

НЕЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ВОЛН В СЛОЖНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ КАК ДИСКРЕТНО-КОНТИНУАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Россия

Представлена нелинейная теория упругих и неупругих деформаций, сопровождающихся кардинальной перестройкой кристаллической решетки благодаря процессам переключения связей, образованию новой фазы, изменению класса симметрии, зарождению дефектов. Теория является обобщением классической линейной теории Кармана, Борна, Хуан Куна, развитой для модели сложной решетки, состоящей из двух взаимнопроникающих подрешеток. Нелинейные уравнения акустической и «оптической» мод колебаний выведены на основе нового принципа внутренней трансляционной инвариантности сложной решетки относительно взаимной трансляции подрешеток на один период. В результате стало возможным рассмотрение больших микросмещений атомов с преодолением точек бифуркации (порогов устойчивости решетки) под влиянием больших внешних напряжений. Рассмотрено образование дефектов типа дислокаций и их ассоциатов, а также их движение как локализованных (дозвуковых и сверхзвуковых) волн – кинков и солитонов. Установлены критерии их возбуждения под влиянием внешних напряжений.

THE NONLINEAR THEORY OF LOCALIZED WAVES IN A COMPLEX CRYSTALLINE LATTICE AS A DISCRETE CONTINUAL MODEL

E.L. Aero and A.N. Bulygin

Institute of Problems of Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, 199178, Russia

The nonlinear theory of elastic and nonelastic deformations accompanied with deep reconstruction of an initially ideal lattice (switching of interatomic bonds, changing of the class of symmetry, formation of new phases, singular defects and heterogeneities, fragmentation of the lattice) is presented. The proposed theory is a generalization of the classic linear theory (Carman, Born, Kun Huang) of a complex crystalline lattice consisting of two (and more) sublattices and is achieved by introducing the nonlinear equations of acoustic and “optic” oscillation modes. These equations are derived based on the new principle of internal translation of the complicated lattice invariance relative to the mutual sublattice translation for one period. As a result, it is possible to reach and overcome bifurcation points, i.e., thresholds of lattice stability under catastrophic deformations. The universal mechanism of these effects consists in lowering the potential barriers due to great external stresses. The formation of defects such as dislocations and disclinations and their propagation as localized waves are considered. Soliton-like and kink-like supersonic and subsonic waves have been found out. Some criteria of their excitation by external stresses have been established.

1. Общие уравнения

Настоящее исследование посвящено анализу распространения нелинейных локализованных волн (типа кинков и солитонов) в кристаллах, обладающих сложной решеткой. Для простоты рассматривается случай двух подрешеток, которые совмещаются (сливаются в одну) сдвигом на постоянный структурный вектор \vec{y}_0 , являющийся параметром сложной решетки.

В классической линейной теории кристаллической решетки, как дискретной системы атомов [1–3], получаются два дифференциальных уравнения — для акустических (\vec{U}) и «оптических» (\vec{u}) смещений соответственно. Они являются результатом длинноволнового приближения — континуализации уравнений движения атомов в пределах их парных взаимодействий. Процедура применяется к каждой подрешетке отдельно. В результате вводится не одно, как при континуальном подходе, а два непрерывных дифференцируемых поля смещений, отвечающих за средние смещения центров инерции элементарных ячеек (\vec{U}) и внутриячеечных микросмещений соседних атомов (\vec{u}) сложной решетки. Недостатком этих классических подходов является их линейность или квазилинейность — рассматриваются малые смещения, не выводящие атомы за пределы ячейки. Это ограничение не позволяет описывать кардинальные структурные перестройки решетки и качественные изменения ее свойств.

Рассмотрим произвольно большие смещения подрешеток \vec{u} . В основу построения нелинейной теории положим дополнительный элемент трансляционной симметрии, характерный для сложных решеток, который, однако, не был введен ранее в физике твердого тела. Очевидно, что смещение одной подрешетки относительно другой на один период (или на их целое число) до совмещения этой подрешетки с самой собой снова воспроизводит структуру сложной решетки. Это значит, что её энергия должна быть периодической функцией относительного жесткого смещения подрешеток \vec{u} , инвариантной к подобной трансляции. Разумеется, сохраняется и классический принцип трансляционной симметрии, приводящий к инвариантности энергии решетки, к совместной трансляции \vec{U} обеих подрешеток на один период сложной решетки.

Введем смещения \vec{U} центра инерции пары атомов (элементарной ячейки) и относительного их смещения \vec{u} внутри ячейки (за счет изменения \vec{u}_o) следующим образом:

$$\vec{U} = (m_1 \vec{U}_1 + m_2 \vec{U}_2) / (m_1 + m_2), \quad \vec{u} = (\vec{U}_1 - \vec{U}_2) / a. \quad (1)$$

Здесь \vec{U}_1 и \vec{U}_2 — смещения атомов (с массами m_1 m_2) первой и второй подрешеток соответственно, a — период подрешеток.

Рассмотрим весьма простой одномерный и однокомпонентный случай, который удастся проанализировать в общем виде точно и до конца. Условия одномерного и однокомпонентного движения имеют вид:

$$U_i \rightarrow U(t, x), \quad u_i \rightarrow u(t, x). \quad (2)$$

В этом разделе под U и u подразумевается любая из векторных компонент, но не абсолютная величина вектора. Построим вариационные уравнения движения, определяющие поля $U(t, x)$, $u(t, x)$. Исходим из лагранжиана:

$$L = (1/2H) \int_0^t \int_0^H [\rho \dot{U}_n \dot{U}_n + \mu \dot{u}_n \dot{u}_n - 2D] dt dx. \quad (3)$$

Здесь ρ — средняя плотность масс атомов, μ — так называемая плотность приведенных масс пар атомов (они различаются в случае разных по массе атомов); D -- энергия макро- и микродеформаций, H — размер области, толщина плоскопараллельного слоя кристалла.

Инвариантное выражение с учетом их взаимодействия (нелинейной механострикции, далее просто стрикции) имеет вид:

$$D = (1/H) \int_0^H \left[(\lambda/2)(U_{,x})^2 + (k/2)(u_{,x})^2 + (p - s U_{,x})(1 - \cos u) \right] dx. \quad (4)$$

Кроме того, $U_{,x}$ и $u_{,x}$ — макро- и микроскопические градиенты; λ, k — макро- и микроскопические модули; s — коэффициент нелинейной стрикции (перестройки микроструктуры под действием макроскопических деформаций); $2p$ — межатомный потенциальный барьер в недеформированной решетке (энергия активации атомных связей в элементарной ячейке). Производные по времени обозначены точками сверху, а пространственные производные — запятой в тензорных индексах. Градиентные слагаемые в (4) обеспечивают его инвариантность при макротрансляциях, а периодическое слагаемое $\cos u$ обуславливает инвариантность энергии к взаимным трансляциям подрешеток в некотором заданном и фиксированном направлении. В одномерной теории рассматриваются изменения величины вектора микросмещения, но не его направления. Более общие случаи рассмотрены в работах [4–6].

Варьируя функционал по смещениям U , u , скоростям \dot{U} , \dot{u} и градиентам $U_{,x}$, $u_{,x}$ и приравнявая нулю его вариацию, получим систему двух связанных уравнений типа Эйлера для двух полей — акустических макросмещений $U(x, t)$ и оптических микросмещений $u(x, t)$:

$$\rho \ddot{U} = \lambda U_{,xx} - [s(1 - \cos u)]_{,x}, \quad (5)$$

$$\mu \ddot{u} = k u_{,xx} - (p - s U_{,x}) \sin u. \quad (6)$$

Предложенный структурно-феноменологический подход описывает кристаллическую решетку континуализованными уравнениями, учитывающими ее структуру с помощью периодических функций микросмещений атомов u , отнесенных к периоду решетки b . Микросмещению на один период отвечает значение $u = 2\pi$.

Первое уравнение (акустических колебаний) учитывает, наряду с дальнедействующими силами, зависящими от градиентов макросмещений (деформаций) $U_{,x}$, также и силы, обусловленные структурными изменениями, зависящими от градиентов микросмещений $u_{,x}$.

Второе уравнение («оптических» колебаний) учитывает нелинейные силы взаимодействия подрешеток (второе слагаемое справа), которые имеют периодический характер в силу инвариантности сложной решетки по отношению к относительным сдвигам подрешеток на один период $u = 2\pi$. Напомним, что микросмещения измеряются в единицах периода решетки.

Вопрос о начальных и граничных условиях для системы (5), (6) обсудим применительно к частным задачам распространения локализованных волн.

Уравнения (5), (6) в линеаризованной форме и без учета эффекта механострикции получены впервые в динамической теории кристаллических решеток [1] и известны в литературе как уравнения акустических и оптических колебаний сложной решетки. Слабая нелинейность на уровне ангармонизмов разной степени вводится в механику решетки давно. Однако сильная нелинейность, допускающая переходы атомов в соседние ячейки (реконструктивные переходы) впервые введена в наших предыдущих работах [4, 3]. Кроме того, в уравнения (5) и (6) введены нелинейные стрикционные силы (последние слагаемые справа), которые реализуют микромеханизм кардинальной

перестройки структуры. Пренебрегая этими слагаемыми, получим в пределе уравнение классической теории упругости и независимое уравнение микродвига подрешеток.

Вопрос о начальных и граничных условиях для системы (5), (6) обсудим применительно к частным задачам распространения локализованных волн. Ограничимся процессами распространения неравновесных возмущений с постоянными скоростями (задачей «без начальных условий»), когда оба поля являются функциями фазы волны q :

$$q = (x - Vt), \quad V > 0, V < 0. \quad (7)$$

Здесь V — постоянная фазовая скорость (два знака скорости отвечают двум волнам, бегущим в противоположных направлениях). Задание произвольных начальных условий затруднительно. В этом случае стационарные режимы, столь необходимые для существования уединенных волн, требуют поиска весьма сложных решений уравнений (5), (6).

Используя представление (7) в двух предыдущих уравнениях, приходим к двум обыкновенным дифференциальным уравнениям

$$\lambda(1 - V^2/V_s^2)U_{,qq} = [s(1 - \cos u)]_{,q}; \quad V_s^2 = \lambda/\rho; V_k^2 = k/\mu; \quad U_{,q} \rightarrow \partial U/\partial q, \quad (8)$$

$$k(1 - V^2/V_k^2)u_{,qq} = (p - sU_{,q})\sin u \quad u_{,q} \rightarrow \partial u/\partial q, \quad (9)$$

где фазовые скорости акустической V_s и оптической V_k мод имеют вид:

$$V_s^2 = \lambda/\rho, \quad V_k^2 = k/\mu. \quad (10)$$

Проинтегрировав (5), получим

$$\lambda(1 - V^2/V_s^2)U_{,q} = s(1 - \cos u) + \sigma. \quad (11)$$

Здесь σ — константа интегрирования, имеющая смысл внешнего постоянного поля напряжений. С его помощью исключим из (9) макроградиенты и получим отдельное уравнение для оптической моды

$$l_o^2 p(1 - V^2/V_k^2)u_{,qq} = p_1 \sin u + p_2 \sin u \cos u, \quad (12)$$

где обозначено:

$$p_1 = p - s \frac{s + \sigma}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}; \quad (13)$$

$$p_2 = \frac{s^2}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}. \quad (14)$$

Нелинейное уравнение (12) является обобщением известного уравнения синус-Гордона, решением которого, при некоторых граничных условиях, являются локализованные волны. Применив к нему один раз процедуру интегрирования, получим выражение для квадрата микроградиента

$$(\tilde{l}_o^2/2) p(u_{,q})^2 = p_3(1 - \cos u) - (p_2/2)(1 - \cos u)^2 + G, \quad (15)$$

где обозначено

$$\tilde{l}_o^2 = l_o^2(1 - V^2/V_k^2); \quad l_o^2 = k/p; \quad (16)$$

$$p_3 = p - \frac{s\sigma}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}. \quad (17)$$

Соотношение (16) вводит характеристическую длину, что является отличительной особенностью данной теории.

В уравнении (15), наряду с введенной ранее σ , фигурирует новая константа интегрирования — G . Обе эти константы, очевидно, связаны с граничными условиями, накладываемыми на значения самой функции u и ее градиента $u_{,q}$. Для выяснения физического смысла константы G , рассмотрим ситуацию на границе $x=0$, когда $q=q_o = -Vt$. Тогда $u_{,q} = u_{,t}$ — есть скорость колебаний модельного маятника, а левая часть соотношения (15) — его кинетическая энергия. В верхней точке равновесия $u=\pi$ (то есть микросмещение равно половине периода решетки) при скорости, равной нулю, из (15) следует соотношение $G=2(p_2 - p_3) = -2p_1$, которое можно рассматривать как определение G . С другой стороны, в нижней точке равновесия $u=0$ из (15) получим $G=(k/2)(1 - V^2/V_k^2)(u_{,q})^2$. Это позволяет рассматривать G как кинетическую энергию прохождения нижней точки равновесия.

2. Структурные переходы в статике

Рассмотрим вначале некоторые проблемы перестройки решетки в поле внешних напряжений независимо от явного вида решения уравнения (12), то есть безотносительно к граничным условиям. Это уравнение содержит структурно чувствительный параметр — коэффициент p_1 перед первым слагаемым справа — эффективный межатомный барьер, зависящий от внешнего напряжения. Он может обращаться в нуль и даже менять знак, чему отвечает точка бифуркации решения уравнения (12). В результате возникает новая структура решетки с новыми свойствами. Рассмотрим этот вопрос для случая статических структур. Полагая в формулах (13), (14) скорость V равной нулю и обращаясь к статическим обозначениям p_{o1} и p_{o2} , пишем

$$p_1 \rightarrow p_{o1} = p - S/\lambda; \quad S = s(s + \sigma). \quad (18)$$

Здесь p_{o1} означает статическое значение эффективного межатомного барьера p_1 , который отличается от потенциала p идеальной недеформированной решетки величиной S/λ . Эту величину будем называть разупрочнением решетки. Решетка полностью разупрочняется в первой точке бифуркации — при обращении величины эффективного барьера p_{o1} в нуль, когда

$$s(s + \sigma) = p\lambda, \quad (19)$$

то есть стрикционный эффект компенсирует, сглаживает начальный межатомный барьер. Поскольку по определению $p > 0$ и $\lambda > 0$, то и $S = s(s + \sigma_o) > 0$. Заметим, что в противном случае разупрочнение в поле напряжений невозможно.

Этой точке структурного перехода отвечает определенное пороговое значение напряжения. Оно зависит от знака коэффициента стрикции s . Если $s > 0$, то

$$\sigma = \sigma_{i1}; \quad \sigma_{i1} = p \lambda s - s. \quad (20)$$

Если же $s < 0$, то

$$\sigma = \sigma_{i1}; \quad \sigma_{i1} = -(p \lambda |s|) + |s|. \quad (21)$$

Здесь σ_{i1} — пороговое значение напряжения, при котором ослабляются межатомные связи, и происходит перестройка структуры решетки. Очевидно, перестроенная структура существует при условиях $\sigma > \sigma_{i1}$ ($s > 0$) и $\sigma < \sigma_{i1}$ ($s < 0$), а ослабленная (разупрочненная) — при обратных знаках неравенств.

Рассмотрим вторую точку бифуркации, которой отвечает обращение в нуль первого коэффициента уравнения (15), то есть условие $p_3 = 0$ или $p_{o1} = -p_{o2}$. В развернутом виде оно принимает вид критерия для напряжения:

$$\sigma = \sigma_i; \quad \sigma_i = p \lambda s. \quad (22)$$

Положительность величин p и λ требует для его выполнения одинаковых знаков s и σ .

Третья особая точка $p_{o1} = p_{o2}$ представляет собой границу области существования решений типа уединенных волн. Она достигается при следующем пороговом значении для напряжения:

$$\sigma = \sigma_{i2}; \quad \sigma_{i2} = (p \lambda s) - 2s = \sigma_{i1} - s; \quad s > 0. \quad (23)$$

Третьей точке отвечает положительное значение потенциального барьера, первой же — нулевое. Это — не единственное отличие. Точки бифуркации также разграничивают различные структуры решетки. В статике это проявляется в различии зависимости амплитуды, например, солитонов от энергии, как это показано в [4].

Критерии упрочнения и разупрочнения важны при анализе подвижности дефектов в тех или иных условиях нагружения.

3. Условия возникновения уединенных волн

Решения уравнения (12) или (15) представлены, вообще говоря, тремя модами — собственно нелинейными периодическими волнами, кинками и солитонами. Здесь рассмотрим лишь кинки и солитоны. Условиями их возникновения являются, в том числе, и граничные условия.

Уравнение переноса момента импульса (15) имеет две солитонные ветви, которые определяются условием, накладываемым на входящие в него константы интегрирования G и σ .

Опустим специальный случай $G = 0$ и рассмотрим возбужденные возмущения, зависящие от напряжений. Они отвечают случаю возникновения экстремальных

возбуждений $u = \pi$ (смещению на половину периода) в бесконечно удаленных точках $|q| \rightarrow \infty$, где обращаются в нуль градиенты этого поля по координатам и времени. Действительно, из выражения (15) для первого интеграла при значениях $u = \pi$, $u_{,q} = 0$ для константы G имеем:

$$G/2 = -p_1. \quad (24)$$

Здесь p_1 — динамическая величина, определенная в (13). Именно это соотношение, учитывающее указанные граничные условия, необходимо для возникновения уединенных волн типа кинков и солитонов. Вторая константа σ входит в правую часть согласно выражениям (13) и (14). Она позволяет удовлетворить еще одному граничному условию, окончательно определяющему кинковое или солитонное решение. Иными словами, для кинков нужно учесть также и условие $u = 0$ в центре $q = 0$, что с помощью (13), (15) и (24) дает соотношение

$$\tilde{I}_o^2(u_{,q})_o^2 = -2p + 2s \frac{s + \sigma}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}, \quad (25)$$

связывающее наклон в точке перегиба кинка с константой интегрирования σ .

Аналогичное соотношение для солитона получим из условия $u = u_e$, где u_e — экстремальное значение в его центре (амплитуда). Следует учесть, что в центре солитона микроградиент обращается в нуль, то есть $u_{,q} = 0$. Тогда из (15) следует:

$$0 = p_3(1 - \cos u_e) - (p_2/2)(1 - \cos u_e)^2 - 2p_1. \quad (26)$$

Это соотношение связывает амплитуду солитона с напряжением σ , содержащимся в коэффициентах p_1, p_3 , согласно (13) и (14). Установленная связь позволяет, вообще говоря, перейти (для солитонов) к новой константе интегрирования — амплитуде u_e .

Заметим, что общее (для кинков и солитонов) соотношение (24), наряду с указанными двумя константами, содержит еще и скорость волны согласно (13), (14). Поскольку эти константы определяются граничными условиями, то соотношение (24) можно рассматривать как уравнение для скорости распространения кинка или солитона.

Запишем это уравнение в развернутом виде:

$$p_1 = p - S/\lambda(1 - V^2/V_s^2). \quad (27)$$

Здесь S определяется из выражения (18).

Отсюда находим зависимость скорости распространения от напряжения

$$V^2/V_s^2 = 1 - s \frac{s + \sigma}{\lambda(p - p_1)}. \quad (28)$$

Константу справа от σ выразим также через амплитуду солитона и наклон кинка в центре с помощью формул (25), (26).

Следует отметить, что в статике ($V = 0$) соответствующие величины σ и p_{o1} связаны соотношением

$$p_1 = p_{o1}; \quad p_{o1} = p - s(s + \sigma)/\lambda. \quad (29)$$

Иными словами, в случае стоячих дефектов между собой связаны такие их характеристики, как амплитуда, наклон в центре и, как увидим далее, их ширина.

В динамике энергия тратится также и на движение дефектов — согласно соотношению (28). Поэтому соотношение (29) можно рассматривать как условие порогового возбуждения (например, с помощью лазерного облучения) потока механических возмущений — уединенных волн внутри образца.

Если внешние нагрузки (напряжения) отсутствуют $\sigma=0$, то из (28) следует выражение для скорости V_{ss} распространения соответствующих свободных колебаний

$$V_{ss}^2/V_s^2 = 1 - s^2/\lambda(p - p_1); \quad V_s^2 = \lambda/\rho. \quad (30)$$

Существенно, что эта величина определяется лишь свойствами кристалла и представляет собой скорость распространения нелинейного звука с учетом структурной податливости кристалла. Она меньше скорости линейного звука.

Введем эффективный динамический модуль упругости $\tilde{\lambda}$ соотношением, аналогично определению скорости линейного звука (10):

$$V_{ss}^2 = \tilde{\lambda}/\rho. \quad (31)$$

Тогда из (30) следует, что

$$\tilde{\lambda} = \lambda - s^2/(p - p_1). \quad (32)$$

Это соотношение означает, что кристалл с перестраиваемой структурой более податлив, а характерная скорость V_{ss} ниже линейной звуковой скорости V_s .

Не следует думать, что в кристалле распространяются только дозвуковые волны. Речь шла о свободных колебаниях. Под влиянием же внешних нагрузок возможны и сверхзвуковые волны.

В общем случае, когда напряжения σ отличны от нуля, скорость V зависит и от них — согласно (28). Пользуясь определением (31) перепишем (28) в виде зависимости эффективного коэффициента динамической упругости и от напряжений σ :

$$\tilde{\lambda} = \lambda - \frac{S}{(p - p_1)} = \lambda - s \frac{s + \sigma}{(p - p_1)}. \quad (33)$$

Теперь эффективный модуль динамической упругости не обязательно ниже реального. Все зависит от знака второго слагаемого справа в этом выражении. Может иметь место как разупрочнение (при $S > 0$), так и упрочнение (при $S < 0$) кристалла. Выше оба эти случая охарактеризованы.

Внешнее воздействие приводит к снижению упругих свойств, когда $S > 0$ и выполняются критерии для напряжений (19), (20) и (21). При этих условиях формула (28) дает зависимость скорости распространения от напряжения и материальных параметров в виде зависимости, представленной на рисунке 1. Видны две области нелинейных колебаний — дозвуковых и сверхзвуковых. Первая область реализуется при низких значениях эффективного барьера

$$p_1 < p_{o1}; \quad p_{o1} = (p/\lambda)[\lambda - s(s + \sigma_o)/p], \tag{34}$$

вторая, сверхзвуковая, отвечает высоким значениям эффективного барьера

$$p_1 > p. \tag{35}$$

Между ними имеется интервал «непрозрачности» кристалла, в котором скорость распространения оказывается мнимой, а эффективный модуль динамической упругости — отрицательным $p_{o1} < p_1 < p$.

Его ширина составляет величину $S = s(s + \sigma)/\lambda$, которая, как уже было установлено определяет (при $S > 0$) податливость, наведенную напряжением.

Для упрочненных кристаллов ($S < 0$) получаем зависимость скорости движения дефектов, обратную по переменной p_1 , тогда, как дозвуковая область простирается вправо в сторону роста положительных значений p_1 (Рис. 2), а сверхзвуковая — влево, в сторону убывания этой величины с заходом в область отрицательных значений p_1 .

4. Дозвуковые уединенные волны

Рассмотрим теперь одно из решений уравнения (15), удовлетворяющее условию (24). Оно возбуждается в диапазоне относительно слабых воздействий $p_2 > p_1 > 0$. Имеем решение:

$$u = \pm 2 \operatorname{arctg}(a \operatorname{ch} \zeta); \quad \zeta = (q - q_o)/L; \quad V < V_s. \tag{36}$$

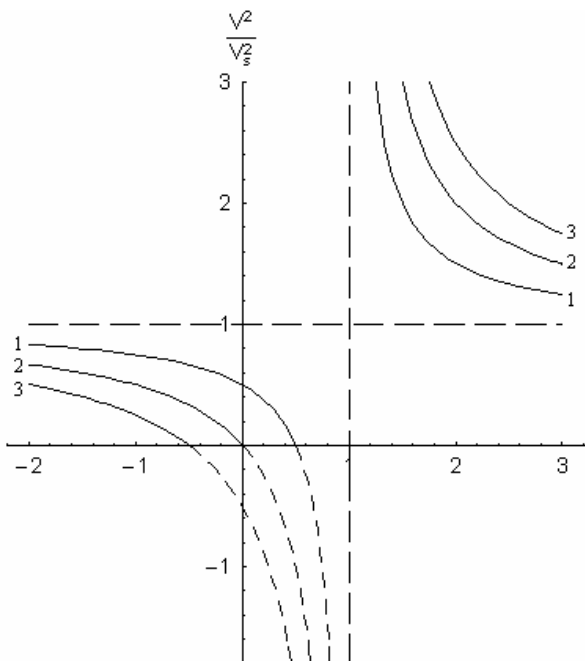


Рис. 1. Зависимость скорости уединенной волны от величины эффективного межатомного барьера при разных значениях параметра разупрочнения решетки: 1 – $S = 0,5p\lambda$; 2 – $S = p\lambda$; 3 – $S = 1,5p\lambda$

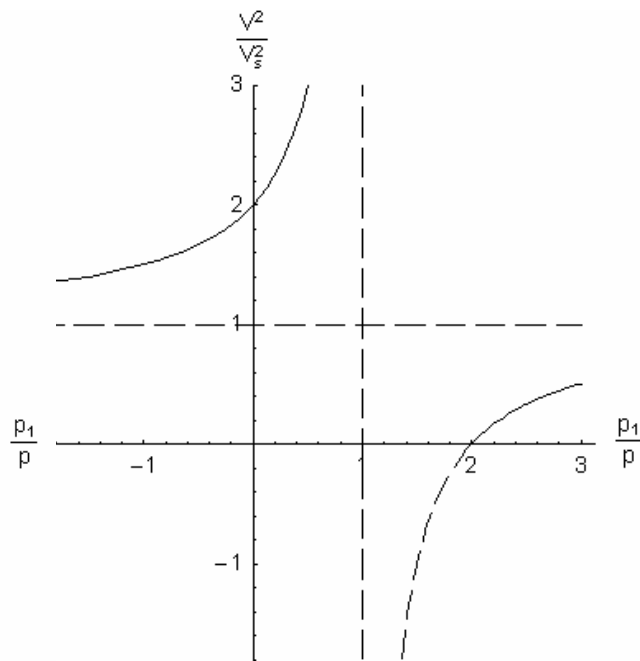


Рис. 2. Зависимость скорости уединенной волны от величины эффективного межатомного барьера в случае упрочнения: $S = -p\lambda$

Для статики подобные решения рассмотрены в работе [4]. Здесь справа двойные знаки отвечают паре возможных решений. Также использованы обозначения

$$a^2 = p_1 / (p_2 - p_1); \quad \tilde{l}_o^2 / L^2 = (p_2 - p_1); \quad \tilde{l}_o^2 = (k/p)(1 - V^2/V_k^2). \quad (37)$$

Решение (36), представляет солитон (на пьедестале π) с центром $q = q_o$ и шириной L . Амплитуда солитона (снижение по отношению к уровню пьедестала π) составляет величину $\pi - 2 \arctg a$. Это дефект упаковки — скопление вакансий, который видоизменяется с приближением к границе существования решения (36) или точке бифуркации $p_1 = 0$. Его ширина, зависящая также и от скорости, уменьшается, а амплитуда (отклонение от уровня пьедестала вниз) возрастает, стремясь к предельному значению $\rightarrow \pi$. Скорость же растет, приближаясь к пороговому значению V_1 , которое на основании (28) записывается как

$$V_1^2 / V_s^2 = 1 - s \frac{s + \sigma_o}{\lambda p}. \quad (38)$$

Напротив, с приближением к другой границе области ($p_1 = p_2$), ширина беспредельно растет, а амплитуда убывает, стремясь к уровню пьедестала $u \rightarrow \pi$. Скорость принимает значение V_2 :

$$V_2^2 / V_s^2 = 1 - s \frac{s + \sigma_o}{(\lambda p - s^2)}. \quad (39)$$

Для перехода к макроскопическому полю U полезно переписать (36) в другом виде, а именно:

$$1 - \cos u = \frac{2a^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}{1 + a^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}. \quad (40)$$

Подставляя это выражение в формулу (11), получим соответствующее явное выражение для макроскопического поля деформаций:

$$\lambda(1 - V^2/V_s^2)U_{,q} = s \frac{2a^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}{1 + a^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}. \quad (41)$$

Ясно, что эти деформации порождены микроскопическим дефектом (36). Заметим, что эта четная функция аргумента ζ имеет колоколообразный (солитоноподобный) вид.

Рассмотрим дозвуковые уединенные волны $V_s > V > V_2$, которые возникают в диапазоне отрицательных значений $p_1 < 0$. Соответствующее решение имеет вид

$$u = \pm 2 \arctg(a \operatorname{sh} \zeta); \quad a^2 = |p_1| / (2p_2 + |p_1|); \quad \zeta = (q - q_o) / L. \quad (42)$$

Здесь справа двойные знаки отвечают паре возможных решений. Кроме того, L -- характерный размер области локализации решения (кинка) дан в (37). Запишем решение (42) решение в иной форме

$$1 - \cos u = \frac{2a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta}{1 + a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta} \quad (43)$$

и подставим в формулу (11). В результате получим соответствующее явное выражение для макроскопического поля деформаций:

$$\rho(V_s^2 - V^2)U_{,q} = s \frac{2a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta}{1 + a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta}. \quad (44)$$

Заметим, что эта четная функция аргумента $U, q = f(\zeta)$ имеет колоколообразный (солитоноподобный) вид, несмотря на то, что исходное микроскопическое поле $u(\zeta)$ является согласно (42) кинкоподобным дефектом (с центром в q_0 и с пределами $u \rightarrow -\pi, +\pi$ на бесконечном удалении от центра). Кинк движется со скоростью (28), возрастающей в сторону убывания p_1 . В точке бифуркации $p_1 = 0$ скорость равна нулю. Дефект становится подвижным, если только напряжение превышает уровень второго порога $\sigma > \sigma_{11}$, определенного в (20). Если напряжение не достигает этого уровня (находимся по другую сторону точки бифуркации), то дефект неподвижен и согласно (28) квадрат скорости отрицателен (скорость оказывается мнимой величиной $V = i\omega$, а кристалл — «непрозрачен»). Тогда в решении (42) для волнового аргумента имеем:

$$q = x - Vt = x - i\omega t; \quad \operatorname{sh} q \rightarrow \operatorname{sh} x \cos \omega t - i \operatorname{ch} x \sin \omega t. \quad (45)$$

После подстановки этих формул в (42) или (43) получим решение, представляющее стоячую затухающую волну типа бризера — колеблющегося дефекта. Область релаксационных колебаний простирается до точки $p_1 = p$ — начала области сверхзвуковых уединенных волн. Она представлена на рисунке 1 кривой, уходящей вверх и направо.

Итак, существуют два различных локализованных решения уравнения (12) или (15) — медленные солитоны (36) и быстрые кинки (42). В любом случае их скорости все же не приближаются непосредственно к скорости линейного звука V_s . Они возбуждаются по разные стороны от первой точки бифуркации — первые при $p_1 > 0$, а вторые — при $p_1 < 0$. В точке раздела (бифуркации) $p_1 = 0$ в уравнении (12) исчезает первое слагаемое справа, но остается слагаемое с произведением тригонометрических функций (или синус с удвоенной пространственной частотой). Иными словами, происходит смена микроструктуры. Из сопоставления формул (36) и (42) видно, что первые — солитоны с разными знаками, описываются четной функцией безразмерного волнового аргумента ζ , а вторые — кинки разных знаков, нечетной.

Можно выяснить физический смысл этого перехода, если чрезвычайно близко приблизиться к точке перехода. Первое решение (медленные солитоны) образуется перед точкой бифуркации. При этом в центральной точке (точке минимума) производная обращается в нуль. На самом деле, в силу двойного знака в (36) возникают два солитона разных знаков (две четных функции), почти соприкасающиеся вершинами. Они описывают дефекты упаковки, являющиеся скоплениями вакансий в пределах ширины каждого солитона.

Что касается решения (42), то оно представлено нечетной функцией волнового аргумента ζ . В силу двойного знака в формуле (42) имеем при $p_1 \leq 0$ два кинковых решения с разными знаками. Рассмотрим одно из них, — соответствующее знаку (+) в

выражении (42). На значительном удалении от точки перехода $p_1=0$ кривая имеет одну точку перегиба в центре ζ . С приближением к точке перехода кривая кинка усложняется, образуя два боковых перегиба, так что кинк имеет уже три точки перегиба. Центральной области отвечает дефект упаковки (в окрестности центрального перегиба). Особенно четко он проявляется в непосредственной близости от точки перехода $p_1 \geq 0$. На рисунке области дефекта отвечает центральный пологий участок кривой. В самой точке бифуркации $p_1=0$ возникает некоторое промежуточное (между двумя рассматриваемыми) решение вида

$$u=2\arctg(a^2 \exp \zeta); \quad V=0; \quad \sigma=\sigma_{11}. \quad (46)$$

Оно представляет собой кинк с пределами $u=0$ ($\zeta \rightarrow -\infty$), $u=\pi$ ($\zeta \rightarrow \infty$) (в отличие от (42)) или полудислокацию.

Кроме точки бифуркации $p_1=0$ уравнение (12) имеет вторую точку ветвления решений, а именно $p_3=0$, или, что то же самое, $p_1=-2p_2$. В этой точке скорость обращается в нуль при другом значении напряжений: $\sigma=\sigma_t$.

В начальной точке этой области $p_1=-2p_2$ решение уравнения (12) имеет вид

$$u=2\arctg(-p_2)^{1/2} \zeta; \quad \sigma=\sigma_{11}; \quad V=0. \quad (47)$$

Это решение представляет собой поле микросмещений дислокации Пайерлса [2]. В остальных точках (по другую сторону второй точки бифуркации $p_1 < -2p_2$) решение имеет вид кинка

$$u=\pm 2\arctg(a \operatorname{sh} \zeta); \quad a^2=|p_1|/(2p_2+|p_1|); \quad \zeta=(q-q_0); \quad V_s > V > 0 \quad (48)$$

и по форме совпадает с решением (42), но отличается от него меньшей шириной L , которая убывает в сторону возрастания скорости V .

Хотя скорость всех рассмотренных уединенных волн при условии разупрочнения $S > 0$ меньше скорости линейного звука, но в последнем случае она может приближаться к ней сколь угодно близко. Когда скорость возрастает до скорости линейного звука ($V \rightarrow V_s, p_1 \rightarrow 0$), ширина кинка становится минимальной ($L \rightarrow 0$). Это значит, что кинк стремится по форме к разрывной волне. Скорость уединенной волны растет с ростом уровня возбуждения. При этом форма кинка меняется. Боковые перегибы исчезают, а ширина убывает. Впрочем, наклон производной в центре кинка имеет конечный предел, который легко вычисляется по формуле (15), если положить в правой части $u=0$.

Дозвуковым волнам отвечает специальная зависимость скорости от ширины уединенной волны L , которая в общем виде дана в (37). Перепишем ее в явной форме, раскрыв выражения для p_1, p_2 и \tilde{l}_o^2 . Получим

$$\frac{l_o^2}{L^2} = \frac{s(2s+\sigma)}{p\lambda(1-V^2/V_s^2)(1-V^2/V_k^2)} - \frac{1}{(1-V^2/V_k^2)}. \quad (49)$$

Это соотношение представляет собой биквадратное уравнение, имеющее два корня $V_a^2(L)$ и $V_o^2(L)$, которым отвечают две ветви: — дозвуковая, «акустическая», и

сверхзвуковая, «оптическая». Первая, которую обсуждаем, показана нижней кривой на рисунке 3. Вторая, сверхзвуковая, будет рассмотрена далее.

Следует отметить две особенности акустической ветви. Первая особенность связана с асимптотическим выполаживанием этой ветви при больших значениях обратной ширины, когда достигается уровень скорости линейного звука V_s и возникает квазиразрывная волна. Вторая особенность обнаруживается на начальном участке резкого возрастания скорости (ширина L велика), когда пересекается ось абсцисс в точке $V_a = 0$. Ей отвечает случай, когда достаточно размытый кинк (дислокация) или солитон (дефект упаковки), которым соответствуют в данной теории уединенные волны, могут останавливаться. Более того, еще более делокализованные дефекты (им отвечают отрицательные значения квадрата скорости в самом начале акустической кривой) представляют собой стоячие и затухающие колебания.

5. Сверхзвуковые уединенные волны

Существование сверхзвуковых уединенных волн возможно лишь в условиях упрочнения $S < 0$. Как уже было отмечено, в противоположном случае разупрочнения ($S > 0$) область сверхзвуковых скоростей реализуется при слишком больших положительных значениях p_1 , где уединенные волны не возбуждаются.

Для упрочненных кристаллов ($S < 0$) получаем зависимость скорости движения дефектов, обратную по переменной p_1 , (Рис. 2). Дозвуковая область простирается вправо, в сторону роста положительных значений p_1 , а сверхзвуковая — влево, в сторону убывания этой величины, с заходом в область отрицательных значений p_1 , в которой и возможны уединенные сверхзвуковые волны.

Поскольку вблизи звуковой скорости меняется также вид уравнения (15) по причине неограниченного возрастания второго его коэффициента $p_2 \rightarrow \infty$, в окрестности скорости звука $V \rightarrow V_s$, происходит смена его знака при переходе в сверхзвуковую область (см. выражение (17)). В результате перемены знака возникает новое кинкоподобное решение (15) в области сверхзвука

$$u = \pm 2(a \operatorname{sh} \zeta); \quad \zeta = (q - q_0)/L; \quad p_1 < -2|p_2|; \quad p_3 < 0; \quad (50)$$

$$a^2 = (|p_2| - |p_3|)/(2|p_2| - |p_3|);$$

$$\frac{\tilde{l}_o^2}{L^2} = |p_3| - 2|p_2|; \quad \tilde{l}_o^2 = (k/p)(1 - V^2/V_k^2). \quad (51)$$

Существенное отличие этого решения от дозвукового (42) обусловлено областью его существования (указана в (50)), которая перекрывается с областью существования сверхзвука $p_1 < -p$ при $S < 0$. Это значит, что сверхзвук возбуждается для упрочненного кристалла. Область же существования решения (42), с соответствующей областью сверхзвука $p_1 > p$, $S > 0$, не перекрывается, то есть не существует сверхзвука для разупрочненного кристалла ($S > 0$). Это же относится и к решению (36).

Остается обсудить вопрос о возбуждении суперзвука $V > V_k > V_s$. В этом случае происходит смена знака в уравнении (13) или (15) не только перед вторым слагаемым справа, но и перед левой его частью. В результате перепишем (5) в виде:

$$(l_o^2/2) \left| (1-V^2/V_k^2) \right| (u, q)^2 = |p_3| (1-\cos u) - (|p_2|/2) (1-\cos u)^2 - 2|p_1|, \quad (52)$$

$$p_1 < 0, \quad p_3 < 0.$$

Имеем формальное совпадение с уравнением (15). Отличие состоит лишь в сужении области существования решений, указанной в (52). В этой области существует кинковое решение, совпадающее с (42) и (50). Только первое не реализуется для сверхзвуковых скоростей, а второе имеет несколько более широкую область существования, обозначенную в (50). Суперзвуковое решение уравнения (52), справедливое при больших значениях $|p_1|$, совпадая с (50) по форме, отличается значительным сужением кинка, приближаясь к разрывной волне.

Суперзвуковым волнам отвечает специальная зависимость скорости от ширины уединенной волны — «оптическая» ветвь $V_o^2(L)$, которая является вторым корнем уравнения (49). На рисунке 3 ей отвечает верхняя кривая. Эта, похожая на гиперболу, кривая асимптотически опускается до предельного уровня — характерной скорости оптической моды V_k . При этом $L^{-1} \rightarrow \infty$, то есть ширина, например, кинка становится малой и образуется квазиразрывная волна.

6. Дисперсионные зависимости для уединенных волн

Уединенным волнам отвечает специальная зависимость скорости от ширины уединенной волны L , которая в общем виде дана в (37). Перепишем ее в явной форме, раскрыв выражения для p_1, p_2 и \tilde{l}_o^2 . Получим

$$\frac{l_o^2}{L^2} = \frac{\hat{S}}{p \lambda (1-V^2/V_s^2)(1-V^2/V_k^2)} - \frac{1}{(1-V^2/V_k^2)}; \quad \hat{S} = s(2s + \sigma) \quad (53)$$

Это соотношение представляет собой биквадратное уравнение, имеющее два корня: $V_{ac}^2(L)$ и $V_{op}^2(L)$. В области действительных значений L , когда решения (36) и (51) содержат гиперболические тригонометрические функции (описывают уединенные волны) им отвечают две ветви — дозвуковая, «акустическая», и суперзвуковая, «оптическая». Скорость последней превышает характерную скорость $V_s^2 = k/\mu$. Выпишем вначале явные выражения для обоих корней, отличающихся знаками перед радикалом (R):

$$2(1-V_{ac}^2/V_s^2)(l_o^2/L^2) = -(V_k/V_s)^2 - (l_o^2/L^2)(V_k^2/V_s^2 - 1) - (V_k/V_s)^2 R, \quad (54)$$

$$2(1-V_{op}^2/V_s^2)(l_o^2/L^2) = -(V_k/V_s)^2 - (l_o^2/L^2)(V_k^2/V_s^2 - 1) + (V_k/V_s)^2 R. \quad (55)$$

Здесь

$$R^2 = 1 + 2(l_o^2/L^2)(V_s/V_k)^2 \left[\frac{2\hat{S}}{p \lambda} + (V_k/V_s)^2 - 1 \right] + (l_o^2/L^2)^2 (1-V_s^2/V_k^2)^2. \quad (56)$$

На рисунке 3 зависимость $V_{ac}^2(L)$ (акустическая ветвь $V < V_s$) показана нижней кривой. Отметим две ее особенности. Первая связана с её асимптотическим выполаживанием при больших значениях квадрата обратной ширины при достижении уровня скорости линейного звука V_s и возникновении квазиразрывной волны. Вторая особенность обнаруживается на начальном участке резкого возрастания скорости (ширина L велика) при пересечении оси абсцисс в точке $V_{ac} = 0$. Ей отвечает случай, когда достаточно размытый кинк (дислокация) или солитон (дефект упаковки), которым соответствуют в данной теории уединенная волна, могут останавливаться. Более того, еще более делокализованные дефекты (им отвечают отрицательные значения квадрата скорости в самом начале акустической кривой) представляют собой стоячие и затухающие колебания (пунктир на рисунке 3). Отметим, что эта кривая опускается не только в область отрицательных значений квадрата скорости. Она заходит и в область отрицательных значений квадрата ширины, а после возвращается немного обратно, сильно опускаясь вниз. Весь этот специфический участок показан более детально на рисунке 4. Видна параболическая точка возврата, о которой будет идти речь далее.

Суперзвуковым волнам отвечает зависимость скорости от ширины уединенной волны (55) — «оптическая» ветвь $V_{op}^2(L)$, которая является вторым корнем уравнения (53). На рисунке 3 ей отвечает верхняя кривая. Эта, похожая на гиперболу, кривая асимптотически опускается до предельного уровня — характерной скорости оптической моды V_k . При этом $L^{-1} \rightarrow \infty$, то есть ширина, например, кинка становится малой и образуется квазиразрывная волна.

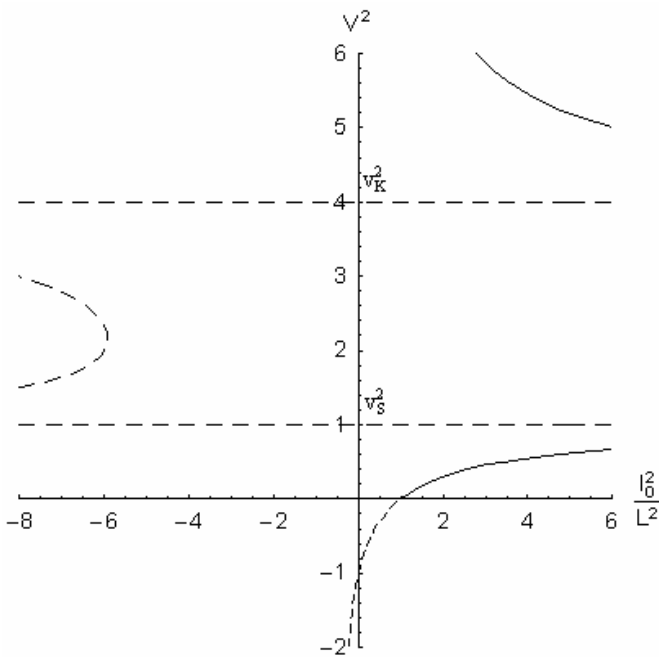


Рис. 3. Ветви уединенных волн решетки — зависимости скоростей от обратной ширины солитона и кинка (верхняя кривая — сверхзвуковая оптическая ветвь; нижняя кривая — дозвуковая акустическая; пунктиром показан участок мнимых значений скорости, отвечающий затухающим колебаниям стоячих дефектов)

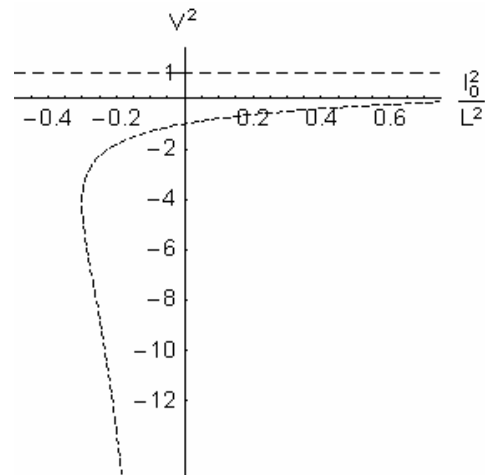


Рис. 4. Пунктирный участок мнимых значений скорости предыдущего рисунка в увеличенном виде

Зависимости (54), (55) имеют представление и в области мнимых значений ширины L , когда ее квадрат представлен на оси абсцисс отрицательными значениями. На рисунке 3 это промежуточная сверхзвуковая ветвь V_{ao} , располагающаяся в области значений скоростей $V_s^2 < V_{ao}^2 < V_k^2$. Она имеет простой физический смысл — описывает гармонические (нелокализованные) волны, что легко просматривается из решений (36) и (51), если величина L становится мнимой, превращаясь в период гармонической волны. Эта ветвь напоминает параболу с вершиной в точке l_o^2/L_{ao}^2 . Соответствующее значение находится из условия $V_{op}^2(L_{ao}) = V_{op}^2(L_{ao})$ или $R=0$. Отметим, что этому условию удовлетворяет два значения: L_{ao1}^2 и L_{ao2}^2 . Первое относится просто к вершине данной параболы, а второе задает предельную точку возврата рассмотренной выше акустической дозвуковой ветви — пунктирный участок нижней кривой на рисунке 3. Громоздкие выражения для соответствующих корней уравнения опускаем. Интересно, однако, их разность:

$$\frac{L_{ao1}^2}{l_o^2} - \frac{L_{ao2}^2}{l_o^2} = \frac{2\hat{S}}{p\lambda} \left(V_s^2/V_k^2 \right) \left(\frac{\hat{S}}{p\lambda} - 1 + V_k^2/V_s^2 \right)^{1/2}. \quad (57)$$

Она задает «пустой», запрещенный интервал слишком длинных гармонических волн. Следует подчеркнуть, что это особые волны переключения межатомных связей с амплитудой $u_m = \pi$, которые генетически связаны с уединенными волнами общим условием образования, когда константа G в уравнении (15) задана специальным образом согласно условию (24). При другом выборе этой константы возможны иные периодические волны, которые здесь не рассматриваются.

7. Обсуждение результатов и выводы

Используется предложенная ранее дискретно-континуальная модель сложной решетки. Развитая сильно нелинейная теория позволяет учитывать в длинноволновом приближении кардинальные изменения структуры решетки при деформировании (механострикцию). Структурные изменения описываются полем микросмещений соседних атомов в элементарной ячейке. Наряду с ними вводятся и обычные макроскопические смещения, учитывающие движение самих ячеек. Динамические уравнения в линеаризованном классическом варианте сводятся к известным уравнениям распространения акустической и «оптической» моды, установленным еще в работах Кармана, Борна, Жуан Куны.

Полученные сильно нелинейные уравнения связаны микромеханизмом механострикции. В результате описывается эффект изменения межатомных потенциальных барьеров под влиянием внешних напряжений, предсказывается возникновение дефектов структуры в поле критических напряжений, их движение в виде локализованных волн, а также релаксация.

В настоящей сильно нелинейной теории рассматриваются локализованные волны типа кинков и солитонов, описывающие распространение и релаксацию дефектов упаковки и дислокаций. Механизм механострикции реализуется, в зависимости от напряжений и коэффициента стрикции, в явлениях упрочнения (охрупчивание) и разупрочнения (пластификация) кристалла. С ними связано возникновение медленных, дозвуковых, и быстрых, сверхзвуковых, волн. Взаимное влияние акустической и «оптической» моды (макроскопических и микроскопических полей) приводит к тому, что ядра дефектов оказываются функциями макроскопических напряжений и скоростей

мод. Более того, появляются как макроскопические, так и микроскопические локализованные волновые пакеты, описывающие искажения макроскопического континуума и искажения микроструктуры.

Определяющим параметром динамических явлений является эффективный потенциальный межатомный барьер, зависящий от напряжений и скорости распространения. Существуют три его значения (три точки бифуркации), которые определяют пределы устойчивости решетки, испытывающей в статике кардинальную перестройку в зависимости от величины и знака внешних напряжений. В динамике дополнительно возникает зависимость потенциального барьера от скорости распространения локализованной волны. Интересно, что между двумя областями до- и сверхзвуковых волн существует область релаксационных колебаний — полоса непрозрачности кристалла для бегущих волн. Ей отвечает область бездиссипативных потерь энергии, обусловленных необратимыми, но равновесными процессами перестройки микроструктуры при переходе через точки бифуркации. Эти процессы сопровождаются остаточными деформациями в силу разупрочнения кристалла. Процессы перестройки структуры характеризуются критериальными значениями напряжений. Выявлены условия формирования квазиразрывных волн. Ранее аналогичные эффекты рассмотрены в работах [7], [8].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 07-01-00213), а также в рамках Программ фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН № 12 и 13

Литература

1. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. - М.: ИЛ, 1958. – 488 с.
2. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки. Физическая механика кристаллов. – Харьков: Вища школа, 1988. – 304 с.
3. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. – М.: Наука, 1975. - 415 с.
4. Аэро Э.Л. Существенно нелинейная микромеханика среды с изменяемой периодической структурой. // Успехи механики. – 2002. – Т.1, № 3. – С. 130–176.
5. Aero E.L. Micromechanics of a double continuum in a model of a medium with variable periodic structure // Journal of Engineering Mathematics. – 2005. – V.1. – P.1–15. DOI 10.1007/s10665-005-9012-3, Springer.
6. Аэро Э.Л., Бульгин А.Н. Сильно нелинейная теория формирования наноструктуры вследствие упругих и неупругих деформаций кристаллических тел // Изв. РАН МТТ. – 2007. – № 5. – С.170–187.
7. Наймарк О.Б. // Физическая мезомеханика. – 2003. – Т.4. – С.45–72.
8. Naimark O.B. Defect induced transitions as mechanisms of plasticity and failure in multifield continua // Advances in multifield theories of continua with substructure / Ed. G. Capriz, P. Mariano. - Boston, Birkhauser. – 2004. – P.75–114.