

Упругое поведение винтовой дислокации в стенке полый нанотрубки

© М.Ю. Гуткин, А.Г. Шейнерман

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 5 декабря 2006 г.)

Теоретически исследовано упругое поведение винтовой дислокации, залегающей в стенке полый цилиндрической нанотрубки. Поставлена и решена в напряжениях соответствующая граничная задача классической теории упругости для линейного упругого изотропного или трансверсально изотропного тела. Рассчитаны упругая энергия нанотрубки с дислокацией и сила изображения, действующая на дислокацию со стороны внутренней и внешней поверхности нанотрубки. Показано, что наличие внутренней полости приводит к качественным отличиям в распределении поля напряжений дислокации: перемене знака компонент тензора напряжений возле внутренней поверхности нанотрубки, высокой концентрации напряжения и его градиента на этой поверхности. Дислокация имеет единственное положение неустойчивого равновесия в стенке нанотрубки, которое всегда смещено к ее внутренней поверхности. По мере увеличения радиуса внутренней полости энергия дислокации уменьшается, а положение ее равновесия смещается к наружной поверхности нанотрубки, доходя в предельном случае плоской пластины до ее середины. Вблизи свободных поверхностей нанотрубки действующая на дислокацию сила изображения достигает высоких значений и способна оказывать существенное воздействие на поведение дислокации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 04-01-00211), Федерального агентства по науке и инновациям (грант Президента РФ МК-8340.2006.1) и Фонда содействия отечественной науке.

PACS: 61.46.Fg, 61.72.Lk, 62.25.+g

1. Введение

Последнее десятилетие отмечено ростом интереса к углеродным и неуглеродным нанотрубкам [1–8]. Область применения этих наноструктур простирается от электроники до конструкционных материалов. Внешний диаметр нанотрубок может составлять от единиц до десятков нанометров, а толщина их стенок — от одного до десятков атомных слоев.

Известно, что нанотрубки могут содержать дефекты структуры, которые способны оказывать определяющее влияние на их электронные свойства. Например, дефекты могут вызывать изменение радиуса нанотрубки и тем самым приводить к фазовому переходу полупроводник–металл [9]. Наиболее активно исследуемым типом дефектов в углеродных и бороазотных нанотрубках являются дефекты Стоуна–Уэльса (Stone–Wales) [10–12]. Эти дефекты представляют собой искажения атомных слоев нанотрубок, приводящие к появлению в их гексагональной сетке двух пятиугольников, разделенных двумя семиугольниками. Дефекты Стоуна–Уэльса нередко описываются в терминах дислокаций (диполей краевых дислокаций [13–15] или квадруполей клиновых дисклинаций [15], линии которых перпендикулярны поверхности нанотрубки). Образование этих дефектов является способом релаксации упругой энергии нанотрубок при их сильном продольном растяжении [13–15].

Кроме дефектов Стоуна–Уэльса в углеродных и бороазотных нанотрубках нередко наблюдается скачкообразное изменение радиусов атомных слоев (оболочек) трубок, которое может быть описано как образование краевой дислокации с линией, перпендикулярной оси

нанотрубки [16]. Наряду с дислокациями, линии которых перпендикулярны оси нанотрубок, в многослойных нанотрубках могут формироваться дефекты с линиями, направленными вдоль оси нанотрубки. Такие краевые дислокации и клиновые дисклинации можно наблюдать на поперечном сечении полый многослойной нанотрубки дисульфата вольфрама [17]. По-видимому, в стенках многослойных нанотрубок образуются и винтовые дислокации, параллельные их осям. Появление такой дислокации должно приводить к скачкообразному изменению хиральности прилегающих слоев нанотрубки.

Поскольку характерные размеры нанотрубок оказываются сопоставимы с размерами дислокационных ядер, присутствие дислокаций должно существенно сказываться на поведении и разнообразных свойствах нанотрубок. Между тем поведение и свойства самих дефектов в стенках многоослойных нанотрубок практически не исследованы. Причина в том, что для определения упругих полей и энергий дислокаций и дисклинаций, расположенных в стенках нанотрубок, требуется решение сложных граничных задач теории упругости. По-видимому, решение [18] представляет собой первую попытку приближенного аналитического расчета упругих полей и энергий прямолинейных дефектов (краевой дислокации и клиновой дисклинации) в стенках полых нанотрубок. Точное решение такой граничной задачи для этих дефектов известными методами весьма трудоемко. Однако для случая винтовой дислокации точное решение может быть получено относительно просто с помощью метода виртуальных дислокаций изображения. Такое решение позволит считать напряженно-деформированное состояние и упругую энергию нанотрубки с винтовой

дислокацией в стенке, а также найти силу, действующую на дислокацию со стороны внешней и внутренней поверхностей нанотрубки.

В первом приближении многослойные нанотрубки могут рассматриваться как трансверсально изотропные полые цилиндры. Упругие свойства таких тел изотропны в плоскости, перпендикулярной их оси, но в общем случае отличаются от их упругих свойств в направлении этой оси [19]. При этом задача расчета поля напряжений винтовой дислокации в стенке трансверсально изотропного цилиндра (а также упругой энергии такой дислокации и действующей на нее силы изображения) сводится к соответствующей задаче для упругоизотропного цилиндра простой заменой модуля сдвига упругоизотропного тела на модуль сдвига (в плоскости, параллельной оси цилиндра) трансверсально изотропного тела. Поэтому в дальнейшем при рассмотрении винтовой дислокации в стенке нанотрубки будем моделировать нанотрубку как упругоизотропный цилиндр, предполагая, что полученные решения и результаты остаются справедливыми и в трансверсально изотропном приближении.

Цель настоящей работы — решение граничной задачи теории упругости о прямолинейной винтовой дислокации в стенке бесконечного упругого изотропного или трансверсально изотропного полого цилиндра и использование этого решения для изучения упругого поведения дислокации в стенке полой нанотрубки.

2. Поле напряжений винтовой дислокации в стенке нанотрубки

Рассмотрим бесконечный упругоизотропный полый цилиндр, в стенке которого параллельно оси цилиндра расположена прямолинейная винтовая дислокация (рис. 1). Радиусы внешней и внутренней свободных поверхностей цилиндра положим равными соответственно R_1 и R_2 . В системе координат, изображенной на рис. 1, ось цилиндра имеет координату $(0, 0)$, а линия винтовой дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_z$ проходит через точку $(x_0, 0)$.

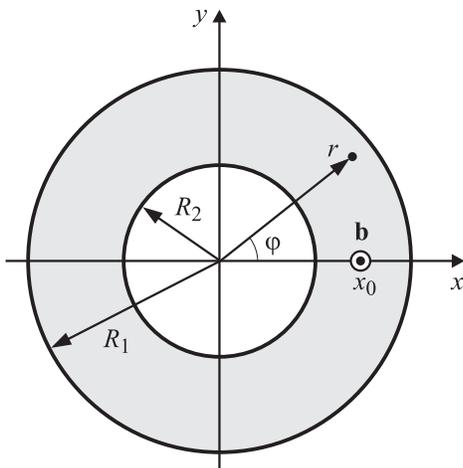


Рис. 1. Винтовая дислокация в стенке нанотрубки.

Для расчета поля напряжений σ_{ij} винтовой дислокации в такой системе используем метод бесконечных рядов дислокаций изображения, использованный ранее для расчета полей напряжений винтовой дислокации в пластине конечной толщины [20], в среде с цилиндрическими включениями [21] или в теле с двумя цилиндрическими порами (для случая, когда винтовая дислокация находится внутри одной из этих пор) [22].

В рамках этого метода поле напряжений дислокации, расположенной в стенке полого цилиндра, ищется в виде суммы поля напряжений такой дислокации в бесконечной среде и поля напряжений, создаваемого в бесконечной среде бесконечным рядом виртуальных дислокаций (ВД), называемых также дислокациями изображения. ВД располагаются внутри и снаружи цилиндра на оси x и обеспечивают выполнение граничного условия $\sigma_{rz} = 0$ на его внутренней и внешней свободных поверхностях. Здесь σ_{rz} — компонента тензора напряжений в цилиндрической системе координат (r, φ, z) , показанной на рис. 1.

Для построения системы ВД воспользуемся следующей итерационной процедурой, основанной на общей методологии использования дислокаций изображения в задачах о винтовой дислокации, смещенной с оси сплошного цилиндра [20,23,24] или расположенной вблизи цилиндрической полости в бесконечной среде [24]. На первой стадии для обеспечения выполнения граничных условий на внутренней поверхности цилиндра введем в полость цилиндра две ВД (рис. 2,а): ВД B_1 с вектором Бюргерса $-\mathbf{b}$, расположенную на расстоянии $x_1^{(B-)} = R_2^2/x_0$ от оси цилиндра, и ВД A_1 с вектором Бюргерса \mathbf{b} , лежащую на оси цилиндра. ВД B_1 снимает напряжение σ_{rz} на внутренней поверхности цилиндра. ВД A_1 не создает напряжения σ_{rz} на поверхностях цилиндра и вводится для того, чтобы суммарный вектор Бюргерса ВД внутри полости был равен нулю.

Далее для снятия напряжения σ_{rz} , создаваемого реальной дислокацией на внешней поверхности цилиндра, введем снаружи цилиндра ВД C_1 (рис. 2,а). Вектор Бюргерса ВД C_1 противоположен вектору Бюргерса реальной дислокации и равен $-\mathbf{b}$, а координата $x_1^{(C-)}$ ВД C_1 определяется соотношением $x_1^{(C-)} = R_1^2/x_0$.

Таким образом, ВД A_1 и B_1 снимают напряжение σ_{rz} , создаваемое реальной дислокацией на внутренней поверхности цилиндра, а ВД C_1 — на внешней. Однако введение ВД B_1 вновь создает напряжение σ_{rz} на внешней поверхности, а введение ВД C_1 — на внутренней.

Для снятия этих напряжений на второй стадии введем новые ВД. Сначала поместим внутрь полости ВД A_2 и B_2 с векторами Бюргерса соответственно $-\mathbf{b}$ и \mathbf{b} (рис. 2,б), устраняющие напряжение σ_{rz} от ВД C_1 на внутренней поверхности. ВД A_2 должна располагаться в центре полости, а ВД B_2 в точке $x_2^{(B+)} = R_2^2/x_1^{(C-)} = x_0(R_2/R_1)^2$. ВД A_2 при этом аннигилирует с ВД A_1 . Затем поместим снаружи цилиндра в точке $x_2^{(C+)} = R_1^2/x_1^{(B-)} = x_0(R_1/R_2)^2$ ВД C_2 с вектором Бюргерса \mathbf{b} (рис. 2,б), снимающую напряжение σ_{rz} ,

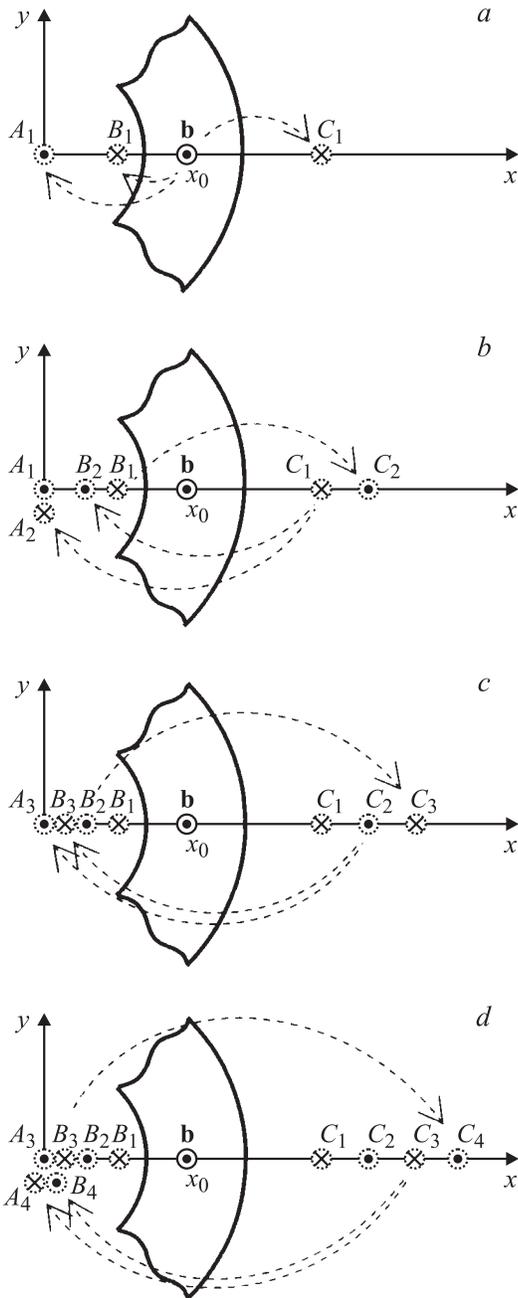


Рис. 2. Положение реальной дислокации в стенке нанотрубки и виртуальных дислокаций изображения, обеспечивающих выполнение граничных условий на внешней и внутренней поверхностях нанотрубки. *a* — ВД A_1 , B_1 и ВД C_1 снимают напряжение σ_{rz} , создаваемое реальной дислокацией соответственно на внутренней и внешней поверхности нанотрубки; *b* — ВД A_2 и B_2 снимают напряжение σ_{rz} , создаваемое ВД C_1 на внутренней поверхности нанотрубки, ВД C_2 снимает напряжение σ_{rz} , создаваемое ВД B_1 на внешней поверхности нанотрубки, ВД A_1 и A_2 аннигилируют; *c* — ВД A_3 и B_3 снимают напряжение σ_{rz} , создаваемое ВД C_2 на внутренней поверхности нанотрубки, ВД C_3 снимает напряжение σ_{rz} , создаваемое ВД B_2 на внешней поверхности нанотрубки; *d* — ВД A_4 и B_4 снимают напряжение σ_{rz} , создаваемое ВД C_3 на внутренней поверхности нанотрубки, ВД C_4 снимает напряжение σ_{rz} , создаваемое ВД B_3 на внешней поверхности нанотрубки, ВД A_3 и A_4 аннигилируют.

созданное ВД B_1 на внешней поверхности. В итоге после второй стадии получаем систему из четырех ВД (B_1 , B_2 , C_1 и C_2), которые соответствуют первой итерации ($m = 1$).

Далее на третьей стадии введем еще три ВД A_3 , B_3 и C_3 (рис. 2, *c*). ВД A_3 и B_3 снимают напряжение σ_{rz} , созданное ВД C_2 на внутренней поверхности цилиндра, а ВД C_3 — напряжение σ_{rz} , созданное ВД B_2 на его внешней поверхности. После этого на четвертой стадии введем ВД A_4 , B_4 и C_4 (рис. 2, *d*), снимающие напряжения σ_{rz} , созданные ВД B_3 и C_3 соответственно на внешней и внутренней поверхности цилиндра. ВД A_4 , введенная на четвертой стадии, аннигилирует с дислокацией A_3 , введенной на третьей стадии. В результате после четвертой стадии получаем систему из восьми ВД (B_1 – B_4 и C_1 – C_4), которые соответствуют второй итерации ($m = 2$).

Продолжая такой итерационный процесс, после каждой такой двухстадийной итерации будем получать четыре новые ВД (на каждой стадии образуется по три ВД, в сумме — шесть, но те две, которые попадают на ось цилиндра, при этом аннигилируют). Таким образом, после m -й итерации получаем четыре новые ВД с координатами $(R_2^2/x_0)q^{-2m}$, $(R_1^2/x_0)q^{2m}$, x_0q^{-2m} и x_0q^{2m} , где $q = R_2/R_1$. При этом векторы Бюргерса этих ВД соответственно равны $-\mathbf{b}$, $-\mathbf{b}$, $+\mathbf{b}$ и $+\mathbf{b}$.

Зная теперь координаты всех ВД, можем записать ненулевые компоненты полного поля напряжений σ_{ij} винтовой дислокации в стенке полый нанотрубки в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{xz} = & -\frac{Gb}{2\pi} y \left\{ \frac{1}{(x-x_0)^2+y^2} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{(x-x_0q^{-2m})^2+y^2} - \frac{1}{(x-R_2^2q^{-2m}/x_0)^2+y^2} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{(x-x_0q^{2m})^2+y^2} - \frac{1}{(x-R_1^2q^{2m}/x_0)^2+y^2} \right) \right\}, \quad (1) \\ \sigma_{yz} = & \frac{Gb}{2\pi} \left\{ \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2+y^2} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{x-x_0q^{-2m}}{(x-x_0q^{-2m})^2+y^2} - \frac{x-R_2^2q^{-2m}/x_0}{(x-R_2^2q^{-2m}/x_0)^2+y^2} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{x-x_0q^{2m}}{(x-x_0q^{2m})^2+y^2} - \frac{x-R_1^2q^{2m}/x_0}{(x-R_1^2q^{2m}/x_0)^2+y^2} \right) \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

где G — модуль сдвига.

Первые слагаемые в формулах (1) и (2) описывают напряжения, создаваемые реальной дислокацией в бесконечной среде, а слагаемые под знаком суммы представляют собой суперпозицию напряжений ВД, обеспечивающих выполнение граничных условий на поверхностях полого цилиндра.

Устремляя радиусы R_1 и R_2 к бесконечности и считая толщину нанотрубки постоянной величиной h , можно от нанотрубки перейти к тонкой плоской бесконечной пластине. Полагая $R_2 = R_1 - h$, $x \rightarrow x + x_0$, $x_0 = R_1 - l$ и $R_1 \rightarrow \infty$, из формул (1) и (2) получаем следующие

выражения для ненулевых компонент σ_{xz}^p и σ_{yz}^p винтовой дислокации в пластине:

$$\sigma_{xz}^p = -\frac{Gb}{4h} \sinh \frac{\pi y}{h} \left[\frac{1}{\cosh(\pi y/h) - \cos(\pi x/h)} - \frac{1}{\cosh(\pi y/h) - \cos(\pi(x-2l)/h)} \right], \quad (3)$$

$$\sigma_{yz}^p = \frac{Gb}{4h} \left[\frac{\sin(\pi x/h)}{\cosh(\pi y/h) - \cos(\pi x/h)} - \frac{\sin(\pi(x-2l)/h)}{\cosh(\pi y/h) - \cos(\pi(x-2l)/h)} \right]. \quad (4)$$

В формулах (3) и (4) предполагается, что винтовая дислокация находится в начале координат, а поверхности

пластины имеют координаты $x = l$ и $x = l - h$, $h \geq l$. Полученное решение (3), (4) совпадает с известным решением [25].

Решение в форме (1) и (2) удобно для численного анализа полей напряжений винтовой дислокации, расположенной в стенке полой цилиндрической нанотрубки. Например, на рис. 3 представлены карты распределения напряжений, построенные для винтовой дислокации, проходящей через точку $(x = x_0 = 30b, y = 0)$ в стенке нанотрубки с внутренним радиусом $15b$ и внешним радиусом $50b$. Значения напряжений даны в единицах $G/(200\pi)$.

Как и ожидалось, наличие свободных цилиндрических поверхностей оказывает сильное экранирующее воздействие на поля напряжений дислокации. Это проявляется как в более быстром, по сравнению со случаем

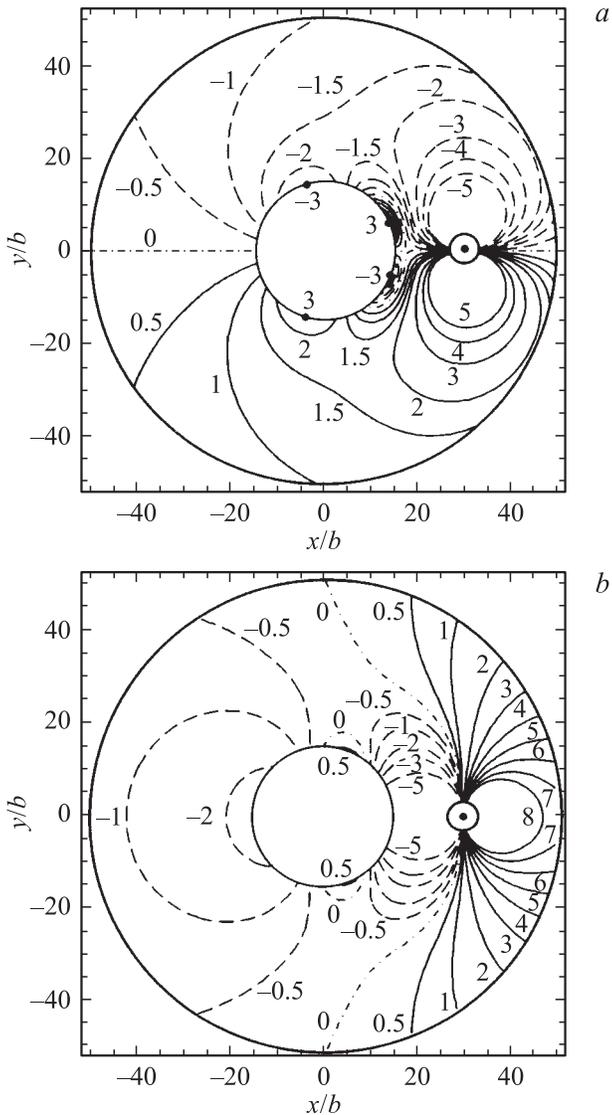


Рис. 3. Карты распределения компоненты поля напряжений $\sigma_{xz}(x, y)$ (a) и $\sigma_{yz}(x, y)$ (b) винтовой дислокации, проходящей через точку $(x = x_0 = 30b, y = 0)$ в стенке нанотрубки с внутренним радиусом $R_2 = 15b$ и внешним радиусом $R_1 = 50b$. Значения напряжений даны в единицах $G/(200\pi)$.

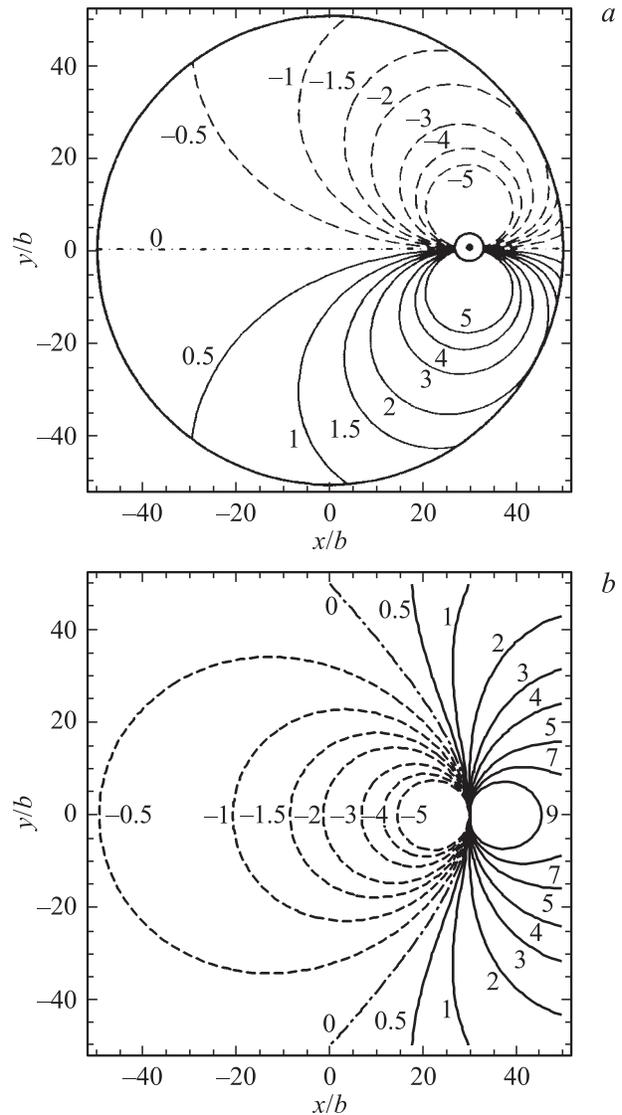


Рис. 4. Карты распределения компоненты поля напряжений $\sigma_{xz}(x, y)$ (a) и $\sigma_{yz}(x, y)$ (b) винтовой дислокации, проходящей через точку $(x = x_0 = 30b, y = 0)$ в стенке сплошной нанопроволоки радиусом $R_1 = 50b$. Значения напряжений даны в единицах $G/(200\pi)$.

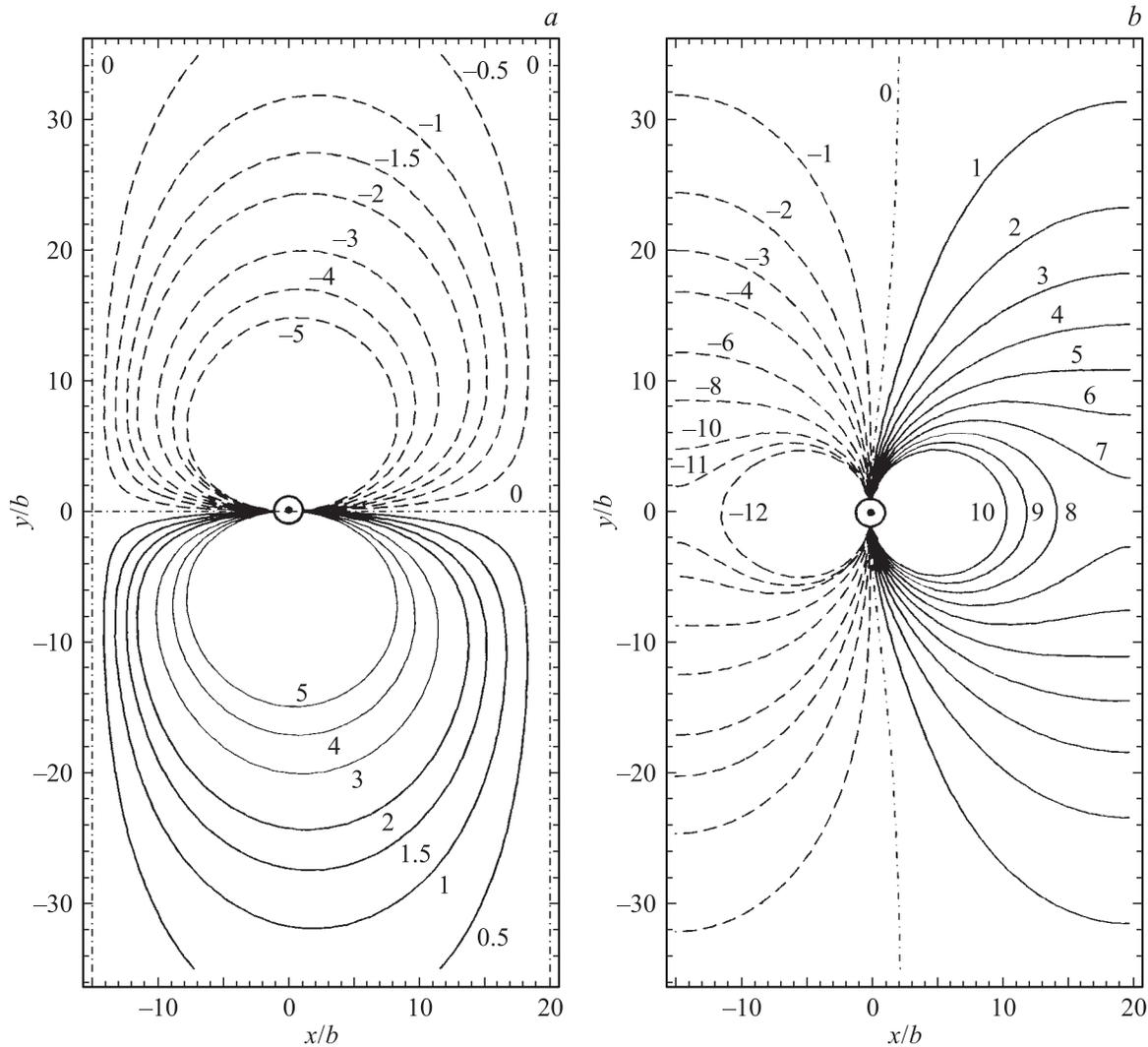


Рис. 5. Карты распределения компоненты поля напряжений $\sigma_{xz}^p(x, y)$ (a) и $\sigma_{yz}^p(x, y)$ (b) винтовой дислокации, залегающей в тонкой плоской бесконечной пластине с координатами поверхностей $x = -15b$ и $20b$. Дислокация расположена в начале координат. Значения напряжений даны в единицах $G/(200\pi)$.

бесконечной среды, убывании величины напряжений по мере удаления от дислокационной линии, так и в появлении качественных отличий в распределении поля напряжений. В частности, на рис. 3, a обращает на себя внимание знакопеременный характер распределения компоненты σ_{xz} вдоль оси x в полосе между внутренней поверхностью нанотрубки ($x = 15b$) и линией дислокации ($x = 30b$). Другая особенность этой компоненты — концентрация напряжений на внутренней поверхности цилиндра вблизи точек ($x \approx -4b, y \approx \pm 14b$) и ($x \approx 13b, y \approx \pm 5b$). Аналогично на рис. 3, b наблюдается изменение знака компоненты σ_{yz} в областях под внутренней поверхностью нанотрубки и над ней. Подобные эффекты наблюдались при детальном анализе полей напряжений краевых дислокаций в тонких упруго-однородных пленках наноскопической толщины $h = 30b$ [26] (см. также рис. 21 и 22 в [27]). Представляет интерес и довольно

неожиданный на первый взгляд результат, что поле напряжений дислокации меняется заметно быстрее в области между дислокацией и внутренней поверхностью, чем между дислокацией и внешней поверхностью. Объяснением может служить то обстоятельство, что в первой области вклады от внешней и внутренней поверхностей суммируются, а во второй области экранирующее влияние внутренней полости уже ослабевает.

Для сравнения на рис. 4 и 5 приведены карты напряжений для винтовой дислокации в сплошной нанопроволоке радиусом $50b$ и в тонкой бесконечной пластине толщиной $35b$. Как следует из рис. 4 и 5, для случая сплошной нанопроволоки и тонкой пластины эффекты изменения знака компонент σ_{xz} и σ_{yz} поля напряжений вблизи внутренней свободной поверхности и концентрации компонент σ_{xz} на свободной поверхности пропадают. Это обусловлено тем, что данные эффекты связаны с наличием в нанотрубке цилиндрической поло-

сти, которая отсутствует в сплошной нанопроволоке и пластине.

Обобщая эти результаты, можно сказать, что при континуальном описании и анализе упругого поведения дефектов в нанотрубках совершенно необходимо использовать точные решения соответствующих граничных задач теории упругости, поскольку они позволяют получать качественно новые эффекты в распределении упругих полей дефектов.

3. Упругая энергия дислокации

К числу важнейших характеристик дислокации относится ее собственная упругая энергия, которая существенно зависит от геометрии системы и соотношения упругих модулей составляющих систему материалов. Знание собственной энергии дислокации необходимо при исследовании широкого спектра проблем, в частности, вопросов, связанных с зарождением и эволюцией дислокационных ансамблей. Энергия дислокации в расчете на единицу ее длины рассчитывается по формуле [28]

$$W = \frac{b}{2} \int_{x_0+r_0}^{R_1} \sigma_{yz}(x, y=0) dx, \quad (5)$$

где r_0 — радиус ядра дислокации, а компонента поля напряжений σ_{yz} определяется выражением (2). Подставляя (2) в (5), получаем

$$W = \frac{Gb^2}{4\pi} \left\{ \ln \frac{R_1 - x_0}{r_0} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\ln \frac{R_1 - x_0 q^{-2m}}{x_0 + r_0 - x_0 q^{-2m}} + \ln \frac{R_1 - x_0 q^{2m}}{x_0 + r_0 - x_0 q^{2m}} - \ln \frac{R_1 - R_2^2 q^{-2m}/x_0}{x_0 + r_0 - R_2^2 q^{-2m}/x_0} - \ln \frac{R_1 - R_2^2 q^{2m}/x_0}{x_0 + r_0 - R_2^2 q^{2m}/x_0} \right) \right\}. \quad (6)$$

Формула (6) позволяет численно построить зависимость упругой энергии W винтовой дислокации от ее положения x_0 в стенке полого цилиндра. На рис. 6 приведены кривые $W(x_0)$ для случая $R_1 = 50b$, $r_0 = b$ и различных значений внутреннего радиуса цилиндра R_2 . Как видно из рис. 6, энергия дислокации достигает точки максимума в стенке нанотрубки. Эта точка определяет единственное положение неустойчивого равновесия дислокации. По мере увеличения внутреннего радиуса нанотрубки энергия дислокации уменьшается, а положение ее неустойчивого равновесия смещается к внешней поверхности нанотрубки. Наименьшее (нулевое) значение энергии достигается на внешней поверхности. На внутренней поверхности нанотрубки упругая энергия дислокации становится равной энергии такой же дислокации, лежащей в полости нанотрубки.

С увеличением размера внутренней полости повышается симметрия зависимости $W(x_0)$ относительно

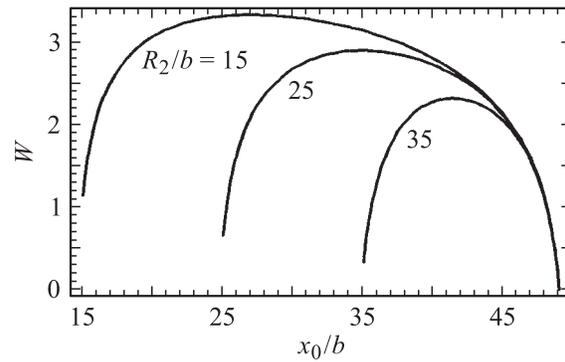


Рис. 6. Зависимость упругой энергии W винтовой дислокации от ее положения x_0/b в стенке нанотрубки с внешним радиусом $R_1 = 50b$ при различных значениях внутреннего радиуса нанотрубки R_2 . Значения энергии даны в единицах $Gb^2/(4\pi)$.

середины стенки нанотрубки. Очевидно, что в случае предельного перехода к тонкой оболочке (когда $R_1 - R_2 \ll R_1$) или, тем более, к плоской пластине (когда $R_1 \rightarrow \infty$, $R_2 \rightarrow \infty$ и $R_1 - R_2 = \text{const}$) эта зависимость становится полностью симметричной, как, например, для краевой дислокации с вектором Бюргера, перпендикулярным поверхностям такой пластины [29] (см. также рис. 25 в [27]).

Из рис. 6 также следует, что винтовая дислокация притягивается как к внутренней, так и к внешней поверхности нанотрубки. Максимальное значение энергии может рассматриваться как упругая составляющая энергетического барьера, который должна преодолеть дислокация, чтобы проникнуть в полость нанотрубки, зародившись на внешней ее поверхности, или наоборот, чтобы выйти из полости нанотрубки на ее внешнюю поверхность. Следовательно, с помощью выражения (6) для упругой энергии дислокации в стенке полой нанотрубки могут быть решены задачи об определении критических условий зарождения винтовой дислокации в нанотрубке или очистки нанотрубки от такой дислокации.

4. Сила изображения, действующая на дислокацию

Полученное общее решение (1) и (2) для поля напряжений дислокации в стенке полой нанотрубки позволяет легко исследовать силу изображения \mathbf{F} , действующую на единицу длины винтовой дислокации со стороны внутренней и внешней поверхностей нанотрубки. Проекция F_x и F_y этой силы на оси x и y (рис. 1) рассчитываются по формуле Пича-Кёлера [20], что дает

$$F_x(x_0) = b\sigma_{yz}^v(x = x_0, y = 0), \quad (7)$$

$$F_y(x_0) = -b\sigma_{xz}^v(x = x_0, y = 0), \quad (8)$$

где σ_{yz}^v и σ_{xz}^v — компоненты суммарного поля напряжений ВД изображения, обеспечивающих выполнение граничных условий на внутренней и внешней

свободных поверхностях нанотрубки. Эти компоненты получаются из формул (1) и (2) путем отбрасывания первых слагаемых, соответствующих полю напряжений винтовой дислокации в однородной бесконечной среде. Подставляя полученные таким путем выражения в (7) и (8), получаем искомые компоненты силы изображения в виде

$$F_x = \frac{Gb^2}{2\pi x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{1-q^{-2m}} + \frac{1}{1-q^{2m}} - \frac{1}{1-R_2^2 q^{-2m}/x_0^2} - \frac{1}{1-R_1^2 q^{2m}/x_0^2} \right), \quad (9)$$

$$F_y = 0. \quad (10)$$

Заметим, что равенство (10) очевидно следует из симметрии задачи относительно оси x .

Зависимости $F_x(x_0)$ для случая $R_1 = 50b$ и различных значений R_2 показаны на рис. 7. Видно, что они полностью согласуются с соответствующими кривыми для энергии дислокации на рис. 6. Так, сила изображения обращается в нуль в точке неустойчивого равновесия дислокации, которая соответствует точке максимума на зависимости $W(x_0)$ на рис. 6. Сила изображения притягивает дислокацию к внутренней и внешней поверхностям нанотрубки. На этих поверхностях сила изображения имеет классические расходимости, обусловленные использованием классической линейной теории упругости. От этих расходимостей можно избавиться, если решить эту граничную задачу, например, в рамках линейной градиентной теории упругости. Примером может служить решение задачи о винтовой дислокации у плоской границы раздела фаз с разными упругими модулями или в частном случае у свободной поверхности полупространства [30,31] (см. также рис. 4 в [27]).

Обращая внимание на численные значения силы изображения, видим, что вблизи свободных поверхностей нанотрубки она достигает очень большой величины. Например, при $R_2 = 15b$ на расстоянии $5b$ от внутренней поверхности сила изображения достигает величины порядка $Gb/60$, а на таком же расстоянии от внешней поверхности — величины порядка $Gb/30$. Это равносильно тому, что на дислокацию действует в первом случае сдвиговое напряжение порядка $G/60$, а во втором — порядка $G/30$. Такие высокие значения указывают на то, что дислокация должна испытывать очень сильное воздействие со стороны свободных поверхностей нанотрубки, причем в данном случае (при $R_1 = 50b$ и $R_2 = 15b$) притяжение к наружной поверхности нанотрубки примерно в 2 раза сильнее, чем к ее внутренней поверхности.

5. Основные результаты и выводы

Впервые детально рассмотрено упругое взаимодействие винтовой дислокации, залегающей в стенке полый цилиндрической нанотрубки, с внутренней и внешней

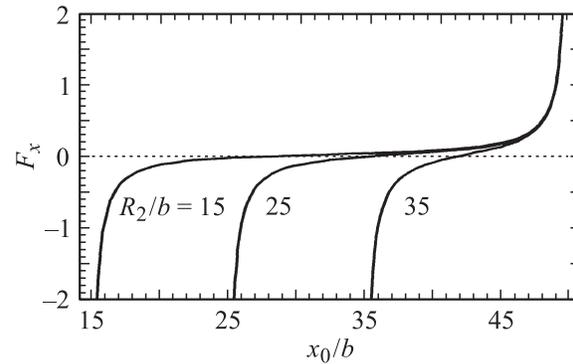


Рис. 7. Зависимости силы изображения F_x , действующей на винтовую дислокацию со стороны внутренней и внешней поверхностей нанотрубки, от положения дислокации x_0/b в стенке нанотрубки с внешним радиусом $R_1 = 50b$ при различных значениях внутреннего радиуса нанотрубки R_2 . Значения силы даны в единицах $Gb/(2\pi)$.

поверхностями нанотрубки. Поставлена и решена в напряжениях соответствующая граничная задача классической теории упругости для линейного упругого изотропного или трансверсально изотропного тела. Методом ВД изображения впервые получено точное аналитическое решение в виде бесконечных, быстро сходящихся рядов. Построены карты полей напряжений дислокации, рассчитаны и изучены упругая энергия дислокации и сила изображения, действующая на нее со стороны внутренней и внешней поверхности нанотрубки.

Показано, что свободные поверхности очень сильно влияют на упругое поведение винтовой дислокации. Обнаружены качественно новые особенности распределения полей напряжений дислокации в стенке нанотрубки: 1) изменение знака компонент σ_{xz} и σ_{yz} тензора напряжений возле внутренней поверхности нанотрубки; 2) сильная концентрация напряжения σ_{xz} на внутренней поверхности нанотрубки; 3) сильный градиент этой компоненты вблизи полости — поле напряжений дислокации меняется заметно быстрее в области между дислокацией и внутренней поверхностью, чем между дислокацией и внешней поверхностью. Анализ энергии дислокации и действующей на нее силы изображения показал, что в стенке нанотрубки дислокация имеет единственное положение неустойчивого равновесия, при смещении из которого она притягивается к свободным поверхностям нанотрубки. Это положение неустойчивого равновесия всегда смещено к внутренней поверхности нанотрубки. По мере увеличения радиуса внутренней полости энергия дислокации уменьшается, а положение ее равновесия смещается к наружной поверхности нанотрубки, доходя в предельном случае плоской пластины до ее середины. Вблизи свободных поверхностей нанотрубки действующая на дислокацию сила изображения достигает довольно высоких значений и способна оказывать существенное воздействие на поведение дислокации.

Полученное решение может использоваться для разработки моделей эволюции дислокационной структуры в

нанотрубках, в частности, для анализа критических условий зарождения винтовых дислокаций в нанотрубках или очистки нанотрубок от дислокаций, а также для изучения условий формирования и эволюции цилиндрических пор (полостей) в нитевидных кристаллах. Использованный метод ВД изображения допускает обобщение на случай упруго-неоднородных двухфазных нанопроволок (нанокабелей), состоящих из сердечника и оболочки.

Список литературы

- [1] J. Bernholc, D. Brenner, M.B. Nardelli, V. Meunier, C. Roland. *Ann. Rev. Mater. Res.* **32**, 347 (2002).
- [2] C.M. Lieber. *Mater. Res. Soc. Bull.* **28**, 486 (2003).
- [3] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Physical properties of carbon nanotubes*. Imperial College Press, London (2003). 259 p.
- [4] П. Харрис. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. Техносфера, М. (2003). 336 с.
- [5] А.И. Мелькер, Д.А. Корнилов. *ФТТ* **47**, 979 (2005).
- [6] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, А.С. Федоров. *ФТТ* **48**, 1903 (2006).
- [7] И.В. Запороцкова, Н.Г. Лебедев, П.А. Запороцков. *ФТТ* **48**, 756 (2006).
- [8] П.Н. Гевко, А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева, И.В. Юшина, U. Dettlaff-Weglikowska. *ФТТ* **48**, 947 (2006).
- [9] А.В. Елецкий. *УФН* **167**, 945 (1997).
- [10] Y. Miyamoto, A. Rubio, S. Berber, M. Yoon, D. Tománek. *Phys. Rev. B* **69**, 121 413(R) (2004).
- [11] B.I. Yakobson. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 918 (1998).
- [12] M.B. Nardelli, B.I. Yakobson, J. Bernholc. *Phys. Rev. B* **57**, R 4277 (1998).
- [13] Q. Zhao, M.B. Nardelli, J. Bernholc. *Phys. Rev. B* **65**, 144 105 (2002).
- [14] T. Dumitrică, B.I. Yakobson. *Phys. Rev. B* **72**, 035 418 (2005).
- [15] Z. Li, P. Dharap, P. Sharma, S. Nagarajaiah, B.I. Yakobson. *J. Appl. Phys.* **97**, 074 303 (2005).
- [16] C. Tang, Y. Bando, T. Sato, K. Kurashima. *Chem. Commun.* **12**, 1290 (2002).
- [17] Nanotechnology. <http://www.physorg.com/news8947.html>
- [18] М.Ю. Гуткин, А.Г. Шейнерман. В сб.: III Междунар. науч. семинар „Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)“. Программа и материалы. НовГУ им. Ярослава Мудрого, Великий Новгород (2006). С. 141.
- [19] Р. Кристенсен. Введение в механику композитов. Мир, М. (1982). 336 с.
- [20] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [21] G.P. Sendeckyj. *Phys. Stat. Sol. (a)* **3**, 529 (1970).
- [22] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. *Phys. Stat. Sol. (b)* **231**, 356 (2002).
- [23] J.D. Eshelby. In: *Dislocations in solids* / Ed. F.R.N. Nabarro. North-Holland, Amsterdam (1979). V. 1. P. 167.
- [24] J. Dundurs. In: *Recent advances in engineering science* / Ed. A.C. Eringen. Gordon & Breach. N.Y. (1967). V. 2. P. 223.
- [25] A. Seeger. In: *Encyclopedia of physics* V. VII. Pt 1. Crystal physics I / Ed. S. Flüge. Springer, Berlin-Göttingen-Heidelberg (1955). P. 383.
- [26] M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. *Phys. Stat. Sol. (a)* **125**, 107 (1991).
- [27] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Физическая механика деформируемых наноструктур. Т. II. Нанослойные структуры. Янус, СПб (2005). 352 с.
- [28] T. Mura. In: *Advances in materials research* / Ed. H. Herman. Interscience, N.Y. (1968). V. 3. P. 1.
- [29] M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. *Phys. Stat. Sol. (a)* **129**, 363 (1992).
- [30] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, Е.С. Айфантис. *ФТТ* **42**, 1609 (2000).
- [31] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, E.C. Aifantis. *Scripta Mater.* **43**, 477 (2000).