

Микромасштабные деформации в двумерной решетке — структурные переходы и бифуркации при критическом сдвиге

© Э.Л. Аэро

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

(Поступила в Редакцию 14 июля 1999 г.
В окончательной редакции 11 ноября 1999 г.)

Рассмотрена двумерная модель кристаллической решетки с существенно нелинейным взаимодействием между атомами при произвольных взаимных смещениях в условиях сдвига. Энергия деформирования содержит периодический и градиентные члены. Уравнение равновесия в форме синус-Гельмгольца (с двумя характерными длинами когерентности) решается точно. Показано, что достаточно большая однородная деформация сдвига неустойчива и сопровождается возникновением периодических модуляций вдоль слоя, приводящих к неоднородным растяжениям и сжатиям атомных цепочек, т.е. к изменениям дальнего порядка. При проскальзывании цепочек на полпериода решетки и более изменяется и ближний порядок. Получены соотношения, связывающие размеры ячейки и амплитуду поля смещений, которые определяют условия существования модулированной структуры. Обнаружен бифуркационный переход от чисто упругой деформации решетки к упруго-пластической, а также переход в неупорядоченное (аморфоподобное) ее состояние.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98-01-01076).

Некоторые результаты теории изложены в кратком сообщении [1]. В настоящей работе дано не только их обоснование, но и выявлен физический смысл структурных переходов и точек бифуркации.

В теории деформирования твердых тел, в том числе и кристаллических, принимается в качестве постулата условие сохранения локальной топологии в процессе изменения структуры — ближайшие соседи (в пределах малой окрестности материальной частицы) остаются неизменными, а силовые связи между частицами не переключаются. Учитывается лишь сопротивление тела изменению расстояний между малыми, но макроскопическими объемами. В действительности же происходят также и изменения дальнего и ближнего трансляционного порядков в кристалле. Для их учета необходимо введение структурных факторов. В некоторой степени это было сделано еще М. Борном и Хуан Кунем в известных работах при рассмотрении оптических ветвей колебаний, правда, лишь в линейном приближении. Микросмещения u соседних атомов друг относительно друга представляются как полуразность смещений подрешеток. Макросмещениям U , ответственным за акустические колебания, соответствует полусумма смещений. При этом ограничивались малыми смещениями и чисто динамическими эффектами.

Для развития более общей теории примем во внимание наряду с континуальными также и структурные силы. Последние в угоду внутреннему строению тела стремятся сохранить трансляционный периодический порядок, в то время как континуальные стремятся его нарушить. Структурным степеням свободы соответствует в упругом потенциале решеточное слагаемое, являющееся периодической функцией микросмещений u , а континуальным — слагаемое, являющееся квадратичной

функцией их градиентов. Последнее следует отличать от макропотенциала акустического поля U , которое в данной работе не анализируется. Оно подчиняется уравнениям теории упругого континуума, которые здесь не рассматриваются. Равновесие обоих факторов возможно лишь в пределах определенных пространственных масштабов, промежуточных между атомными и макроскопическими. Речь, таким образом, пойдет о теории, которая рассматривает мезоскопические моды движения атомной решетки.

Избегая здесь построения общей теории микродеформаций (точнее, мезодеформаций), ограничимся наиболее простой версией. Рассмотрим статическую деформацию сдвига вдоль оси OY двумерной квадратной решетки с периодом b и нелинейными силами взаимодействия между атомами. Энергия E участка слоя толщиной H и протяженностью $2B$ принимается в виде

$$E = \int_0^H \int_0^B [(1/2)k_1(\partial u/\partial x)^2 + (1/2)k_2(\partial u/\partial y)^2 + p(1 - \cos u)] dx dy. \quad (1)$$

Здесь u — взаимное микросмещение цепочек (в единицах b) вдоль слоя (оси OY), k_1 — микромодуль сдвига и k_2 — микромодуль продольного растяжения решетки, p — амплитуда межчастичного периодического потенциала, равно как и амплитуда (наибольшее значение) силы сцепления. Микромодули отличны, строго говоря, от соответствующих модулей в макроскопической теории упругости.

Третий член в (1) отвечает энергии однородного сдвига жестких монослоев (цепочек), а первые два учитывают их податливость или упругость двумерной решетки

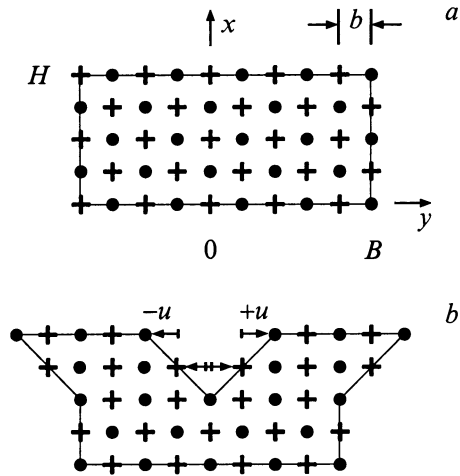


Рис. 1. Расположение атомов в квадратной решетке в исходном состоянии (а) и после однородной деформации ($u = \pm 2\pi$) двойникования (б). Крестики и кружки отличают подрешетки, демонстрируя эффект переключения связей.

при сдвиге и растяжении вдоль оси координат OY . В случае жестких монослоев простое условие, когда поле микросмещений является константой, означает не жесткое смещение всей решетки как целого, а однородную сдвиговую ее микродеформацию, которая по существу и равна относительной (в единицах b) величине микросмещения u . При жестком микросдвиге соседних цепочек на величину одного межатомного расстояния получается однородная деформация двойникования (рис. 1).

Уравнение равновесия, соответствующее минимуму функционала (1), имеет вид

$$k_1(\partial^2 u / \partial x^2) + k_2(\partial^2 u / \partial y^2) - p \sin u = 0. \quad (2)$$

Это нелинейное уравнение, известное как уравнение синус-Гельмгольца, очевидно содержит две характерные длины когерентности решетки

$$l_1 = \sqrt{k_1/p}, \quad l_2 = \sqrt{k_2/p}. \quad (3)$$

Они определяют те мезоскопические масштабы, которые появляются в настоящей теории в отличие от теории континуальной, безмасштабной. В масштабах меньше мезоскопических дальний трансляционный порядок полностью нарушается градиентами деформаций. Решетка сохраняет определенный трансляционный порядок лишь на больших расстояниях. Будет показано, что длины когерентности в нелинейной теории как бы уменьшаются и не дают точного предела существования порядка.

При $l_1 \rightarrow 0$ приходим к одномерной модели Френкеля–Конторовой — упругой цепочке атомов, взаимодействующих с периодической подложкой. В нашей же модели рассматривается взаимодействие параллельных цепочек друг с другом (а не с подложкой), способных как к проскальзыванию друг относительно друга, так и к непрерывному деформированию. Первые два члена

в уравнении равновесия (2) отвечают континуальным, сглаженным по атомарным масштабам силам, а третий нелинейный член учитывает межатомные структурные силы. Не является тривиальным случай, когда континуальные силы обращаются в нуль при равных нулю градиентах микросмещений. Тогда структурные силы самоуравновешиваются, если $u = 2n\pi$, что прямо следует из уравнения (2). При $u = 2\pi$ имеем, очевидно, деформацию двойникования.

Если (2) соответствует минимуму функционала (1), то максимуму отвечает уравнение с обратным знаком перед нелинейным членом. Их решения u_+ , u_- , как нетрудно видеть, связаны преобразованием (меняющим знак у синуса), т. е.

$$u_-(x, y) = u_+(x, y) \pm \pi,$$

$$k_1(\partial^2 u_+ / \partial x^2) + k_2(\partial^2 u_+ / \partial y^2) + p \sin u_+ = 0. \quad (4)$$

Они отличаются трансляцией структуры на половину периода решетки (в единицах b). В результате переходим от стабильной к неустойчивой конфигурации решетки, когда одни атомы перемещаются из локальных минимумов на вершины потенциальных барьеров, а другие, напротив, — с вершин в минимумы, что формально соответствует изменению знака величины p , максимальной силы межатомного взаимодействия. Ясно, что происходит переключение межатомных связей с изменением соседей частиц — ситуация, в модели сплошной среды невозможная. В случае жестких цепочек переключение связей происходит на всем протяжении слоя. Однако в случае упругой системы эффект переключения может быть сильно локализован, и тогда после перехода через экстремальное состояние вновь возникает устойчивое, но возбужденное состояние, энергия которого связана с границами.

Представляет интерес микродеформация в слое, когда на границах возникает критический сдвиг $u = \pi$ или

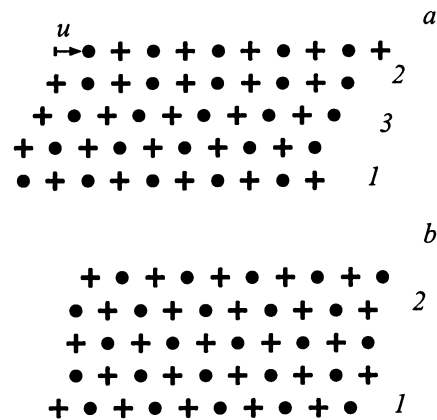


Рис. 2. Расположение цепей при неоднородном упруго-пластическом (а) и упругом микросдвиге (б) на границе $x = 0$ (1), $x = H$ (2) и вблизи внутренней границы между упругой и пластической зонами (3). В последней видна смена ближайших соседей.

двойниковый сдвиг $u = 2\pi$, а между границами сдвиг меньше (рис. 2). Границы имеют условный смысл — за их пределами все та же решетка, которая разделяется, скажем, забегая вперед, на слои одинаковой толщины с одинаковой картиной микродеформаций в них. Толщина слоев не вполне произвольна. Она определяется условиями устойчивости большого сдвига.

Исследование этих эффектов начнем с анализа точного двумерного решения u уравнения (2), которое подчиним граничным условиям двойникового неоднородного(!) сдвига с переключением связей (рис. 2, *a*),

$$u(0, y) = 0, \quad u(|n|H, y) = 2\pi|n|, \quad n = \pm 1, 2, \dots \quad (5)$$

Построим также решение u_- , удовлетворяющее условиям критического сдвига (рис. 2, *b*)

$$u_-(0, y) = -\pi, \\ u_-(|n|H, y) = (2|n| - 1)\pi, \quad n = \pm 1, 2, \dots \quad (6)$$

Во втором случае речь идет о взаимном сдвиге соседних цепочек на границах $x = 0$ и H (при $n = 1$) на величину π , т. е. на половину периода исходной решетки, в ту и в другую сторону. Оставляя пока без внимания случай больших значений n , отметим, что граничные атомы выходят при критическом сдвиге на максимумы микрорельефа, а внутри слоя (толщиной H) эти сдвиги, конечно, меньше. Такая деформация вправе именоваться чисто упругой. Будет показано, что соответствующее предельное состояние решетки может быть устойчивым, когда деформации испытывают периодические модуляции вдоль слоя.

В случае граничных условий первого типа речь идет (при $n = 1$) о жестком взаимном сдвиге соседних цепочек на границе $x = +H$ и $-H$ на величину одного межатомного расстояния (также влево и вправо). Заметим, что в отличие от предыдущего случая при $x = 0$ взаимный сдвиг цепочек отсутствует — атомы находятся в начальных минимумах микрорельефа, а на границах они попадают в соседние ямы. Можно было бы уровень $x = 0$ принять в качестве границы с условием "прилипания". Такого рода закритический (упруго-пластический сдвиг) может быть устойчив при специальных условиях и в однородной вдоль слоя конфигурации.

Ясно, что условия первого типа учитывают эффект переключения межатомных связей на границах слоя толщиной $2H$ с образованием топологического дефекта типа линии скольжения. В большом же объеме система линий скольжения (при $n \geq 1$) порождает пластический сдвиг всего объема по бездислокационному механизму двойникового, что, конечно, предполагает условие мягкости решетки. Проскальзывание пар цепочек (с использованием ближайших соседей атомов) имеет место не только на указанных границах, но и в глубине слоя на некотором расстоянии — возникают своего рода пластические пограничные зоны, о которых подробнее будет сказано далее.

Оправдано ожидание определенных пороговых условий возникновения этих эффектов. Для этого вначале необходимо построить соответствующие решения. Они оказываются устойчивыми, если принять периодические граничные условия по оси OY с некоторым периодом $2B$, что будет показано. Для построения точных решений уравнения (2) воспользуемся методом Лэма разделения переменных для уравнения синус-Гельмгольца [2], согласно которому решение ищется в виде

$$\operatorname{tg}(u/4) = Q_1/Q_2, \quad Q_1 = Q(x), \quad Q_2 = Q(y). \quad (7)$$

С помощью этого представления исходное уравнение (2) разделяется на два обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнения относительно частных функций Q_1, Q_2

$$(\partial Q_1/\partial x)^2 = a^2(Q_1^2 + B_1)(Q_1^2 + C_1), \\ (\partial Q_2/\partial y)^2 = a^2(Q_2^2 - B_2)(C_2 - Q_2^2). \quad (8)$$

В оригинальной работе [2] справа в этих уравнениях фигурируют три произвольные константы интегрирования, которые заранее подобраны так, чтобы исходное уравнение удовлетворялось. Целесообразно записать, как это было сделано впервые в [3], двучлены справа через пять констант (a, B_1, B_2, C_1, C_2) и получить (путем подстановки (8) в (2)) в явном виде два дополнительных соотношения, которым эти константы подчиняются

$$B_1C_1 = B_2C_2, \quad a^2(B_1 + C_1) - a^2(B_2 + C_2) = 1. \quad (9)$$

Уравнения (8) решаются в эллиптических функциях. Введение на промежуточном этапе избыточных констант интегрирования дает более широкие возможности для выбора тех или иных эллиптических функций, ориентируясь на заданные граничные условия. Далее этот выбор проверяется с помощью соотношений (9), которые оказываются условиями существования решения.

Подробно процедура построения интересующего нас решения описана в [4,5]. Оно имеет вид двоякопериодической функции

$$\operatorname{tg}(u/4) = \pm \operatorname{tn}(q_1x) \operatorname{dn}(q_2y) / A \operatorname{cn}(q_2y), \\ A^2 = \nu_2 / \sqrt{1 - \nu_1^2}. \quad (10)$$

Здесь q_1, q_2 это пространственные эллиптические частоты

$$q_1 = K_1/H, \quad q_2 = K_2/B. \quad (11)$$

H, B — полупериоды эллиптического тангенса tn , косинуса cn и дельта-функция Якоби dn соответственно, а K_1, K_2 — полные эллиптические интегралы первого рода, известным образом зависящие от своих аргументов-модулей ν_1, ν_2 [6]. Последние определены в интервале от 0 до 1. Справедливы следующие асимптотики [6]:

$$K \rightarrow \infty, \quad \operatorname{tn} \rightarrow \operatorname{sh}, \quad \operatorname{dn} \rightarrow 1/\operatorname{ch}, \quad \nu \rightarrow 1, \\ K \rightarrow \pi/2, \quad \operatorname{tn} \rightarrow \operatorname{tg}, \quad \operatorname{dn}^2 \rightarrow (1 - \nu^2 \sin^2), \quad \nu \rightarrow 0. \quad (12)$$

Они, в частности, показывают, что модули ν_1 , ν_2 и K_1 , K_2 определяют "степень эллиптичности" соответствующих функций и степень их локализации по соответствующим осям, а с нею и величины градиентов смещений. Последние в принципе могут быть неопределенно велики и при ограниченных периодах $2H$, $2B$ или пространственных частотах поля смещений. Тогда возникают солитоноподобные области локализованных деформаций.

С помощью (12) легко убедиться, что решение (10) удовлетворяет граничным условиям (6) в действительности при всех целых n , т. е. оно существует, вообще говоря, во всей плоскости и граничный сдвиг линейно растет с ростом номера границы n . Граничным условиям (5) удовлетворяет решение (4), которое будет рассмотрено подробнее далее. Отметим заранее, что функция u_+ в (4) дается той же формулой (10), но при иных значениях величины A . Оба решения периодичны по оси OY (с периодом $2B$) в силу периодичности функции dn . Поскольку последняя положительна (исключая предельный случай $\nu = 1$), все поперечные сечения слоя характеризуются сложным профилем смещений. Ясно, что выражение (10) является периодическим решением и по оси OX с периодом $2H$. Полученное решение показывает, что и в деформированном состоянии, когда на некоторых линиях достигаются условия критического сдвига, возможен трансляционный порядок, реализующийся в виде доменной суперструктуры.

Внутри же каждой ячейки в случае суперструктуры (5), (10) происходит постоянное нарастание взаимного сдвига цепей от нуля при $x = 0$ и до 2π на границе $x = H$ в соответствии с (5). На рис. 2, а эти уровни обозначены цифрами 1 и 2. Следовательно, где-то в промежутке достигается значение, равное π , соответствующее выходу атома на вершину барьера — уровень 3 на том же рисунке. Большому значению сдвига соответствует пластическое проскальзывание — переключение связей и изменение ближнего порядка. Следовательно, вблизи центра каждого слоя толщиной $2H$ возникает зона упругих сдвигов, а вблизи границ — два пластических погранслоя. Заметим, что внутренняя граница раздела упругой и пластической областей не является прямолинейной, как это для простоты изображено на упомянутом выше рисунке. В действительности внутренняя граница осциллирует с периодом $2B$. Ее уравнение дается выражением (10) при $u = \pi$, когда правая часть его оказывается равной единице.

Продолжая анализ упруго-пластической конфигурации (10), (5), рассмотрим критерии ее существования. Обратим вначале внимание на то, что решение (10) содержит после удовлетворения граничным условиям две произвольные константы интегрирования ν_1 , ν_2 . Они в принципе находятся из соотношений (9), которые следует назвать дисперсионными соотношениями, поскольку накладываются связи на пространственные частоты q_1 и q_2 . Их можно выразить через указанные константы так:

$$(2 - \nu_1^2)k_1q_1^2 - (1 + \nu_2^2)k_2q_2^2 - p = 0, \quad (13)$$

$$k_1q_1^2 = A^2k_2q_2^2, \quad p \geq 0. \quad (14)$$

Первое является прообразом самого уравнения (2) и получается подстановкой в него решения (10). Здесь второе слагаемое отвечает градиентам смещений вдоль слоя, ответственным за неоднородное растяжение цепочек. Существенно, что знак перед ним в отличие от первого слагаемого отрицателен. Это значит, что имеет место конкуренция соответствующих сил в установлении равновесия. Если поперечные градиенты создают силы, направленные против структурных сил, удерживающих порядок, то продольные растяжения (сжатия) цепочек действуют в том же направлении, что и структурные силы. Уже из расстановки знаков в (13) следует, что для его выполнения (возникновения устойчивых деформаций) необходимо, чтобы поперечные градиенты сдвига преобладали над продольным растяжением (сжатием).

Соотношение между ними задается вторым дисперсионным уравнением (14) в зависимости от параметра A , который определен изначально в (10). Уравнение же (14) придает ему простой смысл отношения характерных энергий микросдвига и микрорастяжения. Он играет определяющую роль в вопросах устойчивости этих деформаций. Критическая величина этого параметра может быть уточнена после элементарного преобразования (13) и (14) в два следующих условия:

$$S = A^2P_1 = P_2. \quad (15)$$

Здесь

$$S = (A^2 - 1)(1 - \nu_2^2/A^2). \quad (16)$$

В (15) введены величины P_1 , P_2

$$P_1 = p/k_1q_1^2, \quad P_2 = p/k_2q_2^2. \quad (17)$$

Фактически в (15) дано разделение дисперсионных соотношений относительно пространственных эллиптических частот q_1 , q_2 . В нелинейной теории частоты выражаются не только через материальные константы, но и зависят от параметра A .

По поводу вновь введенных в (17) величин (эффективных относительных потенциалов) следует отметить, что они имеют смысл некоторых коллективных характеристик взаимодействия не отдельных атомов, а участков цепей длиной $2B$ и $2H$ в суперструктуре. Они, так же как и решеточный потенциал p недеформированной структуры, положительны, что равносильно устойчивости суперрешетки. Это, однако, требует неравенства $A \geq 1$, при котором $S \geq 0$ и дисперсионные соотношения в форме (15), т. е. условия существования решения, выполняются. Значениям A , меньшим единицы, когда преобладают продольные градиенты, соответствуют, как это отмечено ранее, неустойчивая конфигурация решетки и отрицательные значения эффективных барьеров P_1 , P_2 . Последнее равносильно условию (4) взаимного сдвига цепочек на полпериода недеформированной решетки.

Далее будет показано, что и в области значений параметра $A \leq 1$ можно построить устойчивое решение, но с новыми граничными условиями, переход к которому

происходит через точку $A = 1$. По этой причине интересно рассмотреть точку структурного перехода $A = 1$ с других позиций. Ей соответствует, как это следует из (15), и условие обращения в нуль потенциального барьера $p = 0$, скажем, за счет температуры. При этом структурные силы исчезают — происходит исчезновение и трансляционного порядка в результате потери устойчивости подрешеток к сдвигу. Тогда модель вырождается в два независимых бесструктурных континуума, связанных лишь граничными условиями. Действительно, оба поля (микро- и макросмещений) подчиняются теперь одинаковым уравнениям классической теории упругости. Ясно, что условию $S = 0$ или $A = 1$ соответствует точка ветвления решения уравнения (2), а величина A имеет смысл бифуркационного параметра.

На самом деле не обязательно связываться с изменением самой модели в процессе повышения температуры тела, обращающей в нуль величину барьера p . В нашем случае аналогичный эффект достигается за счет градиентов микродеформаций, также нарушающих трансляционный порядок. К точке $S = 0$ можно тогда приблизиться, правда, лишь асимптотически, устремив к нулю эффективные потенциальные барьеры P_1, P_2 , определенные в (17). За счет роста деформационных градиентов подавляется роль решеточного потенциала таким образом, что становится возможен обмен ролями поперечного сдвига и продольного растяжения (сжатия). При этом, как и в случае $p = 0$, происходит смена знака в S , т.е. в градиентной части уравнения за счет перехода параметра A через значение, равное единице. Структурный переход, разумеется, имеет иной смысл — теряется устойчивость к сдвигу деформированных подрешеток (суперструктуры) и происходит существенная перестройка искаженного трансляционного порядка деформированной конфигурации. Поэтому эффективные потенциалы, являющиеся относительными величинами, можно рассматривать в качестве параметров искаженного трансляционного порядка в деформированном кристалле.

Суперструктура, а с ней и иной трансляционный порядок снова появляются при $A \leq 1$, когда возникает новое устойчивое микрополе u_- , согласно (4). Уточним явный вид поля u_+ в (4). Оно удовлетворяет уравнению в (2), которое отличается от (2) обратным знаком перед нелинейным членом, что соответствует максимуму функционала (1). Это неустойчивое решение u_+ дается также формулой (10), но при $A \leq 1$. При этом оно по-прежнему удовлетворяет граничным условиям (5). Новое же устойчивое решение u_- дается тогда первой формулой в (4) и удовлетворяет, очевидно, граничным условиям (6) (рис. 2, *b*). Так что в случае микродеформаций речь идет о переходе в граничных условиях. Имеется аналогия с точкой бифуркации в режиме больших колебаний маятника — в верхнем положении неустойчивого равновесия маятник может вернуться назад или продолжить движение.

Новые граничные условия в отличие от (5) исключают пластические погрязоны, что согласуется со снижением

роли поперечного сдвига при $A \leq 1$. В новой суперрешетке уже нет необходимости пластического сбора энергии и переключения связей. Энергия перераспределяется в пользу продольной деформации цепей.

Отметим еще, что подобные чисто упругие смещения возникают в слое, толщина которого вдвое меньше и существенно меньше продольные периоды $2B$.

Итак, области чисто упругих ($A \leq 1$) и упруго-пластических деформаций ($A \geq 1$) разделены точкой бифуркации $A = 1$, в которой переход сопровождается проскальзыванием на границе на половину периода начальной решетки.

В каждой из этих областей реализуются дополнительные ограничения. Они также следуют из дисперсионных соотношений. Для их выявления нужно исключить из (14), (13) константы интегрирования ν_1, ν_2 . Определив последние из (14), (13) через H, B , получим A как функцию тех же величин. Удобнее изобразить взаимосвязь трех величин A, B, H семейством кривых, выражающих зависимость H от B при разных значениях бифуркационного параметра A (рис. 3, 4).

Рассмотрим вначале область значений $A \geq 1$, когда решение дается в (5), (10). Каждому значению параметра A соответствует кривая на плоскости (H, B) (рис. 3). Она близка к гиперболе с асимптотами

$$H \geq H_t, \quad H \leq \infty, \quad H_t = l_1(1 - 1/A^2)K_{11}, \quad (18)$$

$$B \geq B_t, \quad B \leq \infty, \quad B_t = (\pi/2)l_2\sqrt{A^2 - 1}. \quad (19)$$

Здесь K_{11} есть значение функции $K_1(\nu_1)$ в точке $\nu_1 = \sqrt{1 - 1/A^4}$. Эти неравенства задают предельные значения размеров доменов или ячеек суперструктуры. Легко видеть, что однородный вдоль слоя сдвиг, когда $(1/B) \rightarrow 0$, в принципе возможен, но при жестком условии $H = H_t$, что соответствует средней деформации,

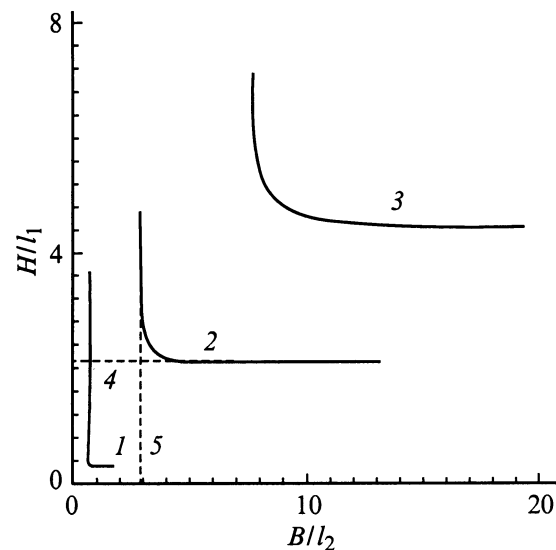


Рис. 3. Кривые существования устойчивой конфигурации решетки при $A > 1$. 1 соответствует $A = 1.1$, 2 — $A = 2$, 3 — $A = 5$, 4 — $H = H_t$, 5 — $B = B_t$.

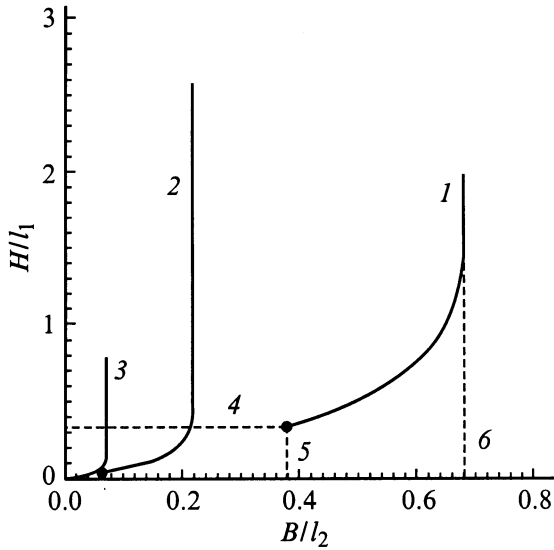


Рис. 4. Кривые устойчивых конфигураций при $A < 1$. 1 соответствует $A = 0.9$, 2 — $A = 0.99$, 3 — $A = 0.999$, 4 — $H = H_c$, 5 — $B = B_c$, 6 — $B = B_i$.

равной b/H_t . Для других же значений толщин и деформаций однородный сдвиг невозможен и сопровождается модуляциями с периодами $2B$.

Заметим, что величина порога определяется длинами когерентности l_1 , l_2 с множителями, зависящими от A . Эти множители приводят эффективно к сокращению длин когерентности.

Как следует из (18), (19), решение с переключением связей на границах, т.е. упруго-пластический сдвиг, возможно лишь в достаточно толстых слоях и длинных ячейках. В противном случае в слое возникают слишком большие градиенты микродеформаций сдвига, несовместные с каким-либо трансляционным порядком.

Это ясно видно, если представить (18), (19) в форме энергетических соотношений, раскрыв в них согласно (3) длину когерентности. Тогда получим в ином виде условия существования упруго-пластического двоякопериодического поля микросмещений или условие возникновения суперструктуры при проскальзывании цепей

$$\begin{aligned} p &\geq k_1(K_{11}/H)^2(1 - 1/A^2)^2, \\ (1 - 1/A^2)^2 &\leq P_1 \leq (1 - 1/A^2), \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} p &\geq k_2\pi^2(A^2 - 1)/4B^2, \\ (A^2 - 1)^2/A^2 &\leq P_2 \leq (A^2 - 1). \end{aligned} \quad (21)$$

Первые неравенства в каждой строке с очевидностью показывают, что суперструктура в условиях проскальзывания цепей требует для своего поддержания достаточно больших структурных потенциальных барьеров и ограниченных по величине градиентов, нарушающих трансляционный порядок в решетке. Если первые слишком малы, а вторые — велики, то условия существования решетки

не выполняются. Тогда, по-видимому, возникает неупорядоченная деформированная структура, т.е. происходит переход порядок–беспорядок, означающий, что под влиянием больших градиентов деформаций (при малых коллективных барьерах) может возникать аморфоподобная структура. Окончательно решение этого вопроса в рамках данной теории невозможно.

Вторые неравенства в (20), (21) демонстрируют универсальность пределов эффективных барьеров, зависящих лишь от бифуркационного параметра A . Они обращаются в нуль в точке граничной бифуркации.

Рассмотрим теперь снова область $A \leq 1$, когда устойчивая конфигурация дается формулами (4), (6), в которых поле u_+ , как и u_- , определяется соотношениями (5), (10), но при условии $A \leq 1$. Напомним, что здесь речь идет о чисто упругой микродеформации с условиями предельно допустимого сдвига на границах. На рис. 2, b они обозначены цифрами 1 и 2. Цифра 4 указывает на тот срединный уровень, где микросмещения равны нулю. Этот уровень в действительности осциллирует, что не нашло своего отражения на схематическом рисунке.

В этом случае (рис. 4) каждая кривая на той же плоскости (HB) при заданном значении A имеет по одной асимптоте $B = B_i$ и приходит в конечную точку H_c , B_c , не достигая начала координат, так что

$$H \geq H_c, \quad H \leq \infty, \quad B_c \leq B \leq B_i. \quad (22)$$

Значения этих пределов таковы:

$$H_c = \pi l_1(1 - A^2)/2A^2, \quad (23)$$

$$B_c = l_2(1 - A^2)K_{22}, \quad B_i = \pi l_2\sqrt{1 - A^2}/2. \quad (24)$$

Здесь K_{22} — значение функции $K_2(\nu_2)$ в точке $\nu_2 = A^2$.

Сравнивая масштабы на координатных осях рис. 3 и 4, видно, что теперь ячейки суперструктуры значительно меньше. Кроме того, как и прежде, не все значения параметров H , B допустимы — из (21), (22) следуют очевидные ограничения.

Однако в отличие от упруго-пластических деформаций здесь полностью исключается вся область больших продольных масштабов суперструктур B , а с ними и однородный сдвиг. Действительно, величина B не превышает длины когерентности с множителем, зависящим от A , который может оказаться весьма малым при $A \rightarrow 1$. Энергия однородного сдвига слишком велика, и в угоду устойчивости она передается продольным деформациям. В предыдущем случае пластические деформации поглощают избыток упругой энергии однородного сдвига, правда, при жестких ограничениях на толщину слоя.

Таким образом, в малых областях возможны лишь упругие искажения трансляционного порядка. Однако при размерах ячейки суперрешетки, меньших допустимых H_c , B_c , мы выходим за пределы области существования решения, и мелкомасштабная суперструктура становится невозможной.

Неравенства (21), (22) можно выразить через энергетические параметры так:

$$p \geq k_1(\pi/2H)^2(1-A^2)^2/A^2, \\ (1-A^2)^2/A^2 \leq P_1 \leq (1/A^2-1), \quad (25)$$

$$(\pi k_2/2B^2)(1-A^2) \geq p \geq (k_2/B^2)(1-A^2)^2 K_{22}^2, \\ (1-A^2)^2 \leq P_2 \leq (1-A^2). \quad (26)$$

Существенным отличием от случая упруго-пластических деформаций является ограничение по потенциальному барьеру не только снизу, но и сверху. Чтобы понять это, обратимся снова к дисперсионному соотношению (13). Переход к чисто упругому случаю формально выразился в том, что сумма первых двух (градиентных) членов изменила знак, — это и есть переход в область, где параметр A становится меньше единицы. Но теперь уже продольные градиенты должны преобладать, а домены не могут быть слишком короткими — по крайней мере должны значительно превышать межатомные расстояния. По этой причине слишком большие потенциальные барьеры решетки не могут быть в этом режиме преодолены. Таким образом, чисто упругий критический сдвиг возникает в вилке значений величин p , B или градиентов, как это представлено в (26).

Чисто упругие, но большие микродеформации и их градиенты возможны, как уже отмечалось, без пластического сброса при наличии другого механизма разгрузки. Он реализуется благодаря компенсирующим (стабилизирующим) силам, порожденным градиентами микродеформаций вдоль слоя. Дело в том, что растяжение (сжатие) цепей вдоль слоя препятствует скатыванию частиц в потенциальные ямы, поскольку это привело бы к дополнительному растяжению (сжатию). Иными словами, соседние цепочки приобретают несоответствие структур. В результате вместо пластических деформаций возникают большие продольные градиенты, отвлекающие на себя избыточную энергию сдвигового деформирования. Такое перераспределение энергии между модами микродеформаций реализуется в мелкомасштабной (вдоль слоя) модулированной структуре, каковая и реализуется при значениях $A \leq 1$. Несответствие в структуре соседних цепочек выгодно для устойчивости лишь до определенного предела. При больших их длинах $2B$ энергия поперечного сдвига компенсируется недостаточно для обеспечения устойчивости. Поэтому имеет место ограничение чисто упругих структур по этим длинам в соответствии с (22).

Таким образом, нелинейная теория микродеформаций в двумерной решетке, основанная на точных решениях нелинейного уравнения равновесия синус-Гельмгольца, предсказывает неустойчивость большого однородного сдвига. Она также позволяет учесть влияние больших градиентов микродеформаций на дальний трансляционный порядок решетки в двух случаях критического и двойникового (закритического) сдвига на границах. В последнем случае возникает проскальзывание цепочек

на величину, превышающую половину периода решетки, что означает переключение связей и изменение ближнего порядка в расположении атомов. В бесконечном пространстве возникает двумерная суперструктура с большими периодами, т.е. происходит уменьшение дальнего трансляционного порядка. Внутри доменов или ячеек возможны два устойчивых состояния микрополя (критического и закритического сдвига), разделенных бифуркационным переходом с переключением межатомных связей. Установлены критерии существования устойчивых состояний, ограничивающих величины градиентов деформаций по отношению к величине потенциальных барьеров начальной недеформированной структуры решетки. Установлены параметры порядка — эффективные потенциальные барьеры, обращающиеся асимптотически в нуль в точке бифуркации, что интерпретируется как полная потеря дальнего трансляционного порядка.

Список литературы

- [1] Э.Л. Аэро. Неорганические материалы **8**, 1 (1999).
- [2] Lamb G.L. Elements of Soliton Theory. Wiley, N.Y. (1980).
- [3] Э.Л. Аэро. Кристаллография **40**, 5, 889 (1995).
- [4] Э.Л. Аэро. Прикладная математика и механика **60**, 1, 79 (1996).
- [5] Э.Л. Аэро. Изв. РАН. МТТ **1**, 182 (1998).
- [6] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. Специальные функции. Наука, М. (1977). 342 с.; E. Janke, F. Emde, F. Losch. Tafel Horerer Funktionen. Stuttgart, Tourner (1960).