论文

石墨烯位错附近应变场的离散晶格方法研究

邵宇飞^{1*}, 杨鑫¹, 高科², 李久会³, 赵星³

1. 辽宁工程技术大学应用物理与技术研究所, 葫芦岛 125105;

2. 辽宁工程技术大学安全科学与工程学院, 葫芦岛 125105;

3. 辽宁工业大学理学院, 锦州 121001

*联系人, E-mail: yfshao@alum.imr.ac.cn

收稿日期: 2016-10-13; 接受日期: 2016-12-05; 网络出版日期: 2017-01-24

国家自然科学基金(编号: 51404126)、辽宁省自然科学基金(编号: 201602360)和辽宁省教育厅一般科学研究项目(编号: L2014135)资助

摘要 位错是石墨烯材料中的一种重要结构缺陷. 本文通过基于离散晶格方法的virial局部应变研究了石墨烯位错周围应变场. 结果表明两种原子级virial局部应变, 即无限小应变和有限应变, 与位错弹性理论预测结果吻合较好, 从而证明了virial应变分析方法的有效性. 然而这两种应变存在微小差异, 该差异可以用来显示位错芯域的原子结构. 近邻环境对这种应变差异存在影响, 根源在于不同的近邻环境对位错芯域局部变形的敏感程度不同: 与次近邻环境相比, 最近邻环境计算范围较小, 计算出的应变差异对局部变形更加敏感. 最后, 提出近邻位移参数——一种显示石墨烯位错的新方法, 该参数可以清晰地显示出石墨烯位错的5|7结构, 并能够反映出褶皱引起的结构变化.

关键词 石墨烯, 位错, 应变, 晶格**PACS:** 61.50.Ah, 61.72.Lk, 81.40.Jj

1 引言

自2004年Geim和Novoselov在实验上制备出石墨烯以来, 这种仅一层原子厚度的碳晶体材料迅速成为国际研究的热点^[1-6]. 大量研究表明理想石墨烯晶体具有许多出色的物理性能, 如高强度^[7]、高导电性^[8], 以及良好的热稳定性^[9], 可应用于晶体管^[10,11]、传感器^[12]、光电子^[13,14]等领域. 然而, 石墨烯材料的实际表现通常受到晶格缺陷的影响^[15-19]. 因此, 理解缺陷的物理性质和力学行为对石墨烯相关设备和器件的优

化设计具有重要意义.

位错作为一种重要的结构缺陷, 对石墨烯材料性能的影响日益引起人们的重视^[20-26]. 早期的工作主要集中在石墨烯位错结构、能量等性质的理论计算研究. 例如, Jeong等人^[27]分析了5|7位错在石墨烯中的稳定性, Yazyev和Louie^[28]计算了位错及晶界的热力学性质和电子结构, 王志勇等人^[29]计算了位错对石墨烯光学性能的影响. 随着技术的进步, 近年来人们尝试通过实验手段研究位错. Coraux等人^[30]在Ir基底上观察到核心为5|7结构的石墨烯位错对, Lehtinen等人^[31]通

引用格式: 邵宇飞, 杨鑫, 高科, 等. 石墨烯位错附近应变场的离散晶格方法研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 067801
Shao Y F, Yang X, Gao K, et al. Strain fields around graphene dislocations studied by discrete crystal lattice analyses (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 067801, doi: 10.1360/SSPMA2016-00429

过原位电子显微镜研究了石墨烯位错形核至湮灭的过程. 最近, Warner等人^[32]通过高分辨电子显微镜结合几何相位分析方法(Geometric Phase Analysis Method)在原子尺度上精确测量了石墨烯位错的应变场. 以上研究工作, 特别是Warner等人的发现, 极大地激发了石墨烯位错相关理论和实验的发展.

在本文的工作中, 针对Warner等人观察的石墨烯位错, 尝试通过一种原子近邻分析技术研究其芯域性质, 采用基于近邻原子坐标的virial局部应变概念计算位错周围应变场. 发现可以得到两种原子级virial局部应变, 且这两种应变存在微小差异, 该应变差异可以用来显示位错芯域的原子结构. 还提出了近邻位移参数——一种显示石墨烯位错芯域结构的新方法, 该参数对Warner等人研究的石墨烯位错显示效果很好.

2 模型构建与计算方法

2.1 石墨烯位错对的原子模型

Warner等人通过高分辨透射电子显微镜观察到具有5/7结构的石墨烯位错对(Dislocation Dipole), 并通过密度泛函理论得出该位错对的精细原子模型, 如图1所示. 模型包含3549个原子, 理想C—C键长度为0.14 nm.

2.2 应变计算

石墨烯晶体内部原子处于离散分布状态, 线元与晶格常数处于同一数量级, 晶体内部应变与变形前后原子位置有关, 因此可以按照如下方式计算应变:

图1 (网络版彩图)基于密度泛函理论计算的石墨烯位错对模型^[32], 其中蓝色原子显示出两个5/7位错核

Figure 1 (Color online) Dislocation dipole in a graphene sheet given by density functional theory^[32], the two 5/7 cores are indicated by blue atoms.

首先考虑左Cauchy-Green张量

$$B_{ij} = \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^N \left(\frac{(r_i^l - r_i^k)(r_j^l - r_j^k)}{d_0^2} \right), \quad (1)$$

其中, d_0 表示理想晶体内原子与其近邻之间的距离, l 表示原子序数, k 表示近邻序数, r_i^l, r_j^l, r_i^k 和 r_j^k 分别表示晶体内第 l 个原子及其第 k 个近邻原子的当前坐标, i 和 j 表示 x, y 和 z 笛卡尔坐标分量, N 代表近邻原子总数, λ 为常数, 将在2.3节加以讨论. 这种采用离散原子坐标的分析方法与virial应力^[33]相似, 因此 B_{ij} 又称virial应变^[34].

基于式(1), 无限小变形条件下应变张量可得

$$\varepsilon_{ij}^l = \frac{1}{2}(B_{ij} - \delta_{ij}), \quad (2)$$

有限变形条件下应变张量可得

$$\varepsilon_{ij}^f = \frac{1}{2}(\delta_{ij} - B_{ij}^{-1}), \quad (3)$$

其中, B_{ij}^{-1} 表示virial应变逆矩阵中的对应元素, 当 $i=j$, $\delta_{ij}=1$, 否则 $\delta_{ij}=0$.

此外, 位错激发的应变场还可以通过各向同性介质弹性理论予以分析^[35]. 以应变张量的 xx 分量为例

$$\varepsilon_{xx} = \frac{b}{2\pi} \left[-\frac{(y-y_0)}{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} + \frac{(y-y_0)^3 - (x-x_0)^2(y-y_0)}{2(1-\nu)((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2)^2} \right], \quad (4)$$

其中, $b=0.242$ nm, $\nu=0.186$ ^[36], 分别表示位错的柏氏矢量和泊松比, x, y 表示模型中某原子坐标, x_0, y_0 表示位错中心的坐标. 在本文的工作中, virial应变计算结果将与位错弹性理论预测结果进行比较, 从而验证virial应变概念的有效性.

2.3 λ 常数

如图2所示, 石墨烯晶体的中心原子 a 具有3个最近邻原子. 未变形时, 各最近邻原子与 a 的距离均为 a_0 , a_0 为理想C—C键长度. 从 a 指向这些最近邻原子的各个方向上, 单位矢量 ξ 沿坐标轴的分量见表1.

图2 (网络版彩图)石墨烯原子的近邻环境. 蓝色和绿色原子分别表示最近邻和次近邻原子

Figure 2 (Color online) Neighboring environment of graphene atom. Nearest and second nearest neighboring atoms are highlighted as blue and green ones.

表1 从 α 指向其最近邻原子的各单位矢量的分量

Table 1 Unit vector components to the nearest neighbors for atom α

最近邻 β	ξ_x	ξ_y
1	$\sqrt{3}/2$	$1/2$
2	$-\sqrt{3}/2$	$1/2$
3	0	-1

$$\sum_{\beta=1}^3 \xi_x^{\alpha\beta} \xi_x^{\alpha\beta} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \times \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \times \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + 0 \times 0 = \frac{3}{2}, \quad (5)$$

$$\sum_{\beta=1}^3 \xi_y^{\alpha\beta} \xi_y^{\alpha\beta} = \left(\frac{1}{2}\right) \times \left(\frac{1}{2}\right) + \left(\frac{1}{2}\right) \times \left(\frac{1}{2}\right) + (-1) \times (-1) = \frac{3}{2}, \quad (6)$$

$$\sum_{\beta=1}^3 \xi_x^{\alpha\beta} \xi_y^{\alpha\beta} = 0 \times 1 + \left(-\frac{1}{2}\right) \times \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \left(-\frac{1}{2}\right) \times \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = 0. \quad (7)$$

因此, $\sum_{\beta=1}^3 \xi_i^{\alpha\beta} \xi_j^{\alpha\beta} = \lambda \delta_{ij}$, $\lambda = \frac{3}{2}$, 即式(1)中的常数. 可以证明, λ 仅取决于晶体结构以及所考虑的近邻环境, 与选取的坐标无关.

3 计算结果及讨论

图3给出了石墨烯晶体的应变场. 可以看出, 根据virial应变概念计算出的结果与位错弹性理论预测

结果基本一致. 3个应变场均显示出在远离位错区域内晶体变形程度较小, 在位错芯域附近晶体变形较剧烈. 在位错核心附近, 两种virial应变计算结果略有差别, 与virial无限小应变相比, virial有限应变更符合弹性理论的预测. 为了进一步定量比较3种应变计算结果, 将图3(a)中白色虚线圆圈附近原子的局部应变挑选出来, 并按照相对于x轴的角度进行排序, 如图4(a)所示. 3条曲线较为接近, 从而证明virial应变计算方法的有效性. 将图3(a)中黑色虚直线附近原子的两种virial应变挑选出来, 计算差值, 再按照相对于位错对中心的距离进行排序, 结果表明越靠近位错, $|\varepsilon_{xx}^f - \varepsilon_{xx}^i|$ 越大, 如图4(b)所示. 之前的工作已经指出virial无限小应变的适用条件是小变形状态, 越靠近位错核心, 变形越严重, 因此 ε_{xx}^i 会渐渐偏离 ε_{xx}^f [37]. 类似地, $\Delta\varepsilon$ 的 $y y$, $x y$ 和 $y x$ 分量在位错核心附近变得强烈.

以上结果表明virial应变能够较准确地描述石墨烯位错周围的应变场, 并且两种virial应变的差值 $\Delta\varepsilon$ 可以显示出位错核心区域. 图5给出了 $\Delta\varepsilon$ 各分量在石墨烯晶体内的分布状态, 其中, $\Delta\varepsilon_{xy}$ 和 $\Delta\varepsilon_{yx}$ 的分布状态稍复杂, 位错核心结构的显示效果稍差一些, 尽管如此, 仍描绘出位错区域的形貌, $\Delta\varepsilon_{xx}$ 和 $\Delta\varepsilon_{yy}$ 则清晰地显示出5/7位错核心的原子结构. 有趣的是, $\Delta\varepsilon_{xy}$ 和 $\Delta\varepsilon_{yx}$ 具有完全一致的分布状态. 这是因为根据式(1)计算的左Cauchy-Green张量具有对称性, 即 $B_{xy}=B_{yx}$. 做如下考虑:

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{xy}^i - \varepsilon_{xy}^f \\ &= \frac{1}{2}(B_{xy} - \delta_{xy}) - \frac{1}{2}(\delta_{xy} - B_{xy}^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}(B_{xy} + B_{xy}^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}\left[B_{xy} + \frac{(-B_{yx})}{|B|}\right], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_{yx} &= \varepsilon_{yx}^i - \varepsilon_{yx}^f \\ &= \frac{1}{2}(B_{yx} - \delta_{yx}) - \frac{1}{2}(\delta_{yx} - B_{yx}^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}(B_{yx} + B_{yx}^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}\left[B_{yx} + \frac{(-B_{xy})}{|B|}\right], \end{aligned} \quad (9)$$

因此, $\Delta\varepsilon_{xy}=\Delta\varepsilon_{yx}$, 两者分布状态处处相同.

图3 (网络版彩图)石墨烯晶体应变场. (a) Virial无限小应变, ε_{xx}^i ; (b) virial有限应变, ε_{xx}^f ; (c) 弹性理论, ε_{xx}^e

Figure 3 (Color online) Strain fields around the dislocation dipole. (a) Virial infinitesimal strain, ε_{xx}^i ; (b) virial finite strain, ε_{xx}^f ; (c) strain given by elastic theory, ε_{xx}^e .

图4 (网络版彩图)应变比较. (a) 角向, ε_{xx} ; (b) 径向, $\Delta\varepsilon_{xx}=|\varepsilon_{xx}^f-\varepsilon_{xx}^i|$

Figure 4 (Color online) Strain comparison. (a) Along angle, ε_{xx} ; (b) along distance, $\Delta\varepsilon_{xx}=|\varepsilon_{xx}^f-\varepsilon_{xx}^i|$.

要根据virial应变概念计算石墨烯应变场,也可以仅考虑次近邻,即图2中的绿色原子.此时,近邻总数 N 取6,常数 λ 为3,再由式(1)–(3)可计算出相应的 ε_{xx} 和 $\Delta\varepsilon_{xx}$,结果显示于图6.可以看出, $\Delta\varepsilon_{xx}$ 再次清晰地凸显出位错核心区域.进一步分析表明在远离位错核心的区域内根据次近邻得出的virial应变与最近邻的结果几乎相同,但在靠近位错核心的区域内两种 $\Delta\varepsilon_{xx}$ 分布稍有差别.根据图7所示,在位错核心附近,通过最近邻环境得出的 $\Delta\varepsilon_{xx}$ 比次近邻结果变化更明显.造成这种现象的原因是最近邻计算比次近邻计算考虑的范围稍小,因此对晶体的局部变形更加敏感.

受到以上计算过程的启发,我们提出一种通过计算近邻原子位移的方法来显示石墨烯位错的结构

$$D_{\text{sym}}^I = \frac{\sqrt{\left(\sum_{k=1}^N \Delta r_x^{Ik}\right)^2 + \left(\sum_{k=1}^N \Delta r_y^{Ik}\right)^2}}{\sum_{k=1}^N \sqrt{(\Delta r_x^{Ik})^2 + (\Delta r_y^{Ik})^2}}, \quad (10)$$

其中, D_{sym}^I 称为近邻位移参数,表示第 I 个原子的近邻结构变形程度, $\Delta r_x^{Ik}=(r_x^k-r_x^I)$ 表示 I - k 键长的 x 分量,而 k 表示第 I 个原子的近邻原子序数,这里仅考虑最近邻环境.可以通过平衡距离为 s 的一维原子链来理解近邻位移参数的意义:令某原子 I 变坐标为 $x=0$,左右最近邻原子为 $x_1=-s$ 和 $x_2=s$,则变形前位移参数 $D_{\text{sym}}^I=0$.如果左右最近邻原子经历拉伸应变 ε_1 和 ε_2 ,即原子链发生不均匀应变,则 $D_{\text{sym}}^I=|\varepsilon_2-\varepsilon_1|/(|1+\varepsilon_1|+|1+\varepsilon_2|)$.由此可见近邻位移参数是晶体应变的函数,能够反映局部结构变形

图5 (网络版彩图) $\Delta\epsilon = \epsilon^f - \epsilon^i$. (a) $\Delta\epsilon_{xx}$; (b) $\Delta\epsilon_{yy}$; (c) $\Delta\epsilon_{xy}$; (d) $\Delta\epsilon_{yx}$

Figure 5 (Color online) $\Delta\epsilon = \epsilon^f - \epsilon^i$. (a) $\Delta\epsilon_{xx}$; (b) $\Delta\epsilon_{yy}$; (c) $\Delta\epsilon_{xy}$; (d) $\Delta\epsilon_{yx}$.

图6 (网络版彩图)仅考虑次近邻时virial应变场. (a) ϵ_{xx} ; (b) $\Delta\epsilon_{xx} = |\epsilon_{xx}^f - \epsilon_{xx}^i|$

Figure 6 (Color online) Virial strain fields, only second nearest neighbors are considered. (a) ϵ_{xx} ; (b) $\Delta\epsilon_{xx} = |\epsilon_{xx}^f - \epsilon_{xx}^i|$.

状态. 根据式(10)计算出的石墨烯近邻位移参数显示于图8(a), 可以看出 D_{sym}^i 很好地显示出位错的核心结构, 从而证明了该方法的有效性.

近年来的研究表明应力状态^[38]、边界原子化学环境^[39]等因素能够使单层石墨烯发生褶皱(即薄膜原子沿垂直于理想表面方向发生位移), 这种结构变化能

图7 (网络版彩图)位错芯域附近 $\Delta\epsilon_{xx}$ 分布. (a) 仅考虑最近邻; (b) 仅考虑次近邻

Figure 7 (Color online) $\Delta\epsilon_{xx}$ in the core area of the dislocation dipole. (a) Only nearest neighbors are considered; (b) only the second nearest neighbors are considered.

图8 (网络版彩图)近邻位移参数 D'_{sym} . (a) 无褶皱; (b) 侧视图; (c) 存在褶皱

Figure 8 (Color online) Displacement parameter of neighbors, D'_{sym} . (a) Without ripples; (b) lateral view; (c) with ripples.

够对材料的物理、力学性能产生深刻影响, 具有重要研究意义. 为此, 通过给图1中的模型原子赋予 z 方向位移的方式来构造褶皱: 假设褶皱以正弦波的形式在 x, y 两个方向上发生^[40], 不失一般性, 分别假设 x, y 方向的原子位移满足下列简谐波的叠加:

$$\begin{aligned} \delta_x &= A_x \left[\sin \left[\frac{(x - x_0)}{\lambda_{1x}} \right] + \sin \left[\frac{(x - x_0)}{\lambda_{2x}} \right] \right], \\ \delta_y &= A_y \left[\sin \left[\frac{(y - y_0)}{\lambda_{1y}} \right] + \sin \left[\frac{(y - y_0)}{\lambda_{2y}} \right] \right], \end{aligned} \quad (11)$$

其中, A_x (=0.08 nm), A_y (=0.06 nm)表示 x, y 方向的振幅, λ_{1x} (=4.0 nm), λ_{2x} (=6.0 nm), λ_{1y} (=5.0 nm)和 λ_{2y} (=8.0 nm)为 x, y 方向的波长, x_0, y_0 表示位移为零的参考点, 这里取为模型的中心坐标.

发生褶皱后的石墨烯侧视效果显示于图8(b), 将近邻位移参数推广至三维空间

$$D_{\text{sym}}^I = \frac{\sqrt{\left(\sum_{k=1}^n \Delta r_x^{ik} \right)^2 + \left(\sum_{k=1}^n \Delta r_y^{ik} \right)^2 + \left(\sum_{k=1}^n \Delta r_z^{ik} \right)^2}}{\sum_{k=1}^n \sqrt{(\Delta r_x^{ik})^2 + (\Delta r_y^{ik})^2 + (\Delta r_z^{ik})^2}}, \quad (12)$$

其中, 各参数与式(10)中的各参数相同. 图8(c)显示了由式(12)得到的结构变形状态. 与图8(a)相比, D_{sym}^I 不但很好地显示出位错的核心结构, 而且反映出褶皱引起的结构变化. 真实的石墨烯晶体由于Van der Waals作用, 可能存在片层交叠^[41], 因此可能对石墨烯晶体位错应变场造成影响. 如何考虑这些影响, 需要在未来的工作中通过更加准确的分子动力学模拟或第一原理计算结合virial应变和近邻位移参数进行深入

研究.

4 结论

Warner等人通过高分辨透射电子显微镜观察到具有5|7结构的石墨烯位错对, 并通过密度泛函理论得出该位错对的精细原子模型. 本文通过基于离散晶格方法的virial局部应变研究了该模型中石墨烯位错对周围的应变场, 主要得出以下结论:

(1) 两种原子级virial局部应变, 即无限小应变和有限应变, 计算结果与位错弹性理论吻合较好, 证明了两种局部应变计算方法的准确性. 两种virial应变的差异, 在远离位错核心的区域很小, 在位错核心附近变得强烈.

(2) 这种应变差异可以用来显示位错核心的原子结构. 进一步研究表明, 近邻环境的选择对这种应变差异存在轻度影响, 与次近邻环境相比, 最近邻环境计算范围较小, 因此该条件下计算出的应变差异对局部变形更加敏感.

此外, 本文还提出了一种分析近邻原子结构变形程度的新方法, 以此来显示石墨烯位错对, 称之为近邻位移参数 D_{sym}^l , 该参数清晰地显示出模型中两个位错的5|7结构, 并能够反映出褶皱引起的结构变化. 需要指出的是, 实际的石墨烯晶体可能存在片层交叠, 这些结构的变化均可能对石墨烯晶体的应变场造成影响. 如何考虑这些影响, 以及如何将以上分析方法拓展至MoS₂等类石墨烯二硫族化物将是本文的后续工作.

致谢 向评审人和对该文有帮助的人士表示谢意.

参考文献

- Feng W, Zhang R, Cao J C. Progress of terahertz devices based on graphene (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2015, 64: 229501 [冯伟, 张戎, 曹俊诚. 基于石墨烯的太赫兹器件研究进展. 物理学报, 2015, 64: 229501]
- Han L Z, Zhao Z X, Ma Z Q. Process parameters of large single crystal graphene prepared by chemical vapor deposition (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2014, 63: 248103 [韩林芷, 赵占霞, 马忠权. 化学气相沉积法制备大尺寸单晶石墨烯的工艺参数研究. 物理学报, 2014, 63: 248103]
- Lai Z P. Recent progress in preparation of material and device of two-dimensional MoS₂ (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2013, 62: 056801 [赖占平. 二维辉钼材料及器件研究进展. 物理学报, 2013, 62: 056801]
- Wang W R, Zhou Y X, Li T, et al. Research on synthesis of high-quality and large-scale graphene films by chemical vapor deposition (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2012, 61: 038702 [王文荣, 周玉修, 李铁, 等. 高质量大面积石墨烯的化学气相沉积制备方法研究. 物理学报, 2012, 61: 038702]
- Geim A K, Novoselov K S. The rise of graphene. *Nat Mater*, 2007, 6: 183–191
- Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 2004, 306: 666–669
- Lee C, Wei X, Kysar J W, et al. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 2008, 321: 385–388
- Morozov S V, Novoselov K S, Katsnelson M I, et al. Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 016602, arXiv: 0710.5304
- Balandin A A, Ghosh S, Bao W, et al. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Lett*, 2008, 8: 902–907
- Wu Y, Lin Y M, Bol A A, et al. High-frequency, scaled graphene transistors on diamond-like carbon. *Nature*, 2011, 472: 74–78
- Ruoff R. Graphene: Calling all chemists. *Nat Nanotech*, 2008, 3: 10–11
- Heo C, Yoo J, Lee S, et al. The control of neural cell-to-cell interactions through non-contact electrical field stimulation using graphene electrodes. *Biomaterials*, 2011, 32: 19–27
- Loh K P, Bao Q, Eda G, et al. Graphene oxide as a chemically tunable platform for optical applications. *Nat Chem*, 2010, 2: 1015–1024
- Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, et al. Graphene photonics and optoelectronics. *Nat Photon*, 2010, 4: 611–622, arXiv: 1006.4854
- Yang Y L, Lu Y. Thermal transport properties of defective graphene: A molecular dynamics investigation. *Chin Phys B*, 2014, 23: 106501
- Wu L, Hou T, Li Y, et al. First-principles study on migration and coalescence of point defects in monolayer graphene. *J Phys Chem C*, 2013, 117: 17066–17072
- Kotakoski J, Krasheninnikov A V, Kaiser U, et al. From point defects in graphene to two-dimensional amorphous carbon. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 105505, arXiv: 1102.0174
- Banhart F, Kotakoski J, Krasheninnikov A V. Structural defects in graphene. *ACS Nano*, 2011, 5: 26–41

- 19 Grantab R, Shenoy V B, Ruoff R S. Anomalous strength characteristics of tilt grain boundaries in graphene. *Science*, 2010, 330: 946–948, arXiv: [1007.4985](#)
- 20 Bonilla L L, Carpio A. Driving dislocations in graphene. *Science*, 2012, 337: 161–162
- 21 Ariza M P, Serrano R, Mendez J P, et al. Stacking faults and partial dislocations in graphene. *Philos Mag*, 2012, 92: 2004–2021
- 22 Zhang H L, Wang S F, Wang R, et al. The dislocations in graphene with the correction from lattice effect. *Eur Phys J B*, 2010, 73: 489–493
- 23 De Juan F, Cortijo A, Vozmediano M A H. Dislocations and torsion in graphene and related systems. *Nucl Phys B*, 2010, 828: 625–637, arXiv: [0909.4068](#)
- 24 Ariza M P, Ortiz M, Serrano R. Long-term dynamic stability of discrete dislocations in graphene at finite temperature. *Int J Fract*, 2010, 166: 215–223
- 25 Ariza M P, Ortiz M. Discrete dislocations in graphene. *J Mech Phys Solids*, 2010, 58: 710–734
- 26 Carpio A, Bonilla L L, De Juan F, et al. Dislocations in graphene. *New J Phys*, 2008, 10: 053021, arXiv: [0806.3001](#)
- 27 Jeong B W, Ihm J, Lee G D. Stability of dislocation defect with two pentagon-heptagon pairs in graphene. *Phys Rev B*, 2008, 78: 165403
- 28 Yazyev O V, Louie S G. Topological defects in graphene: Dislocations and grain boundaries. *Phys Rev B*, 2010, 81: 195420, arXiv: [1004.2031](#)
- 29 Wang Z Y, Hu H F, Gu L, et al. Electronic and optical properties of zigzag graphene nanoribbon with Stone-Wales defect (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2011, 60: 017102 [王志勇, 胡慧芳, 顾林, 等. 含 Stone-Wales 缺陷 zigzag 型石墨烯纳米带的电学和光学性能研究. 物理学报, 2011, 60: 017102]
- 30 Coraux J, N'Diaye A T, Busse C, et al. Structural coherency of graphene on Ir(111). *Nano Lett*, 2008, 8: 565–570
- 31 Lehtinen O, Kurasch S, Krashennnikov A V, et al. Atomic scale study of the life cycle of a dislocation in graphene from birth to annihilation. *Nat Commun*, 2013, 4: 2098
- 32 Warner J H, Margine E R, Mukai M, et al. Dislocation-driven deformations in graphene. *Science*, 2012, 337: 209–212
- 33 Zhao Y P. Nano and Mesoscopic Mechanics. Beijing: Science Press, 2014. 14 [赵亚溥. 纳米与介观力学. 北京: 科学出版社, 2014. 14]
- 34 Zimmermann J. Continuum and Atomistic Modelling of Dislocation Nucleation at Crystal Surface Ledges. Stanford: Stanford University, 1999. 79
- 35 Hirth J P, Lothe J. Theory of Dislocation. New York: Wiley, 1982
- 36 Liu F, Ming P, Li J. *Ab initio* calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension. *Phys Rev B*, 2007, 76: 064120
- 37 Shao Y F, Yang X, Li J H, et al. Atomistic simulation study on the local strain fields around an extended edge dislocation in copper (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2014, 63: 076103 [邵宇飞, 杨鑫, 李久会, 等. Cu 刃型扩展位错附近局部应变场的原子模拟研究. 物理学报, 2014, 63: 076103]
- 38 Warner J H, Fan Y, Robertson A W, et al. Rippling graphene at the nanoscale through dislocation addition. *Nano Lett*, 2013, 13: 4937–4944
- 39 Carlsson J M. Graphene: Buckle or break. *Nat Mater*, 2007, 6: 801–802
- 40 Huang J Z, Han Q. Molecular dynamics simulation of wrinkles in zigzag graphene under gradient tension (in Chinese). *J South China Univ Tech*, 2015, 43: 122–126 [黄健彰, 韩强. 梯度拉伸下锯齿型石墨烯褶皱的分子动力学模拟. 华南理工大学学报, 2015, 43: 122–126]
- 41 Lee G H, Cooper R C, An S J, et al. High-strength chemical-vapor-deposited graphene and grain boundaries. *Science*, 2013, 340: 1073–1076

Strain fields around graphene dislocations studied by discrete crystal lattice analyses

SHAO YuFei^{1*}, YANG Xin¹, GAO Ke², LI JiuHui³ & ZHAO Xing³

¹ *Institute of Applied Physics and Technology, Liaoning Technical University, Huludao 125105, China;*

² *College of Safety Science and Engineering, Liaoning Technical University, Huludao 125105, China;*

³ *College of Sciences, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China*

Dislocation is one kind of the most important structural defects in graphene sheets. In the present work, graphene dislocation is studied through the computational model of a dislocation dipole with two opposite cores. Strain fields around the dislocation cores are calculated at atomic level according to virial strain concept, which is derived from the coordinates of discrete atoms and the symmetry of crystal lattice. Results show that both infinitesimal and finite virial strains are consistent with the predictions from elastic theory very well, thus the accuracy of virial strain analyses is validated. However, there is a slight difference between the two strain fields. The core area of the dislocation dipole can be outlined by the strain differences, which can be influenced by the neighboring atomic structure. Compared with the second nearest neighboring environment, the nearest neighboring environment has a smaller volume, therefore can be influenced by the local deformation state more easily. Finally, a new method to visualize the cores is proposed based on the displacements of graphene atoms. The location and structure of the dislocation dipole predicted by this new method are in agreement with the strain analyses excellently, and the structure changes generated by ripples can also be described.

graphene, dislocation, strain, crystal lattice

PACS: 61.50.Ah, 61.72.Lk, 81.40.Jj

doi: [10.1360/SSPMA2016-00429](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00429)