

Компьютерное моделирование и аналитическое описание дефектов структуры в двумерных кристаллах ограниченных размеров: свободная граница, дислокации, краудионы

В.Д. Нацик^{1,2}, С.Н. Смирнов¹, В.И. Белан¹

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

²Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина
E-mail: smirnov@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 2 марта 2018 г., опубликована онлайн 28 мая 2018 г.

Рассмотрены 2D кристаллы ограниченных размеров, образованные атомами с центрально-симметричным взаимодействием между ними (потенциал Леннарда–Джонса). Методами молекулярной динамики установлена атомная структура кластеров приблизительно круговой формы с радиусами нанометрового масштаба. Исследованы отклонения атомных конфигураций от идеальной решетки 2D кристалла, обусловленные как свободной границей кластера, так и внедренными в его центр дефектами — дислокацией и краудионом. Вычислены значения собственных энергий этих дефектов, проанализированы их зависимости от радиуса кластера и параметров потенциала межатомного взаимодействия. Методами континуальной механики кристаллов описаны особенности однородной упругой деформации 2D кристаллических круга и полосы по сравнению с деформацией 3D кристаллических шара и стержня. Обсуждены двумерные аналоги основных характеристик упругости — коэффициента сжатия, модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона, а также их связь с коэффициентами Ламэ. Установлены зависимости всех перечисленных параметров упругости от параметров потенциала межатомного взаимодействия, а также получены оценки для эффективных размеров ядер дислокации и краудиона.

Розглянуто 2D кристали обмежених розмірів, які утворені атомами з центрально-симетричною взаємодією (потенціал Леннарда–Джонса). Методами молекулярної динаміки встановлено атомну структуру кластерів приблизно кругової форми з радіусами нанометрового масштабу. Досліджено відхилення атомних конфігурацій від ідеальної ґратки 2D кристала, котрі обумовлені як вільною границею кластера, так і впровадженими у його центр дефектами — дислокацією та краудионом. Обчислено значення власних енергій цих дефектів, проаналізовано їх залежність від радіуса кластера та параметрів потенціалу міжатомної взаємодії. Методами континуальної механіки кристалів описано особливості однорідної пружної деформації 2D кристалічних круга та полоси у порівнянні з деформацією 3D кристалічних сфери та стрижня. Обговорено двовимірні аналоги основних характеристик пружності — коефіцієнта стискування, модуля Юнга, модуля зсуву та коефіцієнта Пуассона, а також їх зв'язок з коефіцієнтами Ламе. Встановлено залежність всіх перерахованих параметрів пружності від параметрів потенціалу міжатомної взаємодії, а також одержано оцінки для ефективних розмірів ядер дислокації та краудиона.

PACS: 02.70.Ns Методы молекулярной динамики;
07.05.Tr Компьютерное моделирование и симулирование;
61.72.Vb Теории и модели дефектов в кристалле;
61.72.J– Точечные дефекты и кластеры дефектов.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, двумерные кристаллы, модули упругости, дислокации, краудионы, микроскопические модели дефектов, топологический заряд дефекта, собственная энергия дефектов.

1. Введение

В данной статье продолжена разработка различных аспектов механики двумерных (2D) кристаллов и теории структурных дефектов в них, начатая в серии публикаций [1–4]. Посвящая статью памяти А.М. Косевича, мы стремились реализовать в ней характерный для его научной школы комплексный подход к описанию механических свойств кристаллических систем [5,6]: оптимальное сочетание методов атомно-решеточной механики и механики упругого континуума; повышенное внимание к топологическим аспектам механики кристаллов в целом, а также обсуждение общности и различий топологических свойств как совершенных 3D, 2D и 1D кристаллов, так и присущих им разнообразных структурных искажений; стремление на каждом этапе исследования акцентировать внимание на тех особенностях обсуждаемых свойств, которые имеют общезначимое значение.

Конкретная цель работы — описание ряда особенностей атомной структуры, энергетики и упругих свойств плоских фрагментов 2D кристаллов трех типов: кластеров с размерами нанометрового масштаба; макроскопического упругого круга; упругой полосы, ограниченной двумя прямолинейными параллельными границами. Эти задачи рассмотрены на примере 2D кристалла, образованного атомами одного типа с центрально-симметричным потенциалом парного взаимодействия между ними. Такой кристалл имеет плотноупакованную атомную структуру и изотропные упругие свойства. Решения перечисленных выше задач получены методами теории упругости 2D изотропного континуума и численными методами молекулярной динамики.

2. Равновесная структура бесконечного идеального 2D кристалла и атомные конфигурации нанокластеров со свободными границами

Одним из интересных для современной нанофизики объектов исследований являются 2D кристаллические кластеры с размерами нанометрового масштаба, например образцы графена, которые образуются в процессе фрагментации графита [7]. При изучении кристаллических кластеров прежде всего следует проанализировать размерные структурные эффекты — влияние свободной границы на равновесные атомные конфигурации в ее окрестности и внутри кластера. В общем случае сложных кристаллов типа графена это довольно трудная задача атомно-решеточной механики 2D кристалла. Поэтому ее решение целесообразно начать с рассмотрения наиболее простой модели кристалла, который образован набором однотипных атомов с центрально-симметричным взаимодействием между ними. Для описания потенциальной энергии взаимодействия двух атомов на расстоянии r между их центрами используется потенциал Леннарда–Джонса [8]

$$\phi(r) = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

с энергетическим ε_0 и пространственным r_0 параметрами.

2.1. Геометрические и энергетические параметры бесконечного кристалла

Минимуму потенциальной энергии бесконечного кристалла с центрально-симметричным межатомным взаимодействием соответствует плотноупакованная атомная структура с двумерной гексагональной (правильной треугольной) решеткой узлов (рис. 1), которая имеет двумерную пространственную группу симметрии $pbmm$ [9–11]. Геометрия кристалла определяется двумя базисными векторами трансляций \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 одинаковой длины ($|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$) и углом между ними $\pi/3$, а также системой решеточных векторов

$$\mathbf{R}^n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{n} = \{n_1, n_2\}, \quad n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Равновесные значения параметра a , площади элементарной ячейки $S = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a^2/2$ и энергии связи на один атом ε бесконечного кристалла с потенциалом парного межатомного взаимодействия (1), можно вычислить хорошо известными аналитическими методами теории кристаллических решеток [8,12]. Эти значения находятся из условия минимума потенциальной энергии на один атом $\varepsilon(a)$ относительно изменения параметра решетки a :

$$\begin{aligned} \varepsilon(a) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \phi(\mathbf{R}^n) = \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[\left(\frac{r_0}{R^n} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{R^n} \right)^6 \right] = \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \left[A_{12} \left(\frac{r_0}{a} \right)^{12} - 2A_6 \left(\frac{r_0}{a} \right)^6 \right], \quad (2) \\ R^n &= |\mathbf{R}^n|. \end{aligned}$$

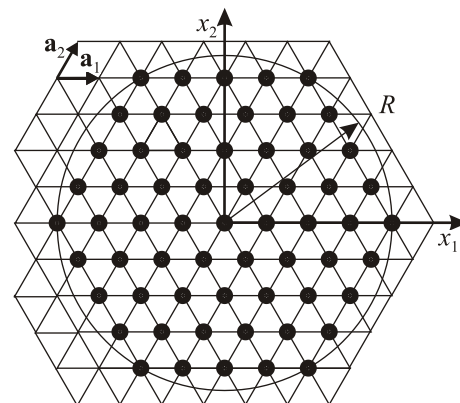


Рис. 1. Решетка узлов бесконечного идеального 2D кристалла, а также начальная конфигурация атомов (•) в кластере, расположенном в области круга с радиусом R .

Здесь A_k — решеточные суммы, которые являются геометрическими инвариантами относительно изменений параметра a , они определяются совокупностью безразмерных кристаллогеометрических параметров R^n/a и показателями степени k в формуле (1):

$$A_k = \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left(\frac{a}{R^n} \right)^k, \quad A_6 \approx 6,376, \quad A_{12} \approx 6,010.$$

Необходимое условие равновесия $d\varepsilon(a)/da = 0$ и формула (2) определяют зависимости параметров решетки a , S , ε от параметров r_0 и ε_0 потенциала межатомного взаимодействия (1):

$$\begin{aligned} a &= \left(\frac{A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} r_0 \approx 0,990 r_0, \\ S &= \frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{A_{12}}{A_6} \right)^{1/3} r_0^2 \approx 0,849 r_0^2, \\ \varepsilon &= -\frac{A_6^2}{2A_{12}} \varepsilon_0 \approx -3,382 \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (3)$$

Отметим, что для 2D и 3D кристаллических структур с плотной упаковкой атомов численные значения решеточных сумм A_6 и A_{12} существенно отличаются (см., например, [8]), что также приводит к различным значениям коэффициентов пропорциональности в соотношениях $a \propto r_0$ и $\varepsilon \propto \varepsilon_0$. Для центрально-симметричного потенциала более общего вида равновесные значения параметров 2D решетки получены в [13].

В континуальной механике кристаллов важную роль играет тензор модулей упругости λ_{iknm} , компоненты которого также связаны с их атомно-решеточными характеристиками [1,5]. В частности, модуль сдвига $\mu = \lambda_{1212}$ для 2D кристалла с межатомным взаимодействием (1) в кристаллографической системе координат (рис. 1) можно представить в виде ряда [1]

$$\mu = \lambda_{1212} = \frac{12\varepsilon_0}{S} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[7 \left(\frac{r_0}{R^n} \right)^{12} - 4 \left(\frac{r_0}{R^n} \right)^6 \right] \sin^2 \varphi^n \cos^2 \varphi^n,$$

где φ^n — полярный угол вектора $\mathbf{R}^n = (R^n, \varphi^n)$. Если ввести решеточные суммы

$$\begin{aligned} \tilde{A}_k &= \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left(\frac{a}{R^n} \right)^k \sin^2 \varphi^n \cos^2 \varphi^n, \\ \tilde{A}_6 &\approx 0,797, \quad \tilde{A}_{12} \approx 0,751 \end{aligned}$$

и воспользоваться соотношениями (3), то в результате получим

$$\mu = \frac{24\varepsilon_0}{\sqrt{3} r_0^2} \left(\frac{A_6}{A_{12}} \right)^{4/3} \left[\frac{7A_6}{A_{12}} \tilde{A}_{12} - 4\tilde{A}_6 \right] \approx 35,848 \frac{\varepsilon_0}{r_0^2}. \quad (4)$$

2.2. Методы и результаты моделирования равновесной атомной структуры в кластере

Появление в кристаллической среде свободной границы нарушает баланс сил межатомного взаимодействия, который обеспечивает равновесный атомный порядок в бесконечном кристалле. Поэтому равновесная структура кластера ограниченных размеров будет деформирована относительно структуры бесконечного идеального кристалла. Это позволяет рассматривать границу как специфический дефект кристаллической структуры и считать ее источником деформаций на границе и внутри кластера. Согласно геометрической классификации структурных дефектов [10,14–17], дислокацию и краудيون в 2D кристалле следует рассматривать как точечные (нульмерные) дефекты, а его границу как линейный (одномерный) дефект.

Моделирование равновесной атомной структуры плоских кластеров проведено методами молекулярной динамики. На первом этапе моделирования задавалась начальная неравновесная атомная конфигурация кластера как фрагмента идеальной бездефектной решетки, вписанной в круг заданного радиуса R с центром в одном из узлов (рис. 1). Этот кластер имеет ось симметрии 6-го порядка, перпендикулярную его плоскости. Значение R задавалось кратным величине параметра решетки a : $R = n_R a$, где n_R — целое число, которое варьировалось от 16 до 198. Каждый из трех центральных рядов (диаметральные плотноупакованные ряды, проходящие через центр кластера) содержал $2n_R + 1$ атомов (на рис. 1 для ряда вдоль оси x_1 число $n_R = 4$).

Второй этап моделирования — расчет структурной релаксации к равновесной атомной конфигурации путем численного решения уравнений движения атомов в плоскости кластера, при этом учитывалось взаимодействие каждого отдельного атома со всеми остальными.

Атомы в кластере нумеровались целыми числами $p = 1, 2, \dots, N$, а их положение в момент времени t определялось в декартовой прямоугольной системе координат (рис. 1) совокупностью радиусов-векторов $\mathbf{r}^p(t)$. Перемещения атомов описывались классическими уравнениями движения в форме Ньютона для системы взаимодействующих материальных точек, которые были записаны в безразмерной форме с помощью системы основных единиц: r_0 — единица длины, масса атома m — единица массы, ε_0 — единица энергии. Динамическая устойчивость процесса релаксации и получение статической равновесной структуры кластера обеспечивалось введением в уравнения движения силы вязкого трения, которая пропорциональна скорости движения атома с одинаковыми для всех атомов значениями коэффициента вязкости.

Таким образом, зависимость безразмерных координат атомов $\mathbf{q}^p(\tau) = r_0^{-1} \mathbf{r}^p$ от безразмерного времени

$\tau = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{m}} \frac{t}{r_0}$ определялась системой дифференциальных уравнений второго порядка и указанными выше начальными условиями:

$$\frac{d^2 \mathbf{q}^p}{d\tau^2} + \gamma \frac{d \mathbf{q}^p}{d\tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}^p} \times \sum_{s \neq p} \left[\left(|\mathbf{q}^p - \mathbf{q}^s| \right)^{-12} - 2 \left(|\mathbf{q}^p - \mathbf{q}^s| \right)^{-6} \right] = 0, \quad (5)$$

$$p, s = 1, 2, \dots, N,$$

$$\mathbf{q}^p(0) = r_0^{-1} \mathbf{R}^n, \quad \left. \frac{d \mathbf{q}^p}{d\tau} \right|_{\tau=0} = 0, \quad |\mathbf{R}^n| \leq R,$$

где γ — безразмерный коэффициент вязкости.

Для численного решения системы уравнений (5) использовался скоростной алгоритм Верле [18], модифицированный в [19] на случай наличия сил трения. Увеличение точности вычислений сумм большого множества чисел с плавающей точкой, которые существенно отличаются по величине, достигалось применением алгоритма Кэжэна (компенсационное суммирование) [20]. Уменьшить длительность расчетов позволило использование параллельных вычислений, которые выполнялись с помощью технологии MPI [21].

После завершения релаксации конфигурации атомов в кластерах соответствовали неоднородно деформированной решетке, но ось симметрии 6-го порядка при этом сохранялась. Анализ смещений атомов выявил нетривиальный характер деформаций в кластерах относительно идеальной решетки. Будем нумеровать интервалы между соседними атомами в центральном ряду целыми числами $n = 1, 2, \dots, n_R$, начиная от границы кластера по направлению к его центру, а расстояния между соседними атомами обозначим символом $d(n)$. Установлено, что расстояние d немонотонно изменяется от границы к центру: убывает от максимального значения $d_{\max} = d(1)$, достигает минимума при некотором значении n_{\min} ($d_{\min} = d(n_{\min})$), а затем возрастает до значения $d(n_R)$ (рис. 2). Расстояние $d_{\max} = d(1)$ заметно отличается от $d(n_R)$ и незначительно изменяется при увеличении R : относительная разность $(d_{\max} / d(n_R) - 1)$ не выходит за пределы $(6,00 - 5,77) \cdot 10^{-3}$ при возрастании n_R от 16 до 198. На рис. 2 видно, что при увеличении размера кластера минимумы на зависимости $d(n)$ становятся менее выраженными, но регистрируются даже в кластере с максимальным размером $R = 198a$, который содержал 142189 атомов. В центре кластера относительное отклонение $d(n_R)$ от параметра решетки a не превышает 10^{-5} при $16 \leq n_R \leq 21$ и уменьшается с увеличением R .

С этой точностью можно принять $d(n_R) = a$ и разделить заданную на дискретном множестве точек $n = 1, 2, \dots, n_R$ вдоль центральных рядов деформацию относительно идеальной решетки формулой

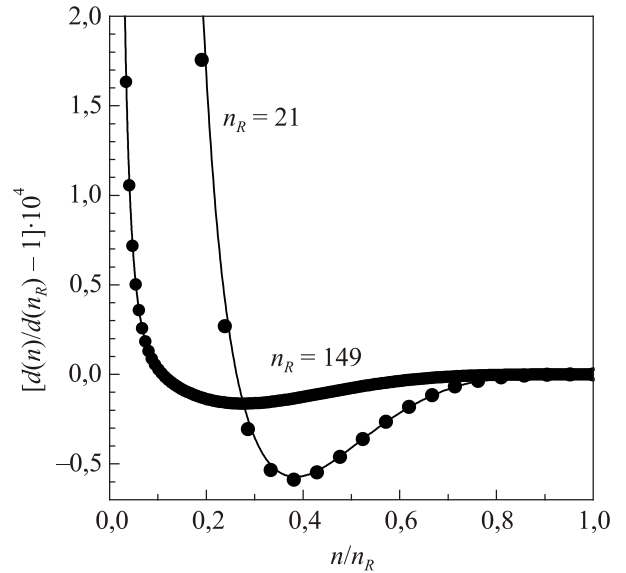


Рис. 2. Изменение расстояния $d(n)$ между соседними атомами в центральных рядах кластера от его границы к центру.

$$\varepsilon^R(n) = (d(n) / a - 1).$$

В целом образование свободной границы увеличивает площадь кластера, а количественные значения основных параметров зависимостей $d(n)$ и $\varepsilon^R(n)$ и влияние на них размеров кластера показаны на рис. 3. Зависимость n_{\min} от n_R может быть аппроксимирована относительно простой аналитической функцией, график которой приведен на рис. 3(а):

$$n_{\min} / n_R = B_1 + B_2 (n_R)^{-p}, \quad (6)$$

$$B_1 \approx 0,28, \quad B_2 \approx 5,76, \quad p = 1,32, \quad 16 \leq n_R \leq 198.$$

Масштаб деформаций на границе кластера порядка 10^{-3} вполне доступен для регистрации современными рентгеновскими, электронно-графическими и другими методами структурного анализа. Неоднородность атомной структуры вблизи границы может оказывать также существенное влияние на спектр граничных упругих волн — типа волн Рэлея в 3D кристаллах.

3. Моделирование атомных конфигураций 2D кластеров с дислокациями и краудионами

Дислокации и краудионы — собственные дефекты кристаллической структуры, которые появляются в результате незавершенных пластических сдвигов вдоль направлений плотной упаковки атомов на элементарный вектор трансляций \mathbf{b} в этом направлении. Атомно-решеточные схемы образования таких дефектов в 2D кристаллах детально описаны в статьях [2–4], где также получено континуальное описание обусловленных ими упругих и пластических деформаций кристаллической структуры. Структурные дефекты в 2D кристаллах также изучались аналитическими методами теории упругости [22,23] и численными методами молекулярной

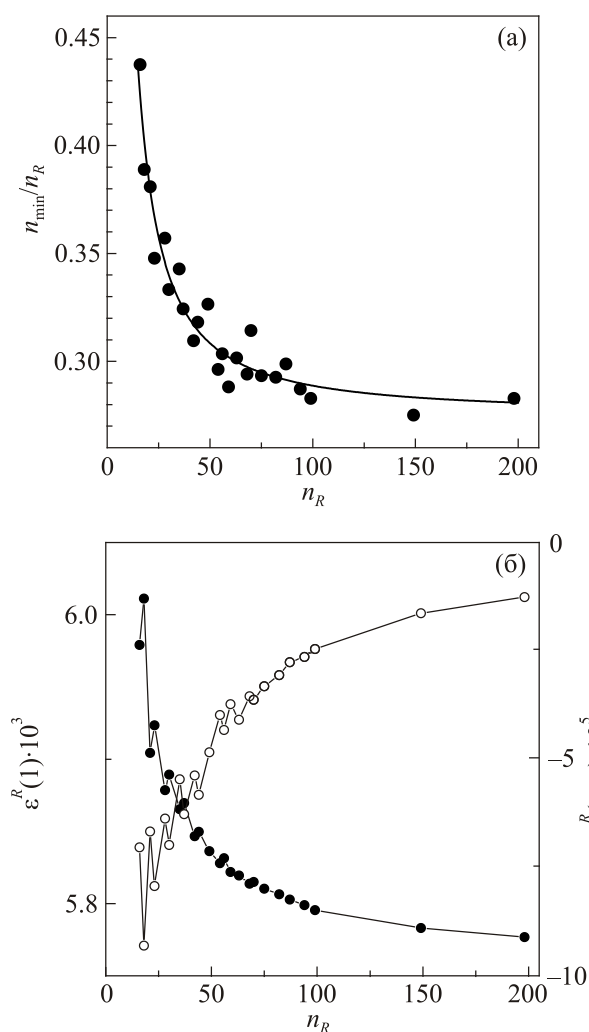


Рис. 3. Влияние размеров кластеров $n_R = R/a$ на характеристики их атомной структуры: (а) — зависимость от n_R расстояния минимума n_{\min} от границы кластера, сплошная линия — график аналитической аппроксимации (6); (б) — зависимость от n_R минимальной (\circ) и максимальной (\bullet) деформаций центральных атомных рядов.

динамики в графене [24]. Задача о моделировании краудиона в простой скалярной модели 2D кристалла рассмотрена в работе [25].

В данном исследовании дефекты вводились в центры 2D кластеров: пластические сдвиги выполнялись в положительном направлении оси x_1 (рис. 1), а роль вектора Бюргерса играл базисный вектор $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1$. Незавершенные пластические сдвиги существенно нарушают баланс сил межатомного взаимодействия, поэтому для обеспечения стабильности процесса релаксации к равновесной структуре кластера целесообразно создать начальную атомную конфигурацию, которая приблизительно отражает структуру равновесного поля деформаций дефекта, вычисленного в континуальном приближении [3].

Дислокация вводилась смещениями атомов в верхней части кластера согласно формуле

$$u_1^d(\mathbf{R}^n) = \begin{cases} b, & \text{при } n_1 \leq -(n_2 + 2), \\ \frac{1-n_1}{n_2+3}b, & \text{при } -(n_2+1) \leq n_1 \leq 0, \quad n_2 \geq 1, \\ 0, & \text{при } n_1 \geq 1. \end{cases}$$

Краудион создавался незавершенным сдвигом атомов центрального плотноупакованного ряда с начальными координатами $\mathbf{R}^n = (an_1, 0)$, а смещения $u_1^c(\mathbf{R}^n)$ задавались формулой

$$u_1^c(\mathbf{R}^n) = \frac{2b}{\pi} \operatorname{arctg} [\exp(-n_1/2)],$$

$$-n_R \leq n_1 \leq n_R, \quad n_R = R/a.$$

Процесс релаксации описывался системой уравнений движения (5) с начальными смещениями вдоль орта линии скольжения \mathbf{e} (рис. 4):

$$\mathbf{q}^p(0) = r_0^{-1}[\mathbf{R}^n + u_1^{d,c}(\mathbf{R}^n)\mathbf{e}], \quad \left. \frac{d\mathbf{q}^p}{d\tau} \right|_{\tau=0} = 0, \quad |\mathbf{R}^n| \leq R.$$

Уравнения движения с этими начальными условиями решались методами, описанными в разд. 2.2. После завершения релаксации получены атомные конфигурации кластеров с дефектами (рис. 4) и значения собственных энергий дислокаций ε_d и краудионов ε_c в

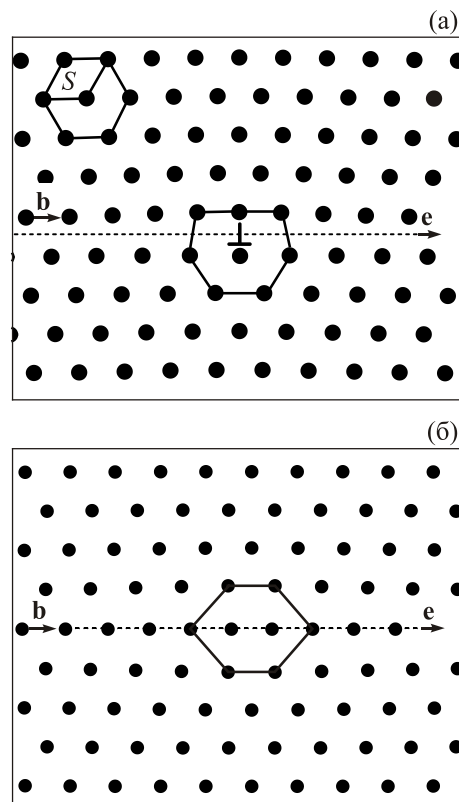


Рис. 4. Равновесная атомная структура вблизи центров дислокации (а) и краудиона (б): сплошными линиями выделены элементарная ячейка с площадью S и гексагон в идеальном кристалле, а также условные ядра дефектов с существенно искаженной конфигурацией атомов, пунктиром обозначены линии скольжения, \mathbf{b} и \mathbf{e} — вектор Бюргерса и орт линии скольжения.

кластерах различных размеров: энергия $\varepsilon_{d,c}$ определялась как разность энергий межатомного взаимодействия бездефектного кластера и кластера с соответствующим дефектом.

Зависимости энергии дефектов $\varepsilon_{d,c}$ от размера кластера иллюстрирует рис. 5. В разд. 5 будет показано, что главные особенности этих зависимостей, полученные здесь методами молекулярной динамики, связаны с характером пространственного распределения упругих деформаций вокруг центров дефектов и влиянием границы кристалла на это распределение*.

4. Континуальное описание деформации 2D кристаллов ограниченных размеров

Обсудим некоторые особенности упругой деформации и деформационные характеристики двумерных кристаллических тел макроскопических размеров, используя для их описания методы континуальной механики [1]. Рассмотрим деформации растяжения-сжатия плоских тел двух типов: упругого круга под действием приложенного к его границе однородного радиального напряжения (рис. 6(a)) длинной упругой полосы со свободными боковыми границами под действием однородных продольных сил на ее концах (рис. 6(б)).

В континуальной механике 3D кристаллов аналогичные задачи рассмотрены для упругих тел, имеющих

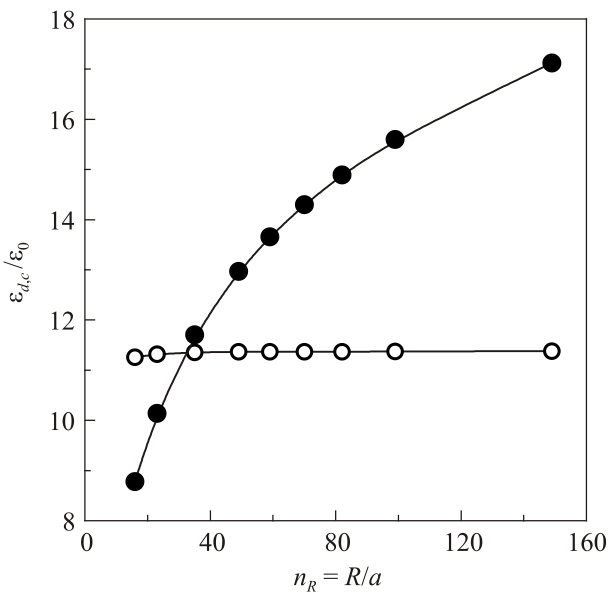


Рис. 5. Зависимость собственной энергии дислокации ε_d (●) и краудиона ε_c (○) от размера кластера $n_R = R/a$ (результаты компьютерного моделирования [26]). Сплошные линии — графики аналитических аппроксимаций (21) и (22).

* В теории краудионов важным является вопрос об их устойчивости по отношению к трансформациям в другие более стабильные конфигурации межзельного или гантельного типа, но этот вопрос будет предметом отдельного исследования.

** Мы рассматриваем здесь только макроскопические деформации вдали от границы 2D кристалла без учета относительно слабых искажений атомной структуры самой границы, которые описаны в разд. 2.2. Континуальное описание этих искажений в принципе возможно в терминах граничной энергии и граничного натяжения, но оно выходит за рамки данной статьи.

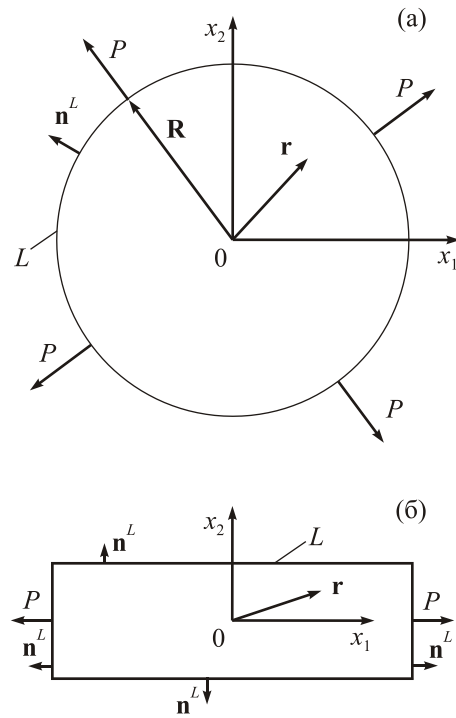


Рис. 6. Схематическое изображение однородной деформации растяжения упругого круга (а) и упругой полосы (б): P — линейная плотность деформирующих сил (напряжение) на границе плоских тел L ; $x_1 0 x_2$ — система прямоугольных координат; $\mathbf{r} = (x_1, x_2)$ — радиус-вектор точек тела; \mathbf{n}^L — орт внешней нормали к границе L .

форму шара и стержня. С их обсуждения обычно начинается изложение базовых положений теории упругости и термодинамики деформирования [27]. Оказалось, что при решении этих простых задач переход от трехмерной к двумерной геометрии кристаллического пространства приводит к нескольким существенным различиям конечных результатов, на которые целесообразно обратить внимание и учитывать их при дальнейшем развитии и уточнениях континуальной механики 2D кристаллов в целом**.

4.1. Базовые уравнения теории упругости 2D кристаллов

Упругие деформации в плоскости 2D кристалла можно описывать двумерным векторным полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_1, u_2)$ или четырехкомпонентными тензорными полями дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ и деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$:

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \nabla_i u_k, \quad \varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}(u_{ik} + u_{ki}), \quad \nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad i, k = 1, 2.$$

Обусловленные деформацией внутренние напряжения описываются симметричным тензорным полем $\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = \sigma_{ki}(\mathbf{r})$ [сила/длина]. В приближении линейной теории упругости статическое состояние деформированного тела, ограниченного некоторым контуром L , определяется уравнениями механического равновесия, законом Гука и заданием на границе и внутри тела распределения деформирующих сил [1]:

$$\nabla_k \sigma_{ik}(\mathbf{r}) = -F_i(\mathbf{r}), \quad (7)$$

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = \lambda_{iknm} \varepsilon_{nm}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}^L) n_k^L = P_i(\mathbf{r}^L). \quad (9)$$

Здесь \mathbf{r}^L и \mathbf{n}^L — соответственно радиус-вектор точек границы L и орт внешней нормали к ней, $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ [сила/длина²] и $\mathbf{P}(\mathbf{r}^L)$ [сила/длина] — соответственно двумерная плотность внешних сил внутри тела и одномерная плотность таких сил на границе, λ_{iknm} — тензор модулей упругости, а по повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование.

Значения компонент тензора λ_{iknm} [сила/длина] зависят от симметрии и геометрических параметров недеформированной кристаллической решетки ($\mathbf{R}^{\mathbf{n}}$), а также от характеристик потенциала межатомного взаимодействия [1]. Для 2D кристаллов с изотропными упругими свойствами этот тензор имеет две независимые компоненты. Используя двумерные аналоги коэффициентов Ламэ λ и μ , можно представить тензор λ_{iknm} в виде

$$\lambda_{iknm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{nm} + \mu (\delta_{in} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kn}), \quad (10)$$

где δ_{ik} — символ Кронекера ($\delta_{nm} = \delta_{11} + \delta_{22} = 2$). В кристаллографической системе координат (рис. 1) $\lambda_{1122} = \lambda$ и $\lambda_{1212} = \mu$.

При решении ряда задач теории упругости целесообразно полную деформацию разделять на деформацию всестороннего растяжения (сжатия) и чистого сдвига [27]. В теории упругости изотропных 2D кристаллов в некоторых случаях удобно использовать в качестве модулей упругости параметры μ и $K = \lambda + \mu$, а закон Гука (8) представить в виде двух эквивалентных соотношений:

$$\sigma_{ik} = K \varepsilon_{nn} \delta_{ik} + 2\mu \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{2} \varepsilon_{nn} \delta_{ik} \right), \quad (11)$$

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{4K} \sigma_{nn} \delta_{ik} + \frac{1}{2\mu} \left(\sigma_{ik} - \frac{1}{2} \sigma_{nn} \delta_{ik} \right). \quad (12)$$

Приведем также формулы, которые определяют связь двумерной плотности энергии упругой деформации (упругой составляющей свободной энергии) с локальными значениями тензора деформации и тензора напряжений:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \lambda_{iknm} \varepsilon_{ik} \varepsilon_{nm} = \frac{1}{2} \lambda \varepsilon_{nn}^2 + \mu \varepsilon_{ik}^2 = \\ &= \frac{1}{2} K \varepsilon_{nn}^2 + \mu \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{2} \varepsilon_{nn} \delta_{ik} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{8K} \sigma_{nn}^2 + \frac{1}{4\mu} \left(\sigma_{ik} - \frac{1}{2} \sigma_{nn} \delta_{ik} \right)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

С помощью соотношений (11) и (12) легко получить решение интересующих нас задач о деформации круга и полосы (рис. 6).

4.2. Растяжение упругого круга и полосы

При деформации круга однородными радиальными напряжениями на его границе $\sigma_{ik}(\mathbf{r}^L) = P \delta_{ik}$ и в отсутствие внешних сил внутри круга $\mathbf{F}(\mathbf{r}) \equiv 0$ (рис. 6(a)) решением уравнения равновесия (7) является однородное распределение деформаций и напряжений

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = 2K \varepsilon_{ik}(\mathbf{r}) = P \delta_{ik}, \quad \varepsilon_{nn}(\mathbf{r}) = K^{-1} P. \quad (14)$$

При продольном растяжении 2D кристаллической полосы (рис. 6(б)) отсутствие сил на боковых границах, где $\mathbf{n}^L = (0, \pm 1)$, эквивалентно равенству нулю компонент тензора напряжений $\sigma_{12}(\mathbf{r}^L) = 0$ и $\sigma_{22}(\mathbf{r}^L) = 0$ на этих границах. На торцевых границах, где $\mathbf{n}^L = (\pm 1, 0)$, отлична от нуля только компонента $\sigma_{11}(\mathbf{r}^L) = P$. Согласно соотношениям (11) и (12), этим условиям и уравнению равновесия (7) удовлетворяют однородные поля деформаций и напряжений:

$$\sigma_{11}(\mathbf{r}) = P, \quad \sigma_{22}(\mathbf{r}) = 0, \quad \sigma_{12}(\mathbf{r}) = 0, \quad (15)$$

$$\varepsilon_{11}(\mathbf{r}) = \frac{K + \mu}{4K\mu} P, \quad \varepsilon_{22}(\mathbf{r}) = -\frac{K - \mu}{4K\mu} P, \quad \varepsilon_{12}(\mathbf{r}) = 0.$$

4.3. Соотношения между коэффициентами упругости для изотропных 2D кристаллов

Полученные выше решения двух простых задач о деформации плоских кристаллических тел позволяют выяснить физический смысл нескольких характеристик упругих свойств 2D кристаллов и получить соотношения между ними, полезные при решении множества других более сложных задач. Формулы (14) описывают деформацию всестороннего растяжения ($P > 0$) или сжатия ($P < 0$) 2D кристалла, следовательно, параметр K имеет смысл двумерного аналога коэффициента всестороннего расширения-сжатия. Очевидно, что при деформации чистого сдвига, когда $\sigma_{nn} \equiv 0$ и $\varepsilon_{nn} \equiv 0$, отличные от нуля недиагональные компоненты деформаций и напряжений связаны соотношением $\sigma_{12} = 2\mu \varepsilon_{12}$, т.е. параметр μ имеет смысл двумерного аналога модуля сдвига.

Формулы (15), описывающие продольное растяжение ($P > 0$) или сжатие ($P < 0$) упругой полосы, позволяют обсудить еще две важные характеристики упругости 2D кристаллов — двумерные аналоги коэффициента

продольного растяжения-сжатия (модуля Юнга) E и коэффициента Пуассона ν , который характеризует соотношение между продольным растяжением ε_{11} и поперечным сжатием ε_{22} . В результате получаем

$$\begin{aligned} E &= \frac{\sigma_{11}}{\varepsilon_{11}} = \frac{4K\mu}{K+\mu} = \frac{4\mu(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}, \\ \nu &= -\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} = \frac{K-\mu}{K+\mu} = \frac{\lambda}{\lambda+2\mu}, \\ K &= \frac{P}{\varepsilon_{nn}} = \frac{E\mu}{4\mu-E} = \lambda + \mu. \end{aligned} \quad (16)$$

Отсюда также следуют соотношения:

$$\lambda = \frac{\nu E}{1-\nu^2}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad K = \frac{E}{2(1-\nu)} = \frac{1+\nu}{1-\nu}\mu. \quad (17)$$

Для термодинамически устойчивых кристаллических структур $K \geq 0$ и $\mu \geq 0$, поэтому коэффициент Пуассона 2D кристалла может изменяться в пределах*

$$-1 \leq \nu \leq 1.$$

Для 2D кристаллов с центрально-симметричным взаимодействием атомов $\lambda = \mu$ [1,3], а коэффициент Пуассона, модуль Юнга и коэффициент всестороннего растяжения имеют значения

$$\nu = \frac{1}{3}, \quad E = \frac{8}{3}\mu, \quad K = 2\mu. \quad (18)$$

Сравнение формул (11)–(18), описывающих упругие свойства 2D кристаллов, с соответствующими формулами для 3D кристаллов [15,27] показывает, что «двумерные» коэффициенты упругости λ, μ, K, E (размерность [сила/длина]) отличаются от их «трехмерных» аналогов (размерность [сила/длина²]) не только размерностью, но и видом этих формул. Что же касается безразмерного коэффициента Пуассона ν , то переход от двумерного к трехмерному кристаллическому пространству существенно изменяет интервал его возможных значений (в 3D кристаллах $-1 \leq \nu \leq 1/2$) и значение, соответствующее центрально-симметричному взаимодействию (для таких 3D кристаллов $\nu = 1/4$ [12]).

5. Континуальное описание дислокации и краудиона в упругом круге

В континуальной механике 2D кристалла статические упругие деформации, обусловленные дислокациями и краудионами, описываются системой уравнений и граничных условий (7)–(9) вместе с еще одним уравнением, которое определяет связь тензора упругих дислокаций u_{ik} с топологическими зарядами дефектов [2–4]:

$$\varepsilon_{nk} \nabla_k u_{ni}(\mathbf{r}) = \alpha_i^{d,c}(\mathbf{r}), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \alpha^d(\mathbf{r}) &= \mathbf{b}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}^d), \quad \alpha_i^c(\mathbf{r}) = \varepsilon_{kn} S_{ki} \nabla_n \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}^c), \\ \mathbf{b} &= q\mathbf{b}e, \quad S_{ik} = qS\varepsilon_i e_k. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь ε_{nk} — единичный антисимметричный тензор ($\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 0, \varepsilon_{12} = 1, \varepsilon_{21} = -1$), \mathbf{b} и S — вектор Бюргера и площадь элементарной ячейки, \mathbf{e} — орт линии скольжения, $q = \pm 1$ — знак дефекта, $\mathbf{r}^{d,c}$ — радиус-векторы центров дефектов. Векторный \mathbf{b} и тензорный S_{ik} параметры играют роль многокомпонентных топологических зарядов дислокации и краудиона соответственно, а $\alpha^{d,c}(\mathbf{r})$ — векторные поля двумерных плотностей этих зарядов. Связь топологических зарядов дефектов с кристаллогеометрическими характеристиками иллюстрирует рис. 4.

Решения уравнений (7)–(9) и (19), а также поля упругих деформаций $\varepsilon_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ и напряжений $\sigma_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ вокруг центров отдельных дефектов в бесконечном изотропном 2D кристалле получены в работе [3]. В ней также отмечены и обсуждены специфические трудности, возникающие в континуальной теории при вычислении собственной энергии таких дефектов $\varepsilon_{d,c}$ путем подстановки полей $\varepsilon_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ в формулы (13) и интегрировании плотности упругой энергии по площади 2D кристалла: для дефектов обоих типов возникает нефизическая расходимость интеграла энергии при $\mathbf{r} = \mathbf{r}^{d,c}$ и необходимость вводить в теорию эффективные радиусы ядер дефектов $r_{d,c}$ для ее устранения. В случае дислокации в бесконечном кристалле возникает также расходимость на больших расстояниях от ее центра. В кристалле конечных размеров необходимо учитывать при вычислении полей деформаций и напряжений наличие границы. Обсудим указанные трудности более детально и сравним результаты вычислений энергии дефектов в 2D кристалле конечных размеров как методами атомно-решеточной механики (моделирование в разд. 3), так и аналитическими методами континуальной механики.

Рассмотрим изотропный кристаллический круг радиуса R со свободной границей L и предположим, что в нем созданы дислокация или краудион, а центры этих дефектов совмещены с центром круга. Будем использовать систему прямоугольных декартовых координат $x_1 0 x_2$ и обозначим символом \mathbf{n}^L орт внешней нормали к его границе ($\mathbf{R} = R\mathbf{n}^L$). Создаваемые дефектами упругие поля описываются решениями системы уравнений (7) и (19) в отсутствие сторонних сил ($\mathbf{F}(\mathbf{r}) \equiv 0$ и $\mathbf{P}(\mathbf{r}) \equiv 0$) и должны удовлетворять граничным условиям $\sigma_{ik}(\mathbf{R})n_k^L = 0$.

Анализ этих уравнений показывает, что они формально совпадают с уравнениями, описывающими плоское деформированное состояние в теории упругости 3D изотропной среды [15,17]. В частности, выражения для

* Возможность реализации как 3D, так и 2D упругих систем с отрицательными значениями $\nu < 0$ (или $\lambda < 0$) вызывает сомнения [27].

упругих полей дислокации в 2D среде формально совпадают с выражениями для упругих полей прямолинейной бесконечной краевой дислокации в 3D среде в плоскости, которая перпендикулярна линии дислокации, если совпадают их векторы Бюргерса \mathbf{b} и для обеих сред тензор модулей упругости λ_{iknm} определяется формулой (10).

Кроме того, в теории упругости изотропных 3D кристаллов решена задача о распределении поля напряжений вокруг линии прямолинейной краевой дислокации, расположенной на оси бесконечно протяженного цилиндра с конечным радиусом R и свободной боковой поверхностью [17]. Это решение — конкретный пример плоского деформированного состояния, который можно использовать и для решения интересующей нас задачи о дислокации в упругом изотропном круге, если рассматривать этот круг как поперечное сечение цилиндра, а точку дислокации в центре круга как след дислокационной линии в цилиндре. Используя изложенные выше соображения и приведенные в [17] формулы, можно установить вид асимптотики энергии дислокации в круге по параметру r_d/R , где r_d — эффективный радиус ядра дислокации:

$$\varepsilon_d = \frac{\mu(\lambda + \mu)b^2}{2\pi(\lambda + 2\mu)} \left[\ln\left(\frac{R}{r_d}\right) + \gamma_d \left(\frac{r_d}{R}\right)^2 \right], \quad R \gg r_d. \quad (21)$$

В этой формуле r_d и γ_d — феноменологические параметры континуальной теории. Параметр r_d вводится в теорию как расстояние от центра дислокации, на котором описание создаваемого ею сингулярного поля деформаций нельзя считать корректным (по порядку величины $r_d \approx b$). Для дислокации в 2D кристалле плотность упругой энергии $U(r) \propto b^2/r^2$, и ее интегрирование по площади круга дает логарифмический вклад в ε_d . Безразмерный параметр γ_d характеризует добавку по малому параметру $(r_d/R)^2$ (при $R \gg r_d$) к энергии дислокации.

Краудион в 2D кристалле как источник упругой деформации эквивалентен дислокационному диполу с топологическим зарядом $S \approx b^2$ [2,3], и для него плотность упругой энергии $U(r) \propto S^2/r^4$. Поэтому главный вклад в энергию краудиона ε_c дает интегрирование в области его ядра на расстояниях $r_c \approx b$ от центра, а остальная область кристаллического круга дает малую поправку порядка S/R^2 :

$$\varepsilon_c = \frac{\mu(\lambda + \mu)(4\lambda + 5\mu)S^2}{4\pi(\lambda + 2\mu)^2} \left[\frac{1}{r_c^2} - \frac{\gamma_c}{R^2} \right], \quad R \gg \sqrt{S} \approx b. \quad (22)$$

Здесь, как и в формуле (21), эффективный размер ядра дефекта $r_c \approx b$ и безразмерный коэффициент γ_c являются феноменологическими параметрами континуальной теории.

Количественную неопределенность параметров континуальной теории $r_{d,c}$ и $\gamma_{d,c}$ можно устранить, сопоставляя формулы (21) и (22) и результаты компьютерного моделирования дефектов в 2D кристаллах ограниченных размеров, полученные в разд. 3. Для рассмотренного там кристалла с центрально-симметричным взаимодействием атомов коэффициенты Ламэ $\lambda = \mu$ и согласно (4) связаны с параметрами потенциала (1) соотношениями

$$\lambda = \mu \approx 35,848 \frac{\varepsilon_0}{r_0^2}, \quad (23)$$

а параметры $b = a$ и $S = \sqrt{3}a^2/2$ определяются соотношениями (3). В результате для коэффициентов перед квадратными скобками в формулах (21) и (22) получаем численные значения:

$$\frac{\mu(\lambda + \mu)b^2}{2\pi(\lambda + 2\mu)} \approx 3,73\varepsilon_0, \quad \frac{\mu(\lambda + \mu)(4\lambda + 5\mu)S^2}{4\pi(\lambda + 2\mu)^2} \approx 4,11\varepsilon_0 r_0^2. \quad (24)$$

Аппроксимация по методу наименьших квадратов результатов моделирования, приведенных на рис. 5, формулами (21) и (22) позволила получить следующие значения феноменологических параметров:

$$r_d \approx 1,52a \approx 1,52r_0, \quad \gamma_d \approx 0,27, \quad r_c \approx 0,6a \approx 0,6r_0, \quad \gamma_c \approx 7,4. \quad (25)$$

Заключение

В заключение еще раз уместно вспомнить о разнообразном и весьма значительном вкладе А.М. Косевича в исследование физико-механических свойств кристаллических систем и о том, какое внимание он постоянно уделял в этих исследованиях выявлению и анализу связи свойств кристаллов с размерностью и геометрией кристаллического пространства. В данной публикации мы попытались продемонстрировать эффективность такого подхода на примере изучения нескольких простых задач механики двумерного кристалла.

Данная работа была выполнена с использованием вычислительных ресурсов грид-кластера ИЛТРЕ — Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина Национальной академии наук Украины, Харьков.

Авторы искренне признательны А.С. Ковалеву за интерес к работе и полезные дискуссии.

1. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **39**, 690 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 534 (2013)].
2. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **40**, 1366 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 1063 (2014)].
3. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **41**, 271 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 207 (2015)].

4. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **42**, 268 (2016) [*Low Temp. Phys.* **42**, 207 (2016)].
5. А.М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
6. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища шк., Изд-во при ХГУ, Харьков (1988).
7. К.С. Новоселов, *УФН* **181**, 1299 (2011).
8. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, Мир, Москва (1990), т. 2.
9. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Наука, Москва (1979).
10. А. Келли, Г. Гровс, *Кристаллография и дефекты в кристаллах*, Мир, Москва (1974).
11. Р.В. Галиулин, *Кристаллографическая геометрия*, Наука, Москва (1984).
12. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, Гос. изд.-во физ.-мат. лит., Москва (1963).
13. С.Н. Смирнов, Е.И. Назаренко, *Збірник наукових праць міжнародної науково-практичної конференції «Структурна релаксація у твердих тілах»*, ТОВ «Планер», Вінниця, (2006), с. 261.
14. Дж. Эшелби, *Континуальная теория дислокаций*, Изд-во ин. лит., Москва (1963).
15. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
16. А.М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова Думка, Киев (1978).
17. К. Теодосиу, *Упругие модели дефектов в кристаллах*, Мир, Москва (1985).
18. Н. Gould, J. Tobochnik, and W. Christian, *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems*, Addison–Wesley, San Francisco (2007).
19. В.И. Белан, А.И. Ландау, *ФНТ* **36**, 456 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 360 (2010)].
20. W. Kahan, *Communications of the ACM* **8**, 40 (1965).
21. А.С. Антонов, *Параллельное программирование с использованием технологии MPI*, МГУ, Москва (2004).
22. A.L. Kolesnikova, T.S. Orlova, I. Hussainova, and A.E. Romanov, *Physics of the Solid State* **56**(12), 2573 (2014).
23. A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin, and A.E. Romanov, *Rev. Adv. Mater. Science* **51**, 130 (2017).
24. M.A. Rozhkov, A.L. Kolesnikova, I.S. Yasnikov, and A.E. Romanov, *Fiz. Nizk. Temp.* (2018), to be published.
25. A.I. Landau, A.S. Kovalev, and A.D. Kondratyuk, *Phys. Status Solidi B* **179**, 373 (1993).
26. 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.
27. Л.Д. Ландау, И.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965).

Computer simulation and analytic description of the structural defects in two-dimensional limited in size crystals: free boundary, dislocations, crowdions

V.D. Natsik, S.N. Smirnov, and V.I. Belan

2D limited in size crystals being generated of atoms with centrally symmetric interatomic interaction (the Lennard-Jones potential) were discussed. The atomic structure of approximately circular clusters of nanometer scale radius was established by molecular dynamics methods. The deviations of the atomic configurations from the perfect lattice of 2D crystal caused by both free boundary of cluster and interstitial defects in its centre (dislocation and crowdion) were investigated. The self energy of these defects was evaluated; their dependences on the cluster radius and the parameters of the interatomic interaction potential were analyzed. The features of homogeneous elastic deformation of 2D crystalline circle and band as compared to the deformation of 3D crystalline sphere and rod were described by continual mechanics methods. The two-dimensional analogues of fundamental elastic characteristics (modulus of compression, Young modulus, shear modulus, Poisson's ratio and their relationship with Lamé coefficients) were discussed. The dependences of the listed parameters of elasticity on the parameters of the interatomic interaction potential were established as well as the estimates of the effective core sizes of dislocation and crowdion were obtained.

PACS: 02.70.Ns Molecular dynamics and particle methods;
 07.05.Tp Computer modeling and simulation;
 61.72.Bb Theories and models of crystal defects;
 61.72.J– Point defects and defect clusters.

Keywords: molecular dynamics computer simulation, two-dimensional crystals, moduli of elasticity, dislocations, crowdions, microscopic defect models, topological charge of defect, self energy of defects.