

Механика 2D кристаллов: переход от атомно-решеточного описания к уравнениям теории упругости

В.Д. Нацик^{1,2}, С.Н. Смирнов¹

¹ *Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина*

E-mail: smirnov@ilt.kharkov.ua

² *Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина*

Статья поступила в редакцию 30 ноября 2012 г.

Рассмотрен двумерный (2D) кристалл, образованный системой одинаковых атомов с парным центрально-симметричным взаимодействием между ними. Предполагается, что в начальном состоянии равновесия атомы занимают узлы плоской трансляционно-симметричной сетки, а деформированное состояние возникает в результате их смещений в плоскости кристалла (продольные деформации) и в перпендикулярном к ней направлении (деформации изгиба). Показано, что при континуальном описании такому кристаллу соответствует бесконечно тонкая анизотропная пленка с конечной плотностью массы, которая способна к упругим продольной и изгибной деформациям. В рамках классической механики выведены базовые соотношения и уравнения для атомных смещений и соответствующие им уравнения теории упругости, описывающие обе моды деформации 2D кристалла как в линейном приближении, так и с учетом ангармонизмов. Получены явные выражения, связывающие модули линейной и нелинейной упругости кристалла с потенциалом межатомного взаимодействия и геометрическими характеристиками плоской кристаллической решетки.

Розглянуто двовимірний (2D) кристал, утворений системою однакових атомів з парною центрально-симетричною взаємодією між ними. Передбачається, що у початковому стані рівноваги атоми розташовані у вузлах плоскої трансляційно-симетричної сітки, а деформований стан виникає як результат їх зміщень у площині кристала (поздовжні деформації) і у перпендикулярному до неї напрямку (деформації згину). Показано, що при континуальному описі такому кристалу відповідає нескінченно тонка анізотропна плівка з кінцевою густиною маси, яка здатна до пружних деформацій та деформацій згину. У рамках класичної механіки виведено базові співвідношення і рівняння для атомних зміщень та відповідні рівняння теорії пружності, які описують обидві моди деформацій 2D кристала як у лінійному наближенні, так і з урахуванням ангармонізмів. Отримано явні вирази, що зв'язують модулі лінійної і нелінійної пружності кристала з потенціалом міжатомної взаємодії та геометричними характеристиками плоскої кристалічної ґратки.

PACS: **46.05.+b** Общая теория континуальной механики твердых тел;

63.22.-m Фононы или колебательные состояния в низкоразмерных и наномасштабных материалах.

Ключевые слова: двумерные кристаллы, упругие пленки, теория упругости, модули упругости, нелинейная механика.

Введение

В настоящее время в физике конденсированного состояния вещества изучается довольно большое количество систем, в которых пространственное распределе-

ние микроскопических структурных элементов имеет трансляционный порядок в двух измерениях. Эти системы называются двумерными (2D) кристаллами [1–3]. Симметрия структуры 2D кристаллов описывается 17 двумерными пространственными группами (группами

плоской симметрии), десятью кристаллографическими точечными группами симметрии и пятью типами плоских ячеек Бравэ [4–6].

В реально существующих 2D кристаллах элементарными структурными единицами являются частицы (молекулы, атомы, электроны) или псевдочастицы (например, топологические солитоны в тонких пленках сверхтекучей жидкости, сверхпроводника, магнетика — соответственно квантованные вихри, вихри Абрикосова, цилиндрические магнитные домены). С целью упрощения формулировок условимся в дальнейшем использовать для обозначения элементарной структурной единицы кристалла термин «атом», оговорив возможность более общего толкования этого термина, если возникнет в этом необходимость. Отметим, что во многих случаях 2D кристаллы могут существовать только в условиях достаточно низких температур, а их физико-механические свойства имеют специфические низкотемпературные особенности. Поэтому изучение этих систем относится к одной из актуальных проблем современной физики низких температур [7,8].

Математическое описание и теоретико-физический анализ свойств 2D кристаллов требует определенной модификации моделей и методов, ранее разработанных для трехмерных (3D) кристаллов. В частности, для континуального описания механических свойств 2D кристаллов необходима формулировка базовых положений и уравнений двумерной теории упругости, которая может иметь специфические особенности по сравнению с хорошо известной теорией упругости для 3D кристаллических сред [9–11]. Такие различия возникают уже в приближении линейной теории упругости и особенно возрастают при переходе к описанию нелинейных деформационных эффектов, например, свойств нелинейных волн атомных смещений или топологических дефектов структуры (дислокаций, дисклинаций, краудионов).

К настоящему времени появилось довольно много теоретических исследований, посвященных анализу акустических колебаний и дислокационных процессов в 2D (или в слоистых квазидвумерных) кристаллах [1–3,12]. Но при этом в большинстве из них микроскопический анализ направлен в основном на описание общих закономерностей гармонических колебаний простейших моделей 2D кристаллов, а континуальная механика таких систем строится на основе 3D теории упругости: 2D кристалл рассматривается как предельно тонкий слой трехмерной упругой среды (упругая пластина или мембрана); в классической теории упругости для описания статических деформаций пластин и волновых процессов в них разработан специальный раздел [9,13,14]. Такие подходы дают возможность предсказывать и строить полуколичественное описание целого ряда физико-механических эффектов, отражающих специфику кристаллических систем с по-

ниженной размерностью, но не могут претендовать на роль последовательной теории. В частности, рассматривая 2D кристалл как упругую пластину, мы вынуждены использовать плохо определенный параметр — конечную толщину слоя: данное обстоятельство не приводит к затруднениям, если 2D кристалл представляет собой решетку топологических солитонов в пленке, но при рассмотрении плоских моноатомных слоев или моноэлектронных структур возникает неопределенность в микроскопической интерпретации указанного параметра и количественных оценок его величины. Отсутствует также ясность в вопросе о микроскопической интерпретации модулей упругости и цилиндрической жесткости 2D кристалла, рассматриваемого как упругая пластина, а именно, связи этих феноменологических параметров теории упругости с характеристиками межатомного взаимодействия.

В настоящей работе предложен последовательный и непротиворечивый вывод базовых уравнений теории упругости 2D кристалла: предполагается, что кристалл образован системой одинаковых атомов, их взаимодействие описывается парным центрально-симметричным потенциалом, а теория упругости соответствует предельному переходу от уравнений атомно-решеточной механики к континуальному описанию в приближении малых деформаций. Будут получены уравнения для описания деформаций в плоскости кристалла и изгибных деформаций, которые в приближении линейной теории упругости являются независимыми (как и для тонких упругих слоев). Получены и обсуждены главные нелинейные поправки к линейному приближению, определяющие взаимосвязь обоих типов деформаций. Выведены явные выражения, позволяющие вычислять модули упругости 2D кристалла при заданном потенциале парного межатомного взаимодействия.

Следует отметить, что в физике конденсированного состояния существует отдельная специфическая проблема механизмов формирования и критериев устойчивости низкоразмерных кристаллических структур [1–3,15,16], но ее обсуждение выходит за рамки данного исследования.

1. Геометрия, динамические переменные и уравнения движения 2D кристалла в атомно-решеточном приближении

Рассмотрим евклидово пространство R^3 , в котором выделим плоское подпространство R^2 и зададим в нем сетку эквивалентных узлов с симметрией решетки 2D кристалла. Будем использовать декартову правовинтовую прямоугольную систему координат с началом O в одном из решеточных узлов и ортонормированным базисом $\{\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2, \mathbf{s}\}$, где $\{\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2\}$ — орты в пространстве R^2 , а \mathbf{s} — единичный вектор нормали к плоскости R^2 , задающий ее ориентацию (рис. 1). Отдельная точка

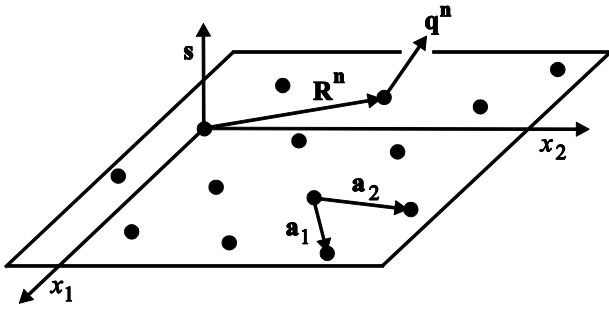


Рис. 1. Геометрия задачи.

пространства R^2 относительно этой системы координат определяется радиус-вектором $\mathbf{r} = x_1 \mathbf{i}_1 + x_2 \mathbf{i}_2 = \{x_1, x_2\}$. Решетку узлов 2D кристалла можно получить бесконечным повторением одной примитивной ячейки, построенной на паре непараллельных базисных векторов $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$, а радиус-вектор \mathbf{R}^n отдельного узла с номером $\mathbf{n} = \{n_1, n_2\}$ определяется соотношением $\mathbf{R}^n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$, где $n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Разность двух решеточных векторов с номерами $\mathbf{n} = \{n_1, n_2\}$ и $\mathbf{m} = \{m_1, m_2\}$ также является решеточным вектором $\mathbf{R}^{n-m} \equiv \mathbf{R}^n - \mathbf{R}^m = (n_1 - m_1) \mathbf{a}_1 + (n_2 - m_2) \mathbf{a}_2$.

Пространству R^2 поставим в соответствие двумерное обратное пространство, отдельная точка которого определяется радиус-вектором $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{i}_1 + k_2 \mathbf{i}_2 = \{k_1, k_2\}$, а его компоненты имеют размерность обратной длины. В этом пространстве также зададим трансляционно симметричную сетку узлов и элементарную ячейку, построенную на паре базисных векторов $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$, которые связаны с $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$ соотношениями

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{s_0} [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{s}], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{s_0} [\mathbf{s} \times \mathbf{a}_1], \quad s_0 = ([\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2] \cdot \mathbf{s}), \quad (1)$$

где s_0 — площадь примитивной элементарной ячейки 2D кристалла.

Идеальную структуру бесконечно протяженного 2D кристалла будем представлять как совокупность одинаковых атомов, помещенных в узлы \mathbf{R}^n , тогда деформированное состояние кристалла можно задать трехкомпонентным вектором атомных смещений

$$\mathbf{q}^n(t) = u_1^n(t) \mathbf{i}_1 + u_2^n(t) \mathbf{i}_2 + w^n(t) \mathbf{s} \equiv \{u_1^n, u_2^n, w^n\}, \quad (2)$$

где компоненты смещений в плоскости кристалла $\mathbf{u}^n = \{u_1^n, u_2^n\}$ и в поперечном направлении w^n заданы в точках (узлах решетки) с координатами \mathbf{R}^n и являются функциями времени t . В этих обозначениях мгновенная координата атома $\mathbf{r}^n(t)$ и разность координат двух атомов определяются как

$$\mathbf{r}^n = \mathbf{R}^n + \mathbf{q}^n, \quad \mathbf{r}^{nm} \equiv \mathbf{r}^n - \mathbf{r}^m = \mathbf{R}^{n-m} + \mathbf{q}^{nm}, \quad \mathbf{q}^{nm} \equiv \mathbf{q}^n - \mathbf{q}^m. \quad (2a)$$

При описании механических процессов в кристалле выберем в качестве динамических переменных совокупность смещений отдельных атомов $\mathbf{q}^n(t) = \{\mathbf{u}^n, w^n\}$ и соответствующих им скоростей

$$\dot{\mathbf{q}}^n(t) \equiv \frac{d}{dt} \mathbf{q}^n(t) = \{\dot{\mathbf{u}}^n, \dot{w}^n\}^*.$$

В дальнейшем будем рассматривать простейшую модель 2D кристалла, в которой межатомное взаимодействие описывается парным центрально-симметричным потенциалом $\varphi(r) = \varphi(|\mathbf{r}|)$, \mathbf{r} — вектор, соединяющий атомы, а каждый узел кристаллической решетки является центром симметрии. При анализе потенциальной энергии такого кристалла расстояние между двумя атомами $r^{nm} \equiv |\mathbf{r}^{nm}|$ удобно представить в виде

$$r^{nm} = (\mathbf{r}^{nm} \cdot \mathbf{r}^{nm})^{1/2} = [(R^{n-m})^2 + J^{nm}]^{1/2}, \quad R^{n-m} = |\mathbf{R}^{n-m}|, \quad (3)$$

$$J^{nm} = 2(\mathbf{R}^{n-m} \cdot \mathbf{q}^{nm}) + (q^{nm})^2 =$$

$$= 2(\mathbf{R}^{n-m} \cdot \mathbf{u}^{nm}) + (u^{nm})^2 + (w^{nm})^2.$$

Отметим важную особенность 2D кристалла — обращение в нуль скалярного произведения $(\mathbf{R}^{n-m} \cdot \mathbf{s} w^{nm}) = 0$; данная особенность приведет в дальнейшем к существенным различиям уравнений, определяющих перемещения \mathbf{u}^n (деформации \mathbf{u}^{nm}) кристалла в его плоскости и перемещения w^n (деформации изгиба w^{nm}) в поперечном направлении. С учетом соотношений (2), (3) полную энергию межатомного взаимодействия $\tilde{U}\{\mathbf{q}^n\}$ можно представить в виде

$$\tilde{U}\{\mathbf{q}^n\} = \tilde{U}\{\mathbf{u}^n, w^n\} = \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \varphi(r^{nm}) =$$

$$= \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \varphi\left([(R^{n-m})^2 + J^{nm}]^{1/2}\right), \quad (4)$$

где функция атомных смещений $J^{nm}(\mathbf{u}^{nm}, w^{nm})$ определяется формулой (3), а суммирование \sum' выполняется по двум наборам чисел $\mathbf{n} \neq \mathbf{m}$. При описании относительно малых деформаций 2D кристалла, которые удовлетворяют неравенствам

$$|\mathbf{u}^{nm}| \ll R^{n-m}, \quad |w^{nm}| \ll R^{n-m}, \quad |J^{nm}| \ll (R^{n-m})^2, \quad (5)$$

потенциальную энергию в (4) можно разложить в ряд Тейлора по степеням величины J^{nm} , а функцию Лагранжа $\tilde{L}\{\mathbf{q}^n, \dot{\mathbf{q}}^n\} \equiv \tilde{L}\{\mathbf{u}^n, \dot{\mathbf{u}}^n, w^n, \dot{w}^n\}$ для 2D кристалла, состоящего из атомов с массой m , записать в виде

* В литературе иногда обсуждаются модели 2D кристаллов, в которых перемещения атомов $\mathbf{q}^n(t)$ принадлежат пространству R^2 , т.е. $w^n \equiv 0$ (собственно двумерные кристаллы). Рассматриваемая здесь модель более адекватна реальным низкоразмерным физическим системам и описывает собственно двумерные кристаллы как частный случай.

$$\tilde{L} = \frac{m}{2} \sum_{\mathbf{n}} [|\dot{\mathbf{u}}^{\mathbf{n}}|^2 + (\dot{w}^{\mathbf{n}})^2] - \tilde{U}\{\mathbf{u}^{\mathbf{n}}, w^{\mathbf{n}}\} - \tilde{U}^{(e)}\{\mathbf{R}^{\mathbf{n}} + \mathbf{q}^{\mathbf{n}}, t\} - \tilde{U}_0, \quad (6)$$

$$\tilde{U} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{2^{\nu} \nu!} \Gamma_{\nu}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}) (J^{\mathbf{nm}})^{\nu}. \quad (7)$$

В этой формуле $\tilde{U}^{(e)}$ — потенциал внешних по отношению к кристаллу сил, \tilde{U}_0 — собственная энергия кристалла в начальном состоянии, а зависимость собственной потенциальной энергии от атомных смещений определяется слагаемым \tilde{U} и зависимостью $J^{\mathbf{nm}}(\mathbf{u}^{\mathbf{nm}}, w^{\mathbf{nm}})$ (3). Отметим, что величины \tilde{U}_0 и $\Gamma_{\nu}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}})$ зависят только от геометрических параметров и характеристик межатомного взаимодействия в исходном недеформированном кристалле:

$$\tilde{U}_0 = \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \varphi(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}), \quad \Gamma_{\nu}(r) = \hat{\partial}^{\nu} \varphi(r),$$

где $\hat{\partial} = (1/r) d/dr$ — оператор, который действует на функцию $f(r)$ скалярного аргумента r по правилу

$$\hat{\partial} f(r) = \frac{1}{r} \frac{df(r)}{dr}.$$

В частности:

$$\begin{aligned} \Gamma_1(r) &= \hat{\partial} \varphi(r) = \frac{1}{r} \frac{d\varphi(r)}{dr}, \\ \Gamma_2(r) &= \hat{\partial}^2 \varphi(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} - \frac{1}{r^3} \frac{d\varphi(r)}{dr}, \\ \Gamma_3(r) &= \hat{\partial}^3 \varphi(r) = \frac{1}{r^3} \frac{d^3\varphi(r)}{dr^3} - \frac{3}{r^4} \frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} + \frac{3}{r^5} \frac{d\varphi(r)}{dr}, \\ \Gamma_4(r) &= \hat{\partial}^4 \varphi(r) = \\ &= \frac{1}{r^4} \frac{d^4\varphi(r)}{dr^4} - \frac{6}{r^5} \frac{d^3\varphi(r)}{dr^3} + \frac{15}{r^6} \frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} - \frac{15}{r^7} \frac{d\varphi(r)}{dr}. \end{aligned} \quad (8)$$

В выражении (7) при выполнении двойного суммирования можно отказаться от ограничения $\mathbf{n} \neq \mathbf{m}$, формально полагая далее $\Gamma_{\nu}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}} = 0) \equiv 0$ [16, 17].

Здесь уместно подчеркнуть, что в формуле (4) скаляры $r^{\mathbf{nm}}$ и $\tilde{U}\{\mathbf{q}^{\mathbf{n}}\}$ обладают естественным свойством инвариантности относительно произвольных трансляций и ортогональных преобразований координат в пространстве R^3 (и в подпространстве R^2). Использование разложения (7) не нарушает эту инвариантность, так как она имеет место и для $J^{\mathbf{nm}} = (r^{\mathbf{nm}})^2 - (R^{\mathbf{nm}})^2$ — изменений квадрата расстояния между атомами в результате их смещений. Напомним, что в микроскопической механике кристаллов [1, 2, 16, 17] очень часто используют представление энергии $\tilde{U}\{\mathbf{q}^{\mathbf{n}}\}$ в виде степенного ряда по смещениям атомов $\mathbf{q}^{\mathbf{n}}$, но при этом соблюдение свойства инвариантности требует наложения определенных ограничений на коэффициенты ряда и дальнейший анализ существенно усложняется.

Отметим, что идеальная равновесная структура классического кристалла (без учета квантовых эффектов) должна соответствовать минимуму энергии $\tilde{U}_0 = \tilde{U}_0(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$, если ее рассматривать как функцию базисных векторов $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$. Обсуждение этого условия при описании 3D кристаллов содержится в монографии [16]. Воспользовавшись предложенным там алгоритмом анализа, легко показать, что необходимым условием экстремума \tilde{U}_0 является равенство

$$\sum_{\mathbf{n}} \Gamma_1(\mathbf{R}^{\mathbf{n}}) R_i^{\mathbf{n}} R_j^{\mathbf{n}} = 0, \quad i, j = 1, 2. \quad (9)$$

Здесь и в дальнейшем мы используем координатные индексы $i, j = 1, 2$ для обозначения компонент двумерных векторов $\mathbf{R}^{\mathbf{n}} = \{R_1^{\mathbf{n}}, R_2^{\mathbf{n}}\}$, $\mathbf{u}^{\mathbf{n}} = \{u_1^{\mathbf{n}}, u_2^{\mathbf{n}}\}$

Функции Лагранжа (6) соответствует система уравнений движения для отдельных атомов:

$$m \ddot{u}_i^{\mathbf{n}} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial u_i^{\mathbf{n}}} = f_i^{(e)}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}} + \mathbf{u}^{\mathbf{n}} + \mathbf{sw}^{\mathbf{n}}, t), \quad (10)$$

$$m \ddot{w}^{\mathbf{n}} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial w^{\mathbf{n}}} = f_s^{(e)}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}} + \mathbf{u}^{\mathbf{n}} + \mathbf{sw}^{\mathbf{n}}, t). \quad (11)$$

Здесь $\mathbf{f}^{(e)} = \{f_i^{(e)}, f_s^{(e)}\}$ — заданная система внешних сил, которые действуют на отдельные атомы в плоскости кристалла ($i = 1, 2$) и в направлении нормали s .

Во многих реальных ситуациях 2D кристалл существует на жесткой подложке [3] и ее влияние на структуру и механические свойства кристалла можно описать системой внешних сил в уравнениях движения (10), (11) с учетом их зависимости от смещений атомов $\{u_1^{\mathbf{n}}, u_2^{\mathbf{n}}, w^{\mathbf{n}}\}$.

2. Линейная динамика 2D кристалла

В физике как трехмерных, так и низкоразмерных кристаллов при решении большого количества задач достаточно ограничиться так называемым гармоническим (линейным) приближением механики кристаллической решетки. В нашем случае 2D кристалла этому приближению соответствует учет в разложении (7) для потенциальной энергии $\tilde{U}\{\mathbf{u}^{\mathbf{n}}, w^{\mathbf{n}}\}$ слагаемых с $\nu = 1, 2$ и выделении в них квадратичных от $\{u_i, w\}$ форм. Если учесть очевидное равенство

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \Gamma_1(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}) R_i^{\mathbf{n}-\mathbf{m}} u_i^{\mathbf{nm}} &= \\ = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{h}} \Gamma_1(\mathbf{R}^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} u_i^{\mathbf{n}} - \sum_{\mathbf{h}, \mathbf{m}} \Gamma_1(\mathbf{R}^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} u_i^{\mathbf{m}} &= 0, \end{aligned}$$

то энергия \tilde{U} в гармоническом приближении приобретает вид

$$\begin{aligned} \tilde{U} \cong \tilde{U}_1 = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \left\{ [\Gamma_1(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}) \delta_{jk} + \Gamma_2(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}) R_j^{\mathbf{n}-\mathbf{m}} R_k^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}] \times \right. \\ \left. \times u_j^{\mathbf{nm}} u_k^{\mathbf{nm}} + \Gamma_1(\mathbf{R}^{\mathbf{n}-\mathbf{m}}) w^{\mathbf{nm}} w^{\mathbf{nm}} \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь использован символ Кронекера δ_{jk} , а по повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование.

Несложные преобразования позволяют привести выражение для \tilde{U}_1 к стандартному виду, если перейти от разностей $u_i^{nm} = u_i^n - u_i^m$ к смещениям отдельных атомов u_i^n и ввести атомные силовые коэффициенты Φ_{ik}^{nm} , Ψ^{nm} :

$$\tilde{U}_1\{\mathbf{u}^n, \mathbf{w}^n\} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} (\Phi_{jk}^{nm} u_j^n u_k^m + \Psi^{nm} w^n w^m), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{jk}^{nm} &= \delta_{nm} \sum_{\mathbf{h}} [\Gamma_1(R^{\mathbf{h}}) \delta_{jk} + \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}}] - \\ &- [\Gamma_1(R^{\mathbf{n-m}}) \delta_{jk} + \Gamma_2(R^{\mathbf{n-m}}) R_j^{\mathbf{n-m}} R_k^{\mathbf{n-m}}], \\ \Psi^{nm} &= \delta_{nm} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_1(R^{\mathbf{h}}) - \Gamma_1(R^{\mathbf{n-m}}). \end{aligned}$$

Легко установить, что атомные силовые коэффициенты обладают набором простых свойств, учет которых вместе с равенством (9) упрощает вычисления решеточных сумм:

$$\Phi_{jk}^{nm} = \Phi_{kj}^{nm} = \Phi_{jk}^{mn}, \quad \Psi^{nm} = \Psi^{mn}, \quad \sum_{\mathbf{m}} \Phi_{jk}^{nm} = \sum_{\mathbf{m}} \Psi^{nm} = 0. \quad (14)$$

Из соотношений (10)–(14) видно, что в гармоническом приближении в отсутствие внешних сил $\mathbf{f}^{(e)} \equiv 0$ смещения отдельных атомов \mathbf{u}^n и \mathbf{w}^n , а также разности смещений (деформации) $\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^m$ и $\mathbf{w}^n - \mathbf{w}^m$ в плоскости кристалла и в перпендикулярном направлении являются независимыми (разделяются). Связь между ними возникает только при учете в разложении (7) форм третьей и более высоких степеней от смещений $\{u_i, w\}$.

Представляется целесообразным отдельно рассмотреть механику 2D кристалла, в которой ангармонические слагаемые в энергии \tilde{U} учтены только для описания связи между деформациями в плоскости кристалла и деформациями изгиба. В первом приближении это соответствует сохранению в (7) кубических форм вида $u_i w^2$:

$$\tilde{U} = \tilde{U}_1 + \tilde{U}_2^{\text{int}}, \quad (15)$$

$$\tilde{U}_2^{\text{int}} = \frac{1}{4} \sum_{n,m} \Gamma_2(R^{\mathbf{n-m}}) R_j^{\mathbf{n-m}} u_j^{nm} (w^{nm})^2.$$

Выражение для ангармонической поправки \tilde{U}_2 , которая учитывает все формы третьей и четвертой степени от смещений $\{u_i, w\}$, приведено в Приложении.

Отметим, что динамика вынужденного движения кристалла даже при использовании гармонического приближения для энергии $\tilde{U} \approx \tilde{U}_1$ может оказаться нелинейной, если зависимость $\mathbf{f}^{(e)}(\mathbf{R}^n + \mathbf{u}^n + \mathbf{w}^n, t)$ от смещения атомов $\mathbf{q}^n = \mathbf{u}^n + \mathbf{w}^n$ является нелинейной; эта же зависимость может также привести к «перепутыва-

нию» смещений \mathbf{u}^n и \mathbf{w}^n . Ниже мы ограничимся описанием малых деформаций кристалла под действием достаточно плавных силовых полей, когда $\mathbf{f}^{(e)} \cong \mathbf{f}^{(e)}(\mathbf{R}^n, t)$. В этом приближении базовая система уравнений линейной динамики 2D кристалла имеет вид

$$m \ddot{u}_i^n + \sum_{\mathbf{m}} \Phi_{ik}^{nm} u_k^m = f_i^{(e)}(\mathbf{R}^n, t), \quad i = 1, 2; \quad (16)$$

$$m \ddot{w}^n + \sum_{\mathbf{m}} \Psi^{nm} w^m = f_s^{(e)}(\mathbf{R}^n, t). \quad (17)$$

Из этих уравнений следует, что в отсутствие внешних сил $\mathbf{f}^{(e)} \equiv 0$ свободное движение кристалла можно представить как линейную суперпозицию трех типов волн атомных смещений с произвольными значениями двумерного волнового (точнее квазиволнового) вектора $\mathbf{k} = \{k_1, k_2\}$ и амплитуды A :

$$\mathbf{u}^n(t) = A \mathbf{e}^{(\alpha)}(\mathbf{k}) e^{i[(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^n) - \omega_{\alpha}(\mathbf{k})t]}, \quad \alpha = 1, 2; \quad (18)$$

$$w^n(t) = A e^{i[(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^n) - \omega_s(\mathbf{k})t]}. \quad (19)$$

Здесь $\omega_{\alpha}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{e}^{(\alpha)}(\mathbf{k}) = \{e_1^{(\alpha)}, e_2^{(\alpha)}\}$, $\alpha = 1, 2$ — соответственно законы дисперсии и единичные векторы поляризации ($|\mathbf{e}^{(\alpha)}| = 1$, $(\mathbf{e}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}) = 0$) для двух типов волн смещений в плоскости кристалла; $\omega_s(\mathbf{k})$ — закон дисперсии для волн смещений вдоль направления нормали \mathbf{s} . Зависимости этих величин от волнового вектора \mathbf{k} определяются фурье-образами атомных силовых коэффициентов:

$$\Phi_{ik}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \Phi_{ik}^{n0} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^n)} = \sum_{\mathbf{n}} \Phi_{ik}^{n0} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^n), \quad (20)$$

$$\Psi(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \Psi^{n0} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^n)} = \sum_{\mathbf{n}} \Psi^{n0} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^n). \quad (21)$$

Для волн смещений в плоскости кристалла (18) законы дисперсии и компоненты векторов поляризаций описываются формулами

$$\omega_{\alpha}^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2m} [(\Phi_{11} + \Phi_{22}) - (-1)^{\alpha} \sqrt{(\Phi_{11} - \Phi_{22})^2 + 4\Phi_{12}^2}], \quad (22)$$

$$e_1^{(\alpha)}(\mathbf{k}) = \frac{\Phi_{12}}{\sqrt{(m\omega_{\alpha}^2 - \Phi_{11})^2 + \Phi_{12}^2}}, \quad (23)$$

$$e_2^{(\alpha)}(\mathbf{k}) = \frac{m\omega_{\alpha}^2 - \Phi_{11}}{\sqrt{(m\omega_{\alpha}^2 - \Phi_{11})^2 + \Phi_{12}^2}}.$$

Закон дисперсии для волн изгиба (19) описывается формулой

$$\omega_s^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{m} \Psi(\mathbf{k}). \quad (24)$$

Величины, определяемые формулами (20)–(24), обладают хорошо известными кристаллогеометрическими свойствами:

— векторы поляризации $\mathbf{e}^{(\alpha)}(\mathbf{k})$ ортогональны, т.е. $(\mathbf{e}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{e}^{(\beta)}) = \delta_{\alpha\beta}$;

— все зависимости от \mathbf{k} являются периодическими функциями с периодами сетки узлов в обратном пространстве $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$, которые определены соотношениями (1).

Выше уже было отмечено, что учет ангармонизмов в энергии межатомного взаимодействия \tilde{U} (7) и учет зависимости внешних сил от атомных смещений $\mathbf{f}^{(e)}(\mathbf{R}^n + \mathbf{u}^n + \mathbf{sw}^n, t)$ приводит к «перепутыванию» поляризаций и существенно усложняет описание как свободных колебаний, так и вынужденных деформаций. Простейший ангармонический эффект в механике 2D кристалла — взаимное влияние атомных смещений в его плоскости \mathbf{u}^n и смещений w^n вдоль нормали \mathbf{s} . Этот эффект проявляется при учете в энергии \tilde{U} ангармонической поправки \tilde{U}_2^{int} (15) и описывается системой уравнений движения:

$$m\ddot{u}_i^n + \sum_m \Phi_{ik}^{nm} u_k^m + \frac{1}{2} \sum_m \Gamma_2(R^m) R_i^m (w^n - w^{n-m})^2 = f_i^{(e)}(\mathbf{R}^n, t), \quad i = 1, 2; \quad (25)$$

$$m\ddot{w}^n + \sum_m \Psi^{nm} w^m + \sum_m \Gamma_2(R^m) R_k^m (u_k^n - u_k^{n-m})(w^n - w^{n-m}) = f_s^{(e)}(\mathbf{R}^n, t). \quad (26)$$

При изучении ряда практически интересных задач решения этих уравнений можно получить методами теории возмущений, используя в качестве нулевого приближения решения линейных уравнений (16) и (17). Эти уравнения можно также использовать для описания линейных деформаций в плоскости кристалла при заданных смещениях w^n , или деформаций изгиба при заданных смещениях \mathbf{u}^n . Данное обстоятельство позволяет уравнения (25), (26) и указанные способы их анализа обозначить термином «квазилинейное приближение» в механике 2D кристалла.

3. Основные соотношения и уравнения континуальной механики 2D кристаллов

При континуальном описании механических свойств 2D кристалла определим его исходное (недеформированное) состояние как сплошную материальную среду, которая равномерно заполняет плоское двумерное пространство R^2 и имеет конечное значение плотности массы на единицу площади. Будем считать, что такая среда имеет анизотропию локальных физических свойств, соответствующую симметрии решетки 2D кристалла, а ее плотность $\rho = m/s_0$ определим как массу атома m , отнесенную к площади примитивной элементарной ячейки s_0 . Будем также считать, что сре-

да имеет механические свойства бесконечно тонкой массивной пленки, которая способна к упругой обратимой деформации как в плоскости R^2 , так и в направлении нормали \mathbf{s} к ней.

Хорошо разработанная континуальная механика деформирования 3D упругой среды [9–11] базируется на законах классической механики материальных частиц и на нескольких ключевых понятиях и предположениях:

— для описания локальных деформаций среды используются вместе с вектором смещений также тензор деформаций, компоненты которого характеризуют относительные изменения размеров и формы малых элементов материала;

— предполагается, что силы взаимодействия между соседними элементами среды сосредоточены на разделяющей их поверхности и могут быть описаны тензором внутренних напряжений;

— предполагается известной связь между компонентами тензора напряжений и тензора деформаций (закон Гука или его более сложные аналоги).

Этот подход можно без особых трудностей распространить и на описание 2D упругих сред при последовательном учете геометрических различий.

3.1. Тензор деформаций

Если положение отдельного малого элемента 2D среды в исходном состоянии задавать двухкомпонентным радиус-вектором $\mathbf{r} = x_1 \mathbf{i}_1 + x_2 \mathbf{i}_2 = \{x_1, x_2\}$ точки в пространстве R^2 , то конфигурацию деформированной среды можно описывать векторным полем смещений

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + w(\mathbf{r}, t)\mathbf{s}, \quad \mathbf{u} = u_1 \mathbf{i}_1 + u_2 \mathbf{i}_2 \equiv \{u_1, u_2\}.$$

В тех областях среды, где компоненты вектора смещений $\{u_1, u_2, w\}$ являются непрерывными и дифференцируемыми функциями координат $\mathbf{r} = \{x_1, x_2\}$, удобной характеристикой локальных деформаций является тензорное поле $e_{ij}(\mathbf{r}, t)$ ($i, j = 1, 2$), которое определяет изменение расстояния $dl = |d\mathbf{r}|$ между двумя бесконечно близкими точками исходной среды с радиус-векторами \mathbf{r} и $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ в результате смещений $d\mathbf{q} = d\mathbf{u} + sdw$. Полагая $d\mathbf{r} = \boldsymbol{\tau} |d\mathbf{r}| = \boldsymbol{\tau} dl$ ($\boldsymbol{\tau}$ — единичный вектор), получаем выражения, определяющие расстояние между точками dl' после деформации среды:

$$dl' = \sqrt{dl^2 + 2e_{ij} dx_i dx_j} = dl \sqrt{1 + 2e_{ij} \tau_i \tau_j}, \quad (27)$$

$$dx_i = \tau_i dl, \quad e_{ij} = e_{ij}^u + \varepsilon_{ij}^w,$$

$$e_{ij}^u = \frac{1}{2} (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i + \nabla_i u_k \nabla_j u_k), \quad \varepsilon_{ij}^w = \frac{1}{2} \nabla_i w \nabla_j w.$$

В этих формулах использован символ дифференцирования $\nabla_i \equiv \partial / \partial x_i$ ($i = 1, 2$). Учитывая специфические для 2D кристаллов геометрические условия $(\mathbf{r} \cdot \mathbf{sw}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{sw}) = 0$, мы считаем целесообразным раз-

делить тензор деформации e_{ij} на две составляющие e_{ij}^u и e_{ij}^w , что позволяет отдельно описать вклады в локальные удлинения элементов среды смещений в плоскости кристалла и в направлении нормали \mathbf{s} . Эти вклады имеют качественно различный характер зависимостей от производных $\nabla_i u_j$, $\nabla_i w$: первый из них содержит как линейные, так и квадратичные слагаемые, тогда как второй является чисто квадратичным.

При изучении малых деформаций, которые удовлетворяют условиям $|\nabla_i u_j| \ll 1$, $|\nabla_i w| \ll 1$, можно рассматривать приближение линейной теории упругости, которому соответствует формула

$$dl' = [1 + \frac{1}{2}(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i)\tau_i \tau_j] dl .$$

В этом приближении dl' не зависит от изгибных деформаций 2D кристалла. Для того чтобы в дальнейшем иметь возможность описывать взаимное влияние этих двух мод деформации 2D упругой среды и не слишком усложнять теорию, мы будем при вычислении dl' в формулах (27) пренебрегать вкладом нелинейных поправок по производным $\nabla_i u_j$, но сохраним в первом неисчезающем приближении квадратичный вклад по производным $\nabla_i w$. Ниже будет показано, что такое упрощение эквивалентно квазилинейному приближению в атомно-решеточной механике 2D кристалла, которое обсуждено в конце разд. 2. В этом приближении локальные изменения вследствие деформаций начальных значений длины $dl = |d\mathbf{r}| = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2}$ и площади $dS = dx_1 dx_2$ малого элемента 2D среды определяются формулами

$$dl' = [1 + (\varepsilon_{ij}^u + \varepsilon_{ij}^w)\tau_i \tau_j] dl , \quad dS' = (1 + \varepsilon_{ii}^u + \varepsilon_{ii}^w)dS . \quad (28)$$

$$\varepsilon_{ij}^u = \frac{1}{2}(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i) , \quad \varepsilon_{ij}^w = \frac{1}{2}\nabla_i w \nabla_j w .$$

Формула для dS' получена как следствие симметричности тензора $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^u + \varepsilon_{ij}^w$ в каждой точке пространства R^2 , возможности привести его к главным осям и инвариантности следа $\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}$ симметричного тензора второго ранга относительно ортогональных преобразований системы координат в пространстве R^2 . Таким образом, диагональные компоненты тензора деформаций описывают изменение площади малого элемента 2D среды (ε_{11} , ε_{22} — деформации растяжения–сжатия), а недиагональные — изменения его формы без изменения площади ($\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$ — деформации сдвига). Деформация сопровождается также вращениями элементов среды. Углы локальных поворотов вокруг координатных осей в плоскости кристалла $\{\theta_1, \theta_2\}$ и вокруг нормали θ_s связаны с производными от полей смещений соотношениями

$$\theta_1 = \nabla_2 w , \quad \theta_2 = -\nabla_1 w , \quad \theta_s = \frac{1}{2}(\nabla_1 u_2 - \nabla_2 u_1) . \quad (29)$$

3.2. Тензор напряжений

Выделим внутри рассматриваемой 2D упругой среды некоторый макроскопический элемент площади S , ограниченный замкнутым контуром L . Используемое в механике сплошных сред предположение об исчезающе малом радиусе действия межатомных сил (близкодействие) позволяет считать, что действие силы на выделенную часть среды со стороны ее окружения осуществляется только непосредственно через линию L . Следовательно, полную трехкомпонентную силу $\tilde{F}_1 \mathbf{i}_1 + \tilde{F}_2 \mathbf{i}_2 + \tilde{F}_s \mathbf{s} = \{\tilde{F}_1, \tilde{F}_2, \tilde{F}_s\}$, которая действует на ограниченную контуром L часть среды S со стороны ее окружения, можно представить в виде интеграла по этому контуру. Пусть $dl' = \boldsymbol{\tau}' dl'$ — элемент контура L в деформированной среде, а $\mathbf{v} = [\boldsymbol{\tau}' \times \mathbf{s}] / [|\boldsymbol{\tau}' \times \mathbf{s}|]$ — единичный вектор внешней нормали к нему, который, согласно его определению, параллелен плоскости R^2 . Тогда на каждом элементе контура dl' можно ввести внутренние механические напряжения $\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)$ и $\sigma_{sj}(\mathbf{r}, t)$ с размерностью [сила/длина] и записать действующие на него деформирующие силы в виде $df_i = \sigma_{ij} v_j dl'$, $df_s = \sigma_{sj} v_j dl'$. В рамках приближения малых деформаций внутренние напряжения малы вместе с деформациями $\varepsilon^u + \varepsilon^w$, что позволяет при интегрировании сил df считать в главном приближении $dl' = dl$ и компоненты полной силы $\{\tilde{F}_1, \tilde{F}_2, \tilde{F}_s\}$ представить в виде интегралов по соответствующему контуру L в исходной двумерной среде:

$$\tilde{F}_i = \oint_L \sigma_{ij} v_j dl = \int_S \nabla_j \sigma_{ij} dS , \quad i = 1, 2; \quad (30)$$

$$\tilde{F}_s = \oint_L \sigma_{sj} v_j dl = \int_S \nabla_j \sigma_{sj} dS . \quad (31)$$

При записи этих формул использован двумерный аналог известной теоремы Остроградского–Гаусса, позволяющий преобразовывать интегралы по плоскому контуру в интегралы по ограниченной им плоской области.

Согласно формулам (30) и (31), действие внутренних напряжений эквивалентно действию в среде сил, распределенных с плотностью на единицу поверхности $F_i = \nabla_j \sigma_{ij}$ и $F_s = \nabla_j \sigma_{sj}$. Если в каждой точке исходной среды задать также плотность внешних сил $F_i^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t)$ и $F_s^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t)$ и ввести плотности сил инерции для движения в плоскости среды $\rho \ddot{u}_i(\mathbf{r}, t)$ и в направлении нормали к ней $\rho \ddot{w}(\mathbf{r}, t)$, то, согласно основному закону классической механики, поступательное движение любого элемента среды должно определяться балансом всех этих сил:

$$\rho \ddot{u}_i(\mathbf{r}, t) = \nabla_j \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) + F_i^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t) , \quad (32)$$

$$\rho \ddot{w}(\mathbf{r}, t) = \nabla_j \sigma_{sj}(\mathbf{r}, t) + F_s^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t) . \quad (33)$$

Для того чтобы использовать эти уравнения для описания пространственно-временной эволюции полей смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$ или обусловленных смещениями относительных деформаций $\varepsilon_{ij}^u(\mathbf{r}, t)$ и $\varepsilon_{ij}^w(\mathbf{r}, t)$, необходимо в явном виде задать связь между тензором напряжений и тензором деформаций. В классической теории упругости 3D кристаллов такие зависимости получают обычно на основе экспериментального изучения закономерностей деформирования конкретных кристаллических материалов (например, закон Гука). Второй способ их получения [1,2,16,17] — переход от атомно-решеточных уравнений деформирования кристалла к континуальному описанию, который позволяет придать им вид уравнений (32), (33) и, тем самым, установить микроскопический смысл компонент тензора внутренних напряжений и их связь с относительными смещениями атомов. Вторым из этих способов мы воспользуемся в настоящей работе, чтобы получить аналог обобщенного закона Гука для 2D кристаллов и записать в явном виде уравнения для полей смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$.

3.3. Базовая система уравнений теории упругости и энергия упругой деформации

Вернемся к атомно-решеточным уравнениям движения (10), (11) или их более простому варианту (25), (26). Хорошо известный алгоритм перехода от уравнений этого типа к континуальной механике кристаллов [1,2,16,18] основан на использовании двух особенностей сил межатомного взаимодействия, которые определяются производными от энергии \tilde{U} (7) по смещениям атомов u_i^n и w^n :

— как энергия \tilde{U} , так и соответствующие ей силы зависят от разностей смещений $u_i^{nm} = u_i^n(t) - u_i^m(t)$ и $w^{nm} = w^n(t) - w^m(t)$ атомов на различных узлах;

— предполагается, что силы взаимодействия весьма быстро уменьшаются с увеличением расстояний между узлами $R^{n-m} = |\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^m|$ вследствие быстрого убывания потенциала парного взаимодействия $\varphi(r)$ и функций $\Gamma_\nu(r)$ (8) на больших расстояниях по сравнению с характерным значением параметра решетки*.

Напомним, что формула (7) для энергии \tilde{U} получена в приближении малых деформаций при выполнении неравенств (5). Именно эти неравенства и перечисленные выше свойства сил межатомного взаимодействия служат основными предпосылками для перехода к континуальному описанию деформаций. В этом случае смещения атомов из близко расположенных узлов отличаются мало и разности смещений можно предста-

вить в виде разложений в степенные ряды по разностям $\mathbf{R}^{n-m} = \mathbf{R}^n - \mathbf{R}^m$.

Поставим в соответствие функциям дискретного аргумента $\mathbf{u}^n(t)$ и $w^n(t)$ поля смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$, принимающие в узлах недеформированной решетки значения $\mathbf{u}(\mathbf{R}^n, t) = \mathbf{u}^n$ и $w(\mathbf{R}^n, t) = w^n$. Тогда для разности смещений $w^{nm} = w(\mathbf{R}^n, t) - w(\mathbf{R}^m, t)$ разложение около точки $\mathbf{R}^n = \mathbf{r}$ имеет вид ($\mathbf{n} - \mathbf{m} = \mathbf{h}$):

$$\begin{aligned} w^{nm} &= w(\mathbf{R}^n, t) - w(\mathbf{R}^m, t) = \\ &= w(\mathbf{R}^n, t) - w(\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^h, t) = w(\mathbf{r}, t) - w(\mathbf{r} - \mathbf{R}^h, t) = \\ &= \nabla_i w(\mathbf{r}, t) R_i^h - \frac{1}{2} \nabla_i \nabla_j w(\mathbf{r}, t) R_i^h R_j^h + \frac{1}{3!} \nabla_i \nabla_j \nabla_k w(\mathbf{r}, t) R_i^h R_j^h R_k^h - \\ &\quad - \frac{1}{4!} \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_n w(\mathbf{r}, t) R_i^h R_j^h R_k^h R_n^h + \dots \end{aligned} \quad (34)$$

Аналогичные разложения можно записать и для разности компонент смещений в плоскости кристалла $u_i^{nm} = u_i(\mathbf{R}^n, t) - u_i(\mathbf{R}^m, t)$.

При подстановке таких разложений в формулы для энергии \tilde{U} (7) и ее производных по смещениям будут появляться решеточные суммы вида

$$\sum_{\mathbf{h}} \Gamma_\nu(\mathbf{R}^h) R_i^h R_j^h \dots R_s^h.$$

Так как значения $\Gamma_\nu(\mathbf{R}^h)$ не зависят от знака векторов \mathbf{R}^h , то при нечетном числе множителей R_i^h под знаком суммы она обращается в нуль. Дополнительные упрощения при вычислении таких сумм обеспечиваются равенством (9).

Таким образом, процедура при переходе от атомно-решеточного к континуальному описанию деформаций кристалла сводится к заменам

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^n &\rightarrow \mathbf{r}, \quad \mathbf{u}^n = \mathbf{u}(\mathbf{R}^n, t) \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad w^n = w(\mathbf{R}^n, t) \rightarrow w(\mathbf{r}, t), \\ \frac{m}{s_0} &\rightarrow \rho, \quad \frac{1}{s_0} \{\mathbf{f}^{(e)}, \mathbf{f}_s^{(e)}\} \rightarrow \{\mathbf{F}^{(e)}, \mathbf{F}_s^{(e)}\}, \quad \sum_{\mathbf{n}} (\dots) \rightarrow \frac{1}{s_0} \int (\dots) dS. \end{aligned} \quad (35)$$

Строгое обоснование этой процедуры можно найти в монографии [18].

Окончательные результаты такого перехода при описании деформаций 2D кристалла наиболее просто выглядят для обсужденного в конце раздела 2 квазилинейного приближения. Уравнения (25), (26) для смещений отдельных атомов в результате использования разложений вида (34) и замен (35) переходят в систему дифференциальных уравнений для полей смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$:

* Это предположение не выполняется в случае 2D электронного кристалла в отсутствие экранировки кулоновского взаимодействия между электронами [1,19,20]. Для таких кристаллов как процедура получения уравнений теории упругости, так и вид этих уравнений существенно усложняются.

$$\rho \ddot{u}_i = \lambda_{ijkn} \nabla_j (\nabla_k u_n + \frac{1}{2} \nabla_k w \nabla_n w) + F_i^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t), \quad (36)$$

$$\lambda_{ijkn} = \frac{1}{2s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_2 (R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}}, \quad (36a)$$

$$\rho \ddot{w} = -d_{ijkn} \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_n w + \lambda_{ijkn} \nabla_i (\nabla_j w \nabla_k u_n) + F_s^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t), \quad (37)$$

$$d_{ijkn} = -\frac{1}{4!s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_1 (R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}}. \quad (37a)$$

В этих уравнениях «память» об атомно-решеточной структуре кристалла сохраняется только в виде двух тензоров четвертого ранга λ_{ijkn} и d_{ijkn} : значения их компонент зависят от геометрических параметров решетки s_0 и $\mathbf{R}^{\mathbf{h}}$ исходного кристалла и параметров потенциала межатомного взаимодействия (см. формулы (8) для Γ_1 и Γ_2).

Отметим, что при переходе к континуальному описанию посредством замен (35) мы считаем поля смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$ функциями радиус-вектора \mathbf{r} в пространстве R^2 . Данное обстоятельство согласуется с приближением, которое было использовано при формулировке феноменологических уравнений (32), (33). Легко видеть, что уравнения (36), (37) приобретают вид уравнений (32), (33), если напряжения определить соотношениями

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkn} (\nabla_k u_n + \frac{1}{2} \nabla_k w \nabla_n w) = \lambda_{ijkn} (\varepsilon_{kn}^u + \varepsilon_{kn}^w), \quad (38)$$

$$\sigma_{si} = -d_{ijkn} \nabla_j \nabla_k \nabla_n w + \lambda_{ijkn} (\nabla_j w \nabla_k u_n). \quad (39)$$

Переход к континуальному описанию в формулах (13) и (15), которые определяют энергию межатомного взаимодействия в квазилинейном приближении $\tilde{U} = \tilde{U}_1 + \tilde{U}_2^{\text{int}}$, позволяет ввести плотность (на единицу площади) энергии упругой деформации $U(\mathbf{r}, t) = U^u + U^w + U^{\text{int}}$ и записать полную энергию кристалла в виде интеграла

$$\tilde{U} = \int [U^u(\mathbf{r}, t) + U^w(\mathbf{r}, t) + U^{\text{int}}(\mathbf{r}, t)] dS, \quad (40)$$

$$U^u = \frac{1}{2} \lambda_{ijkn} (\nabla_i u_j) (\nabla_k u_n), \quad (40a)$$

$$U^w = \frac{1}{2} d_{ijkn} \{ (\nabla_i \nabla_j w) (\nabla_k \nabla_n w) - 4 \nabla_i [(\nabla_j w) (\nabla_k \nabla_n w)] \}, \quad (40б)$$

$$U^{\text{int}} = \frac{1}{2} \lambda_{ijkn} (\nabla_i u_j) (\nabla_k w) (\nabla_n w). \quad (40в)$$

Здесь U^u и U^w — соответственно плотность энергии деформаций в плоскости кристалла и энергии деформации изгиба, а U^{int} — плотность энергии взаимодействия этих деформационных мод.

Согласно (38), напряжения σ_{ij} вдоль поверхности кристалла обусловлены как деформациями в его плос-

кости $\nabla_i u_j$, так и деформациями изгиба $\nabla_i w$. Вместе с тем напряжения σ_{si} (39) вдоль нормали \mathbf{s} определяются не только деформациями изгиба $\nabla_i w$, у них также есть составляющая, которая зависит от $\nabla_i u_j$.

В плотности упругой энергии U взаимное влияние двух деформационных мод описывается слагаемым U^{int} (40в), которое является формой третьей степени от указанных производных. Эти два вида (моды) деформаций и сопровождающие их внутренние напряжения разделяются в приближении линейной теории упругости, которому соответствует сохранение только линейных слагаемых по производным от смещений в уравнениях движения (36), (37) и соотношениях (38), (39), а в энергии деформации (40) — сохранению только квадратичных форм U^u и U^w .

3.4. Модули упругости 2D кристаллов

Соотношения (38), (39) связывают внутренние напряжения σ_{ik} и σ_{si} в деформированном 2D кристалле с относительными деформациями, величина которых характеризуется производными $\nabla_i u_k$ и $\nabla_i w$. Сравнение уравнений (32), (33) и (36), (37) с уравнениями деформирования тонких упругих пластин [9,13] показывает, что соотношения (38), (39) следует рассматривать как обобщенный закон Гука для обсуждаемой здесь модели 2D кристалла: компоненты тензоров λ_{ijkn} и d_{ijkn} имеют смысл модулей упругости для деформаций вдоль поверхности кристалла и модулей изгибной (цилиндрической) жесткости. Эти параметры 2D кристалла имеют размерности λ [сила/длина] и d [сила-длина]. Аналогичные характеристики упругости используются в механике тонких пластин [9,13], но там они связаны определенными соотношениями с модулями упругости того 3D кристалла, из которого создана пластина, и с ее толщиной.

Следует обратить внимание на специфическую особенность обсуждаемого здесь квазилинейного приближения в механике 2D кристаллов: предложенный нами частичный учет нелинейных эффектов не приводит к увеличению числа модулей упругости кристалла, так как нелинейные слагаемые в соотношениях (38), (39) и слагаемое U^{int} в упругой энергии содержат только модули линейного приближения λ_{ijkn} . Данное обстоятельство является дополнительным оправданием использования термина «квазилинейное приближение».

Тензоры четвертого ранга λ_{ijkn} и d_{ijkn} заданы в пространстве R^2 ($i, j, k, n = 1, 2$), поэтому имеют по 16 компонент. Но вследствие свойств симметрии кристаллической решетки и потенциала межатомного взаимодействия, которые учитывались при получении формул (36a) и (37a), тензоры λ_{ijkn} и d_{ijkn} в рассматриваемой модели оказались инвариантны относительно произвольных перестановок координатных индексов, поэтому число независимых компонент каждого тензора не превышает 5. Если, например, выделить ком-

поненты с индексами 1111, 2222, 1122, 1222, 2111, то все остальные компоненты можно свести к этим пяти путем перестановки индексов*.

Учет симметрии кристалла, как известно, приводит к появлению дополнительных соотношений, которым должны удовлетворять компоненты тензоров λ_{ijkl} и d_{ijkl} , что может дополнительно уменьшить число независимых компонент. Например, для наиболее симметричного 2D кристалла с гексагональной решеткой (плоская группа симметрии — $pbmm$) имеют место соотношения $\lambda_{1111} = \lambda_{2222} = 3\lambda_{1122}$ и $d_{1111} = d_{2222} = 3d_{1122}$, которые у обоих тензоров оставляют по одной независимой компоненте. В этом случае 2D кристалл является упруго изотропным, а тензоры λ_{ijkl} и d_{ijkl} приобретают вид

$$\begin{aligned} \lambda_{ijkl} &= \frac{1}{3}\lambda(\delta_{ij}\delta_{kn} + \delta_{ik}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jk}), \\ d_{ijkl} &= \frac{1}{3}d(\delta_{ij}\delta_{kn} + \delta_{ik}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jk}), \end{aligned} \quad (41)$$

где $\lambda = \lambda_{1111}$ и $d = d_{1111}$.

3.5. Волновые процессы и краевые задачи в линейной теории упругости 2D кристаллов

При изучении большого количества задач физики 2D кристаллов в полученных выше уравнениях (36), (37) достаточно ограничиться линейным приближением. В этом приближении деформации вдоль поверхности кристалла описываются уравнением

$$\rho \ddot{u}_i = \lambda_{ijkl} \nabla_j \nabla_k u_n + F_i^{(e)}, \quad i = 1, 2. \quad (42)$$

При описании деформаций изгиба в линейном приближении будем рассматривать не только свободный кристалл, но и особый вид механического состояния 2D кристалла, подвергнутого однородному растяжению приложенными к его краям статическими силами. Под действием растягивающих сил в кристалле возникает постоянная во времени однородная деформация $\bar{\varepsilon}_{ij} = \text{const}$, которую можно найти как решение уравнения (42). Эту деформацию сопровождают постоянные внутренние напряжения $\bar{\sigma}_{ij} = \lambda_{ijkl} \bar{\varepsilon}_{kn}$, а их учет в уравнении (37) приводит к линейному уравнению для поля смещений $w(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho \ddot{w} = -d_{ijkl} \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_n w + \bar{\sigma}_{kn} \nabla_k \nabla_n w + F_s^{(e)}. \quad (43)$$

Уравнения (42) и (43) описывают две независимые моды деформации: дополнительные к статическому рас-

тяжению смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ в плоскости кристалла и смещения $w(\mathbf{r}, t)$ в направлении нормали к ней. Отдельная деформационная мода может реализоваться в виде свободных или вынужденных волновых процессов, а также в виде решений краевых задач со специфическими для каждого из уравнений (42), (43) граничными условиями.

Если отвлечься от микроскопической интерпретации модулей упругости λ_{ijkl} и d_{ijkl} , то уравнения (42), (43) эквивалентны хорошо известным и всесторонне изученным уравнениям механики тонких упругих пластин [9,13] и все результаты соответствующего раздела классической теории упругости можно использовать для описания статических и динамических деформаций 2D кристалла. Напомним наиболее существенные из этих результатов.

Классическая задача линейной теории упругости — описание распространения в бесконечном кристалле монохроматических волн смещений с заданным значением волнового вектора \mathbf{k} в отсутствие внешних сил ($F_i^{(e)} = F_s^{(e)} = 0$). В случае 2D кристалла волновой вектор имеет две компоненты $\mathbf{k} = \{k_1, k_2\}$, а единственным дополнительным требованием к соответствующим решениям уравнений (42), (43) является конечная величина смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$ в любой точке кристалла. Волны смещений малых элементов 2D сплошной среды являются континуальным пределом рассмотренных в разд. 2 волн атомных смещений и описываются формулами (18), (19) после замены в них $\mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{r}$. Законы дисперсии для этих волн определяются уравнениями движения (42), (43) и непосредственно связаны с компонентами тензоров модулей упругости λ_{ijkl} и d_{ijkl} , но их можно также получить как длинноволновые асимптотики выражений (22)–(24)**.

При записи формул для законов дисперсии волн смещений в сплошной упругой среде удобно использовать единичный вектор $\mathbf{k} = \mathbf{k}/k$, который задает направление распространения фронта волны. Волновым решениям уравнения (42) соответствуют две ветви закона дисперсии для частоты колебаний ω_α и вектора поляризации $\mathbf{e}^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1, 2$): для каждой из них частота пропорциональна $k = |\mathbf{k}|$, а фазовая скорость $\omega_\alpha(\mathbf{k})/k = c_\alpha(\mathbf{k})$ и вектор поляризации $\mathbf{e}^{(\alpha)}(\mathbf{k})$ зависят только от \mathbf{k} . Угловые зависимости определяются симметричным тензором второго ранга

$$\Lambda_{ij}(\mathbf{k}) = \Lambda_{ji}(\mathbf{k}) = \lambda_{ijkl} k_k k_n \quad (44)$$

* Отметим, что и в теории 3D кристаллов [16,21], если силы центральные и каждый атом является центром симметрии, также возникает полная симметрия тензора модулей упругости по четырем индексам. Это приводит к дополнительным соотношениям между модулями упругости (соотношения Коши), выполнение которых уменьшает число независимых модулей с 21 до 15.

** Справедливость данного утверждения нарушается в случае электронных кристаллов, для которых существенную роль играют эффекты дальнего действия [1,19,20].

и описываются формулами

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}) = c_\alpha(\mathbf{k})k, \\ c_\alpha^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\rho} \left[\Lambda_{11} + \Lambda_{22} - (-1)^\alpha \sqrt{(\Lambda_{11} - \Lambda_{22})^2 + 4\Lambda_{12}^2} \right], \quad (45)$$

$$e_1^{(\alpha)}(\mathbf{k}) = \frac{\Lambda_{12}}{\sqrt{(\rho c_\alpha^2 - \Lambda_{11})^2 + \Lambda_{12}^2}}, \\ e_2^{(\alpha)}(\mathbf{k}) = \frac{\rho c_\alpha^2 - \Lambda_{11}}{\sqrt{(\rho c_\alpha^2 - \Lambda_{11})^2 + \Lambda_{12}^2}}.$$

В случае упругой изотропной 2D среды (2D кристалл с гексагональной решеткой, плоская группа симметрии — $rbmm$) одна из этих волн является чисто продольной ($\mathbf{e} \parallel \mathbf{k}$), а вторая — чисто поперечной ($\mathbf{e} \perp \mathbf{k}$): $\alpha = 1$, $\mathbf{e}^{(1)} \equiv \mathbf{e}^{(l)} = \mathbf{k}$; $\alpha = 2$, $\mathbf{e}^{(2)} \equiv \mathbf{e}^{(t)} = [\mathbf{k} \times \mathbf{s}]$. В обоих случаях угловая зависимость фазовых скоростей исчезает, а их значения равны:

$$c_1 \equiv c_l = \sqrt{\frac{\lambda}{\rho}}, \quad c_2 \equiv c_t = \sqrt{\frac{\lambda}{3\rho}}. \quad (46)$$

Волновые решения уравнения изгибных колебаний (43) и закон дисперсии для этих волн $\omega_s(\mathbf{k})$ имеют важную особенность, характерную для колебаний низкоразмерных упругих сред, она давно известна в теории упругости тонких пластин и стержней [9,13], а также в атомно-решеточной теории слоистых кристаллов [1,12,22,23]. Фазовая скорость этих волн $c_s = \omega_s/k$ существенно зависит от модуля волнового вектора, особенно сильно эта зависимость проявляется в отсутствие натяжения ($\bar{\sigma}_{ij} = 0$):

$$\omega_s(\mathbf{k}) = c_s(\mathbf{k})k, \quad c_s^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{\rho} (\bar{\sigma}_{ij} \kappa_i \kappa_j + k^2 d_{ijkn} \kappa_i \kappa_j \kappa_k \kappa_n). \quad (47)$$

Для упругоизотропного кристалла

$$c_s^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{\rho} (\bar{\sigma}_{ij} \kappa_i \kappa_j + dk^2). \quad (48)$$

Еще раз подчеркнем, что для 2D электронных кристаллов [1,19,20] значительная роль эффектов дальнего действия существенно усложняет вид обобщенного закона Гука (38), (39) и уравнений движения (42), (43), а вместе с ними и законов дисперсии (45) и (47) (см. сноски стр. 697, 699).

Из формул (47), (48) видно, что в отсутствие натяжения ($\bar{\sigma}_{ij} = 0$) необходимым условием устойчивости 2D кристалла относительно изгибных колебаний является положительная определенность тензора d_{ijkn} (в изотропном случае $d > 0$). Согласно формулам (37а) и (8), данное обстоятельство сопряжено с определенными требованиями к виду потенциала межатомного взаимодействия $\varphi(r)$, которые следует учитывать при обсуж-

дении проблемы устойчивости 2D кристаллов. Но если даже для рассматриваемого 2D кристалла условие $d_{ijkn} \kappa_i \kappa_j \kappa_k \kappa_n > 0$ не выполняется, уравнения (36), (37) можно использовать для описания его механических свойств при учете внешних сил $\mathbf{F}^{(e)}$, которые способны обеспечить устойчивость структуры (например, натяжение или силы, создаваемые подложкой).

Сделаем теперь несколько замечаний относительно постановки и решения краевых задач в линейной теории упругости 2D кристаллов. Уравнения движения (42), (43) содержат вторые производные по времени от полей смещений, поэтому временная эволюция этих полей однозначно определяется стандартными начальными условиями — заданием в начальный момент времени $t = 0$ пространственных распределений смещений $\{\mathbf{u}(\mathbf{r}, 0), w(\mathbf{r}, 0)\}$ и скоростей $\{\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, 0), \dot{w}(\mathbf{r}, 0)\}$. Краевые условия для уравнений (42), которые являются уравнениями второго порядка по пространственным производным компонент вектора смещений \mathbf{u} , также имеют стандартный для теории упругости вид [10,11], они сводятся к заданию на внешней границе кристалла (контуре L_g) смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}_g, t)$ (первая краевая задача) или сил $\sigma_{ij}(\mathbf{r}_g, t) v_j^{(g)}$ (вторая краевая задача), возможно также задавать на части контура L_g силы и на другой части смещения (смешанная краевая задача).

Постановка краевых задач при описании изгибных деформаций 2D кристаллов значительно сложнее вследствие присутствия в уравнении (43) пространственных производных четвертого порядка. Для выбора частных решений этого уравнения, соответствующих конкретной физической ситуации, необходимо задавать на контуре L_g одновременно различные комбинации смещений $w(\mathbf{r}_g, t)$, сил $\sigma_{sj}(\mathbf{r}_g, t) v_j^{(g)}$, углов поворота краевых элементов кристалла (29) и соответствующих им моментов сил. Формулировка и решение ряда задач для уравнения (43), представляющих практический интерес, содержится в теории тонких упругих пластин [9,13], эти результаты можно использовать и при описании механических свойств 2D кристаллов.

Авторы выражают искреннюю благодарность А.С. Ковалеву, Е.С. Сыркину и С.Б. Феодосьеву за интерес к данному исследованию и полезные дискуссии по проблемам механики низкоразмерных кристаллов.

Приложение

Уравнения нелинейной механики 2D кристаллов

В современной физике низкоразмерных кристаллов одним из актуальных и быстро развивающихся направлений является изучение разнообразных нелинейных задач и эффектов [1,24]. В связи с этим представляется целесообразным дополнить полученные в настоящей статье базовые уравнения квазилинейной механики 2D кристаллов (25), (26) и (36), (37) более детальным учетом в них ангармонизмов межатомного

взаимодействия. Для этого необходимо в разложении энергии \tilde{U} (7) по разностям атомных смещений $\mathbf{u}^{\mathbf{nm}}$ и $w^{\mathbf{nm}}$ учесть слагаемые, содержащие эти разности в третьей, четвертой и т.д. степенях. При этом следует также принять во внимание давно полученный в механике кристаллов вывод [1,17]: уже первое нелинейное приближение требует, строго говоря, сохранения в разложении (7) одновременно форм третьей и четвертой степени, так как они могут вносить в некоторые из физических характеристик вклады одного порядка. С этой точностью ниже приведены поправка \tilde{U}_{NL} к энергии межатомного взаимодействия $\tilde{U} = \tilde{U}_1 + \tilde{U}_{NL}$ и соответствующие нелинейные поправки к атомно-решеточным и континуальным уравнениям деформирования 2D кристалла.

В линейной механике 2D кристаллов в качестве основных характеристик межатомного взаимодействия рассматриваются коэффициенты упругости $\Phi_{ik}^{\mathbf{nm}}$ и $\Psi^{\mathbf{nm}}$ (атомные силовые постоянные второго порядка, см. формулы (13)). При учете ангармонизмов следует ввести дополнительный набор коэффициентов упругости. При записи разложения (7) с точностью до слагаемых четвертой степени в качестве таких коэффициентов удобно использовать величины:

$$K_{ijkp}^{\mathbf{h}} = \frac{1}{12} \Gamma_4(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_p^{\mathbf{h}} + \frac{1}{2} \Gamma_3(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} \delta_{kp} + \frac{1}{4} \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) \delta_{ij} \delta_{kp},$$

$$\begin{aligned} K_{ijk}^{\mathbf{h}} &= \frac{1}{3} \Gamma_3(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} + \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} \delta_{jk}, \\ K_{ij}^{\mathbf{h}} &= \frac{1}{2} [\Gamma_3(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} + \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) \delta_{ij}], \\ K_i^{\mathbf{h}} &= \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}}, \\ K^{\mathbf{h}} &= \frac{1}{4} \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}). \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

Здесь $\Gamma_\nu(R^{\mathbf{n-m}})$ — функции, связанные с потенциалом межатомного взаимодействия соотношениями (8). Использование набора коэффициентов нелинейной упругости (П.1) позволяет представить ангармоническую поправку \tilde{U}_{NL} к энергии межатомного взаимодействия в виде следующего многочлена четвертой степени от разностей атомных смещений $u_i^{\mathbf{nm}} = u_i^{\mathbf{n}} - u_i^{\mathbf{m}}$ ($i = 1, 2$) и $w^{\mathbf{nm}} = w^{\mathbf{n}} - w^{\mathbf{m}}$:

$$\begin{aligned} \tilde{U}_{NL} &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} [K_{ijkp}^{\mathbf{n-m}} u_i^{\mathbf{nm}} u_j^{\mathbf{nm}} u_k^{\mathbf{nm}} u_p^{\mathbf{nm}} + K_{ijk}^{\mathbf{n-m}} u_i^{\mathbf{nm}} u_j^{\mathbf{nm}} u_k^{\mathbf{nm}} + \\ &+ (K_{ij}^{\mathbf{n-m}} u_i^{\mathbf{nm}} u_j^{\mathbf{nm}} + K_i^{\mathbf{n-m}} u_i^{\mathbf{nm}}) (w^{\mathbf{nm}})^2 + K^{\mathbf{n-m}} (w^{\mathbf{nm}})^4]. \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

Отметим, что слагаемое в (П.2) с коэффициентом $K_i^{\mathbf{n}}$ было учтено при записи уравнений квазилинейной динамики 2D кристалла (15) и (25), (26).

Если для двух составляющих энергии $\tilde{U} = \tilde{U}_1 + \tilde{U}_{NL}$ использовать формулы (13) и (П.2), то уравнения атомно-решеточной механики 2D кристалла (10), (11) приобретают вид

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_i^{\mathbf{n}} + \sum_{\mathbf{m}} \left[\Phi_{ik}^{\mathbf{nm}} u_k^{\mathbf{m}} + \left(\frac{1}{2} K_{ijk}^{\mathbf{n-m}} + K_{jki}^{\mathbf{n-m}} \right) u_j^{\mathbf{nm}} u_k^{\mathbf{nm}} + (K_{ijkp}^{\mathbf{n-m}} + K_{jkpi}^{\mathbf{n-m}}) u_j^{\mathbf{nm}} u_k^{\mathbf{nm}} u_p^{\mathbf{nm}} + \right. \\ \left. + \left(K_{ij}^{\mathbf{n-m}} u_j^{\mathbf{nm}} + \frac{1}{2} K_i^{\mathbf{n-m}} \right) (w^{\mathbf{nm}})^2 \right] = f_i^{(e)}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}} + \mathbf{u}^{\mathbf{n}} + \mathbf{sw}^{\mathbf{n}}, t), \end{aligned} \quad (\text{П.3})$$

$$m\ddot{w}^{\mathbf{n}} + \sum_{\mathbf{m}} \left[\Psi^{\mathbf{nm}} w^{\mathbf{m}} + (K_{ij}^{\mathbf{n-m}} u_i^{\mathbf{nm}} u_j^{\mathbf{nm}} + K_i^{\mathbf{n-m}} u_i^{\mathbf{nm}}) w^{\mathbf{nm}} + 2K^{\mathbf{n-m}} (w^{\mathbf{nm}})^3 \right] = f_s^{(e)}(\mathbf{R}^{\mathbf{n}} + \mathbf{u}^{\mathbf{n}} + \mathbf{sw}^{\mathbf{n}}, t). \quad (\text{П.4})$$

При выводе уравнений нелинейной континуальной механики 2D кристаллов (см. разд. 3.3) наряду с учетом в (П.2) форм третьей и четвертой степеней относительно первых производных от смещений $\nabla_i u_j$ и $\nabla_i w$ (эффекты нелинейности) следует также сохранить и слагаемые, которые содержат производные от смещений второго и третьего порядков $\nabla_i \nabla_j u_k$, $\nabla_i \nabla_j \nabla_k u_n$, $\nabla_i \nabla_j w$, $\nabla_i \nabla_j \nabla_k w$ (эффекты пространственной дисперсии). В настоящее время установлено [24–26], что при описании разнообразных нелинейных уединенных волн (солитонов) и ряда других нелинейных явлений в низкоразмерных системах конкуренция эффектов нелинейности с эффектами пространственной дисперсии играет весьма важную роль.

С указанной выше точностью можно ввести плотность на единицу площади $U(\mathbf{r})$ полной энергии межатомного взаимодействия:

$$\tilde{U} = \tilde{U}_1 + \tilde{U}_{NL} = \int U(\mathbf{r}) dS,$$

$$\begin{aligned}
 U = & \frac{1}{2} \lambda_{ijkn} (\nabla_i u_j \nabla_k u_n + \nabla_i u_m \nabla_j u_m \nabla_k u_n + \nabla_i u_j \nabla_k w \nabla_n w + \frac{1}{4} \nabla_i u_m \nabla_j u_m \nabla_k u_p \nabla_n u_p + \\
 & + \frac{1}{2} \nabla_i u_m \nabla_j u_m \nabla_k w \nabla_n w + \frac{1}{4} \nabla_i w \nabla_j w \nabla_k w \nabla_n w) - \frac{1}{2} d_{ijkn} [3(\nabla_i \nabla_j w)(\nabla_k \nabla_n w) + \\
 & + 4(\nabla_i w)(\nabla_j \nabla_k \nabla_n w) + 3(\nabla_i \nabla_j u_m)(\nabla_k \nabla_n u_m) + 4(\nabla_i u_m)(\nabla_j \nabla_k \nabla_n u_m)] + \\
 & + \frac{1}{3!} \lambda_{ijknpq} (\nabla_i u_j \nabla_k u_n \nabla_p u_q + \frac{3}{2} \nabla_i u_m \nabla_j u_m \nabla_k u_n \nabla_p u_q + \frac{3}{2} \nabla_i u_j \nabla_k u_n \nabla_p w \nabla_q w) + \\
 & + \frac{1}{2} d_{ijknpq} [3(\nabla_i \nabla_j u_k)(\nabla_n \nabla_p u_q) + 4(\nabla_i u_j)(\nabla_k \nabla_n \nabla_p u_q)] + \frac{1}{4!} \lambda_{ijkpqms} \nabla_i u_j \nabla_k u_n \nabla_p u_q \nabla_m u_s . \quad (\text{П.5})
 \end{aligned}$$

Здесь наряду с ранее введенными модулями линейной упругости λ_{ijkn} и d_{ijkn} появились дополнительные модули линейной упругости d_{ijknpq} , а также модули нелинейной упругости λ_{ijknpq} , $\lambda_{ijknpqms}$:

$$\begin{aligned}
 d_{ijkn} = & -\frac{1}{4! s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_1(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}}, \quad d_{ijknpq} = \frac{1}{4! s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}} R_p^{\mathbf{h}} R_q^{\mathbf{h}}, \quad \lambda_{ijkn} = \frac{1}{2s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_2(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}}, \\
 \lambda_{ijknpq} = & \frac{1}{2s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_3(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}} R_p^{\mathbf{h}} R_q^{\mathbf{h}}, \quad \lambda_{ijknpqms} = \frac{1}{2s_0} \sum_{\mathbf{h}} \Gamma_4(R^{\mathbf{h}}) R_i^{\mathbf{h}} R_j^{\mathbf{h}} R_k^{\mathbf{h}} R_n^{\mathbf{h}} R_p^{\mathbf{h}} R_q^{\mathbf{h}} R_m^{\mathbf{h}} R_s^{\mathbf{h}} . \quad (\text{П.6})
 \end{aligned}$$

Отметим, что тензоры d_{ijkn} и d_{ijknpq} характеризуют только эффекты пространственной дисперсии в линейной теории упругости. Компоненты обоих d -тензоров имеют одинаковые размерности [сила·длина], а размерность компонент всех λ -тензоров [сила/длина]. Свойства тензоров четвертого ранга λ_{ijkn} и d_{ijkn} обсуждались в разд. 3.4. Здесь мы отметим некоторые свойства тензоров d_{ijknpq} , λ_{ijknpq} и $\lambda_{ijknpqms}$, которые также заданы в пространстве R^2 и инвариантны относительно произвольных перестановок координатных индексов. Тензоры шестого ранга d_{ijknpq} , λ_{ijknpq} имеют по 64 компоненты, из них число независимых компонент не превышает 7, а тензор восьмого ранга $\lambda_{ijknpqms}$ имеет 256 компонент, из них число независимых компонент не превышает 9.

Выражению для энергии межатомного взаимодействия (П.5) соответствует система уравнений нелинейной механики 2D кристалла, определяющая поля смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned}
 \rho \ddot{w} = & -d_{ijkn} \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_n w + \lambda_{ijkn} \nabla_i (\nabla_j w \nabla_k u_n + \frac{1}{2} \nabla_j w \nabla_k u_m \nabla_n u_m + \\
 & + \frac{1}{2} \nabla_j w \nabla_k w \nabla_n w) + \frac{1}{2} \lambda_{ijknpq} \nabla_i (\nabla_j w \nabla_k u_n \nabla_p u_q) + F_s^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t) . \quad (\text{П.7})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rho \ddot{u}_i = & \lambda_{ijkn} \nabla_j (\nabla_k u_n + \frac{1}{2} \nabla_k u_m \nabla_n u_m + \frac{1}{2} \nabla_k w \nabla_n w) + \lambda_{jmkn} \nabla_j (\nabla_m u_i \nabla_k u_n + \\
 & + \frac{1}{2} \nabla_m u_i \nabla_k u_p \nabla_n u_p + \frac{1}{2} \nabla_m u_i \nabla_k w \nabla_n w) - d_{jknm} \nabla_j \nabla_k \nabla_n \nabla_m u_i + d_{ijkmp} \nabla_j \nabla_k \nabla_n \nabla_m u_p + \\
 & + \frac{1}{2} \lambda_{ijknpq} \nabla_j (\nabla_k u_n \nabla_p u_q + \nabla_k u_n \nabla_p u_m \nabla_q u_m + \nabla_k u_n \nabla_p w \nabla_q w) + \\
 & + \frac{1}{2} \lambda_{jmknpq} \nabla_j (\nabla_m u_i \nabla_k u_n \nabla_p u_q) + \frac{1}{6} \lambda_{ijkpqms} \nabla_j (\nabla_k u_n \nabla_p u_q \nabla_m u_s) + F_i^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t) . \quad (\text{П.8})
 \end{aligned}$$

Эти уравнения выглядят настолько сложными, что возникают сомнения в возможности их решения аналитическими методами. Но их можно существенно упростить, если пользоваться кристаллографической системой координат и изучать задачи о существовании и свойствах автомодельных решений солитонного типа $\mathbf{u}(x-Vt)$ и $w(x-Vt)$ с ориентацией оси распространения X и смещений \mathbf{u} вдоль направлений плотной упаковки атомов. Дополнительные упрощения возможны в случае кристаллов с высокой симметрией, например, с гексагональной решеткой.

1. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища шк., Изд-во ХГУ, Харьков (1988).
2. А.М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
3. И.Ф. Люксютов, А.Г. Наумовец, В.Л. Покровский, *Двумерные кристаллы*, Наукова думка, Киев (1988).
4. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Гл. ред. физ.-мат. лит., Наука, Москва (1979).
5. А. Келли, Г. Гровс, *Кристаллография и дефекты в кристаллах*, Мир, Москва (1974).

6. Р.В. Галиулин, *Кристаллографическая геометрия*, Наука, Москва (1984).
7. V.P. Gusynin, V.A. Miransky, S.G. Sharapov, and I.A. Shovkovy, *ФНТ* **34**, 993 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 778 (2008)].
8. Ю.П. Монарха, В.Е. Сивоконь, *ФНТ* **38**, 1355 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 1067 (2012)].
9. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., Москва (1987).
10. А.И. Лурье, *Теория упругости*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., Москва (1970).
11. В. Новацкий, *Теория упругости*, Мир, Москва (1975).
12. Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, К.В. Кравченко, А.В. Еременко, Б.Я. Кантор, Ю.А. Косевич, *ФНТ* **35**, 208 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 158 (2009)].
13. С.Г. Лехницкий, *Анизотропные пластинки*, Гостехиздат, Москва (1947).
14. А.С. Вольмир, *Нелинейная динамика пластинок и оболочек*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., Москва (1972).
15. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика, ч. 1*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., Москва (1976).
16. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, Гос. издат. физ.-мат. лит., Москва (1963).
17. Г. Лейбфрид, В. Людвиг, *Теория ангармонических эффектов в кристаллах*, Изд-во иностранной литературы, Москва (1963).
18. И.А. Кунин, *Теория упругих сред с микроструктурой. Нелокальная теория упругости*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., Москва (1975).
19. L. Bonsall and A.A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).
20. Ю.М. Вильк, Ю.П. Монарха, *ФНТ* **10**, 901 (1984) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **10**, 469 (1984)].
21. М. Борн, Х. Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток*, Изд-во иностранной литературы, Москва (1958).
22. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **22**, 475 (1952).
23. Yu.A. Kosevich, *Prog. Surf. Science* **55**, 1 (1997).
24. А.М. Косевич, А.С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
25. A.M. Kosevich and A.S. Kovalev, *Solid State Commun.* **12**, 763 (1973).
26. А.С. Ковалев, Е.С. Соколова, *Програма і тези доповідей. 2-а Всеукраїнська наукова конференція молодих вчених «Фізика низьких температур» (КМВ-ФНТ-2009)*, Харків, ФТІНТ (2009), с. 107.

The 2D crystals mechanics: transition from atomic lattice description to the elastic theory equations

V.D. Natsik and S.N. Smirnov

A two-dimensional (2D) crystal formed by the system of identical atoms with a pair centrosymmetrical interaction between them is considered. It is suggested that in the initial equilibrium state the atoms occupy the sites of the plane translation-symmetrical lattice and the deformation state appears due to their displacement within the crystal plane (longitudinal deformation) and in the normal-to-it-direction (flexural strain). It is shown that in the continual description to this crystal corresponds an infinitely thin anisotropic film with a finite mass density that can undergo elastic longitudinal and flexural deformations. In the context of classical mechanics are derived the base relations and equations for atomic displacements and the relevant equations of the theory of elasticity that describe the both modes of deformation for the 2D crystal in the linear approximation as well as with the account of anharmonicity. Explicit expressions are obtained which relate the linear and nonlinear elastic moduli of the crystal to the potential of interatomic interaction and the geometrical characteristics of the plane crystal lattice.

PACS: **46.05.+b** General theory of continuum mechanics of solids;
63.22.-m Phonons or vibrational states in low-dimensional structures and nanoscale materials.

Keywords: the two-dimensional crystal, elastic films, elasticity theory, elastic moduli, nonlinear mechanics.