18

Упругие модели дефектов в двумерных кристаллах

© А.Л. Колесникова [1,2], Т.С. Орлова [2,3], I. Hussainova [4], А.Е. Романов [2,3]

[1] Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики,
Санкт-Петербург, Россия
[3] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[4] Tallinn University of Technology,
Tallinn, Estonia

E-mail: aer@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 17 июня 2014 г.)

В рамках континуальной механики представлены упругие модели дефектов в двумерных (2D) кристаллах. Основой моделей является классификация дефектов, опирающаяся на размерность области задания их собственных дисторсий, т.е. искажений решетки, связанных с процессом образования дефектов. Впервые рассчитано упругое поле бесконечно малой дислокационной петли в пленке. Представлены поля центра дилатации, дислокации, дисклинации и кругового включения в плоских двумерных упругих средах: нанопленках и графенах. Проведено сравнение упругих полей дефектов в 2D- и 3D-кристаллах.

Работа выполнена при поддержке фонда Archimedes (грант AR12133 (NanoCom)) и РФФИ (грант № 14-03-00496_а).

1. Введение

В нашем исследовании двумерные кристаллы — это пленки, толщинами которых можно пренебречь в конкретной поставленной задаче. Среди них можно выделить однослойные кристаллиты [1], графены — кристаллические углеродные пленки одноатомной толщины [1,2], фуллерены — углеродные оболочки в форме выпуклых замкнутых многогранников [3,4] — и биомембраны [5,6]. С точки зрения континуальной механики такие объекты представляют собой двумерную (2D) упругую среду или оболочку. За пределами рассмотрения остаются неупругие и непленочные физические объекты, образующие двумерные периодические структуры, такие как жидкие кристаллы [7,8], упорядоченные ансамбли вихревых нитей Абрикосова в сверхпроводниках второго рода [9] и структурированные комплексы магнитных моментов в ферромагнетиках [8].

В результате механических, термических, радиационных и химических воздействий, а также на стадии изготовления пленки, подобно объемным телам, способны деформироваться и испытывать локальные превращения. Особенной чертой 2D-среды является свойство приобретать ненулевую кривизну. Таким способом пленка реагирует на внешние воздействия или на появление в ней дефектов [10–12]. Уточним, что в качестве дефектов мы не рассматриваем неоднородности, т.е. области с другими упругими модулями, и пустоты, которые самостоятельно не являются источниками упругих полей, а лишь влияют на их перераспределение. Дефекты — это внутренние источники искажения (дисторсии) среды (континуума), которые приводят к генерации упругих полей в ней. При наличии кристаллического порядка мы говорим о дефектах в кристаллах.

Важную роль дефектов в двумерных кристаллах можно продемонстрировать на примере графенов: степень и даже тип (электронная или дырочная) проводимости в графене зависят от дефектной конфигурации границ зерен [12–14]. Дефектная конфигурация определяет упругие поля и энергии этих границ, а также степень отклонения их состояния от равновесного [15]. Можно рассматривать границу зерен в графенах как специфический дефект их строения.

Целью настоящей работы является теоретическое изучение дефектов упругой 2D-среды. На основе представленной классификации дефектов сделан расчет упругих полей бесконечно малой дислокационной петли, центра дилатации, дислокации, клиновой дисклинации и включения в пленках. Поля отдельных дефектов позволяют рассчитать энергии взаимодействия между дефектами и энергии ансамблей дефектов, например границ зерен [15]. Проведено сравнение полей дефектов в 2D- и 3D-средах. Подчеркнуто, что упругое поле двуосной дилатационной нити, краевой дислокации и других дефектов в 2D-среде совпадает с полями аналогичных дефектов в 3D-пластине при устремлении толщины последней к нулю.

2. Классификация внутренних источников упругих искажений в двумерном континууме

Для создания математических моделей реальных физических дефектов кристаллической решетки (точечных дефектов, дислокаций, включений) применим метод собственных дисторсий (см., например, [16,17]). В рамках метода источник упругих искажений среды можно задать с помощью тензора собственной дисторсии. Собственная дисторсия определяет способ задания дефекта и область, где этот способ реализуется.

Процесс задания дефекта с помощью собственной дисторсии (деформации) впервые предложил Эшелби для включений [18]. Процедура Эшелби выглядит так: в материале делается разрез по поверхности, ограничивающей некоторый объем, после этого материал из объема вынимается и пластически деформируется, далее к этому деформированному объему прикладываются силы для того, чтобы вставить его назад точно по месту выреза, затем поверхности разреза склеиваются и силы снимаются. При этом аппарат для нахождения упругих полей дефекта по заданной собственной дисторсии хорошо разработан [16,17].

Мы можем применить процедуру Эшелби к областям разной размерности и классифицировать дефекты в упругой среде на основании размерности n-области Ω_n задания их собственной дисторсии. Обозначим собственную дисторсию как ${}^{m|n}\beta^*_{ij}$, где m — размерность среды. Очевидно, что $n \le m$. По такому „размерному принципу" дефекты в 3D-среде подразделяются на четыре типа [19], а в 2D-среде — на три (см. рисунок).

2.1. Нуль-мерные (точечные) дефекты ($n = 0$). Определим бесконечно малую дислокационную петлю, которая является элементарным нуль-мерным дефектом в 3D- и 2D-средах [19]. Впервые бесконечно малые дислокационные петли в объемном упругом теле рассчитал Кроупа [20]. Дисторсия бесконечно малой дислокационной петли в 3D-среде может быть записана следующим образом [19]:

$$ {}^{3|0}\beta^*_{ij} = -b_j s_i \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0), \quad i, j = x, y, z, \tag{1} $$

где b_j — вектор Бюргерса дислокации, помещенной в точку $\mathbf{R}_0$, s_i — площадь петли, $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)$ — трехмерная дельта-функция Дирака, которая связана с одномерными дельта-функциями равенством $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - x_0)$.

В пленке, залегающей в координатной плоскости $X0Y$, собственная дисторсия бесконечно малой дислокационной петли примет вид

$$ {}^{2|0}\beta^*_{ij} = -b_j l_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad i, j = x, y. \tag{2} $$

Здесь b_j — вектор Бюргерса дислокации; $\mathbf{r}_0$ — координата петли на плоскости $X0Y$, l_i — отрезок с нормалью $\mathbf{n}_i$, являющийся аналогом площадки петли для дислокации в 3D-среде (см. (1)). Двумерная дельта-функция Дирака задана соотношением $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)$. По аналогии с определением дислокационных петель в 3D-среде будем считать, что если вектор $\mathbf{b}$ направлен вдоль нормали $\mathbf{n}_i$, то бесконечно малая петля призматическая; если вектор $\mathbf{b}$ лежит вдоль линии разреза, то бесконечно малая петля — петля скольжения.

Две взаимно перпендикулярные призматические петли при условии равенства величины вектора Бюргерса образуют дилатационный центр со следующей дисторсией:

$$ {}^{2|0}\beta^*_{ii} = bl\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{1}{2}\Delta s \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad i - x, y. \tag{3} $$

Такой центр является упругой моделью примесного атома, атома замещения или вакансии (см. рисунок, a). Если l — начальный линейный размер некоторой площадки $s = l^2$, то изменение линейного размера на величину Δl приведет к изменению площади на величину $\Delta s = (l + \Delta l)^2 - l^2 \approx 2l\Delta l$. Полагая, что $b = \Delta l$, получаем $bl = \frac{1}{2}\Delta s$ и последнее равенство в формуле (3).

Известно, что в упругом объеме дилатационный равноосный центр обладает дисторсией [17]

$$ {}^{3|0}\beta^*_{xx} = {}^{3|0}\beta^*_{yy} = {}^{3|0}\beta^*_{zz} = bs\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) $$
$$ = \frac{1}{3}\Delta V \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0). \tag{4} $$

Здесь ΔV — изменение объема в точке локализации дефекта.

Отметим, что дисторсия (3) равна дисторсии дилатационной линии в 3D-среде, у которой отсутствует компонента ${}^{3|1}\beta^*_{zz}$ [19].

При формальном подходе собственную дисторсию точечного дефекта в пленке можно записатьв виде

$$ {}^{2|0}\beta^*_{ij} = \beta^*_{ij} s \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad i, j = x, y, \tag{5} $$

где β^*_{ij} — пластическая дисторсия малой площадки s без учета места ее задания в среде.

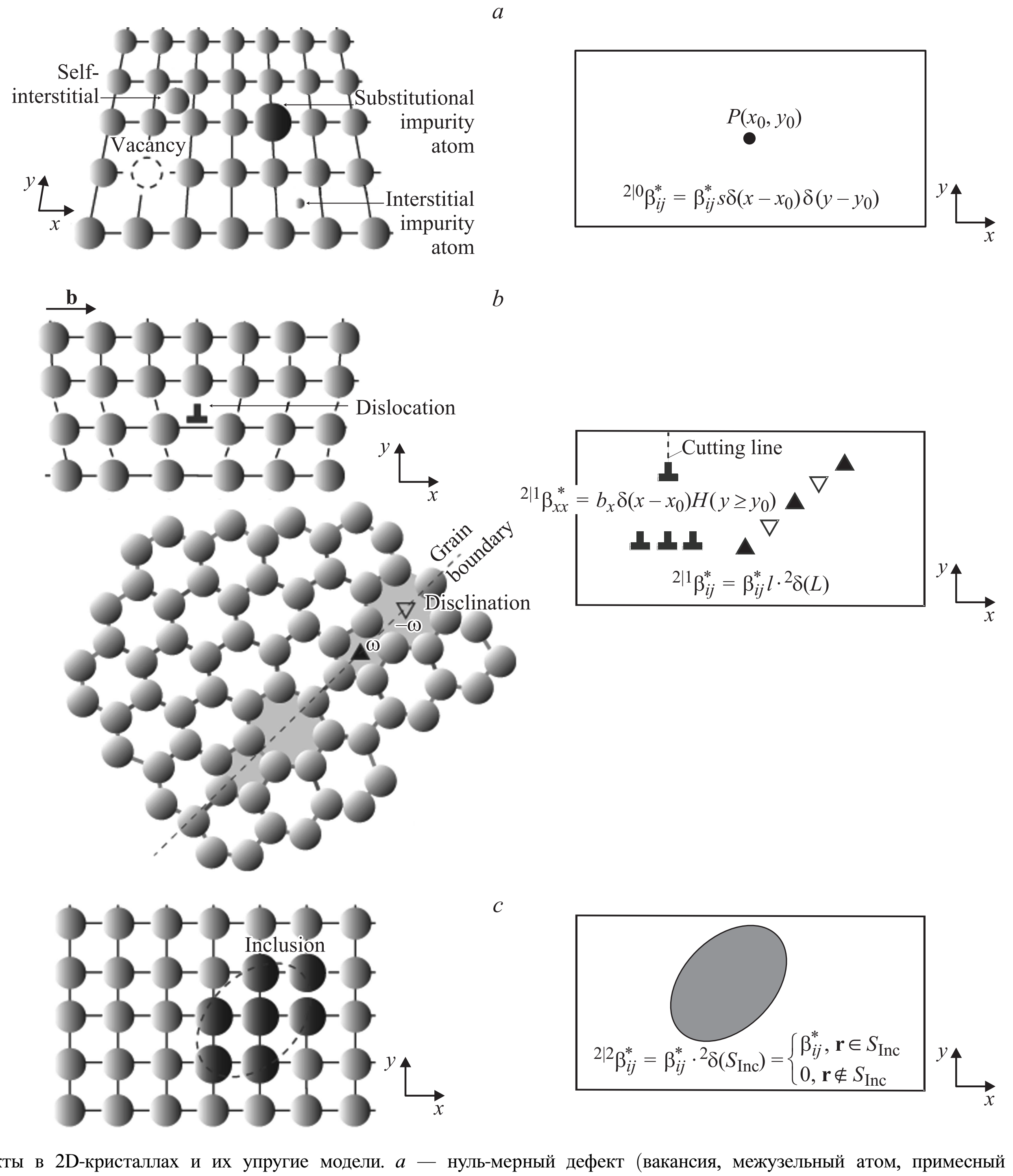
Увеличение размерности области задания дефекта $\Omega_0 \to \Omega_1$ ($\Omega_1 \equiv L$) приводит к одномерному дефекту.

2.2. Одномерные дефекты ($n = 1$). В рамках выбранной классификации собственная дисторсия одномерного дефекта в 2D-среде примет вид

$$ {}^{2|1}\beta^*_{ij} = \beta^*_{ij} l^2 \delta(L), \tag{6} $$

где β^*_{ij} — пластическая дисторсия линии L, l — линейный множитель, ${}^2\delta(L)$ — дельта-функция на линии в 2D-среде, что подчеркнуто левым верхним индексом 2 . Например, для отрезка $[y_1, y_2]$, имеющего координату x_0, ${}^2\delta(L) = \delta(x - x_0)H(y_1 \le y \le y_2)$, где $H(y_1 \le y \le y_2)$ — функция Хевисайда.

Одномерные дефекты — это аналоги дислокации Сомилианы [21–23] и дислокации и дисклинации Вольтерры в упругой 3D-среде (см. рисунок, b). Отрезок, на котором задана дисторсия, — это аналог площадки, на которой задана собственная дисторсия дислокационно-дисклинационной петли в 3D-среде. Линия сингулярности дислокации в 3D-среде перерождается в точку сингулярности дислокации в 2D-среде. Уточним, что в классификации дефектов в 3D-среде, опирающейся на размерность области задания их собственной дисторсии, дислокации Сомилианы — это



Дефекты в 2D-кристаллах и их упругие модели. *a* — нуль-мерный дефект (вакансия, межузельный атом, примесный атом замещения), *b* — одномерные дефекты (дислокация, дисклинация, дислокационное скопление, граница разориентации), *c* — двумерное включение. Основная характеристика модели дефекта — собственная дисторсия $^{2|n}\beta^*_{ij}$, где $n = 0, 1, 2$ — размерность области задания дисторсии, $i, j = x, y$. Представлены 2D-кристаллы с квадратной и гексагональной решетками.

поверхностные дефекты, а дислокации и дисклинации Вольтерры — это вырожденные поверхностные дефекты, имеющие особенности упругих полей на линии, но не на поверхности [17,24,25]. В 2D-среде дислокации и дисклинации Вольтерры — это вырожденные линейные дефекты, имеющие сингулярности упругих полей в точке.

Приведем дисторсию (6) к виду, обычному для дислокаций Вольтерры [26],

$$^{2|1}\beta^*_{ij} = [u_j]^2\delta_i(L) = -b_j{}^2\delta_i(L), \quad i, j = x, y. \qquad (7)$$

Здесь $^2\delta_i(L) =]^2\delta(L)\mathbf{n}_i$, $\mathbf{n}_i$ — нормаль к линии L, u_j — скачок смещения на линии разреза при введении дислокации. Линия задания собственной дисторсии дефекта L

в 2D-среде играет роль площадки, где задана дисторсия дефекта, в 3D-среде.

Линейный дефект можно получить, непрерывно распределив точечные дефекты вдоль некоторой линии с заданной линейной плотностью ρ_L. В том случае, если β^*_{ij} в формуле (6) не зависит от координаты распределяемых точечных дефектов, а линейная плотность постоянна, получаем простую формулу

$$^{2|1}\beta^*_{ij} = \beta^*_{ij} s \rho^*_L \delta(L). \tag{8}$$

Здесь очевидно, что замена $s\rho_L = l$ преобразует формулу (8) в (6).

С дальнейшим увеличением размерности области задания дисторсии $\Omega_1 \to \Omega_2$ $(\Omega_2 \equiv S)$ мы переходим к двумерным дефектам.

2.3. Двумерные дефекты ($n = 2$). Областью задания собственной дисторсии двумерных дефектов является часть поверхности. В пленке двумерные дефекты — это аналоги включения в 3D-среде (см. рисунок, *c*).

В соответствии с (2) и (6) для дисторсии двумерного дефекта общего вида справедливо выражение

$$^{2|2}\beta^*_{ij} = \beta^*_{ij}\, {}^2\delta(S_{\text{Inc}}). \tag{9}$$

В 2D-среде дельта-функция

$$^2\delta(\Omega_2) = {}^2\delta(S_{\text{Inc}}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in S_{\text{Inc}}, \\ 0, & \mathbf{r} \notin S_{\text{Inc}}. \end{cases}$$

Отметим, что в 3D-среде дельта-функция

$$^3\delta(\Omega_3) = {}^3\delta(V_{\text{Inc}}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{R} \in V_{\text{Inc}}, \\ 0, & \mathbf{R} \notin V_{\text{Inc}}. \end{cases}$$

Мы также можем получить двумерный дефект, распределяя точечные дефекты по поверхности S.

Отметим, что в 2D-континууме дефекты меньшей размерности, чем 2, обладают дисторсиями с произвольными размерными множителями. У точечного дефекта это s, у линии — l. Этим множителям можно придать смысл размера дефекта до пластической деформации, (см. подробно в [19]).

3. Упругие поля дефектов в плоских 2D-средах

На основании собственной дисторсии $^{2|m}\beta^*_{ij}$ (или собственной деформации $^{2|m}\varepsilon^*_{ij}$), функции Грина $^2G_{ij}$ упругой среды и ее упругих модулей C_{jlkn} однозначно определяется поле полных смещений дефекта, а также его упругие деформации и напряжения [16,17]. В 2D-континууме поле полных смещений дефекта находится из соотношения [16]

$$^2u^t_i(\mathbf{r}) = -\int\limits_S C_{jlkn}\, {}^{2|m}\varepsilon^*_{kn}(\mathbf{r}')\, {}^2G_{ij,l}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)dS', \tag{10}$$

где левый верхний индекс 2 указывает размерность среды, производная $^2G_{ij}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ берется по нештрихованной переменной, S — площадь пленки, а суммирование ведется по повторяющимся индексам.

Для изотропной упругой среды функция Грина $^2G_{ij}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ и тензор C_{jlkn} имеют вид [16]

$$^2G_{ij}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)G} \times \left\{ \frac{(x_i - x'_i)(x_j - x'_j)}{\overline{r}^2} - (3-4\nu)\delta_{ij} \ln \overline{r} \right\}, \tag{11a}$$

$$C_{jlkn} = \frac{2G\nu}{1-2\nu}\,\delta_{jl}\delta_{kn} + G(\delta_{lk}\delta_{jn} + \delta_{ln}\delta_{jk}), \tag{11b}$$

где $\overline{r}^2 = (x-x')^2 + (y-y')^2$, x_i и x_j — это x или y, δ_{km} — символ Кронекера, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

Поскольку упругим пространством для нас является пленка $X0Y$ со свободными поверхностями, тензор напряжений в этом случае предполагает отсутствие всех компонент σ_{zj}. Таким образом, мы имеем дело с плоским напряженным состоянием, а значит, в функции Грина и в законе Гука модуль Юнга E должен быть заменен соотношением $E(1+2\nu)/(1+\nu)^2$, а коэффициент Пуассона ν — выражением $\nu/(1+\nu)$ [16]. Поскольку модуль сдвига $G = E/[2(1+\nu)]$, процедура замены на него не повлияет. Итак, для того чтобы получить упругие поля, отвечающие пленке со свободными поверхностями, в функции Грина (11a), упругих константах (11b) и законе Гука нужно сделать замену ν на $\nu/(1+\nu)$. При переходе 3D→2D поменяется единица измерения модуля Юнга и модуля сдвига с N/m^2 на N/m.

С помощью соотношений (11) определим поле бесконечно малой дислокационной призматической петли и дилатационного центра.

3.1. Бесконечно малая дислокационная призматическая петля и центр дилатации в пленке. Рассмотрим бесконечно малую призматическую петлю (Infinitesimal Prismatic Dislocation Loop — IPDL), расположенную в начале координат и имеющую собственную дисторсию

$$^{2|0}\beta^{*\text{IPDL}}_{xx} = b_x l \delta(x)\delta(y). \tag{12}$$

Поле полных смещений $^2u^{\text{IPDL}}_i(x,y)$ петли, рассчитанное по формулам (10), (11) с учетом замены коэффициента Пуассона (см. пояснения к (11)), имеет вид

$$^2u^{\text{IPDL}}_x = \frac{b_x lx}{4\pi r^4}\left[-y^2(\nu-1) + x^2(3+\nu)\right], \tag{13a}$$

$$^2u^{\text{IPDL}}_y = \frac{b_x ly}{4\pi r^4}\left[y^2(\nu-1) + x^2(1+3\nu)\right], \tag{13b}$$

где $r^2 = x^2 + y^2$.

Смещения позволяют рассчитать поле упругих деформаций $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{j,i} + u_{i,j})$, где u_j — упругие смещения, и затем по закону Гука, в котором также сделаны соответствующие замены (см. пояснения к (11)), находятся напряжения

$$ {}^2\sigma_{xx}^{\mathrm{IPDL}} = -\frac{G(1+\nu)b_x l}{2\pi r^6}\,[3x^4 - 6x^2y^2 - y^4], \quad (14a)$$

$$ {}^2\sigma_{yy}^{\mathrm{IPDL}} = \frac{G(1+\nu)b_x l}{2\pi r^6}\,[x^4 - 6x^2y^2 + y^4], \quad (14b)$$

$$ {}^2\sigma_{xy}^{\mathrm{IPDL}} = -\frac{G(1+\nu)b_x l}{\pi r^6}xy\,[3x^2 - y^2]. \quad (14c)$$

Определим поле центра дилатации с дисторсией

$$ {}^{2|0}\beta_{xx}^{*\Delta P} = {}^{2|0}\beta_{yy}^{*\Delta P} = \varepsilon s\delta(x)\delta(y). \quad (15)$$

Здесь ΔP — обозначение центра дилатации.

Поле смещений ${}^2u_j^{\Delta P}$ и поле напряжений ${}^2\sigma_{ij}^{\Delta P}$ центра дилатации имеют вид

$$ {}^2u_x^{\Delta P} = \frac{(1+\nu)\varepsilon s}{2\pi}\,\frac{x}{r^2}, \quad (16a)$$

$$ {}^2u_y^{\Delta P} = \frac{(1+\nu)\varepsilon s}{2\pi}\,\frac{y}{r^2}, \quad (16b)$$

$$ {}^2\sigma_{xx}^{\Delta P} = -\frac{G(1+\nu)\varepsilon s}{\pi}\,\frac{(x^2-y^2)}{r^4}, \quad (17a)$$

$$ {}^2\sigma_{yy}^{\Delta P} = \frac{G(1+\nu)\varepsilon s}{\pi}\,\frac{(x^2-y^2)}{r^4}, \quad (17b)$$

$$ {}^2\sigma_{xy}^{\Delta P} = -\frac{2G(1+\nu)\varepsilon s}{\pi}\,\frac{xy}{r^4}, \quad (17c)$$

$$ {}^2\sigma_{xx}^{\Delta P} + {}^2\sigma_{yy}^{\Delta P} = 0. \quad (17d)$$

Своей функциональной частью поле (16), (17) совпадает с полем дилатационной линии в 3D-среде [19].

После замены $\varepsilon s = b_x l$ из формул (16), (17) видно, что центр дилатации в 2D-среде есть сумма двух взаимно перпендикулярных бесконечно малых призматических петель (13), (14) так же, как центр дилатации в 3D-среде есть сумма трех взаимно перпендикулярных бесконечно малых призматических петель [17,19].

Важно заметить, что поле двуосной дилатационной линии с собственной дисторсией ${}^{3|1}\beta_{xx}^{*L} = {}^{3|1}\beta_{yy}^{*L} = \varepsilon s\delta(x)\delta(y)$ в 3D-среде при замене в нем ν на $\nu/(1+\nu)$ в точности совпадает с полем (16), (17).

3.2. Дислокация и клиновая дисклинация в пленке. Пусть для определенности дисторсия дислокации определена соотношением (см. рисунок, *b*)

$$ {}^{2|1}\beta_{xx}^{*\perp} = b_x H(y \geq 0)\delta(x), \quad (18)$$

где функция Хевисайда

$$ H(y \geq 0) = \begin{cases} 1, & y \geq 0, \\ 0, & y < 0. \end{cases}$$

Такую дислокацию можно получить, распределив бесконечно малые дислокационные петли (12) вдоль оси $0Y$:

$$ {}^2u_i^{\perp} = \int_0^{\infty} {}^2u_i^{\mathrm{IPDL}}(x, y - y_0)\rho dy_0, \quad (19a)$$

$$ {}^2\sigma_{ij}^{\perp} = \int_0^{\infty} {}^2\sigma_{ij}^{\mathrm{IPDL}}(x, y - y_0)\rho dy_0, \quad (19b)$$

где ρ — линейная плотность распределения точечных дефектов.

Обозначив $b_x l\rho = b_x$, из (19) получаем

$$ {}^2u_x^{\perp} = \frac{b_x}{4\pi}\left(2\arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{(1+\nu)xy}{r^2}\right), \quad (20a)$$

$$ {}^2u_y^{\perp} = -\frac{b_x}{4\pi}\left((1-\nu)\ln r + \frac{(1+\nu)x^2}{r^2}\right), \quad (20b)$$

$$ {}^2\sigma_{xx}^{\perp} = -\frac{G(1+\nu)b_x}{2\pi}\left(\frac{y}{r^2} + 2\frac{x^2y}{r^4}\right), \quad (21a)$$

$$ {}^2\sigma_{yy}^{\perp} = -\frac{G(1+\nu)b_x}{2\pi}\left(\frac{y}{r^2} - 2\frac{x^2y}{r^4}\right), \quad (21b)$$

$$ {}^2\sigma_{xy}^{\perp} = \frac{G(1+\nu)b_x}{2\pi}\left(\frac{x}{r^2} - 2\frac{xy^2}{r^4}\right). \quad (21c)$$

В работах [22,27] представлено решение задачи о краевой дислокации, перпендикулярной поверхностям пластины конечной толщины. В частности, в [22] показано, что при устремлении толщины пластины к нулю упругое поле, генерируемое краевой дислокацией, становится плосконапряженным и совпадает с полем (21).

Основным отличием поля дислокации (20), (21) от поля дислокации в бесконечной 3D-среде является отсутствие компоненты $\sigma_{zz}^{\perp}$. Остальные компоненты дислокации в 2D- и 3D-средах совпадают с точностью до коэффициентов, связанных с ν. Таким образом, поле дислокации в пленке можно получить путем замены ν на $\nu/(1+\nu)$ в формулах, описывающих поле дислокации в объеме.

Воспользуемся этим приемом и на основании напряжений клиновой дисклинации с вектором Франка $\boldsymbol{\omega} = \omega\mathbf{e}_z$ в 3D-среде [17] запишем напряжения ${}^2\sigma_{ij}^{\omega}$ клиновой дисклинации, находящейся в пленке:

$$ {}^2\sigma_{xx}^{\omega} = \frac{G(1+\nu)\omega}{2\pi}\left(\ln r + \frac{y^2}{r^2} + \frac{\nu}{1-\nu}\right), \quad (22a)$$

$$ {}^2\sigma_{yy}^{\omega} = \frac{G(1+\nu)\omega}{2\pi}\left(\ln r + \frac{x^2}{r^2} + \frac{\nu}{1-\nu}\right), \quad (22b)$$

$$ {}^2\sigma_{xy}^{\omega} = \frac{G(1+\nu)\omega}{2\pi}\,\frac{xy}{r^2}. \quad (22c)$$

Заметим, что дисклинационный диполь является характерным элементом границ зерен в графене (см. рисунок, *b*), см., например, [11–13]. С помощью рядов дисклинаций и их упругих полей удалось рассчитать энергии границ зерен в графене, не прибегая к машинному моделированию [15].

Очевидно, что для дефектов, создающих плоскую деформацию в 3D-среде, существует подобный дефект меньшей размерности в пленке. При этом поля дефектов-аналогов равны при соответствующей замене упругих модулей.

3.3. Дилатационное включение в пленке. Пример дилатационного включения в 2D-среде показан на рисунке, *c*. Зная поле двуосного цилиндрического включения в 3D-среде [28], имеющего дисторсию

$$^{3|3}\beta^*_{xx} = {}^{3|3}\beta^*_{yy} = \varepsilon^3\delta(V_{\mathrm{Inc}}) = \begin{cases} \varepsilon, & R \in V_{\mathrm{Inc}}, \\ 0, & R \notin V_{\mathrm{Inc}}, \end{cases}$$

можно записать поле кругового включения в 2D-среде с дисторсией

$$^{2|2}\beta^*_{xx} = {}^{2|2}\beta^*_{yy} = \varepsilon^3\delta(S_{\mathrm{Inc}}) = \begin{cases} \varepsilon, & R \in S_{\mathrm{Inc}}, \\ 0, & R \notin S_{\mathrm{Inc}}, \end{cases}$$

заменив ν на $\nu/(1+\nu)$ и исключив $^3\sigma^{\mathrm{Inc}}_{zz}$:

$$^2\sigma^{\mathrm{Inc}}_{xx} = G(1+\nu)\varepsilon a^2 \begin{cases} -\frac{(x^2-y^2)}{r^4}, & r > a, \\ \frac{2}{a^2}, & r \le a, \end{cases} \tag{23a}$$

$$^2\sigma^{\mathrm{Inc}}_{yy} = G(1+\nu)\varepsilon a^2 \begin{cases} \frac{(x^2-y^2)}{r^4}, & r > a, \\ \frac{2}{a^2}, & r \le a, \end{cases} \tag{23b}$$

$$^2\sigma^{\mathrm{Inc}}_{xy} = G(1+\nu)\varepsilon a^2 \begin{cases} -\frac{2xy}{r^4}, & r > a, \\ 0, & r \le a. \end{cases} \tag{23c}$$

Здесь a — радиус включения.

Если ввести радиус ядра для двуосного дилатационного центра a и определить коэффициент s в (17) как πa^2, то напряжения дилатационного центра совпадут с напряжениями, генерируемыми круговым двуосным включением в окружающей матрице $r > a$ (23).

4. Заключение

В работе представлены упругие модели дефектов в плоских 2D-кристаллах. Показана иерархия дефектов упругого 2*D*-континуума, основанная на размерности области задания их собственных дисторсий. С помощью собственной дисторсии и функции Грина рассчитано упругое поле бесконечно малой дислокационной петли и дилатационного центра в пленке. Обнаружено, что дефекты, создающие плоскую деформацию в 3D-среде, имеют аналоги в 2D-среде. Выражения для полей дефектов в изотропной пленке получаются путем замены коэффициентов, связанных с упругими модулями, и обнуления компоненты напряжений $^3\sigma^{\mathrm{Inc}}_{zz}$ в формулах для полей дефектов-аналогов в объеме. На этой основе получены поля дислокации, клиновой дисклинации и дилатационного включения в пленке.

Важной проблемой остается определение упругого поведения дефектов в изогнутых 2D-кристаллах, в частности в сферических оболочках. В этом случае эффективным способом расчета полей дефекта, по-видимому, будет следующий: решается граничная задача о дефекте в сферическом слое конечной толщины, а затем при устремлении толщины слоя к нулю находятся поля дефекта. Ранее было показано, что этот подход применим для плоских пленок [22].

Список литературы

[1] K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, A.K. Geim. Proc. Nat. Acad. Sci. USA **102**, 10 451 (2005).
[2] M.I. Katsnelson. Graphene: carbon in two dimensions. Cambridge University Press, NY (2012). 366 p.
[3] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O′Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. Nature **318**, 162 (1985).
[4] J. Baggott. Perfect symmetry: the accidental discovery of buckminsterfullerene. Oxford University Press (1995). 328 p.
[5] W.F. Harris, L.E. Scriven. Nature **228**, 827 (1970).
[6] F.R.N. Nabarro, W.F. Harris. Nature **232**, 423 (1971).
[7] M. Kleman. Points, lines and walls. John Wiley and Sons, NY (1983).
[8] M. Kleman, J. Friedel. Rev Mod. Phys. **80**, 61 (2008).
[9] H. Träuble, U. Essmann. J. Appl. Phys. **39**, *9*, 4052 (1968).
[10] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ **40**, *6*, 1178 (1998).
[11] B.I. Yakobson, F. Ding. ACS Nano **5**, 1569 (2011).
[12] J. Zhang, J. Zhao. Carbon **55**, 151 (2013).
[13] O.V. Yazyev. Solid State Commun. **152**, 1431 (2012).
[14] L. Tapaszto, P. Nemes-Incze, G. Dobrik, K. Yoo Jae, C. Hwang, L.P. Biro. Appl. Phys. Lett. **100**, 053 114 (2012).
[15] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, T.S. Orlova, I. Hussainova, V.E. Bougrov, R.Z. Valiev. Carbon, in press (2014).
[16] T. Mura. Micromechanics of defects in solids. Martinus Nijhoff Publ., Dordrecht–Boston–Lancaster (1987). 587 p.
[17] Р. Де Вит. Континуальная теория дисклинаций. Мир, М. (1977). 208 с.
[18] J.D. Eshelby. Proc. Roy. Soc. of London A **241**, 376 (1957).
[19] А.Л. Колесникова, Р.М. Сорока, А.Е. Романов. Физика и механика материалов **17**, *1*, 71 (2013).
[20] F. Kroupa. In: Theory of crystal defects. Proc. of the Summer School. Academia — Publ. House of the Czechoslovak Academy of Sciences, Prague (1966). P. 276.
[21] C. Somigliana. Rend. Acc. Lincei. **24**, 655 (1915).
[22] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Круговые дислокационно-дисклинационные петли и их применение к решению граничных задач теории дефектов. Препринт ФТИ № 1019. Л. (1986). 62 с.
[23] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ **45**, *9*, 1626 (2003).
[24] V. Volterra. Ann. Sci. École Norm. Supér. (Paris) **24**, *4*, 401 (1907).
[25] J.P. Hirth, J. Lothe. Theory of dislocations. John Wiley and Sons, NY — Chichester–Brisbane–Toronto–Singapore (1982). 857 p.
[26] T. Mura. In: Advanced in materials research / Ed. H. Herman. Interscience Publ., NY (1968). V. 3. P. 1.
[27] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Письма в ЖТФ **13**, *11*, 656 (1987).
[28] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Дислокационные модели включений (1990) [не опубликовано].