

Дислокации и краудионы в двумерных кристаллах. Часть I: Атомно-решеточные модели и континуальное описание этих дефектов в упругой анизотропной 2D среде

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 1 августа 2014 г., опубликована онлайн 22 октября 2014 г.

Предложено последовательное континуальное описание дислокаций и краудионов как собственных дефектов структуры в двумерных (2D) кристаллах. Оба типа дефектов изучены в рамках единого подхода: кристалл рассматривается как строго двумерная упругоанизотропная среда, а изучаемые дефекты — как точечные носители пластической деформации и сингулярные источники полей упругих деформаций с присущими каждому из них кристаллогеометрическими и топологическими свойствами. Континуальному описанию предшествует обсуждение простых атомно-решеточных схем, иллюстрирующих микроскопическую структуру этих дефектов. Каждому типу дефектов сопоставлен тензор пластической дисторсии, согласованный с их кристаллогеометрическими характеристиками. В рамках линейной теории упругости 2D среды выведены уравнения, определяющие распределения упругих полей вокруг центров одиночных дефектов, а также при непрерывном распределении дефектов в кристалле. Найдены общие решения этих уравнений для неподвижных дислокаций и краудионов в бесконечно протяженном упругоанизотропном 2D континууме.

Запропоновано послідовний континуальний опис дислокацій та краудіонів як власних дефектів структури у двовимірних (2D) кристалах. Обидва типи дефектів вивчено у рамках єдиного підходу: кристал розглядається як строго двовимірне пружне анізотропне середовище, а дефекти — як точкові носії пластичної деформації і сингулярні джерела полів пружних деформацій з притаманними кожному з них кристаллогеометричними та топологічними властивостями. Континуальному опису передують обговорення простих атомно-граткових схем, котрі ілюструють микроскопічну структуру цих дефектів. Кожному типу дефектів співставлено тензор пластичної дисторсії, який узгоджено з їх кристаллогеометричними характеристиками. У рамках лінійної теорії пружності 2D середовища виведено рівняння, які визначають розподіл пружних полів навколо центрів одиничних дефектів у кристалі, а також при неперервному розподілі дефектів у кристалі. Знайдено загальні розв'язки цих рівнянь для статичних дислокацій і краудіонів у нескінченному протяжному пружно анізотропному 2D континуумі.

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, теория упругости, поля деформации, топологический заряд.

1. Введение

В настоящее время в физике конденсированного состояния вещества изучается довольно большое количе-

ство систем, в которых пространственное распределение микроскопических структурных элементов имеет трансляционный порядок в двух измерениях. Эти системы называются двумерными (2D) кристаллами [1–3].

Симметрия структуры 2D кристаллов описана в монографиях [4–6]: для них плоская решетка узлов характеризуется десятью кристаллографическими точечными группами симметрии и пятью типами плоских ячеек Бравэ.

Отметим, что во многих случаях 2D кристаллы могут существовать только в условиях 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].

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.

В работе [9] нами предложен последовательный вывод базовых уравнений теории упругости 2D кристалла: предполагается, что кристалл образован системой одинаковых атомов, их взаимодействие описывается парным центральносимметричным потенциалом, а теория упругости соответствует предельному переходу от уравнений атомно-решеточной механики к континуальному описанию в приближении малых деформаций. Получены уравнения для описания деформаций в плоскости кристалла и изгибных деформаций, которые в приближении линейной теории упругости являются независимыми. Обсуждены главные нелинейные поправки к линейному приближению, определяющие взаимосвязь обоих типов деформаций. Результаты работы [9] позволяют провести континуальное описание различных механических процессов и эффектов в идеальных (не содержащих дефектов структуры) 2D кристаллах. Они также создают основы для развития континуального подхода к анализу влияния на физико-механические свойства 2D кристаллов множества структурных искажений или дефектов.

Из всего многообразия дефектов кристаллической структуры следует, в первую очередь, выделить семейство так называемых собственных дефектов, зарождение которых в кристалле не связано с внедрением в него чужеродных структурных элементов. Центральное место в этом семействе занимают два типа дефектов — дислокации и краудионы. Эти дефекты можно считать в определенном смысле родственными. Их зарождение и перемещение, а также обусловленные ими структурные искажения весьма существенно связаны с двумя базовыми свойствами кристаллических структур — транс-

ляционным порядком и наличием в кристаллах плотноупакованных атомных рядов и плоскостей. Эти свойства определяют способность кристаллических материалов к пластическому скольжению — относительному перемещению (сдвигу) соседних фрагментов кристалла на один из периодов трансляций без изменения объема (при континуальном описании — без нарушения сплошности). Такое скольжение может распространяться вдоль плотноупакованных атомных плоскостей или рядов эстафетным способом при сравнительно малых значениях деформирующих сил. Край незавершенного (не прошедшего через весь кристалл) пластического сдвига образует специфический дефект структуры — дислокацию или краудион.

Выше мы подчеркнули определенную аналогию между дислокациями и краудионами. Вместе с тем между этими дефектами существуют и значительные различия, которые необходимо учитывать при описании свойств как самих дефектов, так и их влияния на свойства кристаллов. Наиболее наглядно они проявляются, если классификация дефектов производится по чисто геометрическому признаку: по числу измерений, в которых качественное нарушение структуры кристалла простирается на расстояния, превышающие параметр решетки: дефекты точечные, линейные, поверхностные, объемные. Степень и характер таких различий зависят также и от размерности кристалла.

В трехмерных (3D) кристаллах дислокации относятся к классу линейных, а краудионы — точечных дефектов. В 3D кристалле обусловленная дислокацией область максимального искажения структуры (ядро дислокации) сконцентрирована на атомных расстояниях вдоль некоторой непрерывной линии, а возникает такое искажение в результате незавершенного пластического сдвига вдоль плотноупакованной кристаллографической поверхности. При континуальном описании кристалла в рамках теории упругости дислокация рассматривается как сингулярность поля упругих деформаций на линии. Эта линия расположена на поверхности скольжения с заданными кристаллогеометрическими характеристиками и обладает специфическими топологическими свойствами [10–17]. Краудион в 3D кристалле сильно искажает структуру только в области атомных размеров вблизи некоторой точки (ядро краудиона), такое искажение возникает в результате незавершенного пластического сдвига отдельного плотноупакованного атомного ряда. Поэтому при континуальном описании [18] краудион рассматривается как точечная сингулярность поля упругих деформаций. Эта точка расположена на линии скольжения с заданными кристаллогеометрическими характеристиками и также обладает специфическими топологическими свойствами, но отличными от свойств точек дислокационной линии.

Освещению различных аспектов атомно-решеточной и континуальной теории дислокаций и краудионов в 3D кристаллах посвящена обширная литература (см. [1,2,17,19–35] и приведенные там ссылки). При этом основное внимание исследователей чаще всего концентрировалось на кристаллогеометрических различиях между ними, поэтому дислокации и краудионы рассматривались как качественно различные дефекты. Исключением является работа [18], в которой намечено описание этих дефектов с единой точки зрения — как носителей пластической деформации и сингулярных источников упругих полей. Следует отметить, что подавляющее число публикаций посвящено физике дислокаций, так как их влияние на физико-механические свойства 3D кристаллов намного сильнее и значительнее, чем влияние краудионов.

В 2D кристаллах кристаллогеометрические различия между дислокациями и краудионами менее значительны — оба типа дефектов относятся к классу точечных и возникают в результате незавершенного пластического сдвига вдоль некоторого плотноупакованного атомного ряда. При континуальном описании оба дефекта должны рассматриваться как точечные сингулярности упругого поля, расположенные на линии скольжения с заданными кристаллогеометрическими характеристиками, но эти сингулярности отличаются одна от другой присущими каждой из них топологическими свойствами. Простые схемы, иллюстрирующие атомную структуру дислокации и краудиона в 2D кристалле, описаны в следующем разделе.

Последовательное, строгое и достаточно детальное теоретическое описание структуры и свойств обсуждаемых дефектов в 2D кристаллах до недавнего времени практически отсутствовало. Хотя влияние дислокаций на свойства 2D кристаллов обсуждается довольно часто [1–3], но при этом для их описания используются результаты, полученные в теории 3D кристаллов: 2D кристалл рассматривается как тонкий упругий слой, ограниченный параллельными плоскостями и пронизанный линиями дислокаций в перпендикулярном слою направлении. Такой подход дает корректные полуколичественные оценки при анализе влияния дислокаций на свойства 2D кристалла, но не может претендовать на роль строгой теории. В частности, в этой модели дислокации не являются строго точечными дефектами, теория оперирует плохо определенным параметром — конечной толщиной слоя и соответствующей ей длиной дислокационных линий. Данное обстоятельство не приводит к затруднениям, если реальный 2D кристалл представляет собой решетку топологических солитонов в пленке, но при рассмотрении плоских монокристаллов или монокристаллов структур возникает неопределенность в количественных оценках величины указанного параметра.

Дефекты краудионного типа в 2D кристаллах до настоящего времени, насколько нам известно, вообще не рассматривались. Вместе с тем для этих систем, в отличие от 3D кристаллов, нет оснований считать, что влияние краудионов на их свойства менее значительно, чем влияние дислокаций. Это стимулирует интерес к разработке единого подхода к описанию дефектов обоих типов в 2D кристаллах, а также к детальному анализу их различий и оценкам относительного влияния на конкретные физические свойства и процессы.

В данной статье предложено последовательное континуальное описание дислокаций и краудионов в 2D кристалле с единой точки зрения: кристалл рассматривается как строго двумерная упругоанизотропная среда, изучаемые дефекты — как носители пластической деформации и сингулярные источники поля упругих деформаций с присущими каждому из них кристаллогеометрическими и топологическими свойствами. В рамках двумерной линейной теории упругости [9] выведены уравнения, определяющие распределение упругих полей вокруг центра дефекта. Найдены общие решения этих уравнений для неподвижных дислокаций и краудионов в двумерном бесконечно протяженном анизотропном упругом континууме.

2. Решеточные модели дислокации и краудиона в 2D кристалле

Рассмотрим 2D кристаллическую структуру, состоящую из атомов одного типа, в которой каждый узел является центром симметрии (инверсии). Решетку узлов кристалла будем задавать повторением примитивной ячейки, построенной на двух базисных векторах \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 . Геометрическая схема такой структуры показана на рис. 1 и 2 в виде квадратной решетки узлов на плоскости: она образована плотноупакованными атомными рядами в кристаллографических направлениях [10]. Ориентацию плоскости кристалла в трехмерном пространстве будем задавать единичным вектором нормали \mathbf{s} , считая, что тройка векторов $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{s}\}$ образует правовинтовую систему.

2.1. Дислокации

Вначале обсудим схему введения дислокации в 2D кристалл (рис. 1), которая аналогична хорошо известной схеме введения краевой дислокации в 3D кристалл [11–17]. Дислокация появляется в результате двух последовательных преобразований в расположении атомов: пластического сдвига и упругой релаксации. Для определенности выберем направление [10] с вектором трансляции \mathbf{a}_1 и произведем незавершенный пластический сдвиг верхней левой части кристалла на вектор $\mathbf{b}^{(+)} = \mathbf{a}_1$ на интервале, показанном пунктирной линией между атомными рядами 3 и 4 (линия скольжения). В результате такой операции на левой границе кристалла появляется ступенька, а внутри кристалла —

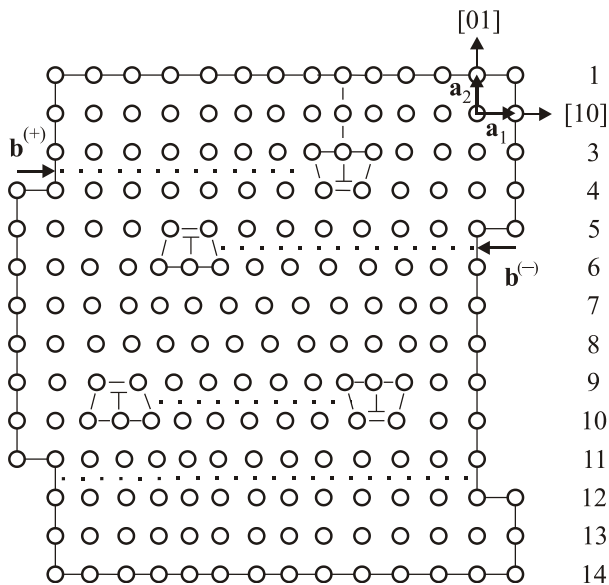


Рис. 1. Схематическое изображение решетки 2D кристалла с дислокациями.

оборванный атомный ряд, уходящий вверх от места остановки пластического сдвига (он выделен прерывистой линией). После упругой релаксации вокруг оборванного атомного ряда возникает слабое упругое искривление остальных атомных рядов (поле упругих деформаций дислокации), и на расстояниях порядка $b = |\mathbf{b}|$ останется сильно искаженная область кристалла (ядро дислокации), центр которой обозначен символом (\perp).

Легко видеть, что описанной выше дислокации можно сопоставить симметричную дислокацию: на рис. 1 она показана как результат незавершенного пластического сдвига на вектор трансляции $\mathbf{b}^{(-)} = -\mathbf{a}_1$ в центре кристалла вдоль линии скольжения между атомными рядами 5 и 6 (центр ядра этой дислокации обозначен символом « \top »). Таким образом, линиям скольжения одинаковой кристаллографической ориентации можно сопоставить дислокации двух разных знаков: одну из них условимся считать положительной « \perp », другую — отрицательной « \top ». В бесконечно протяженном кристалле, когда можно отвлечься от ступенек на его границах, положительные и отрицательные дислокации эквивалентны по их влиянию на внутренние свойства кристалла, они различаются лишь поворотом кристалла на угол π вокруг оси, перпендикулярной его плоскости. Однако по отношению к заданной системе координат или к внешнему физическому миру это различные дефекты.

Отметим, что создание положительной и отрицательной дислокаций на одной линии скольжения не приводит к появлению ступенек на границах кристалла. На рис. 1 такая пара дислокаций образована на линии скольжения, которая проходит между атомными рядами 9 и 10, ее можно рассматривать как результат

пластического сдвига внутри кристалла вдоль отрезка линии скольжения, соединяющего центры положительной « \perp » и отрицательной « \top » дислокаций. Сближение и слияние таких дислокаций приводит к восстановлению идеальной структуры кристалла (аннигиляция дислокаций).

Перемещение центра дислокации вдоль линии скольжения увеличивает или уменьшает величину пластического сдвига, что позволяет рассматривать дислокацию как «носитель» пластической деформации. При перемещении дислокации вдоль линии скольжения с одной границы кристалла на противоположную ей границу возникает завершённый пластический сдвиг, показанный в нижней части рис. 1; соответствующая линия скольжения проходит между атомными рядами 11 и 12. Аналогичный результат можно получить также путем зарождения на этой линии скольжения пары \perp - \top и ее расширения до границ кристалла.

Вектор $\mathbf{b}^{(\pm)}$, определяющий направление и величину пластического сдвига, в результате которого возникла дислокация, называется ее вектором Бюргерса. В дальнейшем воспользуемся обозначением $\mathbf{b}^{(\pm)} \equiv \mathbf{b}$ и будем считать, что знак дислокации совпадает со знаком ее вектора Бюргерса \mathbf{b} . Таким образом, в заданной 2D кристаллической структуре дислокация имеет единственную кристаллогеометрическую характеристику — вектор Бюргерса \mathbf{b} : его абсолютная величина и направление полностью определяют геометрию создаваемых дислокацией структурных искажений и обусловленную ее движением пластическую деформацию.

2.2 Краудионы

Образование в кристалле краудиона также можно считать результатом незавершенного пластического сдвига отдельного фрагмента кристалла — атомного ряда: после такого сдвига и следующей за ним упругой релаксации возникает краудионная конфигурация атомов [1,2]. Для выбранной нами модели 2D кристалла решеточная структура краудионов показана на рис. 2. Выделим один из плотноупакованных рядов (ряд 3 в направлении [10]) и произведем незавершенный пластический сдвиг всех атомов левой части этого ряда (на рисунке она выделена пунктиром) на вектор $\mathbf{b}^{(+)} = \mathbf{a}_1$. В результате на левой границе кристалла появится один свободный узел, а внутри ряда в месте остановки пластического сдвига — один лишний межузельный атом. После упругой релаксации этот атом делокализуется в выбранном атомном ряду на интервале порядка нескольких $b = |\mathbf{b}|$, центр данной области (ядро краудиона) обозначим символом « \blacksquare ». Малые деформации кристалла вдали от центра краудиона образуют его упругое поле.

Если произвести смещение части плотноупакованного атомного ряда в сторону границы кристалла на

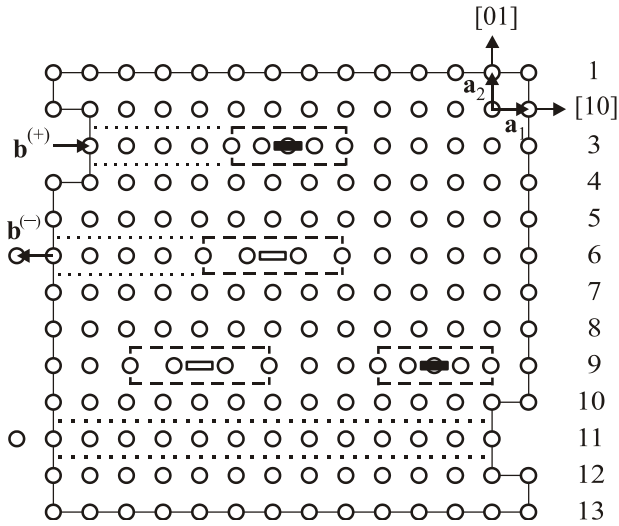


Рис. 2. Схематическое изображение решетки 2D кристалла с краудионами.

вектор $\mathbf{b}^{(-)} = -\mathbf{a}_1$ (на рис. 2 ряд 6), то один атом выйдет за границу, а внутри ряда возникнет делокализованная вакансия, которую естественно назвать антикраудионом (или краудионом противоположного знака), его центр обозначим символом «□». Вокруг центра антикраудиона также распределено поле упругих деформаций. Отметим, что краудион и антикраудион представляют собой физически различные дефекты даже по отношению к внутренним свойствам кристалла (как межузельный атом и вакансия), этим они отличаются от пары дислокаций с противоположными знаками. Создание пары □—■ в одном атомном ряду (ряд 9) можно рассматривать как результат пластического сдвига внутреннего фрагмента этого ряда, который не изменяет атомные конфигурации на границах кристалла. Встречное перемещение и слияние этих дефектов приводит к их аннигиляции и восстановлению идеальной структуры.

Прямую, проходящую через атомы ряда с краудионом, назовем его линией скольжения. Перемещение центра краудиона вдоль линии скольжения увеличивает или уменьшает величину пластического сдвига атомного ряда, что позволяет рассматривать краудион как «носитель» пластической деформации специального вида — эстафетного перемещения межузельного атома на макроскопические расстояния и результирующего перемещения через кристалл атомного ряда в целом (ряд 11 на рис. 2.). Аналогичный результат можно получить путем зарождения на одной линии скольжения пары ■—□ и ее расширения до границ кристалла. Такую пластическую деформацию можно рассматривать как краудионный механизм направленного переноса массы. Этот процесс эквивалентен процессу самодиффузии, но качественно отличается от обычной диффузии, обусловленной термически активированными или туннельными прыжками атомов по

междуузлиям, а также вакансий по узлам кристаллической структуры.

Вектор пластического смещения $\mathbf{b}^{(\pm)} \equiv \mathbf{b}$ является базовым кристаллогеометрическим параметром краудиона, по аналогии с дислокацией будем его также называть вектором Бюргерса. В качестве геометрической характеристики краудиона можно рассматривать и единичный направляющий вектор \mathbf{e} — директор краудиона, который определим соотношением $\mathbf{b} = b\mathbf{e}$.

Целесообразно ввести еще одну кристаллогеометрическую характеристику $S_0 = ([\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2] \cdot \mathbf{s}) = bh$ — элементарную площадь, приходящуюся на один атом 2D кристалла (h — расстояние между плотноупакованными рядами в направлении, перпендикулярном \mathbf{b}). Параметр S_0 является удобной характеристикой мощности краудиона как источника упругого поля и носителя пластической деформации: величина S_0 определяет 2D «объем» (имеющий размерность площади), переносимый краудионом при его распространении через кристалл. Чтобы описать различие краудиона и антикраудиона, введем эффективную элементарную площадь $S_c = qS_0$ и в дальнейшем будем рассматривать векторный параметр

$$S_c = qhb = qhbe = qS_0\mathbf{e} = S_c\mathbf{e}, \quad q = \pm 1. \quad (1)$$

Параметр S_c характеризует как «мощность» краудиона, так и его знак: сопоставим краудиону $S_c = S_0 > 0$ ($q = 1$), а антикраудиону $S_c = -S_0 < 0$ ($q = -1$).

3. Уравнения теории упругости для 2D кристалла

В работе [9] нами предложен последовательный вывод базовых уравнений теории упругости 2D кристалла путем предельного перехода от уравнений атомно-решеточной механики к континуальному описанию в приближении малых деформаций. В данном разделе представим эти уравнения в форме, наиболее удобной для их применения к описанию дислокаций и краудионов.

Рассмотрим 2D кристалл, образованный системой одинаковых атомов, которые в начальном состоянии равновесия занимают узлы плоской трансляционно-симметричной сетки в двумерном евклидовом пространстве \mathbb{R}^2 . В работе [9] показано, что при континуальном описании такому кристаллу соответствует бесконечно тонкая анизотропная пленка с конечной плотностью ρ массы на единицу площади, которая способна к упругим продольной и изгибной деформациям. Будем использовать систему прямоугольных декартовых координат с базисом $\{\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2\}$, орты которого вместе с нормалью \mathbf{s} образуют правовинтовую систему векторов в пространстве \mathbb{R}^3 . Тогда положение отдельного малого элемента такой 2D среды в начальном (недеформированном) состоянии задается двухкомпонентным радиус-вектором $\mathbf{r} = x_1\mathbf{i}_1 + x_2\mathbf{i}_2 = \{x_1, x_2\}$ точки в

пространстве \mathbb{R}^2 , а деформированное состояние, зависящее от времени t , возникает в результате смещений элементов среды $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \{u_1, u_2\}$ в плоскости кристалла (продольные деформации) и смещений $\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = w(\mathbf{r}, t)\mathbf{s}$ в перпендикулярном к ней направлении, заданном единичным вектором \mathbf{s} (деформации изгиба). В рамках классической механики выведены базовые уравнения теории упругости для полей смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$, описывающие обе моды деформации 2D кристалла как в линейном приближении, так и с учетом нелинейных деформационных эффектов.

Описание деформаций 2D кристалла с учетом взаимного влияния смещений в его плоскости и смещений вдоль нормали \mathbf{s} наиболее просто выглядит в квазилинейном приближении. В этом приближении динамические уравнения для полей смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и $w(\mathbf{r}, t)$ можно записать в виде

$$\rho \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \nabla_j \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) + F_i^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t), \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial^2 w(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -d_{ijkn} \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_n w + \lambda_{ijkn} \nabla_i (\nabla_j w \nabla_k u_n) + F_s^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t), \quad (3)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkn} \left(\nabla_k u_n + \frac{1}{2} \nabla_k w \nabla_n w \right). \quad (4)$$

Здесь $\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)$ — компоненты тензора механических напряжений в плоскости кристалла, которые имеют размерность [сила/длина]; $F_i^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t)$ и $F_s^{(e)}(\mathbf{r} + \mathbf{u} + \mathbf{sw}, t)$ — двумерная плотность внешних сил; $\nabla_i \equiv \partial/\partial x_i$. Все латинские индексы могут принимать только значения 1 и 2, а по повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование. Связь напряжений σ_{ik} с относительными деформациями, величина которых характеризуется производными $\nabla_i u_k$ и $\nabla_i w$, дается соотношением (4), которое следует рассматривать как обобщенный закон Гука для 2D кристалла.

Отметим, что принятая в основном тексте статьи система обозначений будет использована в Приложениях 1–3.

В уравнениях (2)–(4) «память» о 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 исходного кристалла и параметров потенциала межатомного взаимодействия [9]. Компоненты тензоров λ_{ijkn} [сила/длина] и d_{ijkn} [сила·длина] имеют смысл модулей упругости для деформаций в плоскости кристалла и модулей изгибной (цилиндрической) жесткости. Тензоры четвертого ранга λ_{ijkn} и d_{ijkn} заданы в пространстве \mathbb{R}^2 ($i, j, k, n = 1, 2$), поэтому имеют по 16 компонент. Компоненты тензора λ_{ijkn} в общем случае

должны удовлетворять соотношениям симметрии относительно перестановок индексов

$$\lambda_{ijmn} = \lambda_{jimn} = \lambda_{ijnm} = \lambda_{jinm}, \quad \lambda_{ijmn} = \lambda_{mnij}. \quad (5)$$

Таким образом, будем рассматривать 2D кристалл как строго двумерную упругоанизотропную среду и предложим последовательное континуальное описание дислокаций и краудионов как носителей пластической деформации и сингулярных источников полей упругих деформаций в такой среде с присущими каждому из этих дефектов кристаллогеометрическими и топологическими свойствами. Описанный в разд. 2 алгоритм введения этих дефектов в кристалл оперирует только со смещениями атомов в его плоскости. Поэтому в приближении линейной теории упругости будем считать, что обусловленные дефектами упругие деформации сводятся к полю смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и соответствующему ему тензорным полям упругих дисторсий $u_{mn}(\mathbf{r}, t)$ и упругих деформаций $\varepsilon_{mn}(\mathbf{r}, t)$:

$$u_{nm} = \nabla_n u_m, \quad \varepsilon_{mn} = \frac{1}{2} (\nabla_m u_n + \nabla_n u_m) = \frac{1}{2} (u_{mn} + u_{nm}). \quad (6)$$

В линейном приближении и в отсутствие внешних сил из (2)–(6) получаем уравнения движения, определяющие эволюцию упругих деформаций в плоскости кристалла и удобные для описания дислокаций и краудионов:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \nabla_k \sigma_{ik}, \quad (7)$$

$$\sigma_{ik} = \lambda_{ikmn} u_{mn} = \lambda_{ikmn} \varepsilon_{mn}. \quad (8)$$

Отметим, что влияние деформаций изгиба на дислокации и краудионы можно описать методами теории возмущений, рассматривая полученные в данной работе результаты в качестве первого приближения.

4. Упругие и пластические деформации в механике сплошной 2D среды

Наиболее важные физические свойства дислокаций и краудионов не связаны однозначно с их микроскопическими моделями и допускают феноменологическое описание в рамках механики сплошной упругой среды, где задача сводится к анализу свойств так называемых дислокаций Вольтерра. Такой подход хорошо разработан для дефектов в 3D кристаллах [11–17] и его следует переформулировать и использовать для решения интересующих нас задач. Для этого следует вернуться к основным понятиям и соотношениям теории упругости и внести в них необходимые уточнения, учитывающие различия геометрических, симметричных и деформационных свойств 2D и 3D кристаллов.

Поскольку дислокация и краудион зарождаются в кристалле путем трансляционного пластического скольжения одних его фрагментов по отношению к другим сопредельным фрагментам, то при континуальном описании кристалла таким дефектам можно сопоставить некоторый тензор пластической дисторсии u_{ik}^P . Физически корректная процедура получения этого тензора подразумевает последовательный и непротиворечивый учет как внутренней кристаллической симметрии среды, так и значений элементарных кристаллогеометрических параметров дефекта, адекватно сохраняющих при континуальном описании «память» об атомарной структуре реального кристалла.

Если допустить возможность пластического скольжения в сплошной среде, то однозначное описание ее деформированного состояния заданием поля упругих смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ невозможно. Более корректно использовать для этого относительные деформации, например тензор полной дисторсии $u_{ik}^T(\mathbf{r})$, который можно представить в виде суммы тензора упругой $u_{ik}(\mathbf{r})$ и тензора пластической $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ дисторсии:

$$u_{ik}^T = u_{ik} + u_{ik}^P. \quad (9)$$

Тогда тензор полной деформации ε_{ik}^T (симметричная часть тензора u_{ik}^T) также сводится к сумме упругой и пластической составляющих:

$$\varepsilon_{ik}^T = \frac{1}{2}(u_{ik}^T + u_{ki}^T) = \varepsilon_{ik} + \varepsilon_{ik}^P. \quad (10)$$

Будем также считать, что пластическая деформация не нарушает сплошность среды и компоненты тензора полной деформации $\varepsilon_{ik}^T(\mathbf{r})$ являются однозначными, непрерывными вместе с производными до второго порядка функциями координат, которые удовлетворяют условию совместности [16,36]. Двумерный аналог условий совместности можно представить в виде уравнения

$$\varepsilon_{kn} \varepsilon_{sm} \nabla_k \nabla_m \varepsilon_{ns}^T = 0, \quad (11)$$

где ε_{ik} — единичный антисимметричный тензор (см. Приложение 1).

Из теории упругости известно [16,36], что при выполнении условия (11) в односвязной области существует однозначное и непрерывное векторное поле полных перемещений $\mathbf{u}^T(\mathbf{r})$, заданное в точках \mathbf{r} недеформированной среды, которое определяет поля полной дисторсии $u_{ik}^T(\mathbf{r})$ и деформации $\varepsilon_{ik}^T(\mathbf{r})$:

$$u_{ik}^T = \nabla_i u_k^T, \quad \varepsilon_{ik}^T = \frac{1}{2}(\nabla_i u_k^T + \nabla_k u_i^T). \quad (12)$$

Вектор $\mathbf{u}^T(\mathbf{r})$ определен с точностью до перемещения среды как абсолютно твердого тела, что для дальнейшего рассмотрения несущественно.

Обсудим более детально возможность описания в рамках единого подхода упругих и пластических де-

формаций кристаллов в приближении линейной механики континуума. Прежде всего, следует отметить, что происходящие при пластической деформации относительные смещения соседних фрагментов кристалла на период решетки не меняют его состояния в окрестности линии скольжения (или поверхности скольжения в 3D кристалле). Поэтому тензор напряжений $\sigma_{ik}(\mathbf{r})$, характеризующий силовое взаимодействие между соседними элементами кристаллической среды, можно считать однозначной и непрерывной функцией координат. Предполагается также, что для описания деформированного состояния среды можно рассматривать тензоры упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ или деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$, считая их непрерывными и однозначными функциями координат, а также использовать закон Гука (8). Будем рассматривать только статические задачи континуальной теории дефектов, поэтому основное уравнение теории упругости (7) сводится к условию механического равновесия $\nabla_k \sigma_{ik}(\mathbf{r}) = 0$.

Для характеристики пластических деформаций в 2D континууме кроме тензора $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ введем также связанный с ним вектор $\alpha(\mathbf{r})$:

$$\alpha_i(\mathbf{r}) = -\varepsilon_{nm} \nabla_n u_{mi}^P(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Так как $\varepsilon_{nm} \nabla_n u_{mi}^T = \varepsilon_{nm} \nabla_n \nabla_m u_i^T \equiv 0$, то из соотношения (9), условия равновесия $\nabla_k \sigma_{ik} = 0$ и закона Гука (8) следуют уравнения, которые описывают связь между упругими $u_{ik}(\mathbf{r})$ и пластическими $\alpha(\mathbf{r})$ деформациями:

$$\varepsilon_{nm} \nabla_n u_{mi}(\mathbf{r}) = \alpha_i(\mathbf{r}), \quad (14)$$

$$\lambda_{iknm} \nabla_k u_{nm}(\mathbf{r}) = 0. \quad (15)$$

Эти четыре уравнения ($i = 1, 2$) вместе с дополнительными физическими условиями на границе 2D кристаллического тела позволяют однозначно найти четыре компоненты тензора упругой дисторсии $u_{11}(\mathbf{r})$, $u_{22}(\mathbf{r})$, $u_{12}(\mathbf{r})$ и $u_{21}(\mathbf{r})$, если распределение пластических дисторсий описывается заданной вектор-функцией $\alpha(\mathbf{r})$.

Иногда вместо уравнений (14),(15) целесообразно использовать систему трех уравнений, определяющих три компоненты симметричного тензора упругих деформаций $\varepsilon_{11}(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{22}(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{12}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{21}(\mathbf{r})$. Учитывая (10), (11) и статические уравнения теории упругости (15), легко получить соотношения

$$\varepsilon_{sk} \varepsilon_{nm} \nabla_s \nabla_n \varepsilon_{km}(\mathbf{r}) = \beta(\mathbf{r}), \quad (16)$$

$$\lambda_{iknm} \nabla_k \varepsilon_{nm}(\mathbf{r}) = 0. \quad (17)$$

Здесь для описания распределения пластических дисторсий в 2D континууме использовано скалярное поле

$$\beta(\mathbf{r}) = -\varepsilon_{sk} \varepsilon_{nm} \nabla_s \nabla_n \varepsilon_{kn}^P(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nm} \nabla_n \alpha_m(\mathbf{r}). \quad (18)$$

Сравнивая (16) и (11), приходим к заключению, что при наличии пластических деформаций в 2D континууме условие совместности для тензора упругих деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$ нарушается в меру отличия от нуля скаляра $\beta(\mathbf{r})$, который для двумерной среды является аналогом так называемого тензора несовместности Кренера [11,14,16] в теории упругости трехмерной сплошной среды. В отсутствие пластической деформации в 2D упругой среде ($\beta(\mathbf{r})=0$) полные деформации ε_{ik}^T и смещения \mathbf{u}^T совпадают с упругими ε_{ik} и \mathbf{u} , уравнение (16) превращается в уравнение совместности (11) для компонент тензора $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$, а поле упругих смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ можно использовать для описания деформированного состояния такой среды наряду с полями деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$ или дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$. Вместе с тем при заданном поле $\beta(\mathbf{r})$, как характеристике распределения пластической деформации в среде, соотношение (16) можно рассматривать как одно из уравнений для компонент тензора $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$.

В бесконечно протяженной среде и при достаточно быстром обращении в нуль поля $\alpha(\mathbf{r})$ на бесконечности общее решение системы уравнений (14),(15) можно записать с помощью тензора Грина $G_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ для уравнений равновесия (15): его свойства и методы вычислений обсуждаются в Приложении 2. Вычисления, позволяющие установить связь создаваемого дефектами поля упругой дисторсии $u_{ik}(\mathbf{r})$ с векторным полем $\alpha(\mathbf{r})$, приведены в Приложении 3. В результате получена формула

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{mi} \lambda_{jpmn} \int \alpha_n(\mathbf{r}') \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') dS'. \quad (19)$$

В конечном итоге поле $\alpha(\mathbf{r})$ оказалось наиболее эффективной (удобной) характеристикой распределения дефектов в кристалле. Физический смысл этого поля и его вид для конкретных дефектов — отдельных дислокаций, дислокационных ансамблей и краудионов — будут установлены в следующем разделе.

5. Дислокации и краудионы в упругом 2D континууме

Рассмотренным в разд. 2 схемам образования дислокации и краудиона в кристаллической решетке сопоставим геометрически аналогичные схемы в сплошной линейно-упругой 2D среде, используя хорошо известные рассуждения, принятые в классической трехмерной теории упругости при рассмотрении дислокаций Вольтера [11–17]. Напомним, что мы ограничимся только обсуждением неподвижных дефектов.

5.1. Дислокация как топологический дефект и сингулярный источник поля упругих деформаций

Воспользуемся схемой, которая аналогична схеме образования прямолинейных краевых дислокаций в бесконечной трехмерной упругой среде и детально

описана во многих монографиях [11–17], ее иллюстрирует рис. 3. В сплошной упругой 2D среде удалим круг радиуса r_0 с центром в точке $(0, 0)$ и проведем разрез по линии $L: (-\infty < x_1 < -r_0, x_2 = 0)$. Переместим сторону разреза L^- на вектор $\mathbf{b} = \{b_1, b_2\}$ по отношению к стороне L^+ , добавим или уберем материал (если это необходимо) и соединим (склеим) два берега разреза, восстановив непрерывность среды (рис. 3(a)). Подчеркнем, что операция склейки берегов разреза обеспечивает необратимость деформации среды после снятия деформирующих сил, в физике твердого тела такая деформация названа пластической. Аналогичная схема

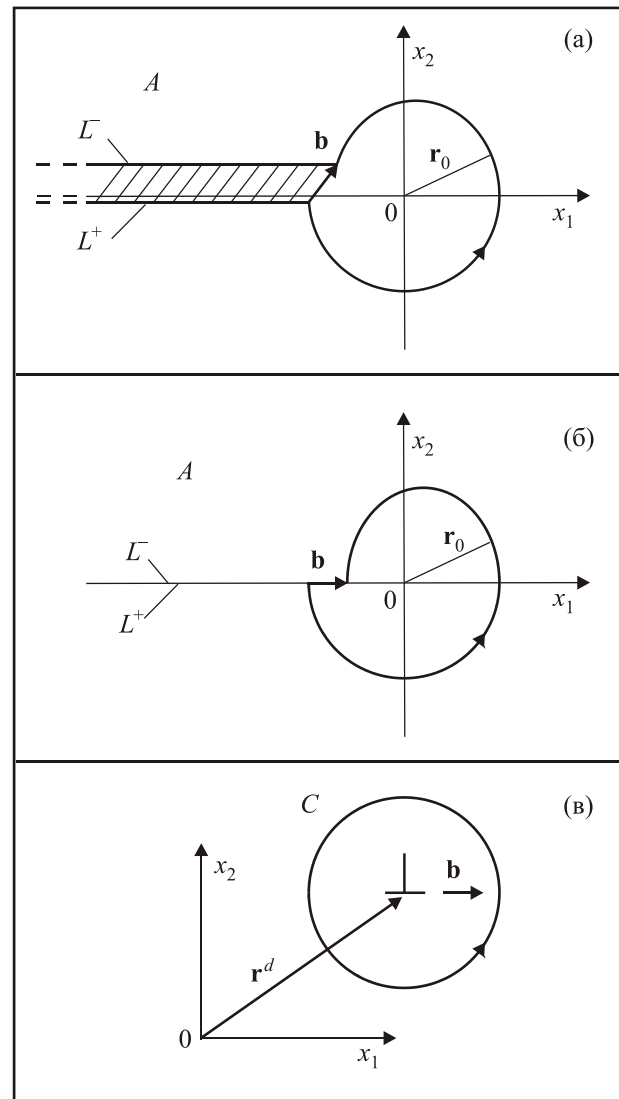


Рис. 3. Геометрические схемы введения дислокаций Вольтера в 2D континуум: перемещение материала на вектор \mathbf{b} под углом к линии разреза L (а); перемещение материала на вектор \mathbf{b} параллельно линии разреза L (б); схематическое изображение дислокационной точки с радиус-вектором \mathbf{r}^d (в), A — область, занимаемая 2D средой, \mathbf{b} — вектор Бюргера дислокации, C — контур интегрирования в формулах (22) и (25).

с более простой геометрией пластической деформации 2D среды показана на рис. 3(б): здесь относительное перемещение берегов разреза выполнено вдоль линии L и $\mathbf{b} = \{b_1, 0\}$.

Важно отметить, что в описанной схеме образования дислокации место и даже форма линии разреза L выбираются произвольно, а также предполагается, что после завершения операции (после склейки) физические свойства среды в этом месте ничем не отличаются от ее свойств в любом другом месте. В конечном итоге вокруг полости $|\mathbf{r}| < r_0$ остается упругодеформированное состояние, которое можно описать тензорным полем упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ — непрерывной функцией координат в области $|\mathbf{r}| > r_0$. Однако если выполнить предельный переход $r_0 \rightarrow 0$, то мы получим деформированное состояние с единственной особой точкой (точкой сингулярности) $\mathbf{r} = 0$. В механике упругого континуума это состояние названо дислокацией Вольтерра, а соответствующая особая точка $\mathbf{r} = 0$ — точкой (центром) дислокации (в случае 3D среды получаем линию дислокации). Поскольку конфигурация поля упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ вокруг дислокационной точки не зависит от таких деталей схемы пластического деформирования, как место расположения и форма линии разреза-склейки L , то в качестве физических характеристик дислокации остаются только координата ее центра \mathbf{r}^d и вектор относительного смещения берегов разреза \mathbf{b} (рис. 3(в)).

При рассмотрении дислокации в кристаллических средах, даже если при этом используется модель упругого анизотропного континуума, возникает необходимость сохранять «память» об атомно-решеточной структуре реального кристалла. В физике кристаллов особое место занимают и играют важную роль дислокации с векторами \mathbf{b} , направленными вдоль плотноупакованных атомных рядов и совпадающими по величине с минимальным периодом трансляций в этих рядах (дислокации Бюргерса). В случае 2D кристаллов аналогия между дислокациями Вольтерра и решеточными дислокациями видна при сравнении рис. 1 и 3(б). В 2D кристалле решеточная дислокация возникает в результате незавершенного сдвига на период трансляции соседних фрагментов кристалла (рис. 1). В этом случае линия скольжения на рис. 1 эквивалентна линии разреза на рис. 3(б), а роль берегов L^+ и L^- играют соседние ряды атомов. После операции сдвига на вектор $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1$ они смыкаются между собой почти без нарушения кристаллического порядка везде, кроме ядра дислокации — области с радиусом $r_0 \approx b$ в месте останова сдвига. При переходе к континуальному описанию ($r_0 \rightarrow 0$) ядро превращается в точку дислокации. Роль естественной «склейки» после относительного перемещения берегов L^+ и L^- , которая обеспечивает необратимость деформации, играет межатомное взаимодействие и устойчивость присущих кристаллу атом-

ных конфигураций в окрестности линии скольжения. В физике решеточных дислокаций вектор \mathbf{b} называется вектором Бюргерса, его величина и ориентация по отношению к осям симметрии кристалла полностью определяют распределение поля упругих деформаций вокруг точки дислокации.

Для описания рассмотренной жесткой (заданной) пластической деформации 2D континуума (рис. 3) введем вектор пластического смещения $\mathbf{u}^P(\mathbf{r})$, который будем рассматривать как однозначную функцию координат \mathbf{r} точек недеформированной среды с заданным скачком на разрезе по линии L :

$$\mathbf{u}^P(x_1, +0) - \mathbf{u}^P(x_1, -0) = \mathbf{b}, \quad -\infty < x_1 < -r_0, \quad \mathbf{b} = \{b_1, b_2\}. \quad (20)$$

Здесь $\mathbf{u}^P(x_1, -0)$ и $\mathbf{u}^P(x_1, +0)$ — предельные значения векторного поля $\mathbf{u}^P(\mathbf{r})$ на линиях L^+ и L^- соответственно. Перемещению (20) соответствует тензор дисторсии $u_{ik}^P = \nabla_i u_k^P$, для которого после предельного перехода $r_0 \rightarrow 0$ получим выражение

$$u_{ik}^P(\mathbf{r}) = \delta_{i2} b_k \Theta(-x_1) \delta(x_2), \quad (21)$$

где $\Theta(\xi)$ — единичная ступенчатая функция Хевисайда. Легко видеть, что вектор \mathbf{b} (в дальнейшем — вектор Бюргерса дислокации) можно определить как контурный интеграл

$$b_i = -\oint_C dl_k u_{ki}^P(\mathbf{r}). \quad (22)$$

Здесь C — произвольная замкнутая кусочно-гладкая кривая, расположенная в пространстве \mathbb{R}^2 вокруг дислокационной точки (рис. 3(в)), а при обходе контура ограниченная им область остается слева от направления движения (обход против направления движения часовой стрелки).

Подставив (21) в (13) и выполнив дифференцирование, легко получить формулу $\alpha_i(\mathbf{r}) = b_i \delta(\mathbf{r})$, использование которой в уравнениях (14), (15) позволяет описать упругие деформации 2D среды, создаваемые единичной дислокацией с центром в начале координат. В более общем случае, когда центр дислокации расположен в произвольной точке с радиус-вектором \mathbf{r}^d , соответствующие ей поля $\alpha(\mathbf{r})$ и $\beta(\mathbf{r})$ в правых частях уравнений (14) и (16) приобретают вид

$$\alpha^d(\mathbf{r}) = \mathbf{b} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d), \quad \beta^d(\mathbf{r}) = b_m \epsilon_{nm} \nabla_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d). \quad (23)$$

Первая из этих формул позволяет представить интегральное соотношение (22) в виде интеграла по области S , ограниченной контуром C :

$$\int_S \alpha_i^d(\mathbf{r}) dS = b_i, \quad \mathbf{r}^d \in S. \quad (24)$$

Данное соотношение определяет физический смысл поля $\alpha(\mathbf{r})$: его можно рассматривать как локальную двумерную плотность вектора Бюргерса дислокаций. Для 2D кристалла такая плотность является векторной величиной, а в случае 3D кристалла аналогичную роль играет тензор второго ранга [13,14].

Полезно более детально обсудить связь тензоров пластической $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ и упругой $u_{ik}(\mathbf{r})$ дисторсий с вектором Бюргерса дислокации \mathbf{b} с точки зрения топологии 2D среды и ее деформированного состояния. В силу однозначности и непрерывности поля полных смещений $\mathbf{u}^T(\mathbf{r})$ для любого замкнутого контура C выполняется тождество

$$\oint_C dl_k u_{ki}^T = \oint_C dl_k \nabla_k u_i^T = \oint_C du_i^T \equiv 0.$$

Его учет вместе соотношениями (9) и (22) позволяет получить интегральную связь между полем упругих дисторсий вокруг центра дислокации и ее вектором Бюргерса \mathbf{b} :

$$\oint_C dl_k u_{ki}(\mathbf{r}) = b_i. \quad (25)$$

В континуальной теории дислокаций в 3D кристаллах [11–17] соотношения (22) и (25) часто используют в качестве исходного определения дислокации как специфического топологического дефекта в кристалле. В случае 2D кристалла дислокацию можно определить как особую точку (рис. 3(в)) — сингулярный источник дальнедействующих полей упругих деформаций и напряжений, которые имеют специфическую пространственную конфигурацию, удовлетворяющую условию (25). «Мощность» такого источника задается вектором Бюргерса \mathbf{b} , а его возможные значения определяются кристаллической структурой. Важно отметить, что вектор \mathbf{b} сохраняется при перемещениях дислокации в однородной кристаллической структуре: дислокация может зарождаться, исчезать или изменять вектор \mathbf{b} только в реакциях с участием других дефектов кристалла, например внешних или внутренних границ раздела, других дислокаций противоположного знака и т.п. В терминах топологии 2D среды точку дислокации можно интерпретировать как точку «прокола», нарушающую ее односвязность. Вектор \mathbf{b} инвариантен относительно перемещений центра дислокации, а также непрерывных топологических преобразований контура интегрирования вокруг дислокационной точки в соотношениях (22) и (25), при которых он не может быть стянут в точку без выхода за пределы 2D континуума. Эти свойства вектора \mathbf{b} позволяют назвать его топологическим зарядом дислокационной точки, а поле $\alpha(\mathbf{r})$ — вектором двумерной плотности топологического заряда.

Особые свойства дислокационной точки в упругом 2D континууме видны также из соотношения несовместности (16), если в нем поле $\beta(\mathbf{r}) = \beta^d(\mathbf{r})$ задано формулой (23): нарушение условия совместности для тензора упругих деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$ в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}^d$ лишает смысла описание упругих деформаций в окрестности этой точки с помощью однозначного поля смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и представление (6) относительных деформаций в виде производных от этих смещений. Кроме того, использование в уравнениях (14) и (16) сингулярных правых частей неизбежно приводит к сингулярному характеру упругих полей дислокации при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}^d$. Например, подстановка $\alpha^d(\mathbf{r})$ из (23) в формулу (19) приводит к выражению для поля упругих дисторсий отдельной дислокации

$$u_{ik}^d(\mathbf{r}) = \varepsilon_{im} \lambda_{jpm} b_n \nabla_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d), \quad (26)$$

а производная тензора Грина имеет сингулярность $|\mathbf{r} - \mathbf{r}^d|^{-1}$ (см. Приложение 2).

Во избежание недоразумений напомним, что сформулированное выше заключение получено при описании дислокации в рамках линейной теории упругости сплошной среды. Сингулярности создаваемых дислокациями полей деформаций исчезают при более строгом описании этих дефектов в рамках нелинейной механики кристаллов с последовательным учетом как атомно-решеточной структуры, так и существенно нелинейного характера межатомных взаимодействий в области ядра дислокации. Это заключение подтверждается анализом дислокации в одномерном кристалле (модель Френкеля–Конторовой) или прямолинейной дислокации в трехмерном кристалле (модель Пайерлса–Набарро) [12,14,19–21].

5.2. Дислокационные ансамбли и пластическая поляризация кристалла

Физико-механические процессы, происходящие в реальных кристаллах макроскопических размеров, очень часто сопровождаются накоплением в них большого количества дислокаций с различными векторами Бюргерса \mathbf{b}^β (β — номер возможного значения). Типичный для 2D кристаллов пример такого процесса — дислокационное плавление [3], когда кристаллический порядок нарушается лавинообразным зарождением дислокаций и их двумерная плотность достигает значений порядка одной дислокационной точки на несколько элементарных ячеек. В таких ситуациях целесообразно усредненное рассмотрение дислокационных ансамблей. При этом не обсуждается точное распределение упругих полей между отдельными дислокационными точками, а теория оперирует с физическими величинами, усредненными по малым областям кристалла. Эти малые области отождествляются с физическими точками для усредненных

полей, но предполагается, что в каждой из них сосредоточено достаточно много дислокационных точек.

Если в большом дислокационном ансамбле присутствует несколько групп однотипных дислокаций с векторами Бюргера \mathbf{b}^β и с достаточно большими значениями двумерной плотности дислокационных точек N^β , то при континуальном описании такого ансамбля в полевых уравнениях (14) следует использовать усредненные значения вектора плотности топологического заряда дислокаций

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\beta} \mathbf{b}^\beta N^\beta(\mathbf{r}). \quad (27)$$

При таком подходе вектор $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r})$ и плотности $N^\beta(\mathbf{r})$ рассматриваются как непрерывные функции координат, которые однозначно определяют распределение упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$, согласно уравнениям (14), (15) или их решению (19).

В качестве интегральной характеристики дислокационного ансамбля, который создает в кристалле распределение топологического заряда $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r})$, можно рассматривать суммарный вектор Бюргера

$$\int \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}) dS = \mathbf{B}, \quad (28)$$

где интегрирование формально ведется по всему пространству, но вектор $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r})$ отличен от нуля только в области, занятой ансамблем. Если для рассматриваемого ансамбля $\mathbf{B} = 0$, то на первый план выступает более детальное описание распределения топологического заряда дислокаций: его можно назвать дислокационной или пластической поляризацией [14]. В качестве интегральной характеристики такого распределения будем рассматривать тензор полного дислокационного момента ансамбля, определив его отношением

$$D_{ik} = \int x_i \alpha_k(\mathbf{r}) dS. \quad (29)$$

При описании деформированного состояния пластически поляризованного 2D кристалла целесообразно использовать алгоритм, разработанный в электродинамике для описания электрической поляризации вещества [37]. Равенство полного топологического заряда \mathbf{B} нулю в формуле (28) означает, что в занятой дислокационным ансамблем области кристалла его средняя плотность $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r})$ может быть представлена как дивергенция некоторого тензора:

$$\alpha_i(\mathbf{r}) = -\nabla_k d_{ki}(\mathbf{r}), \quad (30)$$

но при этом он должен удовлетворять дополнительно условию $d_{ik}(\mathbf{r}) = 0$ в области среды вне ансамбля. Чтобы убедиться в этом, воспользуемся теоремой (П1.3) в Приложении 1:

$$\int_S dS \alpha_i = - \int_S dS \nabla_k d_{ki} = - \oint_C dl v_k d_{ki} \rightarrow 0 \quad \text{при } C \rightarrow \infty;$$

предполагается, что теорема применяется к области S с границей C при их расширении до бесконечности, где $\boldsymbol{\alpha}$ и d_{ik} равны нулю. Аналогичные преобразования после подстановки (30) в (29) приводят к соотношениям:

$$D_{ik} = - \int dS x_i \nabla_n d_{nk} = - \int dS \nabla_n (x_i d_{nk}) + \int dS \delta_{in} d_{nk},$$

$$D_{ik} = \int dS d_{ik}(\mathbf{r}). \quad (31)$$

Отсюда видно, что тензор $d_{ik}(\mathbf{r})$ можно рассматривать как двумерную плотность дислокационной поляризации.

Следует отметить, что соотношение (30) и условие обращения d_{ik} в нуль вне области, занятой ансамблем дислокаций, не определяют этот тензор однозначно, так как к нему можно прибавить тензор $\epsilon_{kn} \nabla_n f_i(\mathbf{r})$, где $f_i(\mathbf{r})$ — произвольное дважды дифференцируемое векторное поле. Установление связи (31) с полным дислокационным моментом уточняет смысл тензора d_{ik} . Он будет однозначно определен в следующем разделе, где введено понятие локальных (точечных) диполей, для которых тензор $d_{ik}(\mathbf{r})$ приобретает смысл двумерной плотности дипольного момента (см. формулы (36) и (37)).

Кроме того, для дислокационных ансамблей с $\mathbf{B} = 0$ справедливы еще три соотношения, которые связывают между собой распределения дислокационной поляризации $d_{ik}(\mathbf{r})$ и пластической дисторсии $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ в кристалле, а также полный дислокационный момент D_{ik} ансамбля и соответствующую ему в кристалле полную пластическую дилатацию S^P . Сравнив (30) с (13) и используя приведенные в Приложении 1 свойства тензора ϵ_{ik} , получим:

$$d_{ik}(\mathbf{r}) = \epsilon_{in} u_{nk}^P(\mathbf{r}), \quad u_{ik}^P(\mathbf{r}) = \epsilon_{ni} d_{nk}(\mathbf{r}), \quad (32)$$

$$S^P = \int u_{nn}^P(\mathbf{r}) dS = \epsilon_{nk} D_{nk}. \quad (33)$$

Специальный интерес вызывает простейший дислокационный ансамбль из двух дислокаций противоположного знака — дислокационный диполь с плечом \mathbf{d} и центром в точке с радиус-вектором \mathbf{r}^D ; для определенности будем считать, что вектор \mathbf{d} направлен от отрицательной « \top » к положительной « \perp » дислокации (рис. 4). Согласно соотношениям (23), (29) и (33), для дислокационного диполя вектор $\alpha_i^D(\mathbf{r})$, полный момент D_{ik}^D и пластическая дилатация S^{PD} равны:

$$\alpha_i^D(\mathbf{r}) = b_1 [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^D - \frac{1}{2}\mathbf{d}) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^D + \frac{1}{2}\mathbf{d})], \quad (34)$$

$$D_{ik}^D = d_i b_k, \quad S^{PD} = d_n \epsilon_{nk} b_k. \quad (35)$$

Отметим, что характеристики дислокационных диполей D_{ik}^D и S^{PD} не зависят от расположения их центров \mathbf{r}^D в 2D упругой среде.

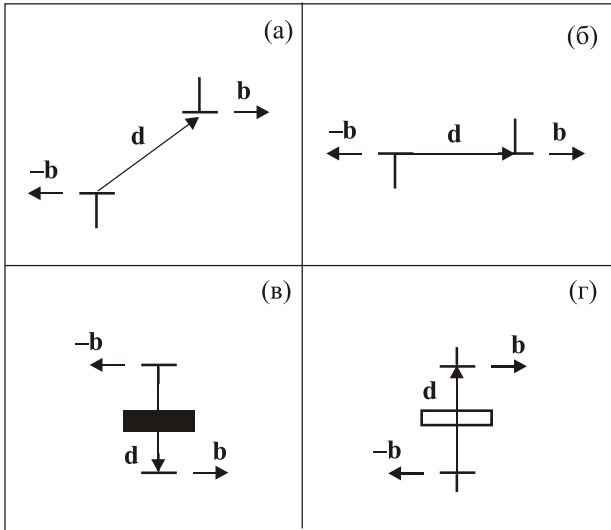


Рис. 4. Различные типы дислокационных диполей: диполь с произвольным направлением плеча \mathbf{d} (а); коллинеарный диполь (б); два типа ортогональных диполей, эквивалентных краудиону (■, $q = 1$) (в) и антикраудиону (□, $q = -1$) (г).

5.3. Топологические дефекты кристаллической структуры дипольного типа

Обсудим еще один вид точечных дефектов в 2D кристаллах. Эти дефекты имеют более сложную структуру и другие топологические свойства по сравнению с дислокациями, но для их описания можно использовать основные положения и результаты теории дислокаций. В частности, к таким дефектам относятся и интересные для нас краудионы.

5.3.1 Локальные дислокационные диполи. Рассмотрим дислокационный диполь в 2D кристалле, состоящий из двух решеточных дислокаций противоположного знака, и будем считать, что плечо диполя имеет предельно малую длину $|\mathbf{d}|$ порядка параметра решетки. Эта дислокационная пара существенно нарушает атомную структуру кристалла только в окрестности центра диполя \mathbf{r}^D в области с размерами порядка длины вектора Бюргерса $|\mathbf{b}|$ отдельной дислокации. Такой диполь имеет характерные свойства точечного дефекта и при переходе к непрерывному описанию кристалла превращается в локализованный в точке \mathbf{r}^D источник упругого поля: назовем его локальным дислокационным диполем.

Двумерную плотность топологического заряда диполя (34) при малых значениях $|\mathbf{d}| \ll |\mathbf{r} - \mathbf{r}^D|$ представим в виде разложения в ряд Тейлора по этому параметру и в первом приближении получим

$$\alpha_i^D(\mathbf{r}) = -b_i d_k \nabla_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^D). \quad (36)$$

Сравнивая (36) с (30) и (35), приходим к заключению, что для локального диполя тензор двумерной плотно-

сти поляризации $d_{ik}^D(\mathbf{r})$, дипольный момент D_{ik}^D и пластическая дилатация S^{PD} имеют вид

$$d_{ik}^D(\mathbf{r}) = d_i b_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^D), \quad D_{ik}^D = d_i b_k, \quad S^{PD} = d_n \epsilon_{nk} b_k. \quad (37)$$

Таким образом, в непрерывном приближении центр локального диполя \mathbf{r}^D , как и дислокационная точка \mathbf{r}^d , является сингулярным источником поля упругих дисторсий $u_{ik}^D(\mathbf{r})$, его можно вычислить путем подстановки (36) в формулу (19). Это поле имеет специфическую пространственную конфигурацию, она определяется заданием координат центра диполя \mathbf{r}^D и векторных параметров \mathbf{b} и \mathbf{d} . Если рассматривать диполь в кристаллической структуре, то оба вектора будут принимать только дискретный набор значений, связанных определенным образом с векторами элементарных трансляций \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 . Кроме того, в однородной кристаллической структуре параметры локального диполя D_{ik}^D и S^{PD} являются инвариантами относительно перемещений его центра \mathbf{r}^D . Принимая во внимание все перечисленные выше свойства локального дислокационного диполя, его можно рассматривать как еще один тип точечного топологического дефекта в 2D кристаллах со специфическими топологическими свойствами. Тогда параметры D_{ik}^D и S^{PD} будут играть роль характеристик «мощности» этого дефекта как источника упругого поля и носителя пластических дисторсий, т.е. роль его многокомпонентного топологического заряда.

Аналогом соотношений (22) и (24), определяющих топологический заряд дислокации \mathbf{b} , для локального диполя может служить формула, полученная с помощью (32) и (37):

$$S^{PD} = \int_S u_{nm}^{PD}(\mathbf{r}) dS = \epsilon_{nk} b_k d_n \int_S \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^D) dS = d_n \epsilon_{nk} b_k, \quad \mathbf{r}^D \in S. \quad (38)$$

Она позволяет рассматривать в качестве одной из компонент топологического заряда локального диполя создаваемую им в кристалле полную пластическую дилатацию S^{PD} . Знак этого параметра (знак диполя) определяется взаимной ориентацией векторов \mathbf{b} и \mathbf{d} : $S^{PD} = bd \sin \varphi^D$, где угол φ^D отсчитывается от \mathbf{d} к \mathbf{b} в положительном направлении (против часовой стрелки). При заданном векторе \mathbf{b} угол φ^D ($0 \leq \varphi^D < 2\pi$) удобно использовать для геометрической классификации дислокационных диполей в 2D среде. Отметим, что углам φ^D и $\varphi^D + \pi$ соответствуют диполи противоположных знаков. Специальный интерес представляют два частных случая дипольных конфигураций: диполи с углами $\varphi^D = \pi/2$ и $\varphi^D = 3\pi/2$ будем называть ортогональными (рис 4(в),(г)), им соответствует пластическая дилатация (топологический заряд) $S^{PD} = bd^D$ и $S^{PD} = -bd^D$; диполи с углами $\varphi^D = 0$ и

$\varphi^D = \pi$ будем называть коллинеарными (рис 4(а),(б)), им соответствует $S^{PD} = 0$.

Отдельного обсуждения требует вопрос об устойчивости локальных дислокационных диполей в кристаллических структурах. Вообще говоря, пара дислокаций противоположного знака с равными абсолютными значениями векторов Бюргерса неустойчива по отношению к процессам их аннигиляции. Это явление мы уже обсуждали в разд. 2: см. рис. 1, где показана конфигурация двух дислокаций противоположного знака на одной линии скольжения. Однако для некоторых пар векторов \mathbf{b} и \mathbf{d} аннигиляция может оказаться затрудненной или даже невозможной в силу специфики атомного порядка и межатомного взаимодействия в кристаллах. Ниже рассмотрен конкретный пример устойчивого локального диполя в кристаллической структуре, который эквивалентен краудиону. Здесь же отметим, что только устойчивые локальные дислокационные диполи можно рассматривать как самостоятельный вид точечных дефектов 2D кристалла.

5.3.2. *Краудионы.* Перейдем теперь к континуальному описанию краудиона в 2D кристалле. На рис. 5 показана геометрическая схема Вольтерра образования краудиона в упругом 2D континууме, адекватная схеме его образования в атомно-решеточной кристаллической структуре (рис. 2). Пусть в пространстве \mathbb{R}^2 сплошная упругая 2D среда занимает односвязную область A . Рассмотрим область $A_C \in A$, ограниченную линиями L_1, L_2, L_3 . Исключим из среды два круга радиуса r_0 с центрами в точках $(0, h/2)$ и $(0, -h/2)$ и проведем разрезы по линиям L_1, L_2, L_3 . Вначале переместим линию L_2^+ на вектор $\mathbf{b} = \{b, 0\}$ по отношению к линии L_2^- , а потом переместим на тот же вектор \mathbf{b} всю область A_C , ограниченную линиями L_1^-, L_2^-, L_3^- . В результате линии L_2^+ и L_2^- точно совместятся. Далее соединим (склеим) берега разрезов, восстановив непрерывность среды. Для описания рассмотренной деформации среды введем вектор пластического смещения $\mathbf{u}^P(\mathbf{r})$, который будем считать однозначной функцией координат с заданным скачком на разрезах по линиям L_1 и L_3 :

$$\mathbf{u}^P(x_1, h/2-0) - \mathbf{u}^P(x_1, h/2+0) = \mathbf{b}, \quad -\infty < x_1 < -r_0;$$

$$\mathbf{u}^P(x_1, -h/2+0) - \mathbf{u}^P(x_1, -h/2-0) = \mathbf{b}, \quad -\infty < x_1 < -r_0.$$

Здесь $\mathbf{u}^P(x_1, h/2+0)$, $\mathbf{u}^P(x_1, -h/2-0)$, $\mathbf{u}^P(x_1, h/2-0)$, $\mathbf{u}^P(x_1, -h/2+0)$ — предельные значения векторного поля $\mathbf{u}^P(\mathbf{r})$ на линиях L_1^+, L_3^+ и L_1^-, L_3^- . Вычислим соответствующие ему компоненты тензора пластической дилатации $u_{ik}^P = \nabla_i u_k^P$ и, выполнив предельный переход $r_0 \rightarrow 0$, получим:

$$u_{ik}^P(\mathbf{r}) = b \delta_{i2} \delta_{k1} \Theta(-x_1) [\delta(x_2 + h/2) - \delta(x_2 - h/2)]. \quad (39)$$

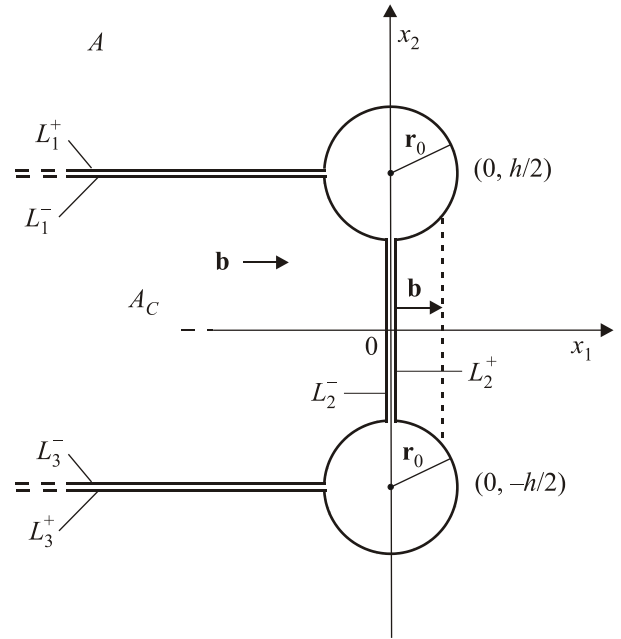


Рис. 5. Геометрическая схема введения краудиона в 2D континуум.

Сравнив формулы (39) и (21), приходим к заключению, что образованный нами в 2D континууме носитель пластической дилатации в точности эквивалентен двум дислокациям Вольтерра с противоположными знаками топологического заряда, т.е. ортогональному дислокационному диполю с вектором $\mathbf{b} = \{b, 0\}$ и плечом $\mathbf{d} = \{0, -h\}$ (рис. 4(в)). Этот диполь приобретает свойства точечного дефекта краудионного типа в решетке 2D кристалла, если произвести предельный переход от протяженного диполя к точечному и его параметрам придать смысл кристаллогеометрических параметров краудиона (см. разд. 2.2 и рис. 2):

- область A_C между линиями разреза на рис. 5 отождествить с фрагментом атомного ряда, в котором произошел пластический сдвиг (на рис. 2 это ряд 3 или 6), тогда параметр h приобретает смысл расстояния между соседними рядами;

- центр диполя \mathbf{r}^D считать центром краудиона \mathbf{r}^c , а в качестве вектора \mathbf{b} выбрать вектор элементарных трансляций $\mathbf{b} = b\mathbf{e} = a_1$ в одном из плотноупакованных атомных рядов (рис. 2);

- в качестве топологического заряда (полной пластической дилатации) диполя–краудиона выберем параметр $S^{Pc} = qS_0$, где $q = \pm 1$ — знак краудиона, а $S_0 = bh$ — элементарный двумерный «объем» в решетке 2D кристалла.

Изменение (см. рис. 5) направления смещения \mathbf{b} на противоположное $-\mathbf{b}$ (см. рис. 5) приведет в конечном итоге к диполю, который эквивалентен антикраудиону (рис. 4(г)).

Таким образом, решеточный краудион в 2D кристалле, как носитель пластической и источник упругой

деформации, при континуальном описании эквивалентен локальному дислокационному диполю, для которого вектор плотности топологического заряда $\alpha^c(\mathbf{r})$ и тензор плотности пластической поляризации $d_{ik}^c(\mathbf{r})$ описываются формулами

$$\alpha_i^c(\mathbf{r}) = -D_{ki}^c \nabla_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c), \quad d_{ik}^c(\mathbf{r}) = D_{ik}^c \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c), \quad (40)$$

$$D_{ik}^c = qS_0 \epsilon_{in} \epsilon_n \epsilon_k, \quad S^{Pc} = qS_0. \quad (41)$$

Согласно предложенной в разд. 2.2 и на рис. 2 схеме, такой диполь является топологически устойчивым дефектом структуры 2D кристалла, ему соответствует топологический заряд S^{Pc} и сингулярное в точке \mathbf{r}^c поле упругих дисторсий $u_{ik}^c(\mathbf{r})$. Это поле легко получить путем подстановки в формулу (19) векторного поля $\alpha^c(\mathbf{r})$ из (40) и простой операции интегрирования с использованием теоремы (П1.2) из Приложения 1:

$$u_{ik}^c(\mathbf{r}) = \epsilon_{im} \lambda_{jpmn} D_{sn}^c \nabla_p \nabla_s G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c). \quad (42)$$

Отсюда видно, что сингулярность поля $u_{ik}^c(\mathbf{r})$ определяется производными второго порядка тензора Грина и имеет вид $|\mathbf{r} - \mathbf{r}^c|^{-2}$. Такая нефизическая особенность поля дисторсий в точке \mathbf{r}^c исчезает при более строгом описании ядра краудиона в рамках нелинейной механики кристаллической решетки, для краудиона в 3D кристалле это показано в работе [28].

При наличии в 2D кристалле большого количества (ансамбля) краудионов, принадлежащих различным линиям скольжения (плотнупакованным атомным рядам), целесообразно ввести среднюю двумерную плотность $N^c(\mathbf{r})$ однотипных краудионных точек, где символ «с» обозначает конкретный набор параметров \mathbf{e} , S_0 , и q . Непрерывному распределению краудионных точек $N^c(\mathbf{r})$ соответствуют усредненные значения тензора пластической дисторсии $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ и тензора двумерной плотности пластической поляризации $d_{ik}(\mathbf{r})$:

$$d_{ik}(\mathbf{r}) = \sum_c D_{ik}^c N^c(\mathbf{r}), \quad u_{ik}^P(\mathbf{r}) = \sum_c \epsilon_{ni} D_{nk}^c N^c(\mathbf{r}). \quad (43)$$

Для полного описания деформированного состояния кристалла, создаваемого ансамблем краудионов, необходимо использовать вместе с соотношениями (43) также систему полевых уравнений, которые вытекают из уравнений (14), (15) и (30):

$$\nabla_n [\epsilon_{nm} u_{mi}(\mathbf{r}) + d_{ni}(\mathbf{r})] = 0, \quad (44)$$

$$\lambda_{iknm} \nabla_k u_{nm}(\mathbf{r}) = 0. \quad (45)$$

При заданных тензорах D_{ik}^c , плотностях $N^c(\mathbf{r})$ и граничных условиях уравнения (44),(45) однозначно определяют поле упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ в кристалле с краудионами. Отметим, что для краудионов пря-

мой физический смысл имеет тензорное поле $d_{ik}(\mathbf{r})$ — как характеристика их топологического заряда. Поскольку полю $d_{ik}(\mathbf{r})$ можно формально сопоставить поле $\alpha_i(\mathbf{r}) = -\nabla_k d_{ki}(\mathbf{r})$, а уравнения (44),(45) формально эквивалентны уравнениям (14),(15), то решение интересующей нас задачи дает формула (19), если в ней под знаком интеграла перейти от поля $\alpha(\mathbf{r})$ к $d_{ik}(\mathbf{r})$. Такой переход возможен, если для рассматриваемой системы краудионов выполняется граничное условие $d_{ik}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. После простых преобразований с использованием теоремы (П1.3) с контуром интегрирования $C \rightarrow \infty$ получим

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \epsilon_{mi} \lambda_{jpmn} \int d_{sn}(\mathbf{r}') \nabla'_s \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dS'. \quad (46)$$

Здесь уместно еще раз напомнить, что эффективность использования формул (42) и (46) для описания упругих полей краудионов в анизотропных 2D кристаллах определяется возможностью вычисления тензора Грина $G_{ik}(\mathbf{r})$ для уравнений равновесия (см. Приложение 2).

6. Заключение

В данном исследовании выполнен начальный этап теоретического описания дефектов дислокационного и краудионного типов в 2D кристаллах. Дислокации и краудионы рассмотрены с единых позиций как носители пластической и источники упругой дисторсий в двумерных кристаллических структурах. Вместе с тем установлены и детально проанализированы различия создаваемых ими структурных искажений с точки зрения топологии и локальной геометрии кристаллической среды. Рассмотрены простые атомно-решеточные модели дефектов обоих типов и сформулирован алгоритм перехода к их описанию в рамках континуальной механики 2D кристалла как строго двумерного упруго-анизотропного континуума.

В целом интересующая нас проблема весьма обширна и ее полное решение далеко выходит за рамки отдельной работы. Поэтому мы ограничились анализом общих свойств статических дефектов и выводом базовых уравнений, описывающих деформированное состояние кристалла с единичными дефектами и их ансамблями. Получены также общие решения этих уравнений, описывающие упругие деформации при заданных распределениях дислокаций и краудионов в среде с произвольной анизотропией. Во второй части публикации предполагается рассмотреть наиболее простой тип 2D кристалла, обладающего упругоизотропными свойствами, для которого поля деформаций и напряжений, создаваемые дефектами, можно получить в явном виде. В дальнейшем мы также намерены перейти к разработке динамической теории дислокаций и краудионов в 2D кристаллах.

Приложение 1

Единичные тензоры и интегральные теоремы в двумерном пространстве

Континуальное описание механических свойств 2D кристаллов и структурных дефектов в них базируется на стандартном аппарате математической физики, но его формулировка и применение в пространстве \mathbb{R}^2 имеет определенную специфику. В связи с этим целесообразно напомнить и уточнить несколько математических понятий и теорем, используя принятые в данной работе обозначения (см. разд. 3).

Вначале рассмотрим два единичных тензора второго ранга δ_{ik} и ϵ_{ik} ($i, k = 1, 2$), а также связывающее их соотношение:

$$\delta_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \epsilon_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \epsilon_{in}\epsilon_{kn} = \delta_{ik}, \quad (\text{П1.1})$$

Символ Кронекера δ_{ik} обозначает единичный тензор, ϵ_{ik} — единичный антисимметричный относительный псевдотензор в пространстве \mathbb{R}^2 [39,39].

Приведем также три формулировки теоремы, связывающей интегралы по области S в пространстве \mathbb{R}^2 с интегралами по ее границе C [40]:

$$\int_S \nabla_i f(\mathbf{r}) = \oint_C dl v_i(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}), \quad (\text{П1.2})$$

$$\int_S \nabla_n f_n(\mathbf{r}) = \oint_C dl v_n(\mathbf{r}) f_n(\mathbf{r}), \quad (\text{П1.3})$$

$$\begin{aligned} \int_S \epsilon_{nm} \nabla_n f_m(\mathbf{r}) &= \oint_C dl \epsilon_{nm} v_n(\mathbf{r}) f_m(\mathbf{r}) = \\ &= \oint_C dl \tau_m(\mathbf{r}) f_m(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{П1.4})$$

Здесь область S предполагается пространственно односвязной, а контур C замкнутым и регулярным. Символами $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ и $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{r})$ обозначены соответственно единичные векторы внешней нормали и касательной к контуру C в точке $\mathbf{r} \in C$, которые при обходе контура против часовой стрелки связаны соотношением $\tau_i = \epsilon_{ni} v_n$ или $v_i = \epsilon_{in} \tau_n$. Подынтегральные функции предполагаются однозначными и непрерывными вместе с производными в области S и на контуре C . Все теоремы остаются справедливыми и для неограниченной области (S и $C \rightarrow \infty$). Преобразования интегралов по области S в интегралы по контуру C в (П1.2)–(П1.4) сводятся к формальной замене $dS \nabla_n \rightarrow dl v_n = dl \epsilon_{nk} \tau_k$.

При решении ряда задач континуальной теории дефектов в 2D кристаллах весьма полезным оказывается фундаментальное соотношение двумерной теории по-

тенциала (в пространстве \mathbb{R}^2) [41–43], которое в наших обозначениях имеет вид

$$\nabla_n \nabla_n \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 2\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{П1.5})$$

Приложение 2

Тензор Грина для уравнений равновесия бесконечной двумерной упругой среды

Рассмотрим статические уравнения теории упругости 2D среды для смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ в плоскости среды при наличии двумерной плотности $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ продольных внешних сил:

$$\lambda_{ijmn} \nabla_j \nabla_m u_n + F_i = 0. \quad (\text{П2.1})$$

Согласно общей теории линейных уравнений математической физики [41–43], решение этих уравнений можно представить в виде свертки

$$u_i(\mathbf{r}) = \int G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_k(\mathbf{r}') dS'. \quad (\text{П2.2})$$

Тензорную функцию $G_{ik}(\mathbf{R})$ ($\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$) принято называть фундаментальным решением (функцией влияния) тензорного оператора $L(\nabla) = \lambda_{ijmn} \nabla_j \nabla_m$, она принадлежит классу обобщенных функций в пространстве \mathbb{R}^2 и удовлетворяет уравнению

$$\lambda_{ijmn} \nabla_j \nabla_m G_{np}(\mathbf{R}) + \delta_{ip} \delta(\mathbf{R}) = 0. \quad (\text{П2.3})$$

Из множества фундаментальных решений, соответствующих различным классам функций, для которых уравнение (П2.1) разрешимо в виде свертки (П2.2), рассмотрим только фундаментальное решение медленного роста [41–43], которое в механике упругой среды имеет простой физический смысл. Будем называть это решение $G_{ik}(\mathbf{R})$ тензором Грина для бесконечной упругой 2D среды и в соответствии с соотношениями (П2.1)–(П2.3) считать, что $G_{ik}(\mathbf{R})$ является i -й компонентой вектора смещений, вызванного единичной сосредоточенной силой, приложенной в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ и направленной вдоль оси x_k .

При построении решения уравнений (П2.3) в классе обобщенных функций медленного роста, как известно в теории обобщенных функций, можно использовать метод преобразования Фурье:

$$\tilde{G}_{ik}(\mathbf{k}) = \int G_{ik}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} dS,$$

$$G_{ik}(\mathbf{R}) = (2\pi)^{-2} \int \tilde{G}_{ik}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\tilde{S}. \quad (\text{П2.4})$$

Здесь $\tilde{G}_{ik}(\mathbf{k})$ — фурье-образ тензора Грина в двумерном обратном пространстве волновых чисел $\mathbf{k} = \{k_1, k_2\}$, $d\tilde{S} = dk_1 dk_2$, а интегрирование производится по бесконечным \mathbf{k} и \mathbf{R} пространствам соответ-

венно. Функция $\delta(\mathbf{R})$ является простейшим примером обобщенной функции, и для нее преобразование Фурье имеет вид

$$\tilde{\delta}(\mathbf{k}) = \int \delta(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} dS = 1, \quad \delta(\mathbf{R}) = (2\pi)^{-2} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\tilde{S}. \quad (\text{П2.5})$$

Применив преобразования (П2.4), (П2.5) к уравнениям (П2.3), получим систему алгебраических уравнений относительно $\tilde{G}_{ik}(\mathbf{k})$:

$$\Lambda_{in}(\mathbf{k}) \tilde{G}_{np}(\mathbf{k}) = \delta_{ip}, \quad \Lambda_{in}(\mathbf{k}) = \lambda_{ijkn} k_j k_k. \quad (\text{П2.6})$$

Используя стандартные методы линейной алгебры при $\mathbf{k} \neq 0$, можно представить решение уравнений (П2.6) в виде

$$\tilde{G}_{ik}(\mathbf{k}) = \frac{\Lambda_{nm}(\mathbf{k}) \delta_{ik} - \Lambda_{ik}(\mathbf{k})}{D(\mathbf{k})}, \quad (\text{П2.7})$$

$$D(\mathbf{k}) = \det [\Lambda_{in}(\mathbf{k})] = \Lambda_{11}(\mathbf{k}) \Lambda_{22}(\mathbf{k}) - \Lambda_{12}(\mathbf{k}) \Lambda_{21}(\mathbf{k}).$$

Функция (П2.7) не является локально интегрируемой в \mathbb{R}^2 , поэтому возникает задача о построении регуляризованного в смысле обобщенных функций решения уравнений (П2.6). Такое решение может быть построено для каждого конкретного тензора $\Lambda_{in}(\mathbf{k})$. Обозначим это решение

$$\tilde{G}_{ik}(\mathbf{k}) = \text{reg} \frac{\Lambda_{nm}(\mathbf{k}) \delta_{ik} - \Lambda_{ik}(\mathbf{k})}{D(\mathbf{k})}. \quad (\text{П2.8})$$

Из формулы $\Lambda_{in}(\mathbf{k}) = \lambda_{ijkn} k_j k_k$ видно, что $\Lambda_{in}(\mathbf{k}) = \Lambda_{in}(-\mathbf{k})$, а при учете свойств симметрии тензора модулей упругости (5) следует свойство симметрии $\Lambda_{in}(\mathbf{k}) = \Lambda_{ni}(\mathbf{k})$. Поэтому после подстановки (П2.8) в (П2.4) выражение для тензора Грина приобретает вид

$$G_{ik}(\mathbf{R}) = \frac{1}{4\pi^2} \text{Re} \int \tilde{G}_{ik}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\tilde{S} = \frac{1}{4\pi^2} \int \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) \text{reg} \frac{\Lambda_{nm}(\mathbf{k}) \delta_{ik} - \Lambda_{ik}(\mathbf{k})}{D(\mathbf{k})} d\tilde{S}. \quad (\text{П2.9})$$

Отсюда видно, что тензор $G_{ik}(\mathbf{R})$ симметричен относительно перестановки координатных индексов и является вещественной четной функцией $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Кроме того, непосредственно из уравнения (П2.3) следует, что частные производные n -го порядка от $G_{ik}(\mathbf{R})$ являются однородными функциями степени $-n$ координат $X_i = x_i - x'_i$, и стремятся к нулю при $R = |\mathbf{R}| \rightarrow \infty$ как R^{-n} . Эту совокупность свойств тензора $\tilde{G}_{ik}(\mathbf{R})$ представим соотношениями

$$G_{ik}(\mathbf{R}) = G_{ki}(\mathbf{R}), \quad G_{ik}(\mathbf{R}) = G_{ik}(-\mathbf{R}),$$

$$\overbrace{\nabla_i \dots \nabla_k}^n G_{mp}(\mathbf{R}) \propto |\mathbf{R}|^{-n}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{П2.10})$$

Даже в тех случаях, когда для кристаллов с тем или иным типом анизотропии упругих свойств вычислить интеграл в (П2.9) аналитическими методами не удастся, соотношения (П2.10) оказываются достаточно информативными и полезными для качественного описания различных видов деформированного состояния 2D кристаллов.

Явный вид зависимости тензора $G_{ik}(\mathbf{R})$ от координат $\mathbf{R} = \{X_1, X_2\}$ сравнительно легко установить для упругоизотропной среды, свойствами которой обладают 2D кристаллы, имеющие плоскую группу симметрии $rbmm$ [4–6]. Для них упругие свойства характеризуются двумя коэффициентами Ламэ λ и μ , а тензоры λ_{ijkn} и $G_{ik}(\mathbf{R})$ можно представить в виде

$$\lambda_{ijkn} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kn} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jk}),$$

$$G_{ik}(\mathbf{R}) = \frac{1}{4\pi^2 \mu} \left(\delta_{ik} \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k^2} d\tilde{S} - \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \int \frac{k_i k_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k^4} d\tilde{S} \right). \quad (\text{П2.11})$$

При вычислении интегралов в (П2.11) воспользуемся соотношениями (П1.5) и (П2.5). Из них можно получить несколько равенств, справедливость которых легко проверить прямым дифференцированием:

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k^2} d\tilde{S} = -2\pi \ln R, \quad \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k^4} d\tilde{S} = \frac{\pi R^2}{2} (\ln R - 1),$$

$$\int \frac{k_i k_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{k^4} d\tilde{S} = -\frac{\pi}{2} \nabla_i \nabla_k [R^2 (\ln R - 1)]. \quad (\text{П2.12})$$

Подставив выражения (П2.12) в (П2.11), выполнив дифференцирование и исключив постоянные, которые являются решением однородного уравнения $\lambda_{ijmn} \nabla_j \nabla_m G_{np}(\mathbf{R}) = 0$, получаем явный вид тензора Грина уравнений равновесия для бесконечной упругоизотропной 2D среды

$$G_{ik}(\mathbf{R}) = \frac{\lambda + \mu}{4\pi\mu(\lambda + 2\mu)} \left(-\frac{\lambda + 3\mu}{\lambda + \mu} \delta_{ik} \ln R + \frac{X_i X_k}{R^2} \right). \quad (\text{П2.13})$$

Приложение 3

Вычисление тензора упругой дисторсии при заданном поле пластической дисторсии в 2D кристалле с произвольной анизотропией

Пусть в кристалле с произвольной анизотропией задано распределение пластических дисторсий $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ и связанное с ним соотношением (13) векторное поле $\alpha(\mathbf{r})$. В разд. 5 показано, что именно это поле целесообразно использовать для характеристики дислокационной деформации: в этом случае оно имеет простой физический смысл плотности топологического заряда

дислокаций и, согласно уравнениям (13), (14), определяет тензор упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$. Предположим, что в рассматриваемой нами бесконечно протяженной среде поле $\alpha(\mathbf{r})$ определяет тензорное поле упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ на классе функций, которые являются однозначными и непрерывными вместе с первыми производными и обращаются в нуль при $r \rightarrow \infty$. Считаем также известным тензор Грина $G_{ik}(\mathbf{r})$ статических уравнений равновесия (П2.1) данной анизотропной среды.

Используя свойства дельта-функции и символа Кронекера, запишем равенство

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \int \delta_{nk} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{in}(\mathbf{r}') dS', \quad (\text{П3.1})$$

где интегрирование выполняется по всему пространству \mathbb{R}^2 .

Внесем под знак интеграла в (П3.1) тензор Грина $G_{ik}(\mathbf{r})$ и поле $\alpha(\mathbf{r})$. Это можно сделать, используя уравнения (П.3) для $G_{ik}(\mathbf{r})$ и соотношение (14), из которых следуют равенства

$$\begin{aligned} \delta_{nk} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= -\lambda_{jpmn} \nabla'_m \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ \nabla'_m u_{in}(\mathbf{r}') &= \epsilon_{mi} \alpha_n(\mathbf{r}') + \nabla'_i u_{mn}(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (\text{П3.2})$$

Подставка выражений (П3.2) в правую часть (П3.1) и простые преобразования приводят к соотношению

$$\begin{aligned} u_{ik}(\mathbf{r}) &= -\lambda_{jpmn} \int \nabla'_m [\nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{in}(\mathbf{r}')] dS' + \\ &+ \lambda_{jpmn} \int \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla'_i u_{mn}(\mathbf{r}') dS' + \\ &+ \epsilon_{mi} \lambda_{jpmn} \int \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \alpha_n(\mathbf{r}') dS'. \end{aligned} \quad (\text{П3.3})$$

После использования преобразования

$$\begin{aligned} \nabla'_p G_{kj} \nabla'_i u_{mn} &= \nabla'_i (\nabla'_p G_{kj} u_{mn}) - \\ &- \nabla'_p (\nabla'_i G_{kj} u_{mn}) + \nabla'_i G_{kj} \nabla'_p u_{mn} \end{aligned}$$

соотношение (П3.3) приобретает вид

$$\begin{aligned} u_{ik}(\mathbf{r}) &= \lambda_{jpmn} \left\{ - \int \nabla'_m [\nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{in}(\mathbf{r}')] dS' + \right. \\ &+ \int \nabla'_i [\nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{mn}(\mathbf{r}')] dS' - \\ &- \left. \int \nabla'_p [\nabla'_i G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{mn}(\mathbf{r}')] dS' \right\} + \\ &+ \lambda_{jpmn} \int \nabla'_i G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla'_p u_{mn}(\mathbf{r}') dS' + \\ &+ \epsilon_{mi} \lambda_{jpmn} \int \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \alpha_n(\mathbf{r}') dS'. \end{aligned} \quad (\text{П3.4})$$

Первые три интеграла в (П3.4), согласно теореме (П1.3), преобразуются в интегралы по замкнутому бесконечно удаленному контуру в пространстве \mathbb{R}^2 и обращаются в нуль в силу предполагаемого асимпто-

тического обращения в нуль компонент тензора $u_{ik}(\mathbf{r})$. Равен нулю также четвертый интеграл в (П3.4) в силу справедливости уравнения равновесия (14) ($\lambda_{jpmn} \nabla'_p u_{mn}(\mathbf{r}') = 0$). Таким образом, приходим к формуле, которая позволяет вычислить компоненты тензора упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ при заданном распределении плотности топологического заряда дислокаций $\alpha(\mathbf{r})$, если считать известным тензор Грина $G_{ik}(\mathbf{r})$:

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \epsilon_{mi} \lambda_{jpmn} \int \alpha_n(\mathbf{r}') \nabla'_p G_{kj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dS'. \quad (\text{П3.5})$$

Для существования интеграла в (П3.5) требуется, чтобы вектор $\alpha(\mathbf{r})$ обращался в нуль на бесконечности быстрее, чем r^{-1} .

1. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища школа, 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*, 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, *Fiz. Nizk. Temp* **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. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **39**, 690 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 534 (2013)].
10. Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).
11. Дж. Эшелби, *Континуальная теория дислокаций*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
12. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
13. Р. Де Вит, *Континуальная теория дисклинаций*, Мир, Москва (1977).
14. А.М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова Думка, Киев (1978).
15. В.Л. Инденбом, В.И. Альшиц, В.М. Чернов, в кн.: *Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ*, Наука, Ленинград (1980), с. 23.
16. К. Теодосиу, *Упругие модели дефектов в кристаллах*, Мир, Москва (1985).
17. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965).
18. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *Кристаллография* **54**, № 6, 1034 (2009).
19. В.Л. Инденбом, *Кристаллография* **3**, Вып. 2, 197 (1958).

20. J. Kratochvil and V.L. Indenbom, *Czech. J. Phys. B* **13**, 814 (1963).
21. А.М. Косевич, А.С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
22. Я.И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Наука, Ленинград (1972).
23. О.М. Braun and Yu.S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, No 1–2 (1998).
24. А.М. Косевич, А.С. Ковалев, *Теория динамического краудиона в трехмерной сильно анизотропной среде*. В кн.: *Динамика дислокаций*, Наукова думка, Киев (1975), с. 275.
25. A.S. Kovalev, A.D. Kondratyuk, A.M. Kosevich, and A.I. Landau, *Phys. Rev. B* **48**, 4122 (1993).
26. A.S. Kovalev, A.D. Kondratyuk, A.M. Kosevich, and A.I. Landau, *Phys. Status Solidi B* **177**, 117 (1993).
27. A.I. Landau, A.S. Kovalev, and A.D. Kondratyuk, *Phys. Status Solidi B* **179**, 373 (1993).
28. В.Д. Нацик, Е.И. Назаренко, *ФНТ* **26**, 283 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 210 (2000)].
29. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, Е.И. Назаренко, *ФНТ* **27**, 316 (2001) [*Low Temp. Phys.* **27**, 233 (2001)].
30. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, Е.И. Назаренко, *ФНТ* **27**, 1295 (2001) [*Low Temp. Phys.* **27**, 958 (2001)].
31. A. Seeger and E. Mann, *J. Phys. Chem. Solids* **12**, 326 (1960).
32. R.A. Johnson and E. Brown, *Phys. Rev.* **127**, 446 (1962).
33. R.A. Johnson and E. Brown, *Phys. Rev.* **134**, A1329 (1964).
34. М.П. Жетбаева, В.Л. Инденбом, В.В. Кирсанов, В.М. Чернов, *Письма в ЖТФ* **5**, 1157 (1979).
35. V.M. Agranovich and V.V. Kirsanov, *Production of Radiation defects by Collision Cascades in Metals*. In.: *Physics of Radiation Effects in Crystals*. R.A. Johnston and A.N. Orlov. (eds.) Amsterdam: Elsevier Science Publishers (1986), P. 117.
36. А.И. Лурье, *Теория упругости*, Наука, Москва (1970).
37. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
38. Ф.И. Федоров, *Теория упругих волн в кристаллах*, Наука, Москва (1965).
39. Б.Е. Победря, *Лекции по тензорному анализу*, Изд-во Моск. ун-та, Москва (1986).
40. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*, Наука, Москва (1970).
41. И.М. Гельфанд, Г.И. Шилов, *Обобщенные функции и действия над ними*, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1959).
42. В.С. Владимиров, *Обобщенные функции в математической физике*, Наука, Москва (1976).
43. В.С. Владимиров, *Уравнения математической физики*, Наука, Москва (1988).

Dislocations and crowdions in two-dimensional crystals. Part 1. Atomic lattice models and continual description of the above defects in an elastic anisotropic 2D medium

V.D. Natsik and S.N. Smirnov

A successive continual description of dislocations and crowdions as intrinsic structure defects in 2D crystals is proposed. The both types of defects have been studied within the framework of a unified approach: the crystal is considered as a strictly two-dimensional elastic anisotropic medium and the defects as point carriers of plastic deformation and singular sources of elastic deformation fields, each being characterized by crystal geometric and topological properties. The continual description is preceded by the discussion of simple atomic lattice schemes illustrate the microscopic structure of the defects. Each type of the defects is related to the plastic distortion tensor which correlates with its crystal geometric characteristics. Based on the linear theory of elasticity of the 2D medium, equations are derived that determine the distribution of elastic fields round the centers of unit defects as well as for continuous distribution of defects in the crystal. The general solutions of these equations for fixed dislocations and crowdions in an infinitely extended elastic anisotropic 2D continuum are obtained.

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, theory of elasticity, deformation field, topological charge.