

ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИОННЫХ ДИПОЛЕЙ В ГРАФЕНЕ

Рысаева Л.Х.,^а Клявлинка А.И.,^б Баимова Ю.А.^{а,б}

^аИнститут проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук,
450001, Уфа, ул. Степана Халтурина, 39,
e-mail: lesya813rys@gmail.com

^бБашкирский государственный университет, 450076, Уфа,
ул. Заки Валиди, 32

Углерод существует во множестве модификаций с очень разнообразными физическими свойствами. Такое разнообразие обусловлено способностью углерода образовывать химические связи разного типа. Одним из уникальных модификаций является графен, представляющий плоский моноатомный слой углерода, в котором каждый атом связан валентной связью с тремя соседями и уложен в гексагональную решетку, и к настоящему моменту является одним из самых активно исследуемых и перспективных материалов из-за своих уникальных свойств¹. Одной из областей исследования являются влияние дефектов в графене на его механические и физические свойства, например, как дефект Стоуна-Троуэра-Уэльса² (СТУ) или пары дефектов (рисунок 1).

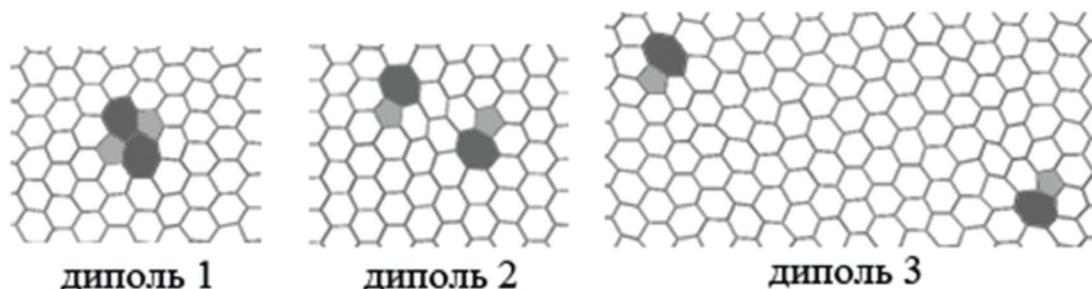


Рисунок 1. Три вида диполей в графене

В данной работе методом молекулярной динамики исследуется поведение дислокационных диполей, состоящих из пары дефектов СТУ, в графене в термодинамическом равновесии.

Литература

1. Geim A. K., Novoselov K. S. Nature Materials, 2007, 6, 183.
2. Баимова Ю.А. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013, 10, 553-557.

Работа выполнена при финансовой поддержке грант Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (МД- 1651.2018.2).