

Дислокации и краудионы в двумерных кристаллах. Часть II: Упругие поля и собственная энергия этих дефектов в кристалле с плоской гексагональной решеткой

В.Д. Нацик^{1,2}, С.Н. Смирнов¹

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: smirnov@ilt.kharkov.ua

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

Статья поступила в редакцию 12 декабря 2014 г., опубликована онлайн 27 января 2015 г.

В континуальном приближении описаны поля упругих деформаций и напряжений вокруг центров дислокаций и краудионов в 2D кристалле с изотропными упругими свойствами. Вычислена упругая энергия дефектов обоих типов, обсуждены ее зависимость от размеров кристалла, а также количественная неопределенность, связанная с неприменимостью континуального описания деформаций на атомных расстояниях от центров дефектов. Уточнения результатов континуальной теории достигнуты путем их сопоставления с результатами численного анализа методами молекулярной динамики атомной структуры дислокаций и краудионов в 2D кристалле с гексагональной решеткой. Работа продолжает исследование, начатое в опубликованной ранее статье: *ФНТ* **40**, 1366 (2014).

У континуальному наближенні описано поля пружних деформацій і напружень навколо центрів дислокацій і краудіонів у 2D кристалах з ізотропними пружними властивостями. Обчислено пружну енергію дефектів обох типів, обговорено її залежність від розміру кристалу, а також кількісну невизначеність, обумовлену неможливістю континуального опису деформацій на атомних відстанях від центрів дефектів. Уточнення результатів континуальної теорії досягнуто шляхом їх співставлення з результатами числового аналізу методами молекулярної динаміки атомної структури дислокацій та краудіонів у 2D кристалах з гексагональною решіткою. Робота продовжує дослідження, яке розпочато у опублікованій раніше статті: *ФНТ* **40**, 1366 (2014).

PACS: **46.25.-y** Статическая упругость;
61.72.Bb Теории и модели дефектов в кристалле;
61.72.J- Точечные дефекты и кластеры дефектов;
61.72.Lk Линейные дефекты: дислокации, дисклинации.

Ключевые слова: двумерные кристаллы, дислокации, краудионы, упругие поля, микроскопические модели дефектов, собственная энергия дефектов.

1. Введение

В настоящей работе продолжено теоретическое изучение свойств дислокаций и краудионов в двумерных (2D) кристаллах. Детальное описание постановки задачи и результатов первого этапа исследования опубликовано в статье [1].

Дислокации и краудионы — собственные дефекты кристаллической структуры, обладающие особыми топологическими и кристаллогеометрическими свойствами. В работе [1] оба типа дефектов изучены в рамках единого подхода: 2D кристалл рассматривается в континуальном приближении как двумерная сплошная упруго-анизотропная среда, а изучаемые дефекты —

как точечные носители пластической деформации и сингулярные источники полей упругих деформаций. Каждому типу дефектов сопоставлен тензор пластической дисторсии, который учитывает различия создаваемых дислокациями и краудионами структурных искажений с точки зрения топологии и локальной геометрии кристаллической среды. В рамках линейной теории упругости анизотропной 2D среды [2] проанализированы общие свойства статических дефектов обоих типов и выведены базовые уравнения, определяющие деформированное состояние кристалла при наличии в нем единичных дефектов или их ансамблей. Разработан также алгоритм построения общих решений этих уравнений. Показано, что упругие поля дефектов можно выразить через тензорную функцию Грина, которая описывает реакцию среды на сосредоточенную силу. Задача о вычислении тензора Грина для 2D кристаллов также рассмотрена в статье [1].

В [1] мы не смогли получить в явном виде координатные зависимости компонент тензора Грина для 2D кристалла с произвольной анизотропией, поэтому был описан только общий характер деформированного состояния кристалла с дефектами дислокационного и краудионного типа. Полное решение обсуждаемых задач оказалось возможным для отдельного класса 2D кристаллов, обладающих изотропными упругими свойствами. Тензор Грина для таких кристаллов получен в работе [1], а в настоящей статье он использован для детального описания полей упругих деформаций и напряжений вокруг центров единичных дислокаций и краудионов. Приведены также результаты вычислений и сравнительного анализа энергетических характеристик этих дефектов. В последнем разделе статьи выводы континуального описания дефектов сопоставлены с результатами компьютерного моделирования атомно-решеточной структуры дислокаций и краудионов в 2D кристалле, который образован системой одинаковых атомов с центрально-симметричным взаимодействием между ними. Такой кристалл обладает изотропными упругими свойствами, что позволило количественно сопоставить результаты моделирования и континуального описания дефектов.

2. Топологические заряды, упругие поля и собственная энергия единичных дефектов

В работе [1] собственные дефекты структуры 2D кристаллов описаны в рамках линейной теории упругости двумерного анизотропного континуума. Использована система декартовых координат с осями x_1 и x_2 , расположенными в плоскости кристалла, а положение малого элемента среды в начальном (недеформированном) состоянии задается двухкомпонентным радиус-вектором $\mathbf{r} = \{x_1, x_2\}$ (рис. 1). Статическая упругая деформация в плоскости кристалла описывается вектор-

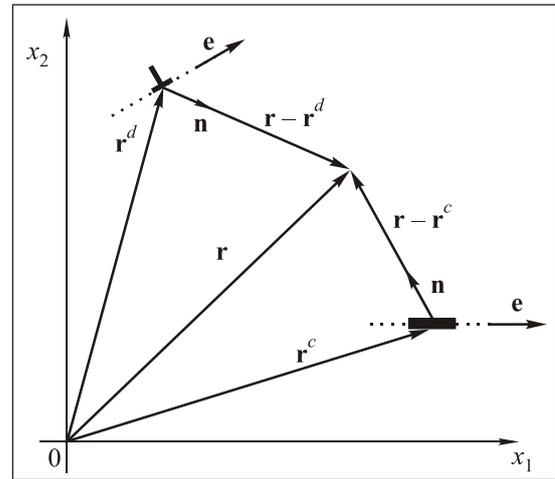


Рис. 1. Система координат и расположение дефектов в плоскости кристалла: \perp , \mathbf{r}^d — символ и радиус-вектор дислокации; \blacksquare , \mathbf{r}^c — символ и радиус-вектор краудиона; \mathbf{r} — радиус-вектор точки наблюдения; \mathbf{n} — орты направлений от центров дефектов к точке наблюдения, пунктиром обозначены линии скольжения дефектов с ортом \mathbf{e} .

ным полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \{u_1, u_2\}$ и тензорным полем дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r}) = \nabla_i u_k(\mathbf{r})$ ($\nabla_i \equiv \partial/\partial x_i$, $i, k = 1, 2$). Единичные дислокации и краудионы рассматриваются как точечные сингулярные источники поля упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$: расположение центров дефектов в плоскости кристалла будем задавать радиус-векторами \mathbf{r}^d и \mathbf{r}^c соответственно (рис. 1). «Мощность» источников, характер сингулярностей и топологические свойства поля $u_{ik}(\mathbf{r})$ у дислокаций и краудионов различны. В качестве основных характеристик «мощности» дефектов, как источников поля упругих дисторсий, рассматриваются их топологические заряды [1]. Эти многокомпонентные величины однозначно связаны с кристаллогеометрическими характеристиками создаваемых дефектами нарушений регулярной атомной структуры кристалла и отражают различия дислокаций и краудионов.

Дефекты обоих типов возникают в 2D кристалле вследствие незавершенных пластических сдвигов вдоль плотноупакованных атомных рядов на элементарный период решеточных трансляций \mathbf{b} и каждому из них соответствует прямая линия скольжения, направление которой будем задавать ортом \mathbf{e} . Роль топологического заряда дислокации играет двухкомпонентный вектор Бюргерса $\mathbf{b}^d = \pm \mathbf{b} = \pm b\mathbf{e}$. При заданном ортом \mathbf{e} положительном направлении линии скольжения векторы $\mathbf{b}^{(+)} = b\mathbf{e}$ и $\mathbf{b}^{(-)} = -b\mathbf{e}$ служат топологическими зарядами положительной и отрицательной дислокации. Краудион, как точечный источник поля упругих дисторсий, эквивалентен локальному дислокационному диполю, который состоит из двух дислокаций с векторами Бюргерса $\pm b\mathbf{e}$, при этом соединяющий их вектор ориентирован перпендикулярно \mathbf{e} , а его длина равна расстоя-

нию между соседними плотноупакованными атомными рядами. Роль топологического заряда краудиона играет четырехкомпонентный тензор дипольного момента D_{ik}^c , его компоненты также могут иметь положительный или отрицательный знаки и пропорциональны решеточному параметру S_0 — площади примитивной элементарной ячейки в рассматриваемом 2D кристалле ($D_{ik}^c \propto \pm S_0$).

В дальнейшем топологические заряды дислокаций \mathbf{b}^d и краудионов D_{ik}^c будем определять соотношениями [1]

$$\mathbf{b}^d = q\mathbf{b}\mathbf{e}, D_{ik}^c = qS_0 \epsilon_{in} e_n e_k, q = \pm 1, \quad (1)$$

где ϵ_{ik} — единичный антисимметричный тензор ($\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = 0, \epsilon_{12} = 1, \epsilon_{21} = -1$). Здесь и в дальнейшем по повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование.

Если считать известным тензор Грина $G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ для рассматриваемого бесконечно протяженного 2D кристалла и задать компоненты топологических зарядов дислокации \mathbf{b}^d и краудиона D_{ik}^c , то распределения упругих дисторсий вокруг центров этих дефектов определяются формулами [1]

$$u_{ik}^d(\mathbf{r}) = \epsilon_{im} \lambda_{jpmn} b_n^d \nabla_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d), \quad (2)$$

$$u_{ik}^c(\mathbf{r}) = \epsilon_{im} \lambda_{jpmn} D_{sn}^c \nabla_p \nabla_s G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c), \quad (3)$$

где λ_{jpmn} — тензор модулей упругости кристалла относительно продольных деформаций с размерностью компонент λ [сила/длина].

В работе [1] показано, что зависимость тензора $G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ от модуля вектора $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ имеет универсальный характер при всех возможных типах анизотропии 2D кристалла, которая определяет только детали его угловой зависимости в плоскости кристалла. В частности $\nabla_i G_{kj}(\mathbf{R}) \propto R^{-1}$, а $\nabla_p \nabla_s G_{kj}(\mathbf{R}) \propto R^{-2}$ ($R = |\mathbf{R}|$), поэтому формулы (2) и (3) можно представить в виде

$$u_{ik}^d(\mathbf{r}) = \frac{b_n^d}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^d|} \Phi_{nik}(\mathbf{n}) = \frac{qb}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^d|} e_n \Phi_{nik}(\mathbf{n}), \quad (4)$$

$$u_{ik}^c(\mathbf{r}) = \frac{D_{ns}^c}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^c|^2} \Phi_{nsik}(\mathbf{n}) = \frac{qS_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^c|^2} \epsilon_{nm} e_m e_s \Phi_{nsik}(\mathbf{n}), \quad (5)$$

где \mathbf{n} — орт направлений от центров дефектов \mathbf{r}^d или \mathbf{r}^c в точку наблюдения \mathbf{r} (рис. 1). Явный вид тензорных функций $\Phi_{nik}(\mathbf{n})$ и $\Phi_{nsik}(\mathbf{n})$ удастся получить только для некоторых кристаллических структур со слабой анизотропией.

Зная поля упругих дисторсий $u_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$, легко вычислить другие важные характеристики создаваемого дефектами деформированного состояния кристалла, в

частности, поля упругих деформаций $\epsilon_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ и напряжений $\sigma_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$:

$$\epsilon_{ik}^{d,c} = \frac{1}{2}(u_{ik}^{d,c} + u_{ki}^{d,c}), \quad \sigma_{ik}^{d,c} = \lambda_{iknm} \epsilon_{nm}^{d,c}. \quad (6)$$

Весьма важной характеристикой дефекта является также его собственная энергия E_d или E_c — приращение потенциальной энергии межатомного взаимодействия в кристалле вследствие создаваемого дефектом искажений его идеальной структуры. При описании дефекта в рамках линейной теории упругости эта величина отождествляется с полной энергией упругой деформации:

$$E_{d,c} = \frac{1}{2} \int \sigma_{ik}^{d,c}(\mathbf{r}) \epsilon_{ik}^{d,c}(\mathbf{r}) dS = \frac{1}{2} \lambda_{iknm} \int u_{ik}^{d,c}(\mathbf{r}) u_{nm}^{d,c}(\mathbf{r}) dS, \quad (7)$$

где интегрирование распространяется на всю площадь, занимаемую кристаллом в двумерном плоском пространстве.

Отметим, что вычисление E_d и E_c путем подстановки выражений (4)–(6) в формулу (7) наталкивается на определенные трудности. Аналогичные трудности и способы их преодоления хорошо известны в континуальной теории дефектов в 3D кристаллах [3,4]. Согласно формулам (4) и (5), радиальная и азимутальная зависимости полей дисторсий $u_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ разделены по отношению к центрам дефектов \mathbf{r}^d и \mathbf{r}^c . Поэтому при вычислениях интеграла в формуле (7) целесообразно перейти к полярным координатам r и θ с началом отсчета для \mathbf{r} в центре дефекта, а полярный угол θ отсчитывать от направления линии скольжения \mathbf{e} . После этого учет соотношений $n_k e_k = \cos \theta$ и $\epsilon_{km} n_k e_m = \sin \theta$ позволяет разделить переменные r и θ , и при выполнении интегрирования интегралы, определяющие величины $E_{d,c}$, привести к виду

$$E_d = b^2 \lambda_{iknm} \int_0^{2\pi} d\theta \Phi_{iknm}^d(\sin \theta, \cos \theta) \int \frac{dr}{r}, \quad (8)$$

$$E_c = S_0^2 \lambda_{iknm} \int_0^{2\pi} d\theta \Phi_{iknm}^c(\sin \theta, \cos \theta) \int \frac{dr}{r^3}. \quad (9)$$

Разумеется, получить явный вид тензорных функций $\Phi_{iknm}^{d,c}$ под знаком интеграла по угловой переменной и выполнить операцию интегрирования можно только, имея явный вид тензора Грина $G_{ik}(\mathbf{r})$, но нет сомнений в том, что эти функции интегрируемы и интегралы имеют конечные значения. Вместе с тем, интегрирование по радиальной переменной должно производиться, вообще говоря, в пределах $0 < r < \infty$, что формально приводит к бесконечным значениям $E_{d,c}$: в формуле (8) появляется логарифмическая расходимость на обоих пределах интегрирования, а в формуле (9) степенная расходимость на нижнем пределе. Расхо-

димось при $r = 0$ в обоих случаях связана с неприменностью формул для $u_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$, полученных в рамках линейной теории упругости, на атомных расстояниях вблизи центров дефектов при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}^{d,c}$. Для устранения этой расходимости необходимо исключить из области интегрирования в (8) и (9) малые окрестности вокруг центров дефектов с радиусами r_0^d или r_0^c атомного масштаба ($r_0^d, r_0^c \cong b$). Следствием такой операции будет появление в теории феноменологических параметров r_0^d и r_0^c и связанная с ними количественная неопределенность $E_{d,c}$, которую можно устранить только при более строгих вычислениях этих величин в рамках атомно-решеточных моделей дефектов.

Расходимость в интеграле по радиальной переменной на верхнем пределе появляется только в формуле (8), при вычислениях собственной энергии дислокации E_d , она обусловлена особыми топологическими свойствами этого дефекта (их детальное обсуждение содержится в статье [1]). Относительно медленное убывание упругих полей при удалении от центра дислокации на макроскопические расстояния ($|\mathbf{r} - \mathbf{r}^d| \gg b$) приводит к существенной зависимости ее собственной энергии от размеров и формы кристалла. Для установления характера такой зависимости и получения полуколичественной оценки величины E_d можно рассмотреть предельно простую геометрию задачи — кристалл в виде круга с радиусом $R_s \gg b$ и дислокационной точкой в его центре, что приводит к зависимости $E_d \propto \ln(R_s/r_0^d)$. Усложнения формы кристалла или смещение дислокационной точки по отношению к его геометрическому центру, а также изменения физических условий на его границе будут сопровождаться поправками логарифмического масштаба к энергии дислокации.

Отметим, что упругие поля краудиона на больших расстояниях от его центра $|\mathbf{r} - \mathbf{r}^c| \gg b$ убывают значительно быстрее, поэтому зависимость его энергии E_c от размеров кристалла R_s , его формы, или граничных условий сводится к поправке порядка $(r_0^c/R_s)^2$, которая для кристалла макроскопических размеров имеет пренебрежимо малую величину.

Учитывая сделанные выше замечания относительно возможности использования формул (7)–(9) для вычисления собственной энергии единичных дислокаций и краудионов, приходим к заключению, что для кристаллов с произвольной анизотропией эти величины можно представить в виде формул

$$E_d = \lambda_{iknm} \Delta_{iknm}^d b^2 \ln(R_s / r_0^d), \quad (10)$$

$$E_c = \lambda_{iknm} \Delta_{iknm}^c (S_0 / r_0^c)^2, \quad (11)$$

где $r_0^{d,c}$ — условный радиус ядра дислокации и краудиона соответственно, а тензорные безразмерные величины $\Delta^{d,c}$ — результат интегрирования в формулах (7)–(9) по угловой переменной, которое возможно вы-

полнить только установив явный вид координатной зависимости компонент тензора Грина $G_{ik}(\mathbf{r})$.

3. Дислокации и краудионы в 2D кристалле с изотропными упругими свойствами

Упругие свойства 2D кристалла при деформациях в его плоскости характеризуются тензором модулей упругости λ_{iknm} . Он имеет 16 компонент, но вследствие инвариантности относительно перестановок индексов $\lambda_{ijmn} = \lambda_{jimn} = \lambda_{ijnm} = \lambda_{jinm}$ и $\lambda_{iknm} = \lambda_{nmik}$ только 6 из них могут быть независимыми. Учет симметрии кристаллической решетки приводит к дополнительному уменьшению числа независимых компонент этого тензора. Двумерная решетка узлов, удовлетворяющая условиям трансляционной симметрии, характеризуется пятью типами плоских ячеек Бравэ и десятью точечными группами симметрии [5–7]. Из всей совокупности возможных двумерных кристаллических структур максимальной симметрией обладают кристаллы с гексагональной (треугольной) решеткой, они имеют плоскую группу симметрии $rbmm$. Для них число независимых компонент тензора λ_{iknm} сокращается до двух и он приобретает вид [1–3]

$$\lambda_{iknm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{nm} + \mu (\delta_{in} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kn}), \quad (12)$$

где δ_{ik} — символ Кронекера, а $\lambda = \lambda_{1122}$ и $\mu = \lambda_{1212}$ — двумерные аналоги коэффициентов упругости Ламэ (в работе [2] символ λ использован для обозначения компоненты λ_{1111}). Упругие свойства этих кристаллов изотропны, что значительно упрощает решение большого числа задач теории упругости, в частности, вычисление тензора Грина, для которого в работе [1] получено выражение

$$G_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{\lambda + \mu}{4\pi\mu(\lambda + 2\mu)} \left(-\frac{\lambda + 3\mu}{\lambda + \mu} \delta_{ik} \ln r + \frac{x_i x_k}{r^2} \right). \quad (13)$$

Использование формул (12) и (13) позволяет вычислить в явном виде все основные характеристики дислокаций и краудионов, представленные в общем виде формулами (2)–(11). Выражения для полей упругих дисто́рсий $u_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ и напряжений $\sigma_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ вокруг центра единичного дефекта в упруго-изотропном 2D континууме будут представлены в системе координат, показанной на рис. 1. Для характеристики угловых зависимостей этих полей использованы орт линии скольжения соответствующего дефекта \mathbf{e} и орт направления от его центра в точку наблюдения \mathbf{n} . При вычислении энергии дефектов $E_{d,c}$ будем использовать полярные координаты, введенные в предыдущем разделе, а также соотношения

$$\epsilon_{mi} \epsilon_{mk} = \delta_{ik}, \quad \epsilon_{nm} \delta_{nm} = 0, \quad \epsilon_{km} n_k e_m = \sin \theta, \quad \delta_{km} n_k e_m = \cos \theta. \quad (14)$$

3.1. Упругие поля и энергия дислокации

Деформированное состояние бесконечно протяженного 2D кристалла вокруг центра дислокации \mathbf{r}^d описывается формулами

$$\mathbf{b}^d = qb\mathbf{e}, \quad \mathbf{r} - \mathbf{r}^d = \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^d \right| \mathbf{n},$$

$$u_{ik}^d(\mathbf{r}) = \frac{qb}{2\pi(\lambda + 2\mu) \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^d \right|} \times$$

$$\times \left\{ \mu \left[\epsilon_{ik} e_s n_s + \epsilon_{is} e_k n_s - \epsilon_{is} e_s n_k \right] + \right.$$

$$\left. + 2(\lambda + \mu) e_m n_m \epsilon_{is} n_s n_k \right\}, \quad (15)$$

$$\sigma_{ik}^d(\mathbf{r}) = \frac{qb\mu}{\pi \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^d \right|} \frac{\lambda + \mu}{(\lambda + 2\mu)} \times$$

$$\times \left[\epsilon_{ns} e_n n_s \delta_{ik} + e_m n_m n_s (\epsilon_{is} n_k + \epsilon_{ks} n_i) \right]. \quad (16)$$

При вычислении энергии E_d ограничимся рассмотрением дислокационной точки в центре кристаллического круга с радиусом R_s . Подстановка (15) и (16) в (7), переход к полярным координатам r и θ с учетом соотношений (14) и ограничение интегрирования по радиальной переменной интервалом (r_0^d, R_s) приводят формулу для E_d к виду

$$E_d = \frac{\mu(\lambda + \mu)}{2\pi^2(\lambda + 2\mu)^2} b^2 \int_0^{2\pi} d\theta (\mu + \lambda \cos^2 \theta) \int_{r_0^d}^{R_s} \frac{dr}{r}.$$

Выполнив операции интегрирования, получим для изотропной среды выражение (10) в явном виде:

$$E_d = \frac{\mu(\lambda + \mu)}{2\pi(\lambda + 2\mu)} b^2 \ln \left(\frac{R_s}{r_0^d} \right). \quad (17)$$

3.2. Упругие поля и энергия краудиона

Упругие поля, создаваемые в бесконечно протяженном 2D кристалле краудионом с центром в точке \mathbf{r}^c , описываются формулами

$$D_{ik}^c = qS_0 \epsilon_{in} e_n e_k, \quad \mathbf{r} - \mathbf{r}^c = \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^c \right| \mathbf{n},$$

$$u_{ik}^c(\mathbf{r}) = \frac{qS_0}{2\pi(\lambda + 2\mu) \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^c \right|^2} \left\{ \left[2(\lambda + \mu)(e_s n_s)^2 - \mu \right] \delta_{ik} + \right.$$

$$\left. + 2 \left[\mu - 4(\lambda + \mu)(e_s n_s)^2 \right] n_i n_k + \right.$$

$$\left. + 2\mu e_i e_k + 4(e_s n_s) \left[(\lambda + \mu) e_i n_k - \mu e_k n_i \right] \right\}, \quad (18)$$

$$\sigma_{ik}^c(\mathbf{r}) = \frac{qS_0 \mu}{\pi(\lambda + 2\mu) \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^c \right|^2} \left\{ \left[2\mu(e_s n_s)^2 + \lambda - \mu \right] \delta_{ik} + 2\mu e_i e_k + \right.$$

$$\left. + \left[2\mu - 8(\lambda + \mu)(e_s n_s)^2 \right] n_i n_k + 2\lambda(e_s n_s)(e_i n_k + e_k n_i) \right\}. \quad (19)$$

Подстановка (18) и (19) в (7), переход к полярным координатам r и θ и использование соотношений (14) приводит формулу для E_c к виду (9) с конкретной угловой зависимостью под знаком первого интеграла и пределами интегрирования по радиальной переменной (r_0^c, ∞) :

$$E_c = \frac{\mu(\lambda + \mu)}{2\pi^2(\lambda + 2\mu)^2} S_0^2 \int_0^{2\pi} d\theta (\mu + 4\lambda \cos^2 \theta + 4\mu \cos^4 \theta) \int_{r_0^c}^{\infty} \frac{dr}{r^3}.$$

Выполнив интегрирование, получаем явный вид формулы (11) для изотропной среды:

$$E_c = \frac{\mu(\lambda + \mu)(4\lambda + 5\mu)}{4\pi(\lambda + 2\mu)^2} \left(\frac{S_0}{r_0^c} \right)^2. \quad (20)$$

4. Сопоставление выводов континуальной теории с результатами моделирования дислокаций и краудионов в 2D кристалле

В разделе 2 были отмечены и обсуждены трудности, возникающие при континуальном описании дефектов кристаллической структуры дислокационного и краудионного типа. Главная из них — нефизические расходимости упругих полей дефектов при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}^{d,c}$. С ней связана еще одна трудность: искусственное введение в теорию радиуса ядра дефекта $r_0^{d,c}$ для устранения расходимостей приводит к количественной неопределенности в формулах (10), (11) или (17) и (20), так как континуальная теория может указать только порядок величины параметров $r_0^{d,c} \approx b$ исходя из критериев ее применимости. Из этих формул следует, что неопределенность особенно велика для краудионов: сравнительно слабая логарифмическая зависимость $E_d \propto \ln(r_0^d)$ и сильная степенная зависимость $E_c \propto (r_0^c)^{-2}$.

Один из возможных способов преодоления отмеченных выше трудностей — количественный анализ атомно-решеточных моделей дефектов с использованием современных методов моделирования физических систем и привлечением компьютеров для численных расчетов. Здесь мы ограничимся только обсуждением и уточнением величины собственной энергии дефектов. Для этого воспользуемся результатами компьютерного моделирования дислокаций и краудионов в 2D кристаллах, опубликованными ранее в сообщениях [8–13].

Рассмотрим 2D кристалл, состоящий из одинаковых атомов с парным центрально-симметричным взаимо-

действием между ними, которое описывается потенциалом Ленарда-Джонса [14]:

$$\varphi(r) = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (21)$$

где r — расстояние между атомами, ε_0 и r_0 — энергетический и пространственный параметры потенциала. Учитывая специфику дислокационных и краудионных деформаций в 2D кристалле [1], будем рассматривать изменения атомных конфигураций только в его плоскости, отказавшись от рассмотрения изгибных деформаций как при описании равновесной структуры кристалла без дефектов, так и создаваемых дефектами искажений атомной структуры.

Статическую равновесную структуру бесконечного идеального 2D кристалла, соответствующую потенциалу парного взаимодействия (21), можно установить хорошо известными аналитическими методами теории кристаллических решеток [3,14,15]. Эта структура представляет собой плоскую гексагональную (треугольную) решетку с параметром a_0 , площадью элементарной ячейки $S_0 = \sqrt{3}/2 a_0^2$ и характеризуется энергией связи на один атом E_0 . Расчет значений параметров a_0 и E_0 для гексагональной решетки показывает, что они связаны с параметрами потенциала (21) соотношениями

$$a_0 \approx 0,99r_0, \quad E_0 \approx -3,38\varepsilon_0. \quad (22)$$

Такой 2D кристалл имеет изотропные упругие свойства с тензором модулей упругости (12). При этом центрально-симметричный характер межатомного взаимодействия приводит [2] к дополнительному соотношению между модулями упругости $\lambda_{1122} = \lambda = \lambda_{1212} = \mu$. Расчет по формулам, полученным в [2], показывает, что величины λ и μ связаны с параметрами потенциала (12) соотношением

$$\lambda = \mu \approx 35,85 \frac{\varepsilon_0}{r_0^2}. \quad (23)$$

В работах [10–13] компьютерное моделирование дислокаций и краудионов и вычисление их характеристик проводилось в 2D кристаллах ограниченных размеров: рассматривался фрагмент идеальной плоской гексагональной решетки, вписанной в круг радиуса R_s , с центром в одном из узлов решетки. Величина R_s задавалась кратной величине параметра решетки a_0 и варьировалась в широких пределах, что позволяло получить количественные оценки влияния размера кристалла на энергетические характеристики дефектов (рис. 2) и сопоставить их с выводами континуальной теории. На рисунке видно, что при $R_s \geq 16a_0$ зависимость энергии дислокации от R_s соответствует логарифмическому закону $E_d(R_s) \propto \ln(R_s/r_0^d)$, а $E_c(R_s) \cong \text{const}$: с этими результатами согласуются формулы континуальной теории (10) и (11) или (17) и (20).

Так как рассматриваемая в данном разделе атомная модель кристалла имеет изотропные упругие свойства, то можно ставить вопрос и о количественном сопоставлении результатов численного компьютерного моделирования, показанных на рис. 2, с формулами континуальной теории (17) и (20). Будем рассматривать радиусы ядер дефектов $r_0^{d,c}$ в этих формулах как подгоночные параметры, вариации которых позволяют получить количественное согласие теоретических формул с результатами моделирования, представленными на рис. 2: соответствующие значения $r_0^{d,c}$ назовем эффективными радиусами ядер дефектов. Подстановка в формулы (17) и (20) соотношений (22) и (23), связывающих параметры кристалла с параметрами потенциала межатомного взаимодействия, и сопоставление формул с результатами моделирования на рис. 2 приводит к оценкам

$$r_0^d \approx 1,5b, \quad r_0^c \approx 0,6b. \quad (24)$$

Эти оценки подтверждают сделанное в разд. 2 предположение о порядке величины радиусов ядер дефектов как феноменологических параметров континуальной теории.

5. Заключение

Настоящая работа завершает второй этап исследования свойств статических дислокаций и краудионов в 2D кристаллах. Создаваемые этими дефектами искажения регулярного расположения атомов весьма значительны только в небольших областях кристалла с размерами порядка межатомных расстояний (ядра де-

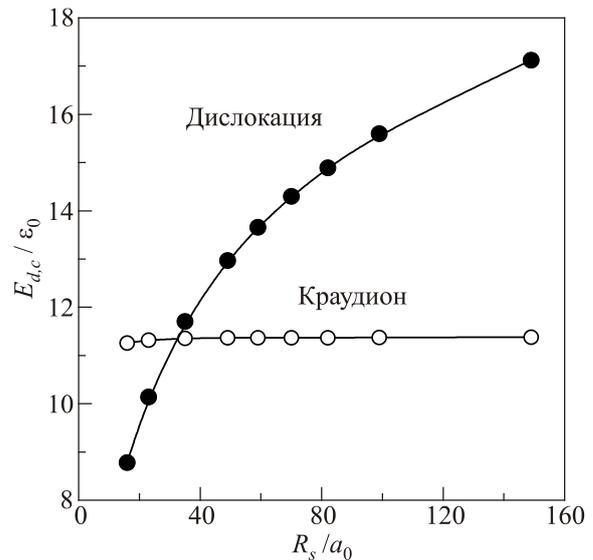


Рис. 2. Зависимость собственной энергии дислокации E_d и краудиона E_c от радиуса кристалла R_s (данные из [12]): ε_0 — энергетический параметр потенциала межатомного взаимодействия, a_0 — параметр решетки бесконечного гексагонального 2D кристалла.

фектов), которые окружены дальнедействующими полями малых упругих деформаций. Такая структура искажений приводит к необходимости использовать при теоретическом описании дефектов два подхода:

— рассматривать кристалл как упругий 2D континуум, а дефекты — как точечные источники полей упругих деформаций и напряжений, что позволяет для описания конфигурации этих полей привлекать уравнения и методы теории упругости;

— формулировать атомно-решеточные модели кристалла и дефектов, а для описания их ядер использовать уравнения механики атомных систем.

В данном исследовании сопоставлены результаты этих подходов при изучении дислокаций и краудионов в 2D кристаллах с гексагональной кристаллической структурой и изотропными упругими свойствами. Сравнение результатов континуального и микроскопического описания позволило получить количественные оценки для эффективных размеров ядер дефектов.

Авторы искренне признательны А.С. Ковалеву за интерес к работе и полезные обсуждения полученных результатов.

1. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **40**, 1366 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 1063 (2014)].
2. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **39**, 690 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 534 (2013)].
3. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища шк., Изд-во ХГУ, Харьков (1988).
4. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
5. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Наука, Москва (1979).
6. А. Келли, Г. Гровс, *Кристаллография и дефекты в кристаллах*, Мир, Москва (1974).
7. Р.В. Галиулин, *Кристаллографическая геометрия*, Наука, Москва (1984).
8. С.Н. Смирнов, Е.И. Назаренко, *Збірник наукових праць міжнародної науково-практичної конференції «Структурна релаксація у твердих тілах»*, ТОВ «Планер», Вінниця, 261 (2006).
9. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, Е.И. Назаренко, *Матеріали 8-ої Міжнародної конференції «Фізичні явища в твердих тілах»*, ХНУ, Харків (2007), с. 25.
10. С.Н. Смирнов, В.Д. Нацик, В.И. Белан, *Матеріали X Міжнародної конференції «Фізичні явища в твердих тілах»*, ХНУ, Харків (2011), с. 15.
11. С.Н. Смирнов, В.И. Белан, *Матеріали XI Міжнародної конференції «Фізичні явища в твердих тілах»*, ХНУ, Харків (2013), с. 112.
12. V.I. Belan, L.F. Belous, G.E. Grechnev, E.S. Zarudnev, V.G. Zobnina, A.Yu. Ivanov, V.A. Karachevtsev, M.V. Kosevich,

Yu.V. Rubin, V.V. Slavin, S.N. Smirnov, S.G. Stepanian, and V.V. Chagovets, *Collection of Scientific Papers International Conference "Parallel and Distributed Computing Systems" (PDCS 2013)*, Kharkiv, Ukraine (2013), p. 32.

13. V.I. Belan, L.F. Belous, S.A. Egupov, V.G. Zobnina, A.Yu. Ivanov, V.A. Karachevtsev, M.V. Kosevich, V.D. Natsik, V.M. Polyakov, Yu.V. Rubin, S.N. Smirnov, S.G. Stepanian, E.Yu. Torgonin, and V.V. Chagovets, *Collection of Scientific Papers International Conference "Parallel and Distributed Computing Systems" (PDCS 14)*, Kharkiv, Ukraine (2014), p. 34.
14. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, Мир, Москва (1990), т. 2.
15. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, Физ.-мат. лит., Москва (1963).

Dislocations and crowdions in two-dimensional crystals. Part II: Elastic fields and intrinsic energies of the above defects in a crystal with a plane hexagonal lattice

V.D. Natsik and S.N. Smirnov

The fields of elastic deformation and stress round the centers of dislocations and crowdions in 2D crystals with isotropic elastic properties are described in the continual approximation. The elastic energy of both types of defects are estimated and its dependence on crystal size is discussed. Considered also is the quantitative uncertainty that is associated with the inapplicability of the continual description of deformation at atomic distances from the defect centers. The results obtained by using the continual theory were improved by comparing with the results of numerical analysis by the methods of molecular dynamics of atomic structure of dislocations and crowdions in a hexagonal lattice 2D crystal. The work under consideration continues the exploration of the problem started in the previous paper (*Fiz. Nizk. Temp.* **40**, 1366 (2014)).

PACS: **46.25.-y** Static elasticity;
 61.72.Bb Theories and models of crystal defects;
 61.72.J- Point defects and defect clusters;
 61.72.Lk Linear defects: dislocations, disclinations.

Keywords: two-dimensional crystals, dislocations, crowdions, elastic fields, microscopic models of defects, self energy of defects.