

Дислокации и краудионы в двумерных кристаллах. Часть III: Пластическая деформация кристалла как результат перемещения дефектов и их взаимодействие с полем упругих напряжений

В.Д. Нацик^{1,2}, С.Н. Смирнов¹

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 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 17 ноября 2015 г., опубликована онлайн 26 января 2016 г.

Продолжено теоретическое исследование свойств собственных дефектов структуры дислокационного и краудионного типа в 2D кристаллах (*ФНТ* **40**, 1366 (2014); *ФНТ* **41**, 271 (2015)). Детально обсуждены атомно-решеточные модели консервативного (скольжение) и неконсервативного (переползание) движения дефектов. Показано, что при континуальном описании 2D кристалла отдельный дефект можно рассматривать как точечный носитель пластической деформации, а ее величина определяется топологическим зарядом, который согласован с кристаллогеометрическими параметрами дефекта. Установлена зависимость скорости деформации от скорости перемещения центра дефекта и его топологического заряда. В рамках линейной теории упругости 2D кристалла вычислены упругие силы, действующие на центры дислокаций и краудионов в поле внешних механических напряжений, а также силы упругого взаимодействия дефектов между собой. Рассмотрен специфический для 2D кристаллов нелинейный эффект — взаимодействие дефектов с деформациями изгиба кристаллической мембраны.

Продовжено теоретичне дослідження властивостей власних дефектів структури дислокаційного і краудионного типу у 2D кристалах (*ФНТ* **40**, 1366 (2014); *ФНТ* **41**, 271 (2015)). Детально обговорено атомно-решеточні моделі консервативного (ковзання) і неконсервативного (переповзання) руху дефектів. Показано, що при континуальному описі 2D кристалів окремих дефектів можна розглядати як точковий носій пластичної деформації, а її величина визначається топологічним зарядом, який узгоджений з кристаллогеометричними параметрами дефекта. Встановлено залежність швидкості деформації від швидкості руху центра дефекта і його топологічного заряду. В наближенні лінійної теорії пружності 2D кристала обчислено пружні сили, які діють на центри дислокацій і краудионів у полі зовнішніх механічних напружень, а також сили пружної взаємодії дефектів між собою. Розглянуто специфічний для 2D кристалів нелінійний ефект — взаємодію дефектів з деформаціями згину кристалічної мембрани.

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

Ключевые слова: двумерные кристаллы, дислокации, краудионы, упругие поля, микроскопические модели дефектов, топологический заряд дефекта, силы взаимодействия дефектов.

1. Введение

Данная работа продолжает теоретическое исследование свойств собственных дефектов структуры двумерных (2D) кристаллов — дислокаций и краудионов. Результаты

предыдущих этапов этого исследования опубликованы в статьях [1,2], где рассмотрены атомно-решеточные модели изучаемых дефектов и сформулированы основы континуального подхода к их описанию.

В континуальном приближении 2D кристалл рассматривается как бесконечно тонкая анизотропная пленка, которая в исходном состоянии заполняет плоское двумерное пространство и способна к упругим продольным и поперечным (изгибным) деформациям [3]. Предполагается, что в такой 2D среде возможны также продольные пластические деформации без нарушения ее сплошности, а дислокации и краудионы рассматриваются как точечные «носители» пластической деформации и сингулярные «источники» полей упругих деформаций и напряжений.

В работе [1] получены полевые уравнения двумерной линейной теории упругости, позволяющие описать поля упругих деформаций и напряжений в 2D кристаллической среде при наличии в ней как единичных дефектов, так и их ансамблей. В работе [2] проанализированы общие свойства решений этих уравнений для единичных дислокаций и краудионов при произвольной анизотропии 2D кристалла, а также получены в явном виде упругие поля дефектов в кристалле с изотропными упругими свойствами.

В настоящей работе описаны более детально, чем в [1], пластические деформации 2D кристалла, обусловленные перемещением в нем дислокаций и краудионов, при этом рассмотрено как консервативное, так и неконсервативное движение дефектов. В рамках линейной теории упругости детально описаны силы, определяющие оба вида перемещений дефектов, в частности, действие на них заданных внешних полей напряжений и силы упругого взаимодействия между дефектами. Проанализирован также специфический нелинейный эффект — действие на дислокации и краудионы в 2D кристалле деформаций изгиба.

2. Атомно-решеточные модели консервативного и неконсервативного перемещения дислокаций и краудионов

Хорошо известно [4–6], что движение дислокаций в 3D кристаллах может происходить без нарушения сплошности кристаллической среды двумя существенно различными способами. Первый из них — чисто механическое перемещение дислокационной линии вдоль своей поверхности скольжения (консервативное движение). Второй способ обусловлен диффузионным оттоком (или притоком) межузельных атомов или вакансий из ядра (или в ядро) дислокации (неконсервативное движение); в литературе такое движение называется переползанием или восхождением. Аналогичные процессы могут происходить и в 2D кристалле с той лишь разницей, что в них роль поверхностей скольжения играют линии скольжения.

На рис. 1(а) показана атомная структура ядра дислокации в 2D кристалле и основные кристаллогеометрические характеристики этого дефекта: линия скольжения с ортом \mathbf{e} и вектор Бюргерса $\mathbf{b} = b\mathbf{e}$. Рисунок 2 иллюстрирует возможности движения дислокационной точки (центра дислокации) без нарушения сплошности кристаллической среды как благодаря скольжению (рис. 2(б)), так и в результате диффузии межузельных атомов или вакансий (рис. 2(в), (г)). На рис. 2(а) показана дислокация с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1$ и линией скольжения (орт \mathbf{e}) между горизонтальными рядами атомов 3 и 4, ей соответствует оборванный вертикальный атомный ряд 4. На рис. 2(б) центр этой дислокации в результате малых (по сравнению с $|\mathbf{b}|$) смещений атомов в ее ядре получил смещение вдоль линии скольжения $\delta \mathbf{r}^d = \mathbf{b} = b\mathbf{e}$, а оборванным оказался вертикальный ряд атомов 5: этот процесс представляет собой элементарный акт механического скольжения в 2D кристалле.

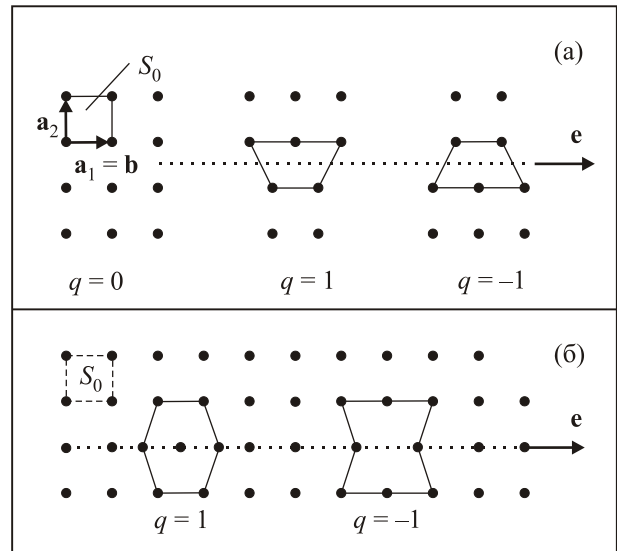


Рис. 1. Схематическое изображение атомной структуры дислокаций и краудионов вблизи их центров, сплошными линиями выделены ядра дефектов: (а) — фрагмент регулярного кристалла ($q = 0$), положительная ($q = 1$) и отрицательная ($q = -1$) дислокации; (б) — положительный ($q = 1$) и отрицательный ($q = -1$) краудион; \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , S_0 — базисные векторы кристалла и элементарная решеточная площадь, \mathbf{e} и $\mathbf{b} = b\mathbf{e} = \mathbf{a}_1$ — орт линии скольжения и элементарный вектор трансляции вдоль нее.

Рисунки 2(в), (г) иллюстрируют принципиально иной механизм движения дислокации, которое происходит в направлении, ортогональном вектору \mathbf{e} : на рис. 2(в) диффузионный скачок крайнего атома в оборванном вертикальном ряду 4 на расстояние порядка $|\mathbf{b}|$ в межузелье одной из соседних элементарных ячеек приводит к перемещению центра дислокации $\delta \mathbf{r}^d \perp \mathbf{e}$, что сопровождается также и перемещением линии скольжения на расстояние h между горизонтальными рядами атомов (для квадратной решетки $h = |\mathbf{a}_2|$). На рис. 2(г) показана схема перемещения центра дисло-

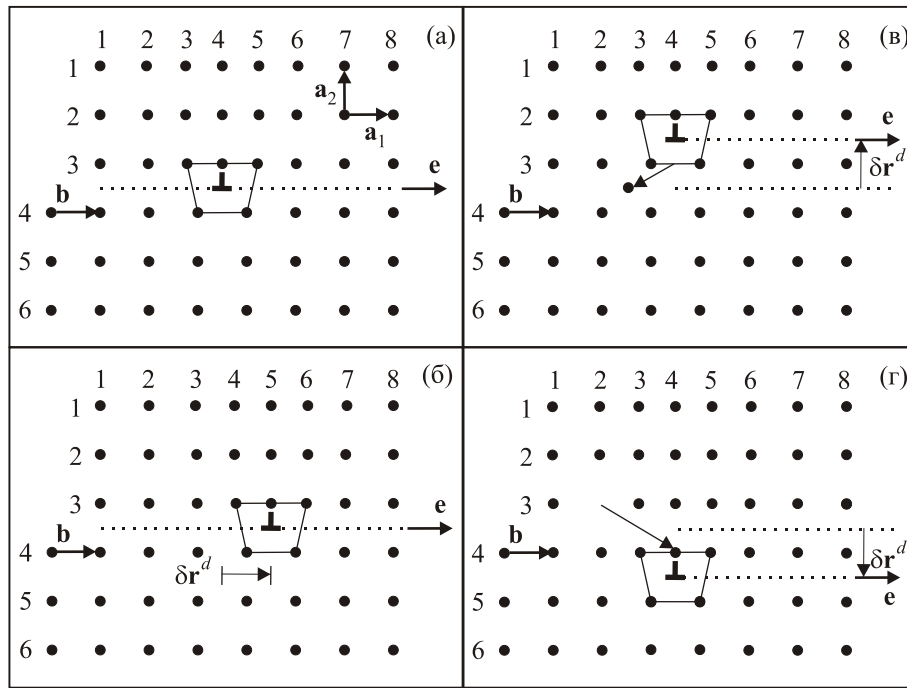


Рис. 2. Атомно-решеточные модели перемещения дислокации, сплошными линиями выделено ее ядро: \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 — базисные векторы кристалла, $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1$ — вектор Бюргера дислокации; \mathbf{e} — орт линии скольжения, $\delta \mathbf{r}^d$ — вектор перемещения центра дислокации; (а) — начальная конфигурация атомов вокруг центра дислокации; (б) — консервативное перемещение (скольжение); (в), (г) — неконсервативное перемещение (переползание).

кации в противоположном направлении в результате диффузионного скачка атома из соседнего узла на край оборванного атомного ряда 4 и образования вакансии в окрестности центра этой дислокации. Таким образом, генерация межузельных атомов или вакансий ядром дислокации в окружающую его кристаллическую матрицу приводит к перемещению центра дефекта в направлении, перпендикулярном орту линии скольжения \mathbf{e} : этот процесс является элементарным актом диффузионного переползания дислокации.

На рис. 1(б) показана атомно-решеточная модель краудиона в 2D кристалле и его основные кристаллогеометрические характеристики: линия скольжения с ортом \mathbf{e} и элементарная решеточная площадь S_0 . Рисунок 3 иллюстрирует два принципиально различных механизма перемещения его центра, которые также можно назвать скольжением (рис. 3(б)) и переползанием (восхождением) (рис. 3(в), (г)). На рис. 3(а) показан краудион в горизонтальном плотноупакованном ряду атомов 4 с ортом линии скольжения \mathbf{e} и периодом трансляций $\mathbf{b} = b\mathbf{e} = \mathbf{a}_1$. Рисунок 3(б) иллюстрирует перемещение центра краудиона $\delta \mathbf{r}^c = \mathbf{b}$ вдоль этой же линии скольжения в результате малых смещений атомов в его ядре: этот процесс является элементарным актом скольжения краудиона. Рисунки 3(в), (г) иллюстрируют возможность перемещения центра краудиона $\delta \mathbf{r}^c \perp \mathbf{e}$, при этом линия скольжения также смещается на расстояние h между соседними плотноупакованны-

ми рядами атомов: $|\delta \mathbf{r}^c| = h$ (для квадратной решетки $h = |\mathbf{a}_2|$). Такое перемещение требует диффузионного скачка атома из ядра краудиона в междоузлие соседнего плотноупакованного ряда атомов: этот процесс будем рассматривать как элементарный акт переползания (восхождения) краудиона. Отметим, что в отличие от процесса восхождения дислокации такое движение краудиона не сопровождается генерацией межузельных атомов или вакансий центром дефекта в окружающую его кристаллическую матрицу.

Важно подчеркнуть, что, рассматривая атомные модели краудиона (рис. 1(б)) и его перемещения в кристалле (рис. 3), мы предполагаем, что этот дефект является устойчивым нелинейным возбуждением в плотноупакованном атомном ряду и его атомная структура сохраняется как при скольжении, так и при переползании. Из рассмотрения исключаются более сложные процессы конверсии [7]: для положительного краудиона — уход межузельного атома из плотноупакованного ряда в междоузлие другого типа; для отрицательного краудиона — заполнение вакансии в плотноупакованном ряду каким-либо атомом.

В заключение данного раздела выскажем еще несколько замечаний относительно подвижности дефектов дислокационного и краудионного типов при их консервативном и неконсервативном движении как в 3D, так и 2D кристаллах. Выше мы уже отмечали, что перемещение дефекта вдоль линии скольжения на одно

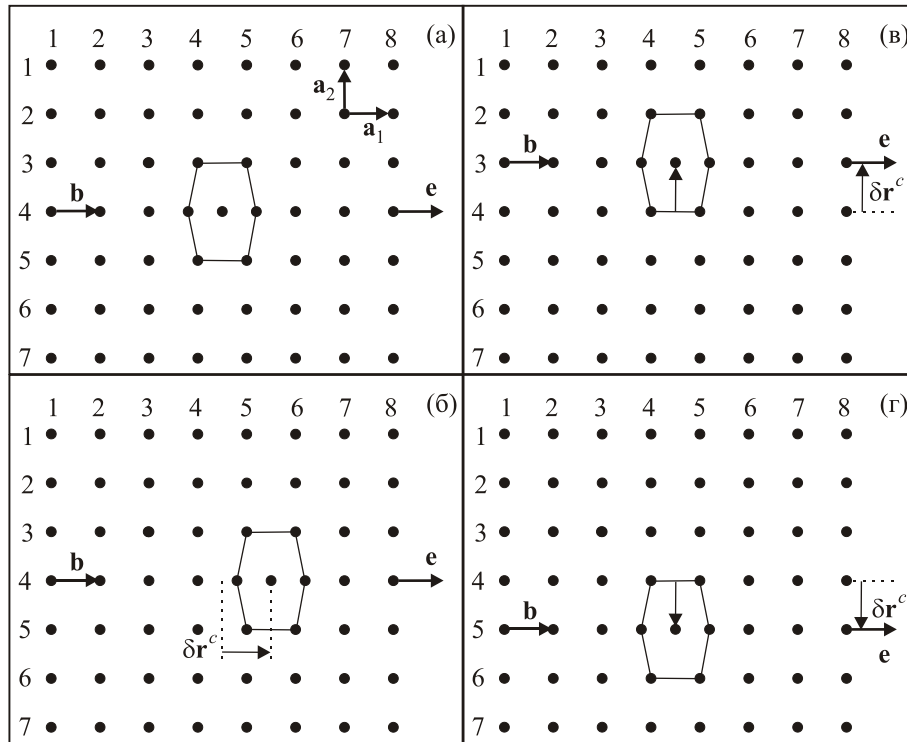


Рис. 3. Атомно-решеточные модели перемещения краудиона, сплошными линиями выделено его ядро: \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 — базисные векторы кристалла, $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1 = e\mathbf{a}_1$ — период трансляции и орт линии скольжения, $\delta\mathbf{r}^c$ — вектор перемещения центра краудиона; (а) — начальная конфигурация атомов вокруг центра краудиона; (б) — консервативное перемещение (скольжение); (в), (г) — неконсервативное перемещение (переползание).

межатомное расстояние $|\mathbf{b}|$ сопровождается малыми по сравнению с $|\mathbf{b}|$ коллективными смещениями атомов в его ядре. Такой коллективный процесс требует преодоления сравнительно малых потенциальных барьеров (так называемых барьеров Пайерлса [4–6]): эти барьеры на несколько порядков ниже барьеров, которые препятствуют перемещениям отдельного атома между узлами и междоузлиями кристаллической структуры (активационные барьеры для процессов самодиффузии). Это означает, что скольжение дефектов может происходить под действием сравнительно малых сил [4–6]: пластическая деформация кристалла, обусловленная скольжением дислокаций или краудионов, может протекать под действием механических напряжений $\sigma \ll \mu$, где μ — модуль сдвига. Этот вывод — один из фундаментальных результатов физики пластичности кристаллических материалов, он давно известен в теории 3D кристаллов и сохраняется при рассмотрении пластичности 2D кристаллов.

Перемещение дислокации или краудиона на межатомные расстояния в направлении, перпендикулярном \mathbf{e} , сопровождается смещениями отдельных атомов на расстояния порядка $|\mathbf{b}|$, поэтому оно требует преодоления потенциальных барьеров, сопоставимых по величине с энергией активации для процессов самодиффузии. При значениях деформирующего напряжения $\sigma \ll \mu$ пластическая деформация кристалла,

обусловленная неконсервативным движением дефектов, может протекать только благодаря термической активации (как и самодиффузия) при достаточно высоких температурах [4–6].

3. Континуальное описание дислокаций и краудионов в 2D кристалле как точечных носителей пластической деформации

При континуальном описании механических свойств двумерных кристаллических структур, показанных схематически на рис. 1–3, им ставится в соответствие бесконечно тонкая анизотропная пленка, которая способна к продольным и изгибным деформациям [3]. Будем считать, что недеформированная пленка заполняет плоское пространство R^2 , а при описании деформаций воспользуемся прямоугольной системой координат в этом пространстве (x_1, x_2) (рис. 4). Положение отдельной точки в таком 2D континууме задается ее радиус-вектором $\mathbf{r} = \{x_1, x_2\}$, а деформированному состоянию соответствуют поля смещений точек континуума $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \{u_1, u_2\}$ в плоскости R^2 (продольные деформации) и смещений $\mathbf{w}(\mathbf{r}) = s\mathbf{w}(\mathbf{r})$ в перпендикулярном направлении (деформации изгиба); здесь \mathbf{s} — орт нормали к плоскости R^2 , который связан с координатами (x_1, x_2) правилом правого винта. Для характеристики продольных деформаций будем также рассматривать тензорные поля дистор-

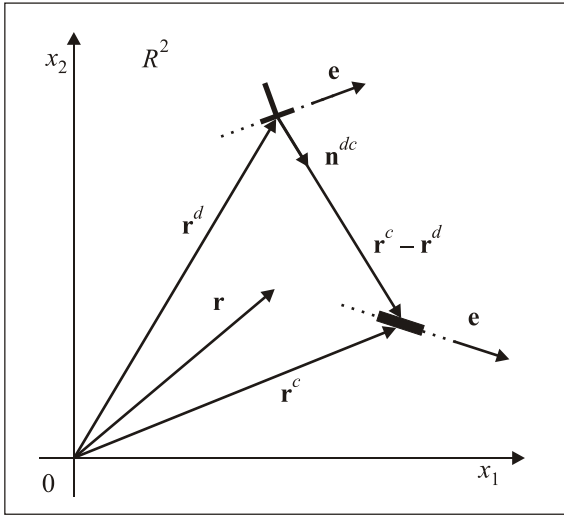


Рис. 4. Система координат и расположение дефектов в плоскости кристалла: \mathbf{r} — координата точки в недеформированном 2D континууме; \perp , \mathbf{r}^d — символ и радиус-вектор дислокации; \blacksquare , \mathbf{r}^c — символ и радиус вектор краудиона; \mathbf{e} — орт линии скольжения дефекта; \mathbf{n}^{dc} — орт направления от центра дислокации к центру краудиона.

сий $u_{ik}(\mathbf{r})$ и деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r}) = (u_{ik} + u_{ki})/2$. В тех областях континуума, где поле смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ однозначно и непрерывно, $u_{ik}(\mathbf{r}) = \nabla_i u_k$ ($\nabla_i = \partial / \partial x_i$).

Предполагается, что в рассматриваемом анизотропном 2D континууме могут происходить без нарушения его сплошности продольные деформации двух типов: упругие дисторсии $u_{ik}(\mathbf{r})$ и пластические дисторсии $u_{ik}^P(\mathbf{r})$. Условием сохранения сплошности континуума при продольных деформациях являются соотношения совместности для компонент тензора полной деформации $\varepsilon_{ik}^T(\mathbf{r})$ [8,9]

$$\varepsilon_{ik} \varepsilon_{nm} \nabla_i \nabla_m \varepsilon_{kn}^T = 0, \quad (1)$$

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

Здесь $u_{ik}^T(\mathbf{r})$ — однозначная и непрерывная вместе с производными до второго порядка функция координат, символ ε_{ik} обозначает единичный антисимметричный тензор в пространстве R^2 ($\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 0$, $\varepsilon_{12} = 1$, $\varepsilon_{21} = -1$), а по повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование. Отметим, что $\varepsilon_{in} \varepsilon_{kn} = \delta_{ik}$ — символ Кронекера.

В континуальной теории собственных дефектов кристалла весьма важную роль играет одно из следствий соотношений совместности (1): возможность ввести в односвязной области однозначное и непрерывное поле полных смещений $\mathbf{u}^T(\mathbf{r})$, производные от которого определяют компоненты тензора полных дисторсий $u_{ik}^T(\mathbf{r}) = \nabla_i u_k^T(\mathbf{r})$ [8,9]. Это следствие будет использовано в разд. 4.

При континуальном описании пластических деформаций кристалла условие совместности (1) дополняется также предположением, что эти деформации не приводят к появлению в кристаллической среде каких-либо дополнительных сил и сохраняют возможность использовать для описания взаимодействия между соседними фрагментами 2D кристалла однозначное тензорное поле внутренних механических напряжений $\sigma_{ik}(\mathbf{r})$ [сила/длина] [3]. При этом тензор $\sigma_{ik}(\mathbf{r})$ однозначно связан с локальными значениями тензора упругих деформаций $\varepsilon_{ik}(\mathbf{r})$ и удовлетворяет условию механического равновесия среды

$$\nabla_k \sigma_{ik}(\mathbf{r}) + F_i^e(\mathbf{r}) = 0, \quad (3)$$

где $\mathbf{F}^e(\mathbf{r})$ — двумерная плотность внешних сил.

В предыдущем разделе в качестве элементарных механизмов пластической деформации 2D кристалла рассмотрено зарождение и перемещение дефектов дислокационного (рис. 2) и краудионного (рис. 3) типов. При континуальном описании такой деформации каждому типу дефектов ставится в соответствие тензор пластической дисторсии $u_{ik}^P(\mathbf{r})$: он должен быть согласован с атомно-решеточными моделями дефектов (рис. 1) и адекватно отражать топологию и локальную геометрию создаваемых ими искажений структуры кристалла [1,2]. С точки зрения микроскопической физики кристаллов главная особенность дефектов обоих типов — возможность их зарождения и относительно легкого перемещения на линиях скольжения вдоль плотноупакованных атомных рядов, а также специфическая атомная структура ядер дефектов (рис. 1–3). Поэтому в качестве главных кристаллогеометрических характеристик дефекта рассматриваются радиус-вектор его центра $\mathbf{r}^{d,c}$, орт линии скольжения \mathbf{e} , соответствующий период решеточных трансляций $\mathbf{b} = b\mathbf{e}$, и элементарная решеточная площадь S_0 .

В континуальной механике 2D кристаллов центр дефекта является сингулярным «источником» полей упругих деформаций и напряжений, а его перемещение сопровождается изменением поля пластических дисторсий. Такая роль центра дефекта характеризуется его топологическим зарядом [1,2]: для дислокации это двухкомпонентный вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \{b_1, b_2\}$, а для краудиона — четырехкомпонентный тензор дипольного момента $D_{ik} = qS_0 \varepsilon_{in} e_n e_k$ или симметричный тензор $S_{ik} = \varepsilon_{ni} D_{nk} = qS_0 e_i e_k$. Топологические заряды отдельных дислокаций и краудионов будем задавать соотношениями

$$\mathbf{b} = qb\mathbf{e}, \quad S_{ik} = qS_0 e_i e_k, \quad q = \pm 1, \quad (4)$$

здесь $S_0 = \left| \varepsilon_{nk} a_n^{(1)} a_k^{(2)} \right|$ — площадь элементарной ячейки 2D кристалла с базисными векторами $\mathbf{a}^{(1)}$ и $\mathbf{a}^{(2)}$, а q — знак дефекта (см. рис.1).

В данном разделе мы обсудим более детально, чем в статье [1], изменения поля пластических дисторсий $u_{ik}^P(\mathbf{r})$ при перемещениях центров дефектов \mathbf{r}^d или \mathbf{r}^c . Результаты такого обсуждения создают исходные предпосылки для разработки последовательной теории дислокационной и краудионной пластической деформации как раздела континуальной механики двумерных кристаллов. Они также будут использованы в разд. 4 при анализе взаимодействия дефектов с полем упругих напряжений.

3.1. Перемещение дислокации

На рис. 5 показана схема перемещения дислокации в 2D континууме. Для описания изменений (вариаций) поля пластической дисторсии $\delta u_{ik}^P(\mathbf{r})$, обусловленных этим перемещением, удобно использовать две системы координат — основную $x_1 0x_2$ и вспомогательную $z_1 0z_2$. Пусть $\mathbf{r}^d = \{x_1^d, x_2^d\}$ и $\delta \mathbf{r}^d = \{\delta x_1^d, \delta x_2^d\}$ — начальные координаты и смещения дислокационной точки в основной системе координат. Вспомогательные координаты выбраны так, что ось $0z_1$ направлена вдоль смещения $\delta \mathbf{r}^d$, и в ней координаты дислокационной точки $\mathbf{r}^d = \{0, 0\}$, а смещение $\delta \mathbf{r}^d = \mathbf{k} \delta z_1^d$, где \mathbf{k} — орт оси $0z_1$.

Переходя к вычислению $\delta u_{ik}^P(\mathbf{r})$, напомним, что дислокация с заданными кристаллогеометрическими характеристиками \mathbf{r}^d и \mathbf{b} может быть создана в 2D

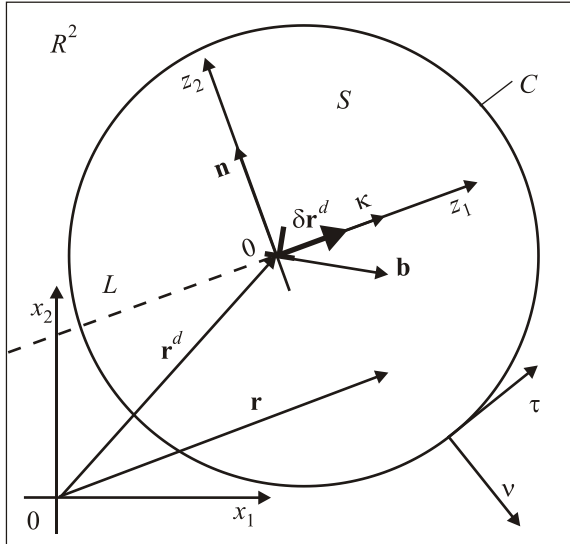


Рис. 5. Континуальная модель перемещения дислокации (\perp) с вектором Бюргерса \mathbf{b} : $\mathbf{r} = \{x_1, x_2\}$ — двумерный радиус-вектор точек в плоскости кристалла относительно системы координат $x_1 0x_2$; \mathbf{r}^d и $\delta \mathbf{r}^d$ — радиус-вектор дислокационной точки и вектор ее смещения; $z_1 0z_2$ — вспомогательная система координат с ортами осей \mathbf{k} и \mathbf{n} ; L — линия разреза упругой 2D среды на интервале $(-\infty, 0)$ оси $0z_1$; S и C соответственно область и контур интегрирования в формуле (5); τ и ν — орты касательной и внешней нормали к контуру C .

кристалле бесконечно большим числом способов, каждому из которых соответствует конкретный вид поля пластических дисторсий $u_{ik}^P(\mathbf{r})$. Единственное топологическое требование к конфигурации этого поля — интегральное соотношение [1]

$$\oint_C dl \tau_k u_{ki}^P(\mathbf{r}) = -b_i, \quad \mathbf{r}^d \in S, \quad (5)$$

где S и C — соответственно произвольная двумерная область и охватывающий ее замкнутый контур вокруг дислокационной точки (рис. 5). Другими словами, это означает, что пластическая деформация не является функцией состояния кристаллического материала, а зависит от способа образования или движения дислокации. Однако такая неоднозначность связи поля пластических дисторсий дислокации с ее кристаллогеометрическими параметрами исчезает при вычислении вариаций этого поля: при заданных параметрах \mathbf{r}^d и \mathbf{b} смещения $\delta \mathbf{r}^d$ определяют $\delta u_{ik}^P(\mathbf{r})$ однозначно.

Одна из простейших возможностей выбора поля $u_{ik}^P(\mathbf{r})$, удовлетворяющего условию (5), — задание его в виде δ -образной сингулярности на произвольной гладкой линии L , которая выходит из точки дислокации \mathbf{r}^d и уходит на бесконечность; этот выбор соответствует образованию дислокации в 2D кристалле по схеме Вольтерра [1]. Например, в качестве линии L будем рассматривать интервал $(-\infty, 0)$ оси $0z_1$ (рис. 5), тогда в координатах $(z_1 0z_2)$ пластическую дисторсию можно определить соотношением [1]

$$u_{ik}^P(z_1, z_2) = n_i b_k \Theta(-z_1) \delta(z_2), \quad (6)$$

где b_k — компоненты вектора Бюргерса в этой системе координат, \mathbf{n} — орт оси $0z_2$, а $\Theta(z)$ и $\delta(z) = d\Theta(z)/dz$ — единичные функции Хевисайда и Дирака соответственно. Согласно (6), изменение δu_{ik}^P в результате смещения дислокационной точки δz_1^d равно

$$\delta u_{ik}^P = n_i b_k \delta(z_2) [\Theta(-z_1 + \delta z_1^d) - \Theta(-z_1)].$$

При бесконечно малых смещениях $\delta z_1^d = dz_1^d \rightarrow 0$ можно воспользоваться заменой $d\Theta = \Theta(-z_1 + dz_1^d) - \Theta(-z_1) = \Theta(z_1) - \Theta(z_1 - dz_1^d) = \delta(z_1) dz_1^d$. В результате получим дифференциальные соотношения, которые однозначно определяют локальные изменения полей пластических дисторсий и деформаций при заданных смещениях дислокационной точки:

$$du_{ik}^P(z_1, z_2) = n_i b_k \delta(z_1) \delta(z_2) dz_1^d, \quad (7)$$

$$d\varepsilon_{ik}^P(z_1, z_2) = \frac{1}{2} (du_{ik}^P + du_{ki}^P) = \frac{1}{2} (n_i b_k + n_k b_i) \delta(z_1) \delta(z_2) dz_1^d. \quad (8)$$

Эти формулы описывают как консервативный, так и неконсервативный механизм дислокационной деформации. Например, перемещение дислокации с $\mathbf{b} = \{qb, 0\}$

определяет приращение пластического сдвига $du_{21}^P = qb\delta(z_1)\delta(z_2)dz_1^d$ (скольжение), а дислокации с $\mathbf{b} = \{0, qb\}$ — приращение пластической дилатации $du_{kk}^P = d\varepsilon_{kk}^P = du_{22}^P = qb\delta(z_1)\delta(z_2)dz_1^d$ (переползание).

Переход в систему координат $(x_1 0 x_2)$ выполняется согласно общим правилам тензорной алгебры [8–10]: мы рассматриваем ортогональное преобразование координат, соответствующее вращению без отражений и параллельному переносу начала координат. Учет соотношений $z_1 = x_1 - x_1^d$, $z_2 = x_2 - x_2^d$, $\delta(z_1)\delta(z_2) \rightarrow \delta(x_1 - x_1^d) \times \delta(x_2 - x_2^d) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d)$, $n_i dz_1^d = \varepsilon_{mi} \kappa_m dz_1^d \rightarrow \varepsilon_{mi} dx_m^d$ и $\varepsilon_{ik} = -\varepsilon_{ki}$, преобразует формулы (7) и (8) к виду:

$$du_{ik}^P(\mathbf{r}) = \varepsilon_{mi} b_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d) dx_m^d, \quad (9)$$

$$d\varepsilon_{ik}^P(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(b_i \varepsilon_{mk} + b_k \varepsilon_{mi})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d) dx_m^d, \quad (10)$$

где b_i — компоненты вектора \mathbf{b} в системе координат $x_1 0 x_2$.

При описании динамики или кинетики дислокационной пластической деформации 2D кристалла целесообразно ввести двухкомпонентный вектор скорости дислокационной точки $\mathbf{V}^d = \{V_1^d, V_2^d\}$, определив его соотношением $d\mathbf{r}^d = \mathbf{V}^d dt$ и считая $\mathbf{r}^d = \mathbf{r}^d(t)$ функцией времени t . В результате формула (10) преобразуется в соотношение, описывающее в квазистатическом приближении скорость изменения локальных значений пластической деформации при заданной скорости перемещения дислокации $\mathbf{V}^d(t)$:

$$\dot{\varepsilon}_{ik}^P(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \varepsilon_{ik}^P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2}(b_i \varepsilon_{mk} + b_k \varepsilon_{mi})V_m^d(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d(t)), \quad (11)$$

$$\dot{\varepsilon}_{kk}^P(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_{mk} b_k V_m^d(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d(t)). \quad (12)$$

Эти формулы описывают как чисто пластические сдвиги при движении дислокации вдоль линии скольжения ($V_i^d = e_i V^d$, $\dot{\varepsilon}_{ik}^P \neq 0$ при $i \neq k$), так и пластические дилатации при переползании ($V_i^d = \varepsilon_{ki} e_k V^d$, $\dot{\varepsilon}_{kk}^P \neq 0$). Согласно (12), при скольжении ($\mathbf{V}^d = \mathbf{e} V^d$ и $\mathbf{b} = \mathbf{e}b$) скорость пластической дилатации $\dot{\varepsilon}_{kk}^P = 0$, так как $\varepsilon_{nm} e_n e_m = 0$.

Формулы (9)–(12) устанавливают однозначную зависимость изменений пространственного распределения пластических деформаций 2D кристалла от перемещений дислокационной точки, а характерный масштаб и знак этих изменений определяется топологическим зарядом дислокации $\mathbf{b} = qb\mathbf{e}$. Так как производная $\dot{\varepsilon}_{ik}^P(\mathbf{r}, t)$ локализована в точке \mathbf{r}^d , то можно формально считать параметр \mathbf{b} характеристикой этой точки и рассматривать ее как своеобразный элементарный «носитель» пластической деформации.

3.2. Перемещение краудиона

В статье [1] показано, что при континуальном описании краудиона в 2D кристалле этот дефект формально эквивалентен точечному дислокационному диполю, который локализован в центре краудиона \mathbf{r}^c и характеризуется тензорными параметрами D_{ik} или $S_{ik} = \varepsilon_{ni} D_{nk}$ (4), которые играют роль топологического заряда данного дефекта. При сравнении топологических свойств деформированного состояния кристалла, создаваемого дислокацией и краудионом как точечными дефектами, у краудиона они оказались более простыми [1]: точке краудиона \mathbf{r}^c и его топологическому заряду S_{ik} соответствуют однозначно определенные поля пластических дисторсий и деформаций:

$$u_{ik}^P(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ik}^P(\mathbf{r}) = S_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c), \quad (13)$$

$$\varepsilon_{kk}^P(\mathbf{r}) = qS_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c). \quad (14)$$

Отсюда видно, что краудион в 2D кристалле эквивалентен анизотропному центру дилатации, а характерный масштаб дилатации определяется кристаллогеометрическим параметром — площадью элементарной ячейки S_0 (рис. 1(а)).

Изменения полей пластических дисторсий и деформаций в результате перемещений центра краудиона $\mathbf{r}^c = \{x_1^c, x_2^c\}$ можно получить прямым дифференцированием формул (13) и (14):

$$du_{ik}^P(\mathbf{r}) = d\varepsilon_{ik}^P(\mathbf{r}) = -S_{ik} \nabla_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c) dx_m^c, \quad (15)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ik}^P(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \varepsilon_{ik}^P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -S_{ik} V_m^c(t) \nabla_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c(t)). \quad (16)$$

Последняя из этих формул описывает локальное изменение скорости пластической деформации при заданном законе перемещения краудиона $\mathbf{r}^c(t)$ в плоскости 2D кристалла со скоростью $\mathbf{V}^c = d\mathbf{r}^c(t)/dt$. Эта деформация имеет дилатационную составляющую (пропорциональную qS_0), которая не зависит от взаимной ориентации вектора скорости перемещения краудиона \mathbf{V}^c и линии скольжения \mathbf{e} , т.е. одинакова для обоих способов движения – консервативного ($\mathbf{V}^c \parallel \mathbf{e}$) и неконсервативного ($\mathbf{V}^c \perp \mathbf{e}$). Данную особенность хорошо иллюстрирует атомно-решеточная схема перемещения краудиона (рис. 3). Так как производная $\dot{\varepsilon}_{ik}^P(\mathbf{r}, t)$ локализована в точке $\mathbf{r}^c(t)$, то можно считать тензор S_{ik} или параметр qS_0 характеристиками этой точки и рассматривать ее как элементарный носитель пластической деформации.

4. Действие поля внутренних напряжений на дислокации и краудионы

Одна из центральных проблем механики кристаллов с дефектами — вычисление и анализ упругих сил, действующих на отдельный дефект со стороны внутрен-

них напряжений. Эти силы обусловлены как приложенными к кристаллу внешними нагрузками, так и другими точечными или протяженными дефектами, в частности границей кристалла [4–6,11]. В континуальной теории кристаллов разработаны несколько методов решения задач такого типа. Один из прозрачных и эффективных методов — анализ функционала полной энергии деформации кристалла при последовательном учете в нем внешних полей, собственных полей дефектов и взаимодействий между ними [11]. В данном разделе этот метод мы используем при вычислении упругих сил, действующих на дефекты дислокационного и краудионного типов в 2D кристалле.

4.1. Упругие поля в 2D кристалле, созданные внешними силами и дефектами

Рассмотрим единичные дислокацию или краудион в 2D кристалле (двумерном упругом континууме), в котором также задано внешнее по отношению к дефектам статическое поле упругих деформаций $\varepsilon_{ik}^e(\mathbf{r})$ и связанное с ним поле напряжений $\sigma_{ik}^e(\mathbf{r})$. При описании внешних полей используем линейное приближение двумерной теории упругости [3], позволяющее рассматривать продольные дисторсии $u_{ik}^e(\mathbf{r})$ и поперечные смещения $w^e(\mathbf{r})$ кристалла как независимые деформационные моды: $u_{ik}^e(\mathbf{r})$ и $w^e(\mathbf{r})$ — соответственно результат действия продольных и поперечных деформирующих сил. В этом приближении деформации изгиба не влияют на образование и перемещение дефектов. Такое влияние проявляется только при описании дефектов в рамках нелинейной механики 2D кристалла [3]. Этот специфический нелинейный эффект в механике 2D кристалла будет рассмотрен в следующем разделе.

В линейной теории упругости локальные значения дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$ и соответствующих им внутренних напряжений $\sigma_{ik}(\mathbf{r})$ связаны законом Гука $\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = \lambda_{iknm} u_{nm}(\mathbf{r})$, где λ_{iknm} — тензор модулей упругости, инвариантный по отношению к перестановкам индексов $ik \leftrightarrow nm$, $ik \leftrightarrow ki$, $nm \leftrightarrow mn$.

Рассмотрим кристалл достаточно больших, но конечных размеров, занимающий в недеформированном состоянии плоскую область S , ограниченную контуром C с ортами внешней нормали \mathbf{v} и касательной $\boldsymbol{\tau}$ (рис. 6). Будем считать, что дисторсии $u_{ik}^e(\mathbf{r})$ являются результатом действия на кристалл продольных сил $\mathbf{F}^e(\mathbf{r}) = \mathbf{P}(\mathbf{r}^B) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^B)$, которые распределены вдоль его границы C в точках $\mathbf{r} = \mathbf{r}^B$ с линейной плотностью $\mathbf{P}(\mathbf{r}^B)$ и равны нулю внутри области S . Согласно условиям равновесия (3), создаваемые этими силами напряжения $\sigma_{ik}^e(\mathbf{r})$ должны внутри области S удовлетворять уравнению

$$\nabla_k \sigma_{ik}^e(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{r} \in S, \quad (17)$$

а на контуре C граничным условиям

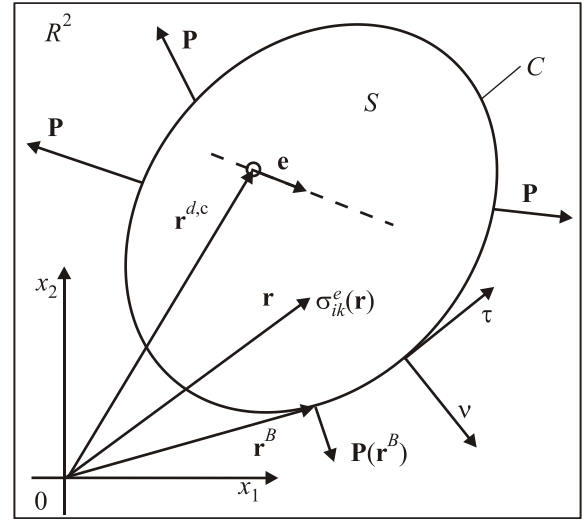


Рис. 6. Фрагмент 2D кристалла, занимающий в недеформированном состоянии плоскую область S с границей C ; \mathbf{r}^B — радиус-вектор точек границы C ; $\boldsymbol{\tau}$ и \mathbf{v} — орты касательной и внешней нормали к границе C ; \mathbf{o} и $\mathbf{r}^{d,c}$ — символ и радиус-вектор центра дефекта (дислокации или краудиона); \mathbf{e} — орт линии скольжения дефекта; $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{r}^B)$ — линейная плотность внешних сил на границе кристалла; $\sigma_{ik}^e(\mathbf{r})$ — поле напряжений, создаваемое силами $\mathbf{P}(\mathbf{r}^B)$ во внутренних точках \mathbf{r} кристалла.

$$\sigma_{ik}^e(\mathbf{r}^B) \nu_k(\mathbf{r}^B) = P_i(\mathbf{r}^B). \quad (18)$$

Появление в кристалле дислокации или краудиона создает дополнительное поле упругих дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r})$, которое определяется уравнениями [1]:

$$\varepsilon_{nm} \nabla_n u_{mi}(\mathbf{r}) = \alpha_i^{d,c}(\mathbf{r}), \quad (19)$$

$$\nabla_k \sigma_{ik}(\mathbf{r}) = \lambda_{iknm} \nabla_k u_{nm}(\mathbf{r}) = 0. \quad (20)$$

Для единичных дефектов

$$\alpha_i^d(\mathbf{r}) = b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^d), \quad \alpha_i^c(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nk} S_{ni} \nabla_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c). \quad (21)$$

Отметим, что в векторные поля $\alpha_i^{d,c}(\mathbf{r})$ имеют смысл двумерной плотности топологического заряда, локализованного на центре соответствующего дефекта. Именно эта локализация обеспечивает главное топологическое свойство создаваемых дефектами упругих дисторсий в 2D кристалле: это однозначно определенное дальнедействующее поле, которое в бесконечно протяженном кристалле имеет вид $u_{ik}(\mathbf{r}) = u_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{d,c})$, где центр дефекта $\mathbf{r}^{d,c}$ является точкой сингулярности [1,2]. В кристалле конечных размеров (рис. 6) конфигурация поля $u_{ik}(\mathbf{r}) = u_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})$ усложняется учетом расположения дефекта по отношению к границе C , но сингулярность в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}^{d,c}$ естественно сохраняется.

Создаваемые дефектами упругие дисторсии $u_{ik}(\mathbf{r}) = u_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})$ и напряжения $\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = \lambda_{iknm} u_{nm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})$ будем рассматривать как решения уравнений (19), (20)

в кристалле со свободной границей, которые удовлетворяют граничным условиям

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}^B) \nu_k(\mathbf{r}^B) = \lambda_{iknm} u_{nm}(\mathbf{r}^B, \mathbf{r}^{d,c}) \nu_k(\mathbf{r}^B) = 0. \quad (22)$$

Сложное деформированное состояние кристалла, созданное внешними силами и дефектами, описывается системой линейных уравнений, поэтому его можно характеризовать суперпозицией упругих дисторсий $u_{ik}^e(\mathbf{r}) + u_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})$ внутри области S и малых упругих смещений $\mathbf{u}^e(\mathbf{r}^B) + \mathbf{u}(\mathbf{r}^B, \mathbf{r}^{d,c})$ на границе C .

4.2. Общая характеристика взаимодействия дефектов с полями внутренних напряжений

Согласно общим правилам механики кристаллов [11,12], для вычисления упругих сил, действующих на центр дефекта $\mathbf{r}^{d,c} = \{x_1^{d,c}, x_2^{d,c}\}$, необходимо рассмотреть функционал полной упругой энергии кристалла с дефектом $U\{C; \mathbf{F}^e; \mathbf{r}^{d,c}\}$ и вычислить его вариацию δU , обусловленную бесконечно малым смещением $\delta \mathbf{r}^{d,c} = d \mathbf{r}^{d,c} \rightarrow 0$ при заданных начальной конфигурации границы кристалла C , распределениях внешних сил $\mathbf{F}^e(\mathbf{r})$, а также созданных ими полей дисторсий и напряжений.

В линейной теории упругости 2D кристалла [3] функционал полной энергии деформации, соответствующий описанному выше деформированному состоянию, определяется выражением:

$$U = \frac{1}{2} \lambda_{iknm} \int_S dS (u_{ik}^e + u_{ik})(u_{nm}^e + u_{nm}) - \oint_C dl (u_i^e + u_i) P_i. \quad (23)$$

Эта формула описывает в континуальном приближении суммарное изменение потенциальной энергии атомов вследствие малых упругих деформаций 2D кристалла: изменение энергии межатомного взаимодействия (первое слагаемое) и энергии атомов в поле внешних сил (второе слагаемое).

В функционале (23) от координат центра дефекта $\mathbf{r}^{d,c}$ зависят только создаваемые им поля $u_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})$ и $\mathbf{u}(\mathbf{r}^B, \mathbf{r}^{d,c})$, поэтому интересующую нас вариацию δU с учетом свойств симметрии тензора λ_{iknm} можно представить в виде

$$\delta U = \int_S dS (\sigma_{ik}^e(\mathbf{r}) + \sigma_{ik}^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})) \delta u_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c}) - \oint_C dl P_i(\mathbf{r}^B) \delta u_i(\mathbf{r}^B, \mathbf{r}^{d,c}) \quad (24)$$

$$\sigma_{ik}^e(\mathbf{r}) = \lambda_{iknm} u_{nm}^e(\mathbf{r}), \quad \sigma_{ik}^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c}) = \lambda_{iknm} u_{nm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c}).$$

* В пространстве R^2 переход от интеграла по области S к интегралу по контуру C сводится к формальной замене $dS \nabla_i(\dots) \rightarrow dl \nu_i(\dots) = dl \epsilon_{ik} \tau_k(\dots)$ [1].

При вычислении первого интеграла в (24) воспользуемся соотношениями $u_{ik} = u_{ik}^T - u_{ik}^P = \nabla_i u_k^T - u_{ik}^P$, где $\mathbf{u}^T(\mathbf{r})$ — однозначное и непрерывное поле полных смещений (см. разд. 3). В результате получим

$$\delta u_{ik} = \delta u_{ik}^T - \delta u_{ik}^P = \nabla_i (\delta u_k^T) - \delta u_{ik}^P. \quad (25)$$

После подстановки (25) в (24) отдельно рассмотрим интеграл

$$I = \int_S dS (\sigma_{ik}^e + \sigma_{ik}^B) \nabla_i (\delta u_k^T) = \int_S dS \nabla_i [(\sigma_{ik}^e + \sigma_{ik}^B) (\delta u_k^T)] - \int_S dS (\nabla_i \sigma_{ik}^e + \nabla_i \sigma_{ik}^B) \delta u_k^T.$$

В этой формуле второе слагаемое равно нулю вследствие условий равновесия (17) и (20) для напряжений, создаваемых внешними силами и дефектами соответственно, а первое слагаемое можно преобразовать в интеграл по контуру C , если воспользоваться двумерным аналогом теоремы Остроградского-Гаусса*. Учитывая после этого граничные условия (18) и (22) для значений напряжений на контуре C , получаем:

$$I = \oint_C dl (\nu_i \sigma_{ik}^e + \nu_i \sigma_{ik}^B) \delta u_k^T = \oint_C dl P_i(\mathbf{r}^B) \delta u_i^T(\mathbf{r}^B, \mathbf{r}^{d,c}). \quad (26)$$

После подстановки (25) в (24) и учета (26) вариация функционала полной упругой энергии кристалла приобретает вид

$$\delta U = - \int_S dS (\sigma_{ik}^e + \sigma_{ik}^B) \delta u_{ik}^P + \oint_C dl P_i (\delta u_i^T - \delta u_i).$$

В этой формуле интеграл по контуру C равен нулю, если центр дефекта находится на достаточно большом расстоянии от границы кристалла $|\mathbf{r}^{d,c} - \mathbf{r}^B| \gg b \approx \sqrt{S_0}$: при малых смещениях $\delta \mathbf{r}^{d,c}$ пластические смещения среды $\delta \mathbf{u}^P$ происходят только в окрестности $\mathbf{r}^{d,c}$ (рис. 5), поэтому на границе C разность $\delta u_i^T(\mathbf{r}^B) - \delta u_i(\mathbf{r}^B) = \delta u_i^P(\mathbf{r}^B) = 0$. Отличную от нуля вариацию упругой энергии кристалла дает первое слагаемое — интеграл по области S : он описывает взаимодействие дефекта с внешними напряжениями и границей.

Следует отметить, что при вычислении интеграла $\int_S dS \sigma_{ik}^B \delta u_{ik}^P$ возникает значительная трудность, обусловленная сингулярным характером поля напряжений дефекта $\sigma_{ik}^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c})$ в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}^{d,c}$ и необходимостью регуляризации такого интеграла. Данная проблема ранее обсуждалась многими исследователями при

описании дислокаций в трехмерных кристаллах [5,6,11]: в конечном итоге алгоритм регуляризации сводится к замене σ_{ik}^B на разность $\tilde{\sigma}_{ik}^B = \sigma_{ik}^B - \sigma_{ik}^\infty$, где $\sigma_{ik}^\infty = \sigma_{ik}^\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{d,c}) = \lim_{C \rightarrow \infty} \sigma_{ik}^B$ — поле напряжений дислокаций в бесконечно протяженном кристалле. Можно показать, что этот алгоритм справедлив и при описании краудиона. Его использование приводит к формуле

$$\delta U = - \int_S dS (\sigma_{ik}^e + \tilde{\sigma}_{ik}^B) \delta u_{ik}^P,$$

$$\tilde{\sigma}_{ik}^B = \sigma_{ik}^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{d,c}) - \sigma_{ik}^\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{d,c}). \quad (27)$$

В пределе бесконечно малых перемещений $\delta \mathbf{r}^{d,c} = d\mathbf{r}^{d,c} \rightarrow 0$ вариация δu_{ik}^P определяется формулой (9) для дислокаций и формулой (15) для краудиона. В обоих случаях du_{ik}^P является линейной формой от $dx_i^{d,c}$, что позволяет привести формулу (27) к виду

$$dU = -f_i dx_i^{d,c}, \quad f_i = f_i^e + f_i^B = -\nabla_i^{d,c} U,$$

$$\nabla_i^{d,c} = \frac{\partial}{\partial x_i^{d,c}}. \quad (28)$$

Здесь вектор $\mathbf{f} = \{f_1, f_2\}$ имеет смысл суммарной силы упругого происхождения, которая действует на центр дефекта $\mathbf{r}^{d,c}$: слагаемое \mathbf{f}^e описывает его взаимодействие с внешним полем напряжений; слагаемое \mathbf{f}^B — сила, действующая на дефект со стороны свободной границы кристалла S .

Отметим, что сила \mathbf{f}^B является двумерным аналогом так называемой «силы изображения», которая действует на дислокацию со стороны поверхности в трехмерном кристалле [5,11]. Ее обсуждение в данной работе имеет предварительный характер: строгое вычисление силы \mathbf{f}^B — сложная самостоятельная проблема теории дефектов в 2D кристалле, ее детальная разработка будет предметом отдельной публикации. Здесь мы ограничимся вычислением и детальным обсуждением только силы \mathbf{f}^e . Поскольку аналитический вид дифференциалов du_{ik}^P для дислокации (9) и для краудиона (15) существенно отличается, то и анализ этой силы для них следует выполнить отдельно.

4.3. Дислокация в поле напряжений

При бесконечно малых перемещениях центра дислокации $\delta \mathbf{r}^d = d\mathbf{r}^d$ соответствующее приращение dU получим, подставив (9) в (27) и выполнив операцию интегрирования с учетом свойств δ -функции:

$$dU = -\epsilon_{in} b_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}^d) dx_i^d.$$

Сравнение этого соотношения с (28) приводит к формуле

$$f_i^d(\mathbf{r}) = \epsilon_{in} b_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) = qb \epsilon_{in} e_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}), \quad (29)$$

где символ \mathbf{r} обозначает радиус-вектор центра дислокации. Эта сила пропорциональна топологическому заряду дислокации $\mathbf{b} = q\mathbf{b}e$ и значению поля напряжений в точке локализации ее центра $\mathbf{r}^d = \mathbf{r}$. Формула (29) является двумерным аналогом известной формулы Пича–Келлера для силы взаимодействия дислокационной линии с полем напряжений в 3D кристалле [5,6,11,12].

Целесообразно отдельно обсудить составляющие силы (29) вдоль линии скольжения (орт \mathbf{e}) и в перпендикулярном ей направлении (орт \mathbf{m}): первая из них ($\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^d$) вызывает консервативное движение дислокации (скольжение), а вторая ($\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d$) — неконсервативное движение (переползание). Используя соотношения $m_i = \epsilon_{ni} e_n$ и $\epsilon_{ni} \epsilon_{nk} = \delta_{ik}$, эти составляющие можно представить в виде

$$(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^d) = qb [e_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) m_n], \quad (30)$$

$$(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d) = -qb [e_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) e_n]. \quad (31)$$

Отсюда видно, что скольжение определяется действием на дислокацию сдвиговой компоненты тензора напряжений вдоль линии скольжения $e_k \sigma_{kn}^e m_n$, а восхождение — действием напряжения растяжения–сжатия вдоль линии скольжения $e_k \sigma_{kn}^e e_n$. Напряжение растяжения–сжатия вдоль нормали к линии скольжения $m_k \sigma_{kn}^e m_n$ прямого действия на движение дислокации не оказывает. Например, в системе координат с осью $0x_1$ вдоль линии скольжения орты $\mathbf{e} = \{1, 0\}$ и $\mathbf{m} = \{0, 1\}$, а соответствующие составляющие силы \mathbf{f}^d равны: $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^d) = qb \sigma_{12}^e$, $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d) = -qb \sigma_{11}^e$.

Следует обратить внимание на несколько особенностей неконсервативного движения дислокации под действием силы $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d)$: их иллюстрируют рис. 2(в), (г), где показана атомно-решеточная модель такого движения. Сила $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d)$, обусловленная растяжением кристалла $\sigma_{11}^e > 0$ вдоль линии скольжения, вызывает удлинение оборванного атомного ряда рис. 2(г) вплоть до его выхода на границу кристалла, если этот процесс обеспечивается диффузионным потоком межузельных атомов с границы к центру дислокации. Влияние сжатия кристалла $\sigma_{11}^e < 0$ вдоль линии скольжения приводит к обратному эффекту (рис. 2(в)): длина оборванного атомного ряда будет уменьшаться под действием силы $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d)$ вплоть до его выхода из кристалла при наличии диффузионного потока межузельных атомов от центра дислокации на границу.

Оба описанных выше процесса можно рассматривать как своеобразные дислокационно-диффузионные механизмы пластического течения 2D кристалла или дислокационные механизмы самодиффузии в нем, вызванные действием на кристалл механического напряжения растяжения–сжатия. Однако полное описание таких процессов выходит за рамки теории упругости: оно должно учитывать самосогласованные перемеще-

ние центра дислокации и диффузию межузельных атомов или вакансий в окружающей их кристаллической матрице [5,6,13]. Такой учет приводит к заключению, что диффузионное восхождение дислокации определяется суммарным действием на нее упругой силы (29) и дополнительной термодинамической силы, обусловленной градиентом химического потенциала межузельных атомов или вакансий вблизи центра дислокации.

4.4. Краудион в поле напряжений

При бесконечно малых перемещениях краудиона $\delta \mathbf{r}^c = d\mathbf{r}^c$ в поле внешних напряжений $\sigma_{kn}^e(\mathbf{r})$ соответствующее изменение упругой энергии dU можно найти, если подставить (15) в (27) и выполнить интегрирование, используя свойства δ -функции*:

$$dU = -S_{kn} \nabla_i^c \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}^c) dx_i^c.$$

Сравнив это соотношение с (28), получим

$$f_i^c(\mathbf{r}) = S_{kn} \nabla_i \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) = qS_0 \nabla_i [e_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) e_n], \quad (32)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}^c$ — радиус-вектор краудиона. Аналог формулы (32) для краудиона в 3D кристалле получен в работе [14].

Сила \mathbf{f}^c определяется градиентом двойного скалярного произведения тензора топологического заряда краудиона S_{ik} на тензор $\sigma_{kn}^e(\mathbf{r})$: она пропорциональна параметру qS_0 и величине градиента напряжения растяжения–сжатия $e_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) e_n$ вдоль линии скольжения в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}^c$. Например, в системе координат с осью $0x_1$ вдоль орта \mathbf{e} скольжение краудиона в этом направлении происходит под действием силы $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^c) = qS_0 \nabla_1 \sigma_{11}^e(\mathbf{r})$, переползание в перпендикулярном направлении — под действием силы $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^c) = qS_0 \nabla_2 \sigma_{11}^e(\mathbf{r})$, а компоненты напряжения σ_{12}^e и σ_{22}^e прямого силового действия на движение краудиона не оказывают.

Отметим главную особенность действия внешнего поля напряжений на краудион: сила \mathbf{f}^c отлична от нуля только в неоднородном поле $\sigma_{ik}^e(\mathbf{r})$, она вызывает перемещение положительного краудиона ($q = 1$ — делокализованный межузельный атом) в растянутую область кристалла, а отрицательного ($q = -1$ — делокализованная вакансия) — в сжатую область. Эти процессы можно рассматривать как краудионные механизмы пластического течения или самодиффузии под действием механических напряжений. В отличие от дислокационных механизмов, они могут происходить только в неоднородно деформированных областях кристалла, при этом возможно как скольжение краудиона в плотноупакованном ряду атомов, так и диффузионные скачки в поперечном ему направлении. Еще одно отличие от дислокационной деформации: такие процессы не сопровождаются макроскопическими потоками межузельных атомов или вакансий в область ядра дефекта.

* При интегрировании использовано известное свойство производной от δ -функции [15]: $\int_S dS \sigma(\mathbf{r}) \nabla_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^c) = -\nabla_i^c \sigma(\mathbf{r}^c)$.

4.5. Упругое взаимодействие между дефектами

В начале данного раздела было установлено, что при описании дислокаций и краудионов в рамках континуальной механики 2D кристаллов отдельный дефект можно рассматривать как точечный топологический заряд: во-первых, он играет роль точечного источника дальнедействующего поля напряжений; во-вторых, такой заряд испытывает действие упругой силы в поле напряжений, созданном другими источниками в месте его локализации. Эти представления можно использовать как исходные предпосылки для описания упругого взаимодействия дефектов между собой. Взаимодействие «дислокация–дислокация», «краудион–краудион» и «дислокация–краудион» можно рассматривать как полевое взаимодействие между соответствующими дефектам точечными топологическими зарядами. Аналогичные представления давно известны и широко используются в континуальной механике 3D кристаллов, но там их реализация усложнена более сложной геометрией задачи, так как вместо дислокационной точки рассматривается дислокационная линия.

Общая структура полей напряжений $\sigma_{ik}^d(\mathbf{r})$ и $\sigma_{ik}^c(\mathbf{r})$ вокруг дислокационной и краудионной точек в бесконечно протяженном упругом 2D континууме с произвольной анизотропией описана в работе [2]. В системе координат, показанной на рис. 4, соответствующие формулы можно представить в виде

$$\sigma_{ik}^d(\mathbf{r}) = \frac{qbM}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^d|} \Psi_{ik}^d(\mathbf{e}^d, \mathbf{n}^d), \quad \mathbf{r} - \mathbf{r}^d = \mathbf{n}^d \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^d \right|, \quad (33)$$

$$\sigma_{ik}^c(\mathbf{r}) = \frac{qS_0M}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^c|^2} \Psi_{ik}^c(\mathbf{e}^c, \mathbf{n}^c), \quad \mathbf{r} - \mathbf{r}^c = \mathbf{n}^c \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}^c \right|. \quad (34)$$

В этих формулах в качестве характеристики упругих свойств кристалла использован некоторый эффективный модуль упругости M [сила/длина], $\mathbf{e}^{d,c}$ — орт линии скольжения соответствующего дефекта, а $\Psi_{ik}^{d,c}$ — сложные безразмерные тензорные функции угла между ортами $\mathbf{e}^{d,c}$ и $\mathbf{n}^{d,c}$ с компонентами $|\Psi_{ik}^{d,c}| \gtrsim 1$. Явный вид полей $\sigma_{ik}^{d,c}(\mathbf{r})$ известен только для упруго изотропного 2D континуума [2], но и в этом случае соответствующие формулы довольно громоздки.

Рассмотрим три пары дефектов: дислокация–дислокация, краудион–краудион, дислокация–краудион. Радиус-векторы их центров и топологические заряды будем обозначать соответственно индексами $d1 - d2$, $c1 - c2$ и $d - c$. Согласно формулам (33), (34) и (29), (32), силы упругого взаимодействия между составляющими таких пар можно описать формулами

$$f_i^{dd} = q^{d2} b^{d2} \epsilon_{in} e_k^{d2} \sigma_{kn}^{d1} (\mathbf{r}^{d2} - \mathbf{r}^{d1}) =$$

$$= \frac{q^{d1} q^{d2} b^{d1} b^{d2} M}{|\mathbf{r}^{d2} - \mathbf{r}^{d1}|} \Psi_i^{dd} (\mathbf{e}^{d1}, \mathbf{e}^{d2}, \mathbf{n}^{dd}), \quad (35)$$

$$f_i^{cc} = q^{c2} S_0 \nabla_i [e_k^{c2} \sigma_{kn}^{c1} (\mathbf{r}^{c2} - \mathbf{r}^{c1}) e_n^{c2}] =$$

$$= \frac{q^{c1} q^{c2} S_0^2 M}{|\mathbf{r}^{c2} - \mathbf{r}^{c1}|^3} \Psi_i^{cc} (\mathbf{e}^{c1}, \mathbf{e}^{c2}, \mathbf{n}^{cc}), \quad (36)$$

$$f_i^{cd} = q^d b^d \epsilon_{in} e_k^d \sigma_{kn}^c (\mathbf{r}^d - \mathbf{r}^c) =$$

$$= \frac{q^c q^d b^d S_0 M}{|\mathbf{r}^d - \mathbf{r}^c|^2} \Psi_i^{cd} (\mathbf{e}^c, \mathbf{e}^d, \mathbf{n}^{cd}). \quad (37)$$

Здесь \mathbf{n}^{dd} , \mathbf{n}^{cc} , \mathbf{n}^{cd} — орты векторов, соединяющих центры дефектов в отдельных парах; Ψ^{dd} , Ψ^{cc} и Ψ^{cd} — безразмерные векторные функции углов между ортами, компоненты которых $|\Psi_i| \lesssim 1$.

Эти формулы описывают зависимости сил взаимодействия дефектов в отдельных парах от их знаков и абсолютных величин топологических зарядов, а также от расстояний между их центрами. Явные, но довольно громоздкие, выражения для величин $M\Psi$ можно получить для дефектов в упругоизотропных 2D кристаллах, если воспользоваться результатами работы [2].

5. Взаимодействие дислокаций и краудионов с деформациями изгиба

В линейной теории упругости 2D кристалла [3] деформации изгиба, как независимая деформационная мода, описываются уравнением для поля смещений $\mathbf{w}^e(\mathbf{r}) = \mathbf{s} w^e(\mathbf{r})$ точек кристаллической среды в направлении орта \mathbf{s} нормали к плоскости недеформированного кристалла (рис. 7):

$$d_{iknm} \nabla_i \nabla_k \nabla_n \nabla_m \mathbf{w}^e(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_s^e(\mathbf{r}), \quad (38)$$

где $\mathbf{F}_s^e(\mathbf{r}) = \mathbf{s} F_s^e(\mathbf{r})$ — двумерная плотность распределения поперечных деформирующих сил, d_{iknm} — тензор модулей изгибной упругости. Вторая независимая деформационная мода, рассмотренная в предыдущем разделе — суммарное поле продольных дисторсий $u_{ik}(\mathbf{r}) + u_{ik}^e(\mathbf{r})$, создаваемое дефектами и внешними силами $\mathbf{F}^e(\mathbf{r})$ в плоскости кристалла. Взаимное влияние продольных и изгибных деформаций — существенно нелинейный эффект, и его описание возможно только на основе уравнений нелинейной механики 2D кристаллов [3]. Взаимодействие дефектов с деформациями изгиба является одним из проявлений этого эффекта.

Наиболее простой способ решения рассматриваемой в данном разделе задачи — использование квази-

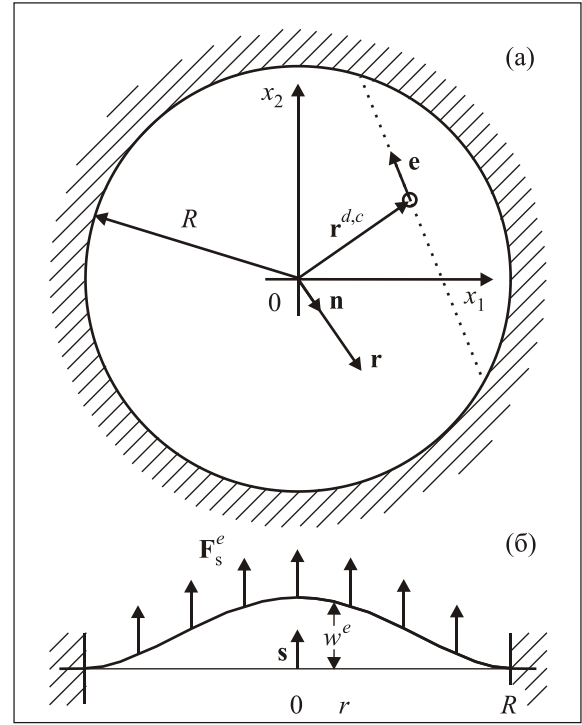


Рис. 7. Взаимодействие дислокаций и краудионов с деформациями изгиба 2D кристалла — геометрия задачи: (а) — недеформированное состояние кристалла в форме круга с радиусом R и заделанными краями, \mathbf{r} и \mathbf{n} — радиус-вектор внутренних точек и его орт, \mathbf{o} и $\mathbf{r}^{d,c}$ — символ и радиус-вектор центра дефекта (дислокации или краудиона), \mathbf{e} — орт линии скольжения дефекта; (б) — деформация изгиба кристалла под действием однородной силы с двумерной плотностью \mathbf{F}_s^e вдоль нормали \mathbf{s} к плоскости кристалла, $w^e(\mathbf{r})$ — поле смещений внутренних точек кристалла вдоль нормали \mathbf{s} .

линейного приближения в двумерной теории упругости. Оно основано на учете вклада поперечных дисторсий $\nabla_i w^e(\mathbf{r})$ в суммарное поле продольных деформаций $\tilde{\epsilon}_{ik}(\mathbf{r})$ и соответствующее им поле продольных напряжений $\tilde{\sigma}_{ik}(\mathbf{r})$ [3]:

$$\tilde{\epsilon}_{ik} = \epsilon_{ik} + \epsilon_{ik}^e + \frac{1}{2} \nabla_i w^e \nabla_k w^e, \quad (39)$$

$$\tilde{\sigma}_{ik} = \lambda_{iknm} \tilde{\epsilon}_{nm} = \sigma_{ik} + \sigma_{ik}^e + \sigma_{ik}^w, \quad (40)$$

$$\sigma_{ik}^w = \frac{1}{2} \lambda_{iknm} \nabla_n w^e \nabla_m w^e. \quad (41)$$

Приведенные выше соотношения являются частным примером учета в теории упругости так называемой геометрической нелинейности [16]. В этом приближении в качестве характеристик деформированного состояния рассматривается тензор конечных деформаций и учитывается нелинейная связь его компонент с компонентами суммарного вектора смещений $\mathbf{u}^e + \mathbf{s} w^e$. При записи выражения для тензора конечных дефор-

маций (39) мы пренебрегаем квадратичным вкладом от продольных смещений $\nabla_i u_n^e \nabla_k u_n^e$ по сравнению с $u_{ik}^e = \nabla_i u_k^e$, но сохраняем как основной нелинейный вклад квадратичную форму $\nabla_i w^e \nabla_k w^e$.

Важно также отметить, что учет геометрической нелинейности не приводит к появлению новых коэффициентов упругости, дополнительных к модулям линейной упругости λ_{iknm} и d_{iknm} [3].

Появление в формуле (40) напряжений σ_{ik}^w (41) как аддитивной добавки к полю внешних напряжений σ_{ik}^e позволяет при вычислении упругих сил, действующих на дислокацию или краудион, рассматривать $\sigma_{ik}^w(\mathbf{r})$ как одну из составляющих внешнего поля продольных напряжений в формулах (29) и (32) соответственно. В результате возникают обусловленные изгибными дилатациями $\nabla_i w^e(\mathbf{r})$ дополнительные силы $\mathbf{f}^{d,c}(\mathbf{r})$, которые действуют на центры дефектов, помещенные в точку $\mathbf{r} = \mathbf{r}^{d,c}$:

$$f_i^d(\mathbf{r}) = qb \epsilon_{in} e_k \sigma_{kn}^w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} qb \lambda_{knpm} \epsilon_{in} e_k \nabla_p w^e(\mathbf{r}) \nabla_m w^e(\mathbf{r}), \quad (42)$$

$$f_i^c(\mathbf{r}) = qS_0 \nabla_i [e_k \sigma_{kn}^e(\mathbf{r}) e_n] = \frac{1}{2} qS_0 \lambda_{knpm} e_k e_n \nabla_i [\nabla_p w^e(\mathbf{r}) \nabla_m w^e(\mathbf{r})]. \quad (43)$$

При вычислениях этих сил можно ограничиваться основным приближением теории возмущений и поле поперечных смещений $w^e(\mathbf{r})$ рассматривать как решение линейного уравнения (38). Целесообразно рассмотреть один из сравнительно простых конкретных примеров деформации изгиба 2D кристалла, позволяющий выполнить такие вычисления и получить результат в явном виде.

Пусть, например, фрагмент упруго изотропного 2D кристалла в форме круга с радиусом R жестко заделан на границе и прогибается под действием поперечной однородной силы с двумерной плотностью $\mathbf{F}_s^e(\mathbf{r}) = \text{const}$ (геометрия задачи показана на рис. 7). Изотропными упругими свойствами обладают 2D кристаллы с плоской группой симметрии $pbmm$ [17,18], для них тензоры модулей упругости λ_{iknm} и d_{iknm} можно представить в виде

$$\lambda_{iknm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{nm} + \mu (\delta_{in} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kn}), \quad (44)$$

$$d_{iknm} = \frac{1}{3} d (\delta_{ik} \delta_{nm} + \delta_{in} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kn}). \quad (45)$$

Здесь λ и μ — двумерные аналоги коэффициентов Ламэ, d — коэффициент изгибной жесткости. После подстановки (45) в уравнение для поля поперечных смещений (38) оно приобретает вид

$$d \Delta \Delta w^e(\mathbf{r}) = F_s^e(\mathbf{r}), \quad \Delta = \nabla_1 \nabla_1 + \nabla_2 \nabla_2. \quad (46)$$

Отметим, что в теории упругости 3D среды аналогичное уравнение описывает равновесный прогиб тонкой пластины под действием поперечных внешних сил. Данное обстоятельство позволяет использовать при решении интересующей нас задачи хорошо известные результаты механики тонких пластин и мембран [12,19–21].

Принимая во внимание круговую симметрию рассматриваемой задачи (рис. 7), используем систему координат с началом отсчета в центре кристалла и рассмотрим центрально симметричные решения уравнения (46) $w^e(\mathbf{r}) = w^e(r)$. В этих координатах радиальная составляющая двумерного оператора Лапласа Δ и условия закрепления на границе $r = R$ имеют вид

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right), \quad w^e(R) = 0, \quad \left. \frac{dw^e(r)}{dr} \right|_{r=R} = 0. \quad (47)$$

Решение уравнения (46) с граничными условиями (47) приведено в монографиях [12,19–21]:

$$w^e(r) = \frac{F_s^e}{64d} (R^2 - r^2)^2. \quad (48)$$

Подстановка (48) и (44) в формулу (41) позволяет получить в явном виде распределение продольных напряжений $\sigma_{ik}^w(\mathbf{r})$, возникающих вследствие деформации изгиба:

$$\sigma_{ik}^w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)^2 r^2 (\lambda \delta_{ik} + 2\mu n_i n_k), \quad \mathbf{r} = \mathbf{nr}. \quad (49)$$

Согласно (42) и (49), действие на дислокацию этих напряжений приводит к появлению силы $\mathbf{f}^d(\mathbf{r})$ и ее составляющих вдоль линии скольжения $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^d)$ и в перпендикулярном ей направлении $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d)$:

$$f_i^d(\mathbf{r}) = \frac{qb}{2} \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)^2 r^2 \epsilon_{ik} [\lambda e_k + 2\mu (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) n_k], \quad (50)$$

$$(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^d) = qb \mu \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)^2 r^2 (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}), \quad (51)$$

$$(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^d) = -\frac{qb}{2} \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)^2 r^2 [\lambda + 2\mu (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2]. \quad (52)$$

Подстановка формулы (49) в формулу (43) позволяет найти силу $\mathbf{f}^c(\mathbf{r})$ и ее составляющие $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^c)$ и $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^c)$, которые описывают действие деформаций изгиба на краудион:

$$f_i^c(\mathbf{r}) = qS_0 \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)r \times \\ \times \{ [\lambda(R^2 - 3r^2) - 4\mu r^2(\mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2] n_i + 2\mu(R^2 - r^2)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}) e_i \}, \quad (53)$$

$$(\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}^c) = qS_0 \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)r \times \\ \times [(\lambda + 2\mu)(R^2 - r^2) - 2\lambda r^2 - 4\mu r^2(\mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2](\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}), \quad (54)$$

$$(\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}^c) = qS_0 \left(\frac{F_s^e}{16d} \right)^2 (R^2 - r^2)r \times \\ \times [\lambda(R^2 - 3r^2) - 4\mu r^2(\mathbf{e} \cdot \mathbf{n})^2](\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}). \quad (55)$$

Силы $\mathbf{f}^d(\mathbf{r})$ и $\mathbf{f}^c(\mathbf{r})$ существенно неоднородны: главные особенности радиальной зависимости определяются множителем $(R^2 - r^2)r$, а детали угловых зависимостей — довольно сложными комбинациями ортов \mathbf{e} , \mathbf{n} и \mathbf{m} . В частности, все силы равны нулю в центре кристалла $r = 0$ и на его границе $r = R$. Отметим также, что для дислокации абсолютная величина силы $\mathbf{f}^d(\mathbf{r})$ максимальна на окружности с радиусом $r_0 = R/\sqrt{3}$, где достигается максимальное значение множителя $(R^2 - r^2)^2 r^2$.

Выполненный в данном разделе анализ показал, что действие на 2D кристалл поперечных сил и вызванных ими деформаций изгиба приводит к появлению сил (42) и (43), которые стимулируют движение дефектов и соответствующие процессы пластической деформации даже в отсутствие продольных деформирующих нагрузок. Рассмотренный здесь пример изгибной деформации мембраны позволяет заключить, что такую деформацию можно эффективно использовать для создания в 2D кристаллах неоднородных распределений дислокаций и краудионов: эти дефекты будут уходить из областей кристалла, в которых силы (37) и (38) имеют максимальную абсолютную величину, и накапливаться в областях, где они равны нулю.

6. Заключение

Настоящая работа — очередной этап начатого нами ранее [1,2] теоретического исследования свойств дислокаций и краудионов в 2D кристаллах. Здесь сформулированы и решены несколько задач:

— детально обсуждены атомно-решеточные модели консервативного (скольжение) и неконсервативного (переползание) движения собственных дефектов кристаллической структуры дислокационного и краудионного типов;

— показано, что при континуальном описании 2D кристалла отдельный дефект можно рассматривать как

точечный носитель пластических сдвигов и дилатаций, установлена зависимость скорости пластической деформации кристалла от скорости перемещения центра дефекта и величины его топологического заряда;

— сформулирован и реализован алгоритм описания упругого взаимодействия отдельных дефектов с полями механических напряжений, создаваемых внешними по отношению к дефектам источниками;

— в приближении линейной теории упругости установлена зависимость действующих на центры дефектов упругих сил от топологических зарядов дефектов и пространственной конфигурации напряжений;

— получены общие выражения для сил упругого взаимодействия между отдельными дефектами в кристалле с произвольной анизотропией и установлены их зависимости от величин топологических зарядов дефектов и расстояний между их центрами;

— детально описан специфический для 2D кристаллов нелинейный эффект — взаимодействие дислокаций и краудионов с деформациями изгиба и отмечена возможность его использования для создания в кристалле неоднородных дефектных структур специальных типов.

Полученные здесь результаты в совокупности с результатами работ [1–3] завершают разработку основ континуальной механики статических дефектов дислокационного и краудионного типа в 2D кристаллах, они содержат все необходимые общие предпосылки для дальнейшего развития этой проблемы путем решения множества конкретных задач частного характера.

Авторы благодарят Е.С. Сыркина за интерес к работе и полезные обсуждения.

1. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **40**, 1366 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 1063 (2014)].
2. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **41**, 271 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 207 (2015)].
3. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **39**, 690 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 534 (2013)].
4. Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).
5. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
6. А.М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова Думка, Киев (1978).
7. A. Seeger, *Phys. Status Solidi* **38**, 235 (1970).
8. А.И. Лурье, *Теория упругости*, Наука, Москва (1970).
9. К. Теодосиу, *Упругие модели дефектов в кристаллах*, Мир, Москва (1985).
10. Б.Е. Победря, *Лекции по тензорному анализу*, Изд-во Моск. ун-та, Москва (1986).
11. Дж. Эшелби, *Континуальная теория дислокаций*, Изд-во ин. лит., Москва (1963).
12. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Гл. ред. физ.-мат. лит., Наука, Москва (1965).
13. J. Weertman, *Philos. Mag.* **11**, 1217 (1965).

14. В.Д. Нацик, Е.И. Назаренко, *ФНТ* **26**, 283 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 210 (2000)].
15. И.М. Гельфанд, Г.И. Шилов, *Обобщенные функции и действия над ними*, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1959).
16. А.В. Порубов, *Локализация нелинейных волн деформации*, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2009).
17. А. Келли, Г. Гровс, *Кристаллография и дефекты в кристаллах*, Мир, Москва (1974).
18. Р.В. Галиулин, *Кристаллографическая геометрия*, Наука, Москва (1984).
19. А. Ляв, *Математическая теория упругости*, Объединенное научн. изд.-во НКТП СССР. Главная Ред. общетехнич. лит. и номографии, Москва–Ленинград (1935).
20. А.С. Вольмир, *Гибкие пластинки и оболочки*, Гос. изд-во тех.-теор. лит., Москва (1956).
21. С.П. Тимошенко, С. Войновский-Кригер, *Пластинки и оболочки*, Гл. ред. физ.-мат. лит., Наука, Москва (1966).

Dislocations and crowdions in two-dimensional crystals. Part III: Plastic deformation of a crystal as a result of movement of defects and their interaction with the field of elastic stresses

V.D. Natsik and S.N. Smirnov

This is a continuation of the theoretical study of the properties of intrinsic dislocation- and crowdion- type structural defects in 2D crystals (*Low Temp. Phys.* **40**,

1063 (2014); *Low Temp. Phys.* **41**, 207 (2015)). The atomic lattice models of the conservative (glide) and nonconservative (climb) motion of defects have been discussed comprehensively. It is shown that in the description of a 2D crystal in terms of the continuum principle an individual defect can be considered as a point carrier of plastic deformation, its quantity being determined by the topological charge which is in conformity with the crystallogometric parameters of the defect. It is found that the strain rate is dependent on the travel velocity of the center of the defect and its topological charge. The elastic forces acting upon the dislocation and crowdion centers in the field of applied mechanical stresses and the forces of the elastic defect interaction have been calculated in terms of the linear theory of elasticity of a 2D crystal. The nonlinear effect of the interaction between defects and the bending deformation of the crystalline membrane specific to 2D crystals has been considered.

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

Keywords: two-dimensional crystals, dislocations, crowdions, elastic fields, microscopic defect models, topological charge of defect, forces of defect interaction.