

УДК 539.3

ТЕОРИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ, ИСПЫТЫВАЮЩИХ КАРДИНАЛЬНУЮ ПЕРЕСТРОЙКУ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин

Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург, Россия

Развита нелинейная теория распространения нелинейных уединенных волн (типа кинков и солитонов), связанных с движением дефектов в кристаллах, и специфических периодических волн, в которые превращаются первые в полях сжимающих напряжений. Учитывается роль и интенсивных растягивающих напряжений, приводящих к глубоким структурным перестройкам кристалла. Принято, что кристаллы обладают сложной решеткой, состоящей из двух подрешеток. Рассмотрены произвольно большие смещения подрешеток \vec{u} . В основу построения нелинейной теории положен дополнительный элемент трансляционной симметрии, характерный для сложных решеток, но ранее не введенный в физике твердого тела. Очевидно, что смещение одной подрешетки относительно другой на один период (или их целое число) до совмещения этой подрешетки с самой собой снова воспроизводит структуру сложной решетки. В результате энергия сложной решетки представляется периодической функцией относительного жесткого смещения подрешеток \vec{u} , инвариантной к подобной трансляции. Вариационные уравнения макроскопических и микроскопических смещений оказываются нелинейным обобщением линейных уравнений акустических и оптических мод, полученных Карманом, Борном, Хуан Куном. В одномерном приближении найдены точные решения нелинейных уравнений и выявлены их особенности.

Ключевые слова: нелинейная волна, твердое тело, дефекты, кристаллическая структура

THEORY OF NONLINEAR WAVES IN SOLIDS UNDERGOING STRONG REARRANGEMENTS OF THEIR CRYSTALLINE STRUCTURE

E.L. Aero and A.N. Bulygin

Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, St-Petersburg, Russia

The nonlinear theory of propagation of nonlinear localized waves (like kinks and solitons), connected with the movement of defects in crystals, is developed. It is assumed that crystals possess a complicated lattice consisting of two sub-lattices. The arbitrary large displacements of sub-lattices, \vec{u} , are considered. An additional element of translational symmetry is employed in the theory. The element is typical for complicated lattices, however, it has not been introduced in physics of solid state before. It is evident that the relative displacement of sub-lattices for one period (or for an integer of periods) to a superposition of the sub-lattice with itself reproduces the structure of a complicated lattice. This means that the complicated lattice energy should be a periodic function of the relative rigid displacement of sub-lattices, \vec{u} , invariant to such a translation. The variational equations of macro- and micro-displacements turned out to be a nonlinear generalization of the linear equations of acoustic and optical modes obtained by Karman, Born and Huang. Some exact solutions are obtained for the one-dimensional case, and their specific features are revealed.

Keywords: nonlinear wave, solids, defects, crystalline structure

1. Общие уравнения

Динамическая теория кристаллической решетки хорошо развита на уровне линейной теории [1–3]. Ее обобщения не распространяются, однако, за пределы ангармонических приближений. Недостатком этих классических подходов является то,

что рассматриваются малые смещения, не выводящие атомы за пределы ячейки. Это ограничение не позволяет описывать кардинальные качественные изменения ее свойств.

В настоящее время этот подход не вполне адекватен новым проблемам, возникающим в задачах формирования и управления структурой новых материалов. Малые изменения внутренней структуры, которые предсказываются линейными теориями, в конечном счете, просто уточняют изменения макроскопической геометрии решетки и приводят лишь к перенормировке материальных констант. Решение этих проблем требует введения существенно нелинейных моделей и прямого учета глубоких изменений структуры твердого тела.

Универсальный подход, берущий свое начало от замечательных работ французских ученых Е. и Ф. Коссера [4], основан на введении в континуальную модель твердого тела внутренних вращательных степеней свободы. Многочисленные попытки ее реализации показали, что в пределах линейной теории действительно предсказываются новые эффекты. Основные новые результаты — появление новых мод оптических колебаний, пространственно-временная дисперсия упругих свойств и приграничные эффекты в статике [5, 6].

Переход к существенно нелинейным уравнениям, как это было показано в [7–12], дает возможность предсказывать глубокие структурные перестройки, понижение потенциальных барьеров, переключение межатомных связей, возникновение сингулярных дефектов и других повреждений, фазовые превращения. Но феноменологическая теория имеет ограничения. Можно, конечно, ввести в теорию внутренние параметры типа микродеформаций, описывающих изменения структуры, и даже рассчитать их. Однако выявить их физический смысл удастся, если задано начальное структурное состояние тела, введены материальные масштабы длины и времени. В континуальной теории это не делается.

Оказывается, что совместное решение проблемы дискретности и нелинейности модели позволяет сформулировать новый принцип трансляционной инвариантности энергии. Е. и Ф. Коссера впервые в механике ввели аналогичный принцип для среды с вращательными степенями свободы. В данной работе развивается теория нелинейных волн в твердых телах, испытывающих кардинальную перестройку кристаллической структуры.

В основу предлагаемой теории положим модель сложной решетки, состоящей из двух подрешеток, которые совмещаются (сливаются в одну) сдвигом на постоянный структурный вектор \vec{u}_0 , являющийся параметром сложной решетки (Рис. 1, а).

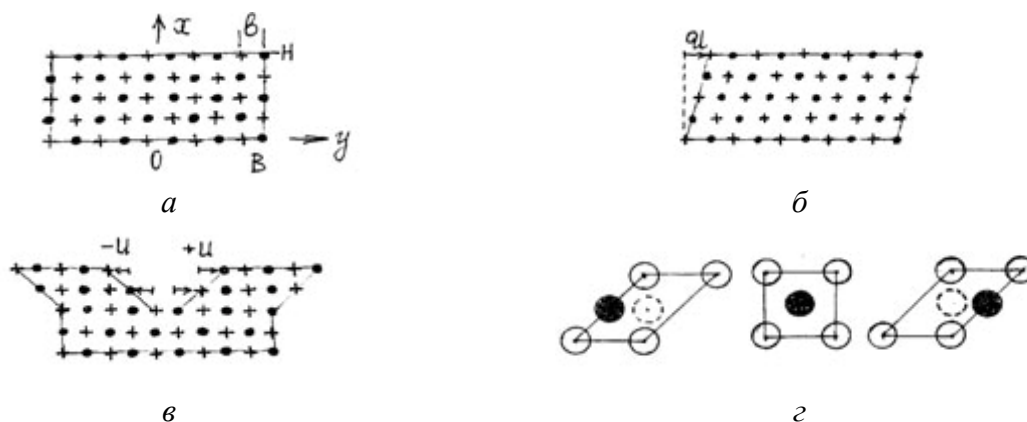


Рис.1. Сложная решетка (а), состоящая из двух подрешеток; макроскопическая деформация без сдвига подрешеток (б); микродеформации при двойниковом разделении (в); бифуркация структуры элементарной ячейки при микродеформации (г)

Эта модель известна в физике твердого тела, однако она разработана в линейном и ангармоническом приближении. В линейной локальной теории кристаллической решетки Кармана, М. Борна, Хуан Куня [1] получаются два уравнения — для акустических (\vec{U}) и «оптических» (\vec{u}) смещений соответственно. В работах А.М. Косевича [2] построена физическая механика неидеальной кристаллической решетки с учетом дефектов. И.А. Куниным развита линейная нелокальная теория сложной кристаллической решетки, в которой уточняется дальноедействие [3].

В предлагаемой здесь локальной нелинейной теории основное внимание уделяется эффектам ближнего порядка, ответственным за кардинальные структурные изменения (в том числе и за возникновение дефектов, и новой фазы), и так называемым реконструктивным переходам — изменениям класса симметрии решетки. Переход к существенно нелинейным уравнениям дает возможность предсказывать понижение потенциальных барьеров, переключение межатомных связей.

Введение в теорию изменений локальной топологии с помощью внутренних степеней свободы (поля \vec{u}) оказывается эффективным, если перейти к обобщению линейного приближения следующим образом. Рассмотрим произвольно большие смещения подрешеток \vec{u} . В основу построения нелинейной теории положим дополнительный элемент трансляционной симметрии, характерный для сложных решеток, но ранее не введенный в физике твердого тела. Очевидно, что смещение одной подрешетки относительно другой на один период (или их целое число) до совмещения подрешетки с самой собой снова воспроизводит структуру сложной решетки и, значит, энергия сложной решетки должна быть периодической функцией относительного жесткого смещения подрешеток \vec{u} , инвариантной к подобной трансляции. Разумеется, классический принцип трансляционной симметрии, приводящий к инвариантности энергии решетки к совместной трансляции \vec{U} обеих подрешеток на один период сложной решетки, сохраняется. Такой подход позволяет ввести в микромеханику новые параметры кристалла, на основе которых становится возможным описание микромеханизмов кардинальных структурных перестроек решетки. Это — характеристики ближнего порядка, потенциальные барьеры, характерные размеры элементов структуры и межфазных границ, бифуркационные параметры.

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

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

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

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

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

Под U и u в этом разделе 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

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

Здесь ρ — средняя плотность масс атомов, μ — так называемая плотность приведенных масс пар атомов (эти величины различаются в случае разных по массе атомов), d — энергия макро- и микродеформаций, H — размер области, толщина плоскопараллельного слоя кристалла. Точками сверху обозначены производные по времени.

Инвариантное выражение с учетом взаимодействия (нелинейной механострикции — перестройки микроструктуры под действием макроскопических деформаций, далее просто стрикции) полей $U(t, x)$, $u(t, x)$ имеет вид

$$d = [(\lambda/2)(U_{,x})^2 + (k/2)(u_{,x})^2 + (p - s U_{,x})(1 - \cos u)], \quad (4)$$

где $U_{,x}$ и $u_{,x}$ — макро- и микроскопические градиенты; λ, k — макро- и микроскопические модули; s — коэффициент нелинейной стрикции; $2p$ — межатомный потенциальный барьер в недеформированной решетке (энергия активации атомных связей в элементарной ячейке); запятой в тензорных индексах обозначены пространственные производные. Градиентные слагаемые в выражении (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 принимаются во внимание изменения величины вектора микросмещения, но не его направления. Более общие случаи рассмотрены в работах [6–8].

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

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

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

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) содержит нелинейные силы взаимодействия подрешеток (второе слагаемое справа), которые имеют периодический характер в силу инвариантности сложной решетки по отношению к сдвигам подрешеток на один период $u = 2\pi$. Отметим, 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. Эти уравнения 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 используется в механике

решетки давно. Однако сильная нелинейность, допускающая переходы атомов в соседние ячейки (реконструктивные переходы), впервые введена в наших предыдущих работах [7–9]. Кроме того, в уравнениях (5) и (6) нами используются нелинейные стрикционные силы (последние слагаемые справа), реализующие микромеханизм кардинальной перестройки структуры. Если пренебречь этими слагаемыми, в пределе получим уравнение классической теории упругости и независимое уравнение микросдвига подрешеток.

Переходя к динамике, 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).

Ограничившись в уравнениях (5), (6) представлением (7), приходим к двум обыкновенным дифференциальным уравнениям:

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

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

V_s и V_k — соответственно фазовые скорости акустической и оптической мод:

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

Интегрируя (5), запишем

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

Константа интегрирования σ есть внешнее постоянное поле напряжений. С его помощью из уравнения (9) исключим макроградиенты. Получим отдельное уравнение для оптической моды

$$l_o^2 p(1 - V^2/V_k^2)u_{,qq} = \tilde{p}_1 \sin u + \tilde{p}_2 \sin u \cos u. \quad (12)$$

Здесь обозначено:

$$\tilde{p}_1 = p - s \frac{s + \sigma}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}, \quad (13)$$

$$\tilde{p}_2 = \frac{s^2}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}. \quad (14)$$

Нелинейное уравнение (12) является обобщением известного уравнения синус-Гордона, решением которого, при определенных граничных условиях, являются

уединенные и периодические волны. В результате его однократного интегрирования получаем выражение для квадрата микроградиента

$$\left(\tilde{l}_o^2/2\right)p(u_{,q})^2 = \tilde{P}(1-\cos u) - (\tilde{p}_2/2)(1-\cos u)^2 + G. \quad (15)$$

При этом

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

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

Первое соотношение вводит характеристическую длину l_o и характеристическое время $l_o V_k = k/\sqrt{p\mu}$, что является отличительной особенностью данной теории.

В уравнении (15), наряду с уже введенной константой σ , фигурирует новая константа интегрирования G . Очевидно, что обе они связаны с граничными условиями, накладываемыми на значения самой функции u и ее градиента $u_{,q}$. Физический смысл константы G выясним, рассматривая 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. Правую часть, зависящую от u , формально можно рассматривать как потенциальную энергию $g_o(u)$ (со знаком минус!):

$$\left(\tilde{l}_o^2/2\right)p(u_{,q})^2 + g_o = G, \quad g_o = -\tilde{P}(1-\cos u) + (\tilde{p}_2/2)(1-\cos u)^2. \quad (18)$$

Здесь первое соотношение выражает закон сохранения энергии.

На рисунке 2 функция $g_o(u)$ представлена серией кривых при разных значениях параметра \tilde{P} , линейно зависящего от напряжения σ . Наличие разнообразно чередующихся максимумов и минимумов определяет несколько различных режимов нелинейных колебаний микроструктуры решетки или несколько волновых ветвей.

В рассмотренном подходе константа G играет роль сохраняющейся полной энергии колебаний микроструктуры и представляется вторым соотношением в (18). Величина этой энергии влияет на картину волновых ветвей, но она — лишь часть полной энергии колебаний всей системы с макроскопическими и микроскопическими степенями свободы. В одномерном случае напряжение σ оказывается константой, и в таком случае область микроколебаний, определяемую двумя константами интегрирования — G и σ , удастся рассматривать обособленно.

Полная энергия G определяет три бифуркационных уровня, разделяющих различные режимы колебаний (Рис. 2). Уровни обозначены горизонтальными линиями, одной из которых является ось абсцисс. Верхний уровень (горизонтальная линия) соединяет максимумы потенциальной кривой 3, у которой имеются два неглубоких минимума под осью абсцисс. Движению между точками касания с максимумами отвечает волна, локализованная между соответствующими максимумами значениями микросмещений. Выше этого уровня (при больших значениях G) минимумов уже нет, и режим движения сводится просто к колебаниям в периодическом потенциале с нулевыми минимумами (кривые 1 и 2), что характерно для слабо искаженной решетки. Напротив, с понижением величины энергии вплоть до нулевого уровня образуется иной

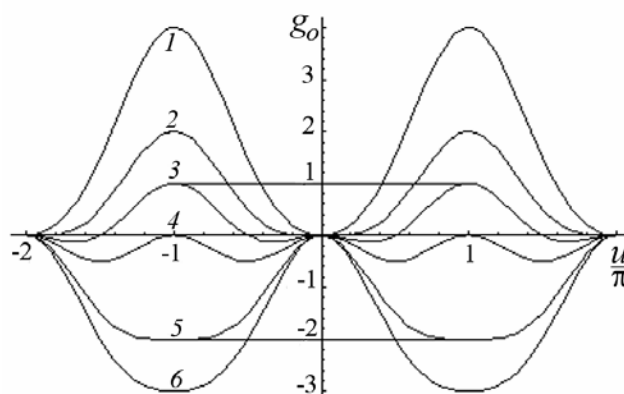


Рис. 2. Потенциальная энергия микроколебаний при разных напряжениях (кривая 1 соответствует напряжениям растяжения, кривая 6 – напряжения сжатия)

потенциальный рельеф с новыми положениями равновесия. При $G = 0$ возникает потенциал (кривая 4) с двумя дополнительными минимумами. Решетка кардинально меняет микроструктуру. С дальнейшим понижением энергии G в сторону отрицательных значений новый потенциальный рельеф вырождается и снова переходит к рельефу с прежним числом экстремумов, но инверсированных. Точка бифуркации отмечена горизонтальной линией, соединяющей минимумы кривой 5. Существенно, что кардинальная перестройка микроструктуры связана с величиной напряжений. Это видно из выражения для потенциальной энергии (18), содержащего коэффициент \tilde{P} , зависящий от напряжения линейно согласно формуле (17).

Эти же качественные особенности можно выявить для решения уравнения (15), если построить его фазовый «портрет» (см. Рис. 3). «Портрет» соответствует значению $p_1 = 4/3$. При этом по вертикальной оси отложено значение «скорости» $u_{,q}$ или микроградиента $u_{,x}$ (если $V = 0$), а по горизонтальной — микросмещения u . Каждая кривая отвечает одному решению, определяемому значением константы интегрирования из диапазона $G = -0,3; 0; 0,3; 1; 2$. Все множество решений разделено на три группы сепаратриссами, обозначенными штриховыми линиями.

«Малые» сепаратриссы ($G = 0$), похожие на восьмерки (кривые 4), ограничивают области, внутри которых имеются решения 5 в форме замкнутых кривых с центрами, отвечающими состояниям устойчивого равновесия. Самим замкнутым кривым 5 отвечают периодические зависимости $u(x)$, которые представляют собой подсемейства частных решений. Периодические решения 3 даются осциллирующими около нуля функциями $u(x, t)$. Решения же 5 осциллируют около некоторого среднего уровня $u_a \neq 0$. Так проявляется нелинейный эффект динамического «расширения», обусловленный асимметрией потенциальных ям. И, наконец, решениям 1 отвечают дрейфующие моды, когда осциллирующее решение содержит линейную составляющую $\Delta u \sim q = x - Vt$. Это модулированные доменные наноструктуры, явный вид которых будет представлен позднее. Они ограничены как по величине микросмещений, так и по величине микроградиентов. Существенно, что им отвечают самые малые значения константы G , то есть градиентной энергии $k(u_{,x})^2$ (при $u = 0$).

За пределами «малой» сепаратриссы (при больших значениях энергии) лежит ограниченное «большой» сепаратриссой 2 ($G = 1$) семейство периодических решений 3 — замкнутые кривые, охватывающие оба упомянутых центра равновесия. Эти решения связаны с большими микросмещениями соседних атомов, не выходящих, однако, за пределы элементарной ячейки.

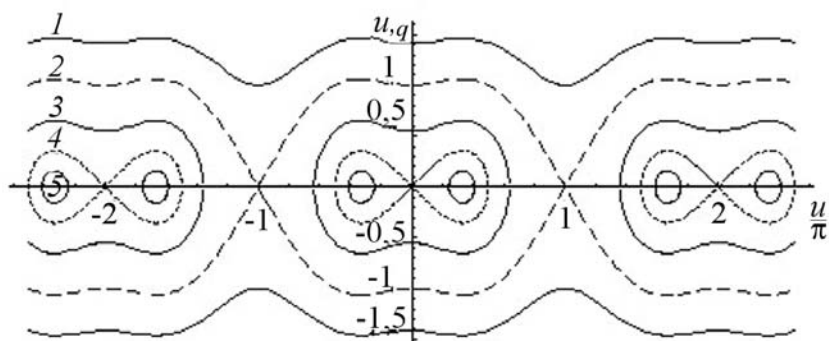


Рис. 3. Фазовый портрет микроколебаний

За пределами «большой» сепаратриссы (при больших G) находится область незамкнутых кривых 1, которые отвечают решениям, не ограниченным величиной микросмещений. Эти решения описывают пластическое течение решетки.

Можно вернуться к формальной аналогии с колебаниями маятниковой системы (считая величину u, q скоростью маятника) и представить наглядную картину его прохождения через некоторые потенциальные барьеры. Двум упомянутым центрам отвечают точки равновесия в двух потенциальных ямах, разделенных потенциальным барьером в точке самопересечения «малой» сепаратриссы. Переход через этот барьер с конечной скоростью (при больших значениях G) отвечает замкнутым кривым, охватывающим данную сепаратриссу. Если же скорость перехода стремится к нулю, то маятник достигает точки бифуркации (неустойчивого равновесия) — седловой точки самопересечения сепаратриссы. Поскольку время нахождения вблизи сепаратриссы велико, соответствующие состояния представляют практический интерес. Это — солитоны поля микросмещений или дефекты решетки. Их физический смысл будет выяснен далее.

Второй («большой») сепаратриссе 2 тоже отвечает неустойчивое состояние на вершине более высокого потенциального барьера, соответствующее второй седловой точке самопересечения сепаратриссы ($|u| = \pi, u_x = 0$). На «большой» сепаратриссе реализуются кинковые решения, также описывающие дефекты структуры.

На рисунке 4 различные режимы периодических колебаний представлены подобластями, разделенными границами, которым отвечают уединенные волны в виде кинков и солитонов. По оси абсцисс отложена величина эффективного потенциального барьера \tilde{P} . Согласно определению (13), это линейная функция напряжения σ . Плоскость констант интегрирования разделяется координатными осями и прямой $G = -2\tilde{p}_1 = -2(\tilde{P} - \tilde{p}_2)$ на области различных решений системы (8), (9). Цифрами 1–6 обозначены области существования периодических решений. Границы между областями образуют горизонтальная линия (луч положительной оси абсцисс) и наклонная линия, задаваемая уравнением $G = -2\tilde{p}_1 = -2(\tilde{P} - \tilde{p}_2)$. Периодические решения областей 4 и 5 даются осциллирующими около нуля функциями $u(x, t)$. Решения же 3 и 2 осциллируют около некоторого среднего уровня $u_a \neq 0$. Это — проявление нелинейного эффекта динамического «расширения», обусловленного несимметрией потенциальных ям. И, наконец, области 1 отвечают дрейфующие моды, когда осциллирующее решение содержит линейную составляющую $\Delta u \sim q = x - Vt$.

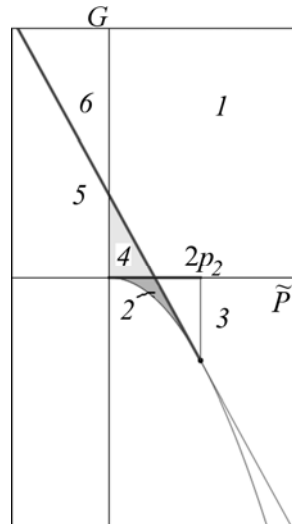


Рис. 4. Карта областей различных решений микроволнового уравнения (15) в зависимости от констант интегрирования G и $\tilde{P}(\sigma)$.

Объектами настоящего исследования будут специальные решения, отвечающие точкам упомянутых выше наклонной и горизонтальной границ. Точки границ, принадлежащие участкам, помеченным на рисунке 3 жирными линиями, соответствуют локализованным решениям типа кинков и солитонов, а точки на продолжениях жирных линий вправо, помеченных тонкими линиями, — специальным периодическим решениям, в которые переходят уединенные решения. Именно эти (уединенные и периодические) решения и будут рассмотрены в следующих разделах. Решения же, не связанные с кинками и солитонами, принадлежащие областям 1–6, здесь не рассматриваются.

2. Структурные переходы в статике

Вначале рассмотрим 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 \tilde{p}_1 — коэффициент 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.

Остановимся на случае статических структур. Полагая в формулах (13), (14) скорость V равной нулю и обращаясь к статическим обозначениям p_1 и p_2 , запишем

$$\tilde{p}_1 \rightarrow p_1 = p - \Delta p, \quad \Delta p = s(s + \sigma) / \lambda. \tag{19}$$

Здесь p_1 означает статическое значение эффективного межатомного барьера \tilde{p}_1 , который отличается от потенциала p идеальной недеформированной решетки величиной Δp . Последнюю будем называть разупрочнением решетки в поле напряжений.

Полное разупрочнение решетки достигается в первой точке бифуркации — при обращении величины эффективного барьера p_1 в нуль, когда

$$\Delta p = p \quad \text{или} \quad (s + \sigma) = p \lambda, \tag{20}$$

то есть стрикционный эффект компенсирует (сглаживает) начальный межатомный барьер. Поскольку по определению $p > 0$ и $\lambda > 0$, то и $\Delta p > 0$. 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

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

Если же $s < 0$, то

$$\sigma = \sigma_{i1}; \quad \sigma_{i1} = -(p\lambda/|s|) + |s|. \quad (22)$$

Здесь σ_{i1} — пороговое значение напряжения, при котором в результате ослабления межатомных связей происходит перестройка структуры решетки. Отметим, что перестроенная структура существует при условиях $\sigma > \sigma_{i1}$ ($s > 0$) и $\sigma < \sigma_{i1}$ ($s < 0$), а ослабленная (разупрочненная) — при обратных знаках неравенств.

Второй точке бифуркации отвечает обращение в нуль первого коэффициента уравнения (15), то есть условие $\tilde{P} = 0$ или $p_1 = -p_2$. В развернутом виде оно принимает вид критерия для напряжения:

$$\sigma = \sigma_i, \quad \sigma_i = p\lambda/s. \quad (23)$$

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

Третья особая точка $p_1 = p_2$ представляет собой границу области существования решений типа уединенных волн. Она достигается при следующем пороговом значении напряжения

$$\sigma = \sigma_{i2}, \quad \sigma_{i2} = (p\lambda/s) - 2s = \sigma_{i1} - s, \quad s > 0. \quad (24)$$

Третьей точке отвечает положительное значение потенциального барьера, первой же точке — нулевое. Это не единственное отличие. Точки бифуркации разграничивают разные структуры решетки. В статике разность структур проявляется в различной зависимости амплитуды от энергии, например, как это показано для солитонов в работе [8]. Рассмотренные критерии упрочнения и разупрочнения важны при анализе подвижности дефектов в тех или иных условиях нагружения.

3. Условия возникновения уединенных волн

Итак, решение уравнения (12) или (15) представляется, как уже отмечено, тремя модами: собственно нелинейными периодическими волнами; кинками; солитонами. Рассмотрим в этом разделе лишь кинки и солитоны. Условиями их возникновения являются, в том числе, и граничные условия.

Уравнение переноса момента импульса (15) имеет, вообще говоря, две солитонных ветви, определяемые условием, накладываемым на константы интегрирования G и σ в указанном уравнении. Это границы между областями — луч положительной оси абсцисс

и наклонная линия $G = -2\tilde{p}_1 = -2(\tilde{P} - \tilde{p}_2)$, которые показаны на рисунке 3. Специальный случай $G=0$ рассматривать не будем.

Обратимся к возбужденным возмущениям, зависящим 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, обращаясь к выражению (15) для первого интеграла, видим, что при значениях $u=\pi$, $u_{,q}=0$ запись для константы G принимает вид:

$$G = -2\tilde{p}_1 = -2(\tilde{P} - \tilde{p}_2). \quad (25)$$

Здесь \tilde{p}_1 — динамическая величина, определенная выражением (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), и позволяет удовлетворить еще одному граничному условию, окончательно определяющему кинковое или солитонное решение. Иными словами, для кинков нужно учесть также и условие в центре ($q=0$), а именно, $u=0$. С помощью выражений (15), (13) и (25) получаем соотношение

$$\tilde{l}_o^2(u_{,q})_o^2 = -2p + 2s \frac{s + \sigma}{\lambda(1 - V^2/V_s^2)}, \quad (26)$$

которое связывает наклон в точке перегиба кинка с константой интегрирования σ .

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

$$0 = \tilde{P}(1 - \cos u_e) - (\tilde{p}_2/2)(1 - \cos u_e)^2 - 2\tilde{p}_1, \quad (27)$$

которое, согласно (13) и (14), связывает амплитуду солитона с напряжением σ , содержащимся в коэффициентах \tilde{p}_1 , \tilde{P} . Установленная связь позволяет, вообще говоря, перейти (для солитонов) к новой константе интегрирования — амплитуде u_e .

Заметим, что общее (для кинков и солитонов) соотношение (25) наряду с указанными двумя константами содержит еще и скорость волны (см. выражения (13), (14)). Поскольку эти константы определяются граничными условиями, то равенство (25) можно рассматривать как определение скорости распространения кинка или солитона. В развернутом виде это условие записывается следующим образом:

$$\tilde{p}_1 = p - (1 - V^2/V_s^2)\Delta p. \quad (28)$$

Здесь Δp определяется выражением (19).

Отсюда находится зависимость скорости распространения от напряжения и величины потенциальных барьеров:

$$V^2/V_s^2 = 1 - s \frac{s + \sigma}{\lambda(p - \tilde{p}_1)}. \quad (29)$$

Константу σ в правой части можно также выразить через амплитуду солитона и наклон кинка в центре с помощью формул (26), (27).

Следует отметить, что в статике ($V=0$) соответствующие величины σ и p_1 оказываются связанными соотношением

$$\tilde{p}_1 = p_1, \quad p_1 = p - s(s + \sigma)/\lambda. \quad (30)$$

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

В динамике энергия, согласно соотношению (29), тратится также и на движение дефектов. Поэтому (30) можно рассматривать в качестве условия порогового возбуждения (например, с помощью лазерного облучения) потока механических возмущений — уединенных волн внутри образца. Если внешние нагрузки (напряжения) отсутствуют ($\sigma=0$), то из (29) следует выражение для V_{ss} — скорости распространения соответствующих свободных колебаний:

$$V_{ss}^2/V_s^2 = 1 - s^2/\lambda(p - \tilde{p}_1), \quad V_s^2 = \lambda/\rho. \quad (31)$$

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

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

$$V_{ss}^2 = \tilde{\lambda}/\rho. \quad (32)$$

Тогда из (31) следует:

$$\tilde{\lambda} = \lambda - s^2/(p - \tilde{p}_1). \quad (33)$$

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 вообще в кристалле распространяются только дозвуковые волны. Речь шла лишь о свободных колебаниях. Под влиянием внешних нагрузок возможны также и сверхзвуковые волны. В общем случае, когда напряжения σ отличны от нуля, скорость V , согласно (29), зависит и от них. Воспользовавшись определением (32), перепишем (29) в виде зависимости эффективного коэффициента динамической упругости и от напряжений σ :

$$\tilde{\lambda} = \lambda \left(1 - \frac{\Delta p}{p - \tilde{p}_1}\right) = \lambda - s \frac{s + \sigma}{(p - \tilde{p}_1)}. \quad (34)$$

Теперь эффективный модуль динамической упругости не обязательно ниже реального. Все зависит от знака второго слагаемого справа в этом выражении. В зависимости от

величины и знака напряжения может иметь место как разупрочнение $\Delta p > 0$, так и упрочнение $\Delta p < 0$ кристалла. Выше оба эти случая охарактеризованы.

Внешнее воздействие приводит к снижению упругих свойств, когда $\Delta p > 0$ и выполняются критерии для напряжений (20), (21) и (22). В этом случае формула (29) дает зависимость скорости распространения от напряжения и материальных параметров.

4. Уединенные волны

Рассмотрим теперь одно из локализованных решений уравнения (15), удовлетворяющее условию (25). Решение возбуждается в диапазоне относительно слабых воздействий при $\tilde{p}_2 > \tilde{p}_1 > 0$ и имеет вид

$$u = + - 2 \operatorname{arctg}(\alpha \operatorname{ch} \zeta), \quad \zeta = (q - q_0)/L = (b - x + Vt)/L. \quad (35)$$

Здесь двойные знаки справа отвечают паре возможных решений. Кроме того, использованы обозначения:

$$\frac{l_o^2}{L^2} = \frac{\tilde{p}_2 - \tilde{p}_1}{1 - V^2/V_k^2}, \quad l_o^2 = k/p, \quad (36)$$

$$\alpha^2 = \frac{\tilde{p}_1}{\tilde{p}_2 - \tilde{p}_1} = \frac{1 - V^2/V_k^2 - S + s^2/\lambda p}{S - 1 + V^2/V_k^2}, \quad S = s \frac{2s + s \sigma}{\lambda p}. \quad (37)$$

Для статики подобные решения рассмотрены в работе [10].

Решение (35) представляет солитон (на пьедестале π) с центром $q = q_0$ и шириной L или дефект упаковки в кристалле типа скопления вакансий. Солитон видоизменяется с приближением к границе существования решения (35) или точке бифуркации $\tilde{p}_1 = 0$. Его ширина (зависящая также и от скорости) уменьшается, амплитуда (отклонение от уровня пьедестала вниз) возрастает, стремясь к предельному значению ($\rightarrow \pi$), а амплитудный множитель $\alpha \rightarrow 0$. Скорость же растет, приближаясь к пороговому значению V_1 , которое на основании (29) удовлетворяет выражению

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

Дальнейшее сужение ширины и рост скорости не происходят, поскольку они сопряжены с переходом величины α в область мнимых значений. Напротив, возможно убывание скорости вплоть до нулевого уровня, что отвечает неподвижному дефекту, и наблюдается это при напряжении

$$\sigma_o = \frac{\lambda p}{s} - s. \quad (39)$$

Напротив, с приближением к другой границе области ($\tilde{p}_1 = \tilde{p}_2$) амплитудный множитель α бесконечно возрастает. Амплитуда же стремится к нулю, и во всем пространстве достигается уровень пьедестала $u = \pi$ (дефект упаковки расплывается). Скорость принимает значение V_2 :

$$V_2^2/V_s^2 = 1 - S, \quad S = s \frac{2s + \sigma_e}{\lambda p}. \quad (40)$$

Таким образом, солитон (35) существует лишь в интервале скоростей $(V_1 - V_2)$. Его величина не зависит от напряжения и дается выражением

$$\frac{V_1^2 - V_2^2}{V_s^2} = \frac{s^2}{\lambda p}, \quad (41)$$

а для амплитудного множителя α очевидна зависимость не только от скорости, но и от напряжения σ .

Функция (37) показана на рисунке 5 для разных значений параметра S . Для того чтобы формулой (35) определялось действительное решение, необходимо одновременное выполнение двух условий: $\alpha^2 > 0$ и $\frac{l_o^2}{L^2} > 0$. Им отвечают верхние участки кривых, лежащих между двумя жирными кривыми 2 и 5. Им соответствуют значения параметра $S = 1$ и $S = 1,5$ и, главное, растягивающие (положительные) напряжения. Интересно, что внутри этой области расположены скоростные зависимости для первоначально неподвижных солитонов (они начинаются от оси ординат).

Отметим, что, вообще говоря, более ясный физический смысл имеет не амплитудный множитель α , а микросмещение u_o в центре солитона (или микроамплитуда), если записать его как $\alpha = \operatorname{tg} \frac{u_o}{2}$. Так величина $\pi - 2 \operatorname{arctg} \alpha = \pi - u_o$ представляет собой микросмещение по отношению к уровню пьедестала π . Используя соотношение (37), можно выразить микроамплитуду u_o через скорость и параметр S или напряжение. С другой стороны, микроамплитуда, согласно (36), связана с ними через ширину дефекта L , в центре которого и реализуются микросмещение u_o .

Располагая решением для микрополя, можно перейти к макроскопическому полю U . Полезно переписать (35) в другом виде, а именно:

$$1 - \cos u = \frac{2 \alpha^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}{1 + \alpha^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}. \quad (42)$$

Используя полученное выражение в формуле (11), найдем соответствующее явное выражение для макроскопического поля деформаций

$$\lambda(1 - V^2/V_s^2)U_{,q} = s \frac{2 \alpha^2 \operatorname{ch}^2 \zeta}{1 + \alpha^2 \operatorname{ch}^2 \zeta} + \sigma. \quad (43)$$

Ясно, что эти деформации порождены микроскопическим дефектом (35). Заметим, что четная функция аргумента ζ в (43) имеет колоколообразный (солитоноподобный) вид.

Другое уединенное решение, отвечающее ветви $G/2 = -\tilde{p}_1$, но в ином диапазоне значений напряжений — $p_1 \leq 0$, дается формулами

$$u = +2 \operatorname{arctg}(a \operatorname{sh} \zeta), \quad a^2 = -\alpha^2 = -\tilde{p}_1/(\tilde{p}_2 - \tilde{p}_1), \quad \zeta = (q - q_o)/L, \quad (44)$$

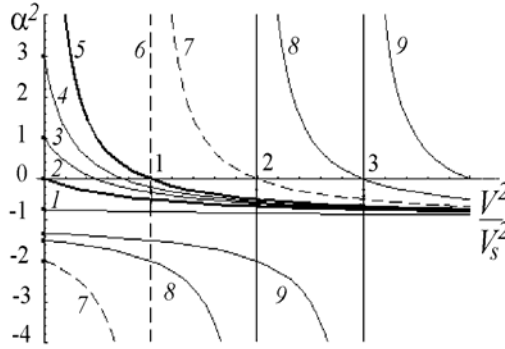


Рис. 5. Зависимость амплитудного множителя α от скорости волны при разных значениях параметра $S(\sigma)$

где двойные знаки справа отвечают паре возможных решений. Кроме того, L — характерный размер области локализации решения (кинка), который дан в выражении (36). Однако амплитудный множитель a определяется здесь несколько иначе, чем в (37). Он связан с амплитудным множителем α через мнимую единицу. Если амплитудный множитель a и ширина L являются действительными величинами, то микроскопическое поле $u(\zeta)$ тоже действительная величина. Ясно, что a^2 должно быть отрицательным. На рисунке 5 ему отвечает область ниже оси абсцисс и ниже граничной кривой 5. Последняя исключает также и область мнимых значений ширины L (кривые 7, 8, 9), отвечающие значениям параметра $S < 1$. Таким образом, амплитудный множитель a , зависит не только от скорости, но и от напряжения σ .

Решение (44) описывает кинкоподобный дефект (с центром $u = 0$ в «точке» $q = q_0$) с пределами $u \rightarrow -\pi, +\pi$ (на бесконечном удалении от центра). В линейном приближении по ζ отсюда получается выражение для дислокации Пайерлса [2]. Как и в случае солитона, более ясный физический смысл имеет не амплитудный множитель a , а микросмещение u_0 в начале отсчета фазы, когда $q = 0$. В то же время в центре кинка $q = q_0$. Константу q_0 можно выбрать так, чтобы на границе $q = 0$ микросмещения достигали наперед заданного значения $u = u_0$.

Тогда из решения (44) следует соотношение

$$\operatorname{tg}^2 \frac{u_0}{2} = a^2 \operatorname{sh}^2 q_0. \tag{45}$$

Используя его, а также обозначения (36), (37), получим формулу

$$\frac{s^2 L^2}{\lambda p l_o^2} = 1 - \frac{\operatorname{tg}^2 u_0 / 2}{\operatorname{sh}^2 q_0}. \tag{46}$$

Введенная таким образом величина L^2 / l_o^2 полезна при формулировке задачи движения слоя (плоского дефекта) толщиной $q_0 = b$, содержащего рассматриваемый кинк. Формула (46) показывает, при каких значениях микросмещения u_0 на границе плоского дефекта $q = 0$ внутри него возникает кинк (44) с относительной шириной L / l_o . Эта зависимость представлена на рисунке 6 для разных значений параметра $s^2 / \lambda p$.

Из рисунка 6 непосредственно видно, что для существования кинка необходимо ограниченное значение микросмещения $u_o \leq \pi \operatorname{arctg} \operatorname{sh} b$. Знак равенства отвечает вертикальной асимптоте, ограничивающей область решения. При этом возникают кинки шириной $L^2/l_o^2 \approx (\lambda p)/s^2$. При больших значениях микросмещения на границе слоя при $u_o = \pi \operatorname{arctg} \operatorname{sh} b$ непрерывные кинки (44) вырождаются в дефекты с нулевой шириной ($l_o^2/L^2 \rightarrow \infty$), то есть в систему разрывов поля микросмещений. В силу многозначности функции арктангенса имеем $u_o \rightarrow \pi \pm 2n\pi$ при $b \rightarrow \infty$. Это значит, что микросмещение, равное половине периода решетки, достигается (с точностью до целого числа периодов) лишь на бесконечно удаленной от центра кинка границе, в то время когда в его центре оно равно нулю. В теле же ограниченных размеров, содержащем кинки (дислокации) возможны выходы на поверхность дислокаций с образованием ступенек. Интересно, что в случае солитонов такого рода ограничения не возникают. Аналогичные зависимости величины l_o^2/L^2 от микросмещения u_o на границе слоя (дефекта) $q=0$ существуют при всех значениях u_o , и ее максимум соответствует $u_o = 0; 2\pi$, где дефекты самые узкие.

Как и в случае солитона, константу b можно выбрать так, чтобы на границе полупространства $x=0$ микросмещения достигали наперед заданного значения $u = u_o$. Для этого кинк (44) должен удовлетворять условию

$$\frac{l_o^2}{L^2} = \beta_0 \operatorname{sh}^2 b / \left(\operatorname{sh}^2 b - \operatorname{tg}^2 \frac{u_o}{2} \right). \quad (47)$$

Кинку, в отличие от солитона, отвечают иные зависимости от микросмещений. На рисунке 6 видны асимптоты бесконечных значений l_o^2/L^2 (нулевых значений ширины кинков или толщины погранслоя) при граничных значениях микросмещений ($\operatorname{tg}^2 \frac{u_o}{2} = \operatorname{sh}^2 b$), и это же следует прямо из выражения (47). Следует подчеркнуть, что такие значения существуют всегда. Это обострение кинкового дефекта (вплоть до разрыва) связано со скоростной зависимостью величины l_o^2/L^2 , которая будет рассмотрена далее.

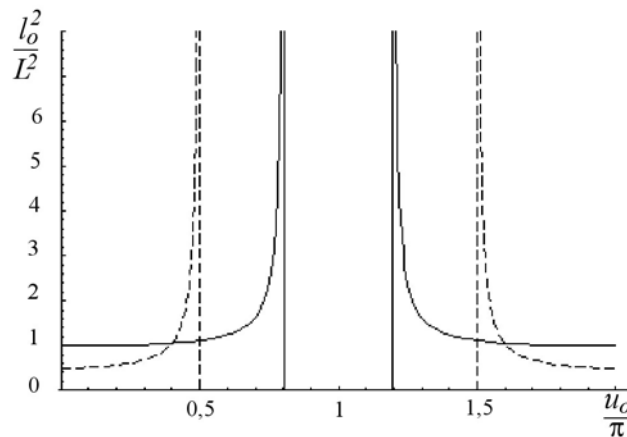


Рис. 6. Зависимость обратной ширины дефекта от микросмещения на границе дефектного слоя

Отметим также, что кривые на рисунке 5, попадающие в «коридор» между кривыми 2 и 5, исходят из точек оси ординат и пересекают ось абсцисс. Они отвечают неподвижным дефектам, которые затем начинают двигаться и при некоторой скорости превращаются в разрывы, распространяющиеся со сверхзвуковыми скоростями. Одним из отличий кинков от солитонов является их область существования на оси скоростей, что видно на рисунке 5. Таким образом, солитоны — это медленные дефекты, скорость которых много ниже скорости линейного звука V_s .

Напротив, кинки могут двигаться не только со сверхзвуковой скоростью, но и значительно ее превышать, выходя на уровень скоростей оптической моды V_k . Так кривая 1 на рисунке 5 с амплитудным множителем $a^2 = -\alpha^2 \approx 1$ почти мгновенно уходит в область неопределенно больших скоростей. При этом амплитудный множитель в решении (44) стремится к единице. Предельное условие $a = 1$ означает бесконечно быстрое скольжение кинка.

Располагая решением для микрополя, можно перейти к макроскопическому полю U . Полезно переписать (44) в другом виде, а именно:

$$1 - \cos u = \frac{2a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta}{1 + a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta}. \quad (48)$$

Используя это выражение в формуле (11), получим соответствующее явное выражение для макроскопического поля деформаций

$$\rho(V_s^2 - V^2)U_{,q} = s \frac{2a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta}{1 + a^2 \operatorname{sh}^2 \zeta} + \sigma. \quad (49)$$

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 (44), кинкоподобным дефектом (с центром в q_o и с пределами $u \rightarrow -\pi, +\pi$ на бесконечном удалении от центра).

5. Вырождение уединенных волн в периодические

Рассмотрим более детально переход уединенных волн (кинков и солитонов) в периодические локализованные волны. В отличие от периодических волн (области 2–б на Рис. 3) они принадлежат первой ветви $G = -2\tilde{p}_1 = -2(\tilde{P} - \tilde{p}_2)$ (наклонная прямая там же). Оказывается также, что и уединенные волны второй ветви ($G = 0$) могут переходить в периодические. Превращение кинков и солитонов в периодические локализованные волны происходит, как отмечалось в предыдущих разделах, при определенном напряжении. Но, кинки и солитоны первой ветви могут перерождаться в периодические волны и с убыванием напряжения (ростом потенциального барьера \tilde{p}_1). Это наблюдается, когда напряжение преодолевает порог, вычисляемый из соотношения $\tilde{p}_1 = \tilde{p}_2$, и величина l_o^2/L^2 становится, согласно определению (36), отрицательной. При мнимых значениях ширины дефекта ($\lambda = -iL$) в правых частях решений (35) и (45) гиперболические функции преобразуются в тригонометрические:

$$\operatorname{ch}(q - q_o)/L \rightarrow \cos(q - q_o)/\lambda, \quad \operatorname{sh}(q - q_o)/L \rightarrow -i \sin(q - q_o)/\lambda. \quad (50)$$

В результате решение (35) принимает вид:

$$\operatorname{tg}(u/2) = \alpha \cos(q - q_0) / \lambda. \quad (51)$$

Однако здесь нужно учесть условия, при которых амплитудный множитель α (равно как и величина u) должен остаться действительной величиной ($\alpha^2 > 0$) при неравенстве $l_o^2/L^2 < 0$. Анализ соответствующей формулы для α — (37), дан в предыдущих разделах. Как непосредственно видно из графиков рисунка 5, условия реализации обоих неравенств ($\alpha^2 > 0$ и $l_o^2/L^2 < 0$) выполнены для серии кривых в случае периодических волн. Они имеют различный вид в зависимости от скоростного интервала. В случае решения (51) нужно принять:

$$1 + s^2 / \lambda p \geq S \geq s^2 / \lambda p \quad (0 < V^2 < V_s^2); \quad S < 0 \quad (V_s^2 < V^2 < V_k^2). \quad (52)$$

Результаты представлены на рисунке 5. Условие $\alpha^2 > 0$ выполняется для участков кривых, лежащих выше оси абсцисс и справа от пограничной кривой 5. Условие $l_o^2/L^2 < 0$ реализуется ветвями, лежащими слева от оси ординат и выше оси абсцисс (в четвертом квадранте). Дозвуковыми ветвями, отвечающим формуле (51) (это малые участки, исходящие вправо и вверх из оси абсцисс вплоть до оси ординат), соответствуют амплитудные зависимости — верхние участки кривых, расположенных между кривыми 5 и 7. Сверхзвуковые ветви решения (51) начинаются на оси ординат и идут влево и вверх с выходом на горизонтальную асимптоту $V = V_k$ — границу оптической моды. Соответствующие амплитудные зависимости изображаются верхними участками кривых, расположенных правее кривой 7. Они заходят и под ось абсцисс $\alpha^2 < 0$, реализуя переход к другому периодическому решению.

Это новое периодическое решение получается из соотношения (45), если учесть переход к мнимым длинам L с помощью второго соотношения в (50). Для того чтобы избавиться от мнимого множителя перед синусом, перейдем в область амплитудных зависимостей $\alpha^2 < 0$. Им отвечают участки кривых на рисунке 5, лежащие ниже оси абсцисс. Для сохранения микросмещения u в области действительных чисел возьмем амплитудный множитель вида $a = i\alpha$. В результате получим периодическое продолжение решения (44)

$$\operatorname{tg}(u/2) = -a \sin(q - q_0) / \lambda. \quad (53)$$

Упомянутые кривые под осью абсцисс, направленные в сторону бесконечно высоких скоростей, но не опускающиеся ниже уровня $\alpha^2 = -1$, являются периодическими волнами оптической моды. На рисунке 5 им отвечают ветви в области мнимых значений L , простирающиеся вверх и влево. Ниже уровня оптических колебаний лежат ветви, относящиеся к промежуточному диапазону сверхзвука $V_s^2 < V^2 < V_k^2$. Их амплитуды представляются на рисунке участками кривых, также не опускающихся ниже уровня $\alpha^2 = -1$, но расположенных между кривыми 5 и 7 ($1 < S < 0$).

И, наконец, медленные периодические волны, отвечающие решению (53), изображаются на рисунке 5 дозвуковыми ветвями также в четвертом квадранте. Они начинаются от оси абсцисс и соотносятся с первоначально неподвижными регулярными дефектами, которым соответствуют амплитудные зависимости

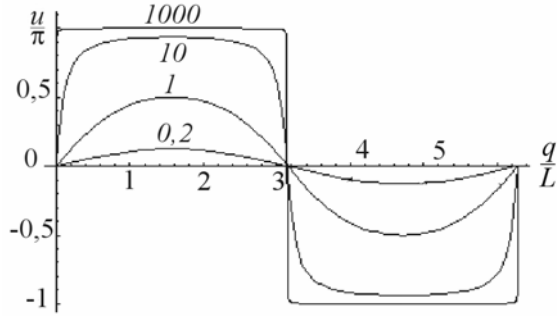


Рис. 7. Эволюция формы периодического решения в зависимости от роста амплитудного множителя от 0,2 до 1000

с безгранично убывающими (в сторону отрицательных) значениями, уходящие вниз и влево ($-\infty < \alpha^2 < -1$). Бесконечно растущий амплитудный множитель перед синусом в решении (53), левая часть которого выражается через тангенс искомой функции, приводит к обострению, вырождению плавной её зависимости от аргумента.

На рисунке 7 представлены графики самой функции микросмещений $u(q/L)$ для разных значений амплитудного множителя a из решения (53). Очевидно, его высоким значениям (значениям микроамплитуды $u \rightarrow -\pi, +\pi$) отвечает профиль волны, представляющий систему П-образных (локализованных) последовательностей или регулярную последовательность резких кинков с чередующимися знаками, напоминающий график эллиптического синуса с бесконечно большими периодами L . В пределе достигается точка перехода фоннных мод в кинковые. В начале раздела сформулирован критерий этого перехода в виде условия $\tilde{p}_1 = \tilde{p}_2$. Раскрывая его в соответствии с формулами (13), (14) получим соотношение

$$\frac{2s^2 + \sigma}{\lambda p} = (1 - V_i^2 / V_s^2). \tag{54}$$

Здесь V_i — скорость волны на границе фонон–кинк. В таком виде критерий перехода дает прямую связь напряжения со скоростью перехода V_i .

При переходе уединенных волн в периодические встает вопрос об устойчивости последних. Интересен в этом смысле результат, полученный Уиземом [13]. Он доказал необходимое условие устойчивости стационарной периодической волны, являющейся решением уравнения Клейна–Гордона. При $\tilde{p}_2 = 0$ исследуемое уравнение (15) является его частным случаем. Необходимое условие Уизема сводится к требованию возрастания интенсивности колебаний G с увеличением обратного периода l_o/L . Поскольку эти величины связаны (для волн первой ветви) соотношением $p(l_o/L)^2 = \tilde{p}_2 - G/2$, то очевидно, что условие устойчивости выполняется, если $l_o^2/L^2 < 0$, то есть в случае периодических волн.

6. Дисперсионные зависимости для локализованных волн

Локализованные решения уравнения (15) имеют различные зависимости ширины локализации волны L от параметров σ и V . Наибольший интерес представляют волны первого типа $G = -2\tilde{p}_1 = -2(\tilde{P} - \tilde{p}_2)$, которым отвечает зависимость (36). В развернутом и преобразованном виде она выглядит так:

$$\frac{l_o^2}{L^2} = \frac{S}{(1-V^2/V_s^2)(1-V^2/V_k^2)} - \frac{1}{(1-V^2/V_k^2)}, \quad l_o^2 = \frac{k}{p}, \quad S = \frac{s}{p} \varepsilon_m, \quad \varepsilon_m = \frac{(2s + \sigma)}{\lambda}. \quad (55)$$

Здесь «волновой» множитель $(1-V^2/V_k^2)$, входящий в определение величины \tilde{l}_o^2 (16), перенесен в правую часть формулы.

Обращает на себя внимание физический смысл параметра S . Он просто пропорционален экстремальному значению деформации $\varepsilon_m = \lambda U_{,x} = 2s + \sigma$, достигаемому в области солитона или кинка для $u = \pi$. При положительном значении коэффициента механострикции s параметр S может менять знак в зависимости от величины и знака напряжения. С другой стороны, S характеризует связь между макро- и микросостояниями.

Соотношение (55) эквивалентно биквадратному уравнению относительно V^2 , имеющему два корня: $V_{ac}^2(L)$ и $V_{op}^2(L)$, соответствующих акустической и оптической ветвям. Если связь отсутствует ($S = 0, \varepsilon_m = 0$), то эти корни следующие:

$$V^2 = V_s^2, \quad (56)$$

$$V^2/V_k^2 = 1 + L^2/l_o^2. \quad (57)$$

Первое соотношение есть результат решения макроскопического волнового уравнения (произвольная волна, распространяющаяся со скоростью линейного звука), второе определяет зависимость скорости волны микросмещений от ширины кинка или солитона. Обе волны по условию не зависимы, каждой из них отвечает своя ветвь на рисунке 8, а. Первая ветвь это просто прямая, параллельная оси абсцисс на уровне $V^2 = V_s^2$, вторая (мелкие штрихи) пересекается с ней и состоит из двух участков гиперболы: суперскоростного $V^2 \geq V_k^2$ (верхняя кривая) и низкоскоростного $V^2 \leq V_k^2$ (нижняя кривая). Этот так называемый кроссовер (резонанс) вырождается, если макро- и микромоды взаимодействуют.

В случае макродеформации растяжения ($S = \varepsilon_m = 0,5$ и $(s\sigma)/(\lambda p) = 0$) картина кроссовера распадается на две ветви (две жирные сплошные кривые $V^2 \leq V_k^2$ на рисунке 8, а). Обе ветви изображают один корень уравнения (55), имеющий разрыв при $V^2 = V_s^2$. Второму корню соответствует суперскоростная ветвь (жирная кривая $V^2 \geq V_k^2$). Пара ветвей раздвинута тем больше, чем сильнее взаимодействие макроскопической и микроскопической волновых мод (больше параметр S , зависящий линейно от напряжения). Так кривым, отмеченным жирными штрихами, удовлетворяют значения $S = \varepsilon_m = 1$ и $(s\sigma)/(\lambda p) = 0,5$. Для пары кривых, обозначенных длинными тонкими штрихами, имеем $S = \varepsilon_m = 1,5$ и $(s\sigma)/(\lambda p) = 1$. Напротив, отрицательным значениям сжимающих напряжений ($S = \varepsilon_m = 0,2$ и $(s\sigma)/(\lambda p) = -0,3$) отвечают кривые, наиболее близкие к кроссоверу, обозначенные на рисунке 8, а точками.

Если рассмотреть случай отрицательного параметра взаимодействия $S = \varepsilon_m = -0,5$ и $(s\sigma)/(\lambda p) = -1$ (макродеформации сжатия), то видно, что кроссовер разрешается с образованием иных ветвей (сплошные тонкие кривые на рисунке 8, а). Теперь в области действительных решений локализованных волн ($l_o^2/L^2 > 0$) оказываются и волны промежуточного диапазона скоростей, а низкоскоростные локализованные волны не образуются. Они переходят в мнимую область, где могут

возникать низкочастотные периодические волны, которые энергетически подпитываются высокочастотными локализованными волнами.

Заметим, что на рисунке 8, *a* в области отрицательных значений оси абсцисс находятся мнимые значения ширины дефекта L . Соответствующие участки ветвей не представляют действительных решений для уединенных волн. Однако они могут иметь смысл для периодических решений, если гиперболические функции, с помощью которых описываются локализованные волны, переходят в тригонометрические, согласно критерию (54). Тогда положительный параметр взаимодействия отвечает за передачу энергии локализованных волн периодическим волнам. Этот случай рассмотрен в предыдущем разделе.

Отметим ещё следующее. Точки оси абсцисс на рисунке 8, *a* изображают по определению нулевые скорости, то есть связаны со статическими значениями ширины L_0 неподвижных дефектов, для которых

$$\frac{l_0^2}{L_0^2} = S - 1; \quad V = 0. \quad (58)$$

Так жирная пунктирная кривая, отвечающая значению $S = 1$, исходит из точки $l_0^2/L^2 = 0$ на оси абсцисс. Это значит, что соответствующий дефект в неподвижном состоянии имеет бесконечно большую ширину ($L_0 \rightarrow \infty$). Если $S = 1,5$, то связанная с ним кривая (показанная тонкими длинными штрихами) должна исходить из точки $l_0^2/L_0^2 = 0,5$.

Соотношение (58) позволяет сформулировать критерий стагнации уединенных неподвижных дефектов. В силу положительности левой части выражения (58), раскрывая выражение для S , имеем:

$$\frac{\lambda}{p} \varepsilon_m \geq 1 \rightarrow \sigma \geq \sigma_p, \quad \sigma_p = p\lambda / s - 2s. \quad (59)$$

Второе неравенство переписано относительно напряжений. Здесь величина σ_p есть порог подвижности дефекта. Для дислокаций он известен как барьер Пайерлса [2]. Отсюда может быть вычислен коэффициент механоупругости s .

Ширина дефекта зависит от напряжения: с ростом положительных (растягивающих) напряжений растет и параметр взаимодействия. Тогда, согласно (58), растет и обратная ширина дефекта L , то есть он сильнее локализуется. В пределе кинк превращается в ударную разрывную волну. Ширина также зависит и от скорости. Это значит, что форма локализованной волны при движении не сохраняется — она меняется за счет обмена энергией с макроскопической модой.

Отметим две особенности изменения формы локализованной волны. Первая из них связана с асимптотическим выполаживанием этой ветви при больших значениях квадрата 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 ординат в точке $V_{ac} = 0$. Ей отвечает случай, когда достаточно размытый кинк (дислокация) или солитон (дефект упаковки), которым в данной теории соответствует уединенная волна, могут останавливаться.

Суперзвуковым волнам отвечает зависимость (57) скорости от ширины уединенной волны — «оптическая» ветвь $V_{op}^2(L)$, которая является вторым корнем уравнения (55). На рисунке 8, *a* она изображается верхней кривой. 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.

Зависимости (56), (57) имеют представление и в области мнимых значений ширины L , когда ее квадрат соответствует на оси абсцисс отрицательными значениями. На рисунке это — промежуточная сверхзвуковая ветвь V_{ao} , располагающаяся в интервале значений скоростей $V_s^2 < V_{ao}^2 < V_k^2$. Она имеет простой физический смысл — описывает периодические (нелокализованные) волны, которые рассматривались в предыдущем разделе. Следует подчеркнуть, что это особые волны переключения межатомных связей с амплитудой $u_m = \pi$, генетически связанные с уединенными волнами общим условием образования, когда константа G в уравнении (15) задается специальным образом, согласно условию (25). При другом выборе этой константы возможны иные периодические волны, принадлежащие областям 2–б рисунка 3.

Интересен случай сильных сжимающих напряжений, при которых параметр упрочнения становится сильно отрицательной величиной. Если соответствующий параметр упрочнения становится равным

$$S = \left(1 - \frac{V_k^2}{V_s^2}\right), \quad V_k^2 > V_s^2, \quad (60)$$

то достигается скорость оптической моды $V = V_k$. Это прямо следует из соотношения (55), которое принимает вид

$$\frac{l_o^2}{L^2} = \frac{1 - V_k^2/V_s^2}{(1 - V^2/V_s^2)(1 - V^2/V_k^2)} - \frac{1}{(1 - V^2/V_k^2)}. \quad (61)$$

Соответствующая ветвь пересекает уровень $V = V_k$, как видно из рисунка 8, б, при положительном значении $l_o^2/L^2 > 0$, когда распространяются уединенные волны. Возникает вторая кроссовая ситуация, которая отличается от кроссовой ситуации, рассмотренной в начале данного раздела (резонанса акустической и сверхзвуковой ветвей) тем, что здесь резонируют сверхзвуковая и оптическая моды. Она характерна для растягивающих напряжений, которые ослабляют решетку, приводя к возникновению стоячих дефектов.

При больших сжимающих напряжениях ($S \leq 1 - V_k^2/V_s^2$) свойства кристалла претерпевают качественные изменения. Кристалл упрочняется, становится жестким (алмазоподобным), лишаясь пластичности. Это проявляется в том, что в нем не возникают дефекты, то есть уединенные волны (кинки и солитоны), способные останавливаться. В этом случае возникают лишь высокоскоростные ветви бегущих волн, показанные на рисунке 8, б для $S = -1$ (сплошные тонкие кривые), $S = -2,9$ (мелкие тонкие штрихи), $S = -3$ (жирные штрихи), $S = -3,1$ (точки) и $S = -4$ (длинные тонкие штрихи). Кроссовая ситуация образована пересечением кривой $S = -3$ с горизонтальной линией $V^2 = V_k^2 = 4$. В первом квадранте ($l_o^2/L^2 > 0$) отсутствуют дозвуковые ветви, исходящие из точек оси абсцисс $V = 0$, которым отвечают неподвижные дефекты. Солитонные и кинковые решения проявляются в сверхзвуковом

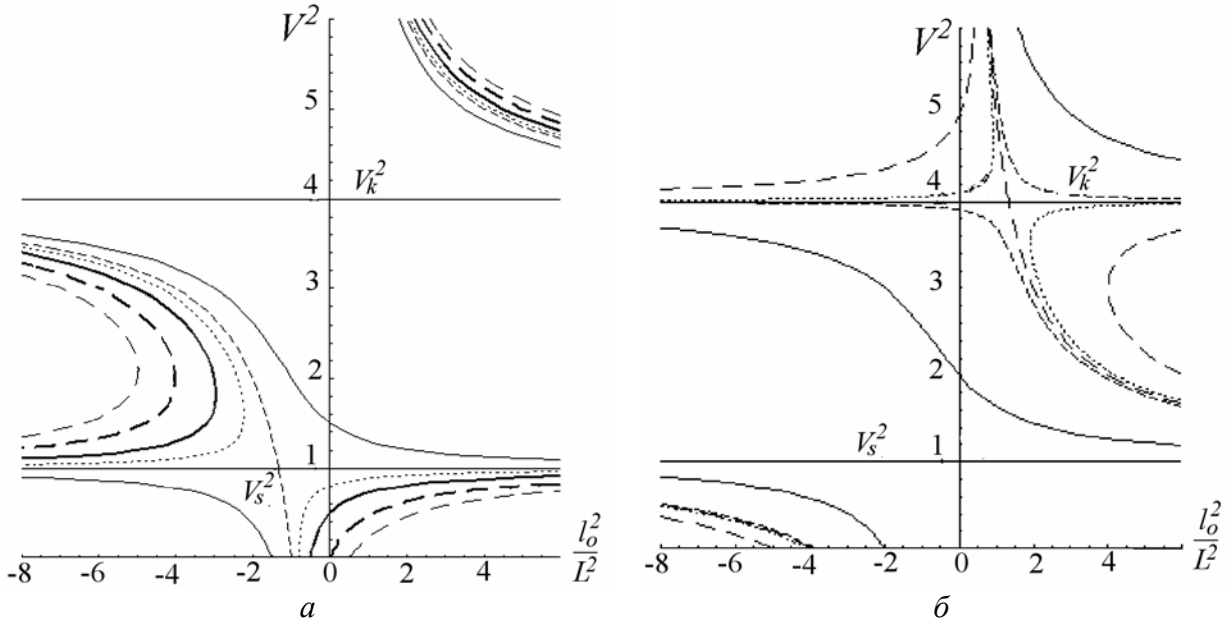


Рис. 8. Зависимость скорости от обратной ширины уединенной волны ($l_o^2/L^2 > 0$) и обратного периода периодической волны ($l_o^2/L^2 < 0$) для кристалла, разупрочненного растягивающими напряжениями (а) и упрочненного большими сжимающими напряжениями (б)

диапазоне $V_s^2 < V^2 < V_k^2$. Интересно, что все же существует узкая область суперзвуковых (оптических) волн, занимающая диапазон весьма широких (слабо локализованных) образований:

$$0 < \frac{l_o^2}{L^2} \leq \frac{V_k^2}{V_k^2 - V_s^2}. \tag{62}$$

Знак равенства здесь достигается при значении параметра упрочнения S , представленном соотношением (60). Отметим, что это значение отрицательное.

Однако, во втором квадранте ($l_o^2/L^2 < 0$) при условии $S \leq 1 - V_k^2/V_s^2$ располагаются ветви низкоскоростных периодических волн, берущие начало от отрицательного участка оси абсцисс. При нулевых скоростях — это неподвижные периодические надструктуры с периодом L/l_o . Бегущие нелинейные волны существуют лишь в суперскоростном (оптическом) диапазоне.

7. Обсуждение результатов и выводы

На основе предложенной ранее дискретно-континуальной модели сложной решетки развивается теория нелинейных волн в твердых телах. Эта 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» мод, установленным еще в работах Кармана, Борна, Хуан Куня. Вариационный подход,

предложенный по существу впервые Е. и Ф. Коссера (за 10 лет до Ф. Клейна и Э. Нетер), распространяется здесь, в принципе, на трансляционные внутренние степени свободы кристаллической решетки.

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 развитой сильно нелинейной теории рассматриваются локализованные волны типа кинков и солитонов, описывающие распространение и релаксацию дефектов упаковки и дислокаций, а также их переход в нелинейные периодические волны при сильном сжатии. Механизм механострикции, в зависимости от напряжений и коэффициента стрикции, реализуется в явлениях упрочнения (охрупчивания) и разупрочнения (пластификации) кристалла. С ними связано возникновение медленных дозвуковых, быстрых сверхзвуковых и сверхбыстрых волн оптической моды. Взаимное влияние акустической и оптической мод (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 служит 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. В частности, при определенной скорости периодическая волна переходит в локализованную и наоборот. Этот процесс перестройки характеризуется критериальными значениями напряжений. Выявлены условия формирования квазиразрывных волн. Ранее некоторые из этих эффектов рассмотрены в работе [14].

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 07-01-00213, № 09-08-00634).

Литература

1. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. – М.: И. Л., 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. Cosserat E. et F. Theorie des corps deformables. – Paris: Libraire Scientifique A. Hermann et Fils, 1909. – 226 p.
5. Ерофеев В.И. Волновые процессы в твердых телах с микроструктурой. – М.: Изд. Моск. ун-та, 1999. – 327 с.
6. Лурье С.А., Белов П.А. Вариационная формулировка математических моделей сред с микроструктурой // Математическое моделирование систем и процессов: Сб. научн. трудов. – Пермь: Изд-во ПГТУ, 2006. – № 14. – С. 114-132.
7. Аэро Э.Л. Структурные переходы и устойчивость сдвиговых деформаций в полиатомных слоях // Изв. РАН. Неорганические материалы. – 1999. – Т. 35, № 8. – С. 860-862.

8. *Аэро Э.Л.* Существенно нелинейная микромеханика среды с изменяемой периодической структурой // Успехи механики. – 2002. – Т. 1, № 3. – С. 130-176.
9. *Aero E.L.* Micromechanics of a double continuum in a model of a medium with variable periodic structure // J. of Eng. Mathem. – 2006. – Vol. 55, N. 1-4. – P. 81-95.
10. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н.* Сильно нелинейная теория формирования наноструктуры вследствие упругих и неупругих деформаций кристаллических тел // Изв. РАН. МГТ. – 2007. – № 5. – С. 170-187.
11. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н.* Нелинейная теория локализованных волн в сложных кристаллических решетках как дискретно-континуальных системах // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 1. – С. 14-30.
12. *Porubov A.V., Aero E.L., Maugin G.A.* Two approaches to study essentially nonlinear and dispersive properties of the internal structure of materials // Phys. Rev. E. – 2009. – V. 79, N 4. – P. 046608.
13. *Уизем Дж.* Линейные и нелинейные волны. – М.: Мир, 1977. – 622 с.
14. *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.

Поступила в редакцию 25.11.09

Сведения об авторах

Аэро Эрон Люттович, дфмн, зав. лаб., Институт проблем машиноведения РАН (ИПМАШ РАН), 199178, Санкт-Петербург, Большой пр., д. 61, E-mail: 16aero@mail.ru

Булыгин Анатолий Николаевич, д.т.н., внс, ИПМАШ РАН; E-mail: 16aero@mail.ru