

Неоднородный микросдвиг в сложных решетках в поле больших макроскопических деформаций (точные решения)

© Э.Л. Аэро

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
191178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: aero@microm.ipme.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 17 января 2003 г.)

Развита нелинейная теория микро- и макродеформаций при большом неоднородном сдвиге двух подрешеток, составляющих сложную решетку, когда кроме акустической возбуждается и псевдооптическая сильно нелинейная мода. Уравнение относительного движения подрешеток решается точно для частного случая среды с центром симметрии. Соответствующее уравнение равновесия типа синус-Гельмгольца имеет двоякопериодическое решение. Оно описывает фрагментацию решетки — возникновение доменной суперструктуры с большими периодами, в ячейках которой находятся ротоны противоположных направлений, разделенные топологическими дефектами разных знаков. Чисто упругие микродеформации сменяются упругопластическими. И те, и другие возникают в результате бифуркационного перехода, когда первоначально однородное поле деформаций сменяется неоднородным. Размеры доменов оптимизируются в однородном внешнем поле макроскопических деформаций после достижения им порогового значения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 01-01-00307), а также Федеральной целевой программы Минпромнауки (проект № 40.010.1-1.1195).

В настоящее время немалое внимание исследователей привлекает проблема структурных и фазовых превращений в поле напряжений и деформаций. Ранние попытки ее решения путем введения внутренних степеней свободы на модели сложной решетки показали, что в пределах линейной теории предсказываются некоторые новые эффекты. Однако этот подход оказался неэффективным. Малые изменения внутренней структуры просто отслеживают изменения макроскопической геометрии решетки и приводят лишь к перенормировке материальных констант; модель сложной структуры сводится фактически к модели простой структуры [1,2]. Основные новые результаты: появление новых оптических мод колебаний, пространственно-временная дисперсия упругих свойств и пограничные эффекты в статике. Кардинальные же структурные перестройки оказались за пределами линейного подхода.

Покажем, что переход к существенно нелинейным оптическим колебаниям дает возможность предсказывать глубокие изменения структуры (локальной топологии): полиморфные превращения, бифуркации, возникновение дефектов, переключение связей, изменение ближнего и дальнего порядка.

Будем для простоты рассматривать случай двух подрешеток. Тогда из линейной теории кристаллической решетки [3,4] следуют два уравнения движения (для акустических и оптических мод соответственно):

$$\rho \ddot{U}_i = c_{ikj} u_{k,j} + \lambda_{ikjm} U_{k,jm} + O_1, \quad (1)$$

$$\mu \ddot{u}_i = -c_{kij} U_{k,j} - \hat{c}_{kij} u_{k,j} - p_{ik} u_k + k_{ikjm} u_{k,jm} + O_2. \quad (2)$$

Здесь точки сверху означают производные по времени, запятая в тензорных индексах — производную по координате. По повторяющимся индексам подразумевается суммирование. В (1), (2) U_i — вектор смещений центров инерции элементарных ячеек (мотивов сложной решетки), u_i — вектор относительных смещений двух атомов в каждой элементарной ячейке. Последний будем относить к периоду решетки Браве (подрешетки). Так, случай $|u_i| = 1$ означает смещение подрешеток на один период. Далее, ρ и μ — атомная плотность массы и плотность приведенной массы двух атомов. Слагаемые O_1 , O_2 — высокоградиентные члены, неучитываемые в длинноволновом приближении.

Тензоры упругих констант обладают симметрией по тензорным индексам: $p_{ij} = p_{ji}$, $\hat{c}_{ikj} = -\hat{c}_{kij}$. Что касается тензоров четвертого ранга k_{ikjm} , λ_{ikjm} , то они обладают симметрией внутри пар индексов (без перестановки пар) лишь в случае парных (центральных) взаимодействий. Отметим, что в континуальной теории упругости имеется и симметрия по отношению к перестановке пар индексов. Симметрия внутри пар исчезает в случае непарных (нецентральных) взаимодействий.

Рассмотрим сначала (1), (2). Первые члены справа (с коэффициентами c_{kij} , \hat{c}_{kij}) — перекрестные члены, ответственные за локальное взаимодействие мод. Они отличны от нуля лишь для кристаллов без центра симметрии (в силу нечетного ранга соответствующих тензоров). Перекрестные члены более высокого порядка входят в слагаемые O_1 , O_2 .

Первое уравнение (для акустических колебаний) сводится (в пренебрежении высокоградиентными членами O_1) к макроскопическому уравнению колебаний сплошной среды без дисперсии упругих свойств. Гра-

диентные слагаемые, вообще говоря, учитывают дальнедействующие силы, а градиенты макроскопических смещений $U_{i,k}$ характеризуют изменение размеров и формы всего тела (внешнюю его геометрию).

Второе уравнение (для оптических колебаний) содержит безградиентное слагаемое (третий член справа), которое отвечает силам связи соседних атомов в элементарной ячейке, или взаимодействию подрешеток. Соответствующий вектор смещения u_i как раз и учитывает изменение ближнего порядка в решетке, или изменение внутренней геометрии среды, ее структуры.

1. Основные соотношения

Введение в теорию изменений внутренней структуры с помощью внутренних степеней свободы u_i оказывается эффективным, если перейти к следующему обобщению уравнения (2). Допустим произвольно большие смещения подрешеток u_i . Тогда вместо линейного появляется нелинейное слагаемое вида $P_i(u_j) = -P_i(-u_j)$, т.е. нечетная нелинейная векторная функция. В силу внутренней трансляционной симметрии сложной решетки она должна быть периодической функцией с периодом, соответствующим периоду b решетки Браве в данном направлении смещения.

В результате вместо (1), (2) имеем следующую систему уравнений:

$$\rho \ddot{U}_i = c_{ikj} u_{k,j} + \lambda_{ikjm} U_{k,jm} + O_1, \tag{3}$$

$$\mu \ddot{u}_i = -c_{kij} U_{k,j} - \hat{c}_{kij} u_{k,j} - P_i(u_j) + k_{ikjm} u_{k,jm} + O_2. \tag{2}$$

Здесь слагаемые O_1, O_2 имеют тот же смысл, что и в линейных уравнениях. Поскольку смещение u_j исчисляется в единицах периода решетки Браве (в данном направлении), периодами этой функции являются целые числа. В частности, если $P_i \rightarrow \sin(2\pi u)$, то микросмещению $u = |u_j| = 1$ отвечает переход подрешеток в новое, но кристаллографически эквивалентное (ближайшее) структурное состояние, поэтому u определено с точностью до целого числа. Но при таком переходе происходит переключение связей и изменение ближайших соседей каждого атома, т.е. изменение внутренней структуры. Этого не происходит, если микросмещения велики, но все же $u < 1/2$. Это значит, что необходим учет существенно нелинейных эффектов ($u \geq 1/2$).

Периодическая векторная функция может быть построена следующим образом: $P_i \equiv \partial d / \partial u_i$, где $d(u_j)$ — периодическая скалярная функция, инвариантная к преобразованию координат. Это просто энергия жесткой трансляции подрешеток, выражение для которой дано в следующем разделе.

В настоящей работе ограничимся предельно простым случаем в рамках этой нелинейной версии теории. Рассмотрим кристалл или среду с центром симметрии,

когда

$$c_{ikj} = \hat{c}_{kij} = O, \quad u_i = (0, u, 0), \\ u = u(x, y), \quad P_i(u_j) \rightarrow p \sin(2\pi u). \tag{5}$$

Ясно, что мы учитываем лишь низкочастотные колебания среды, пренебрегая высокими частотами колебаний кристалла — поле микросмещений (направленное вдоль оси OY) не зависит от времени. Далее для кристаллов высоких сингоний (кроме триклинной и моноклинной) получим

$$k_{ikjm} u_{k,jm} \rightarrow k_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + k_2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \tag{6}$$

В этом операторе нет смешанных производных, что связано не только с высокой симметрией решетки, но и с однокомпонентностью вектора u_i .

Итак, рассматриваем далее два независимых уравнения в длинноволновом приближении

$$\rho \ddot{U}_i = \lambda_{ikjm} U_{k,jm}, \tag{7}$$

$$0 = -p \sin(2\pi u) + k_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + k_2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \tag{8}$$

Перекрестные члены здесь отсутствуют, локального взаимодействия мод деформаций в длинноволновом приближении нет (в центросимметричных структурах!) В принципе взаимодействие появляется, если учесть высокоградиентные (нелокальные) слагаемые O_1, O_2 , т.е. перейти к конечным характерным масштабам.

Прямой учет этих высокоградиентных слагаемых сильно усложняет решение уравнений. Поэтому в разделе 5 развита феноменологическая теория, учитывающая взаимодействие мод на мезоскопическом уровне усреднения.

2. Микродеформация при сдвиге подрешеток

Прежде всего необходимо рассмотреть уравнение (8). Оно отвечает минимуму функционала энергии микродеформаций

$$2E = \int_{-H}^H \int_{-2B}^{2B} \left[k_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + k_2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + 2p(1 - \cos 2\pi u) \right] dx dy. \tag{9}$$

Смысл пределов интегрирования будет разъяснен далее. Будем называть k_1 и k_2 микромодулями сдвига и растяжения. Следует отметить, что их размерность (по сравнению с макромодулями) иная, поскольку микросмещения отнесены к периоду решетки b . Положительная величина p — амплитуда периодического межцепного потенциала — является одновременно и максимальной силой сцепления подрешеток. Она имеет размерность объемной плотности энергии.

Потенциал вида (9) в условиях однокомпонентного движения ($u_i \rightarrow (0, u_y, 0)$) реализуется в кристаллах кубической, гексагональной, ромбоэдрической, тетрагональной и ромбической систем. Поскольку микромодули k_1, k_2 не равны, здесь фактически учитывается анизотропия.

Третий, периодический, член в (9) представляет энергию d жесткого сдвига атомных цепочек (подрешеток) в длинноволновом приближении, а первые два учитывают их податливость (или упругость решеток) при растяжении и сдвиге. Тем самым учитывается и пространственно неоднородный характер микродеформаций. В силу периодичности косинуса в (9) потенциал инвариантен к микросдвигам на величину целого числа периодов подрешетки ($u = n$). Поэтому решение уравнения (8) определено с точностью до целого числа n .

3. Фрагментация решетки

Видно, что уравнение (8) не имеет однородных решений кроме тривиальных (нулевого и целочисленного, когда подрешетки смещаются в кристаллографически эквивалентные положения). Среди неоднородных решений особый интерес представляют двоякопериодические, поскольку они характеризуются ограниченным масштабом неоднородности.

Нелинейное уравнение (8), известное как уравнение синус-Гельмгольца, содержит две характеристических длины когерентности подрешеток

$$l_1 = \sqrt{\frac{k_1}{p}}, \quad l_2 = \sqrt{\frac{k_2}{p}}. \quad (10)$$

Они определяют те мезоскопические (промежуточные) масштабы длин, в пределах которых подрешетки остаются, несмотря на микроградиенты, когерентными (строго говоря, конгруэнтными), т.е. могут быть смещены жестким сдвигом. Это характеристики микроскопического поля, в противоположность макроскопическому безмасштабному. Формально, если длина $l_1 \rightarrow 0$, приходим к известной одномерной модели Френкеля–Конторовой, т.е. цепочке атомов на жесткой периодической подложке.

Начнем анализ с решения уравнения (8). Возбуждение псевдооптической моды свяжем с возможностью фрагментации решетки — возникновением микроротаций в отдельных ячейках (полудоменах), сводящихся в среднем к чистому сдвигу, когда средний поворот отсутствует (рис. 1). Ясно, что соответствующее частное решение должно носить двоякопериодический характер. Рассмотрим случай критического микросдвига, который определим формально с помощью нижеследующих условий на параллельных эквидистантных линиях скольжения $x = \text{const}$ (или внутренних границах системы плоскопараллельных горизонтальных слоев толщиной $2H$) и на поперечных границах ячеек $y = \text{const}$.

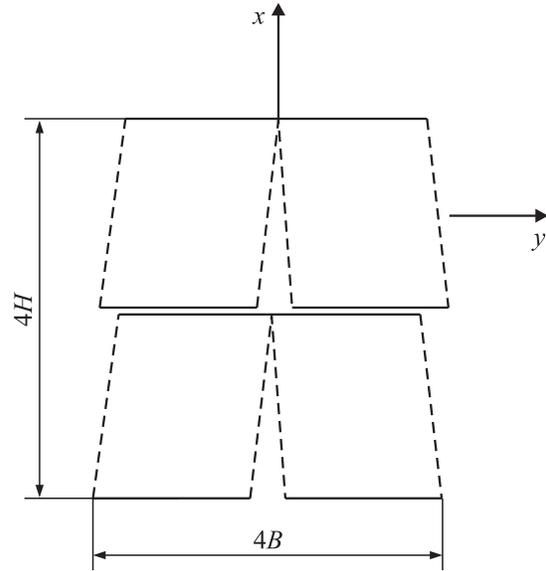


Рис. 1. Две пары полудоменов, разделенные горизонтальными границами скольжения. Штриховыми линиями показаны условные границы.

Нужное решение можно построить, потребовав, чтобы на границах слоев взаимное проскальзывание цепей достигало по абсолютной величине наибольшего значения, равного величине межатомного расстояния. Внутри слоев оно, разумеется, меньше; в результате имеем условие $u \leq 1$. При этом проскальзывание должно носить знакопеременный периодический характер при переходе от одного полудомена (шириной $2B$) к другому, т.е.

$$\begin{aligned} u(H, y) &= -1, & u(0, y) &= 0, \\ u(-H, y) &= +1 & (0 < y < 2B), \\ u(H, y) &= +1, & u(0, y) &= 0, \\ u(-H, y) &= -1 & (-2B < y < 0). \end{aligned} \quad (11)$$

Эти условия должны повторяться вдоль оси Ox с периодичностью $2H$ и вдоль оси Oy с периодичностью $4B$.

Ясно, что проскальзывание цепей достигает наибольшей величины, равной величине периода (или целому числу периодов!), на указанных линиях скольжения, а внутри слоя оно меньше, т.е. $u < 1$. Там, где $u < 1/2$ (потенциальные межатомные барьеры не преодолеваются), возникают чисто упругие микродеформации. В соответствующей упругой зоне домена энергия накапливается, а в пластической происходит ее сброс. В целом же в решетке развиваются упругопластические микродеформации, приводящие к оптимизации системы, если она первоначально испытывала большие однородные макродеформации. Последние будут рассмотрены в разделе 5.

Решение уравнения (8), подчиняющееся этим граничным условиям, удобно строить, используя метод разделения переменных Лэма [5,6], который в конечном счете приводит к выражению

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(\pi u/2) &= \pm \frac{\operatorname{tn}(xK_1/H)}{A \operatorname{sn}(yK_2/B)}, \\ A^{-2} &= a^2 = \frac{\sqrt{1-v_1^2}}{v_2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь величина a формально рассматривается как амплитуда микродеформаций. Два знака справа в (12) соответствуют двум эквивалентным направлениям сдвига; $2H$ и $4B$ являются периодами стоящих справа функций, т.е. эллиптического тангенса (tn) и эллиптического синуса (sn). Величины K_1 и K_2 представляют собой полные эллиптические интегралы первого рода, зависящие от своих модулей v_1, v_2 известным образом [7]. Их значения укладываются в интервал от нуля до единицы.

Отсюда видно, что эллиптические интегралы K_1, K_2 определяют эллиптические же пространственные частоты, или градиенты микродеформаций. Величины $1/H$ и $1/B$ определяют средние частоты. Ясно, что первые становятся весьма большими при значениях модулей, близких к единице. Используя свойства эллиптического тангенса $\operatorname{tn}0 = 0$ и $\operatorname{tn}K \rightarrow \infty$ [7], можно видеть, что решение (12) удовлетворяет граничным условиям (11). Очевидно, что оно подчиняется и периодическим (вдоль и поперек слоя) условиям с периодом $4B$ и $2H$ соответственно.

В результате имеем двоякопериодическое решение, которому соответствует двоякопериодическая суперструктура деформированной решетки. Исходная трансляционная симметрия решетки нарушена микродеформациями лишь отчасти. Произошло огрубление ее масштабов: от b до B, H .

Фактически мы получили решение для всего пространства. Введенные нами ранее формально границы имеют смысл не внешних, а внутренних границ, возникающих под воздействием больших макроскопических напряжений или деформаций.

Что касается поперечных доменных границ, то при $y = (2r + 1)B, r = \pm 0, 1, 2, \dots$, когда левая часть решения (12) обращается в бесконечность, имеем вертикальные ряды солитонов Френкеля–Конторовой (дислокаций несоответствия). Действительно, рассмотрим окрестность начала координат. В этом случае эллиптические тангенс и синус в линейном приближении дают следующее выражение для формулы (12):

$$\operatorname{tg}(\pi u/2) \approx \pm \frac{xk_1}{yk_2} = \pm \frac{k_1}{k_2} \operatorname{tg} \phi. \quad (13)$$

Здесь ϕ — угол локальной полярной системы координат. Очевидно, поле микросмещений в окрестности начала координат является многозначной функцией, зависящей от числа обходов вокруг него по замкнутому контуру.

Отсюда получаем $\pi u/2 = \pm \arctg(k_1 \phi/k_2)$, т.е. топологический дефект поля u с положительным (отрицательным) зарядом. Если он равен единице (при определенном соотношении микромодулей), имеем краевую дислокацию. Если заряд получается в виде нецелого числа, дислокация является частичной. Если же просто $k_1 = k_2$, заряд равен ± 4 .

Такие дефекты (заряды) возникают в каждой точке, которая является одновременно нулем тангенса ($x = \pm 0, 2H, 4H, \dots$) и синуса ($y = 0, 2B, 4B, \dots$). При этом знаки зарядов чередуются вдоль горизонтальных слоев, но сохраняются вдоль вертикальных.

Дефекты связаны с фрагментацией — проскальзыванием (на ограниченных участках протяженностью $2B$) в разные стороны на величину $|u| = 1$. Фрагментами оказываются ротоны (твердотельные вихри), точнее пары вихрей разных знаков с чередованием вдоль горизонтального слоя, что соответствует граничным условиям. Вдоль вертикальной оси расположены вихри одинаковых знаков. Возникает текстура типа „елочного паркета“ (рис. 1). Это возможно благодаря солитонам несоответствия Френкеля–Конторовой, которые берут на себя невязку сплошности поля u в узлах суперрешетки.

Таким образом, настоящая теория позволяет описывать зарождение дефектов в первоначально идеальной решетке и ее фрагментацию. В теории фигурируют эллиптические функции, которые в пределе $v_1, v_2 \rightarrow 1$ становятся разрывными. Хотя этот предел практически недостижим, в макроскопических масштабах такие резкие пространственные перепады можно рассматривать как разрывы.

4. Локальная устойчивость микродеформаций

Периоды суперструктуры не произвольны. Они зависят от свойств решетки и градиентов микродеформаций, а также от макродеформаций, играющих роль внешнего поля. Ограничения, связанные со свойствами и градиентами, следуют из дисперсионных соотношений, которые получаются, если подставить (12) в уравнение (8). После элементарных преобразований получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{k_1 q_1^2}{A^2} + k_2 q_2^2 \right) S - 2p &= 0, \\ S &= (A^2 - 1) \left(1 - \frac{v_2^2}{A^2} \right), \end{aligned} \quad (14)$$

$$k_1 q_1^2 = A^2 k_2 q_2^2, \quad q_1 = \frac{K_1}{H}, \quad q_2 = \frac{K_2}{B}, \quad p \geq 0. \quad (15)$$

Дисперсионные соотношения связывают пространственные частоты q_1, q_2 (градиенты микродеформаций) со свойствами решетки, размерами доменов и „амплитудой“ $a = 1/A$. Они задают область существования решения.

Отсюда легко видеть, что в силу положительности величины p необходимо $A > 1$. Это критерий упруго-пластического сдвига.

Дальнейшие ограничения выявляются, если исключить из этих соотношений константы интегрирования v_1, v_2 . Поскольку амплитудный параметр A , согласно (12), является их функцией, можно вначале исключить, например, величину v_1 , выразив последнюю через A и v_2 . Тогда, зафиксировав A , получим уравнения (14), (15) для двух переменных B, H с одним переменным параметром v_2 . Исключая и его из этих двух уравнений, получим связь между B и H при заданном амплитудном параметре A .

Взаимосвязь трех величин A, B, H может быть представлена семейством кривых, выражающих зависимость H от B при разных значениях параметра A . В этом случае каждая кривая на плоскости (HB) при заданном значении A имеет по одной вертикальной ($B = B_t$) и горизонтальной ($H = H_t$) асимптоте, так что

$$H_t < H < \infty, \quad B \rightarrow B_t (B < \infty). \quad (16)$$

Значения этих пределов равны

$$H_t = l_1(1 - A^{-2})K_{11}, \quad 2B_t = \pi l_2 \sqrt{A^2 - 1}. \quad (17)$$

Здесь K_{11} — значение функции $K_1(v_1)$ в точке $v_1 = \sqrt{1 - A^{-4}}$. Очевидно, не все значения параметров H, B допустимы; из (16), (17) следуют явные ограничения.

Коснемся вопроса об устойчивости упругопластических микродеформаций. Исходное уравнение (8) является условием локального минимума функционала (9) (при фиксированных значениях пределов интегрирования!). Тогда анализируемое нами решение (12) локально устойчиво. Однако, если речь идет об устойчивости суперструктуры в целом (по масштабным параметрам B, H), необходимо исследовать экстремумы функции $E(B, H)/8BH$, что сделано в следующем разделе в условиях воздействия на решетку макродеформаций.

Случай чисто упругих микродеформаций $u \leq 1/2$ рассмотрен в [6]. Ему отвечает иная область значений $A < 1$; соответствующее микрополе $u_+(x, y)$ сдвинуто на $1/2$, т. е.

$$2u_+(x, y) = 2u(x, y) \mp 1. \quad (18)$$

Функция $u(x, y)$ та же, что и в формуле (12).

Заметим, что константа справа перенормирует граничные условия (11) так, что проскальзывания на горизонтальных границах доменов оказываются вдвое меньшими. Они достигают половины межатоминого расстояния — атомы выходят на вершины потенциальных барьеров. Более детальный анализ дается в работе [6].

Упругое решение по определению локально устойчиво. Однако глобальная устойчивость (соответствующей доменной структуры), так же как и в упругопластическом случае, возможна лишь при наличии внешних полей. Она будет рассмотрена в следующем разделе.

5. Глобальная устойчивость во внешнем поле

Проблема оптимизации суперструктуры по параметрам B, H возникает в силу того, что в принятом приближении акустическая мода (макросмещения) локально независима от псевдооптической. Перекрестные члены появляются в уравнениях (7), (8) лишь после учета нелокальных слагаемых вида O_1, O_2 на уровне высших производных. Это значит, что их взаимодействие „накапливается“ в пространстве и может быть учтено путем усреднения по некоторым масштабам. Средние же микро- и макродеформации могут быть связаны условием глобальной устойчивости суперструктуры или условием минимизации полной энергии путем сброса упругой энергии однородного поля за счет дефектов и фрагментов.

Предлагаемый подход в принципе может быть уточнен в процедуре возмущений, если восстановить в уравнении макродеформаций (7) перекрестные слагаемые, зависящие от микрополя, и выразить их через найденное решение (12). Тогда в макроскопическом поле появятся дополнительные слагаемые. Существенно, что они содержат сингулярные термы, поскольку, как показано в разделе 3, решение (12) их содержит. Уточненное поле макроскопических деформаций уже не может быть пространственно однородным из-за наличия дефектов. Однако это программа дальнейших исследований.

В пределах же мезоскопической теории при анализе энергетического баланса достаточно ограничиться усреднением по масштабам доменов, правда с некоторыми оговорками. Действительно, пара полудоменов с ротонами обратных знаков образует домен с равным нулю средним вихрем. Поэтому в наддоменных масштабах среда должна описываться лишь безвихревым макроскопическим полем, или чистым сдвигом. На этом мезоскопическом уровне взаимодействие мод можно учитывать феноменологически, не интересуясь внутримономенными деталями макроскопического поля. Тогда единственными характеристиками суперструктуры оказываются размеры доменов, которые приобретают оптимальные равновесные значения. Эта задача может быть решена в пределах феноменологической схемы, излагаемой далее.

Проанализируем влияние макродеформаций чистого сдвига ($\text{rot } U = 0$) на упругие и упругопластические микродеформации, принимая во внимание то, что первые могут рассматриваться как заданные, конечно после решения уравнения (7), в котором они определяются как не зависящие от микродеформаций величины. В настоящем приближении следует рассматривать их просто как постоянные параметры. Последнее оправдывается и условием пространственной однородности суперструктуры. Это полностью избавляет нас от необходимости анализа уравнения (7).

Запишем выражение для полной энергии с учетом макродеформаций. Имея в виду взаимодействие мод на

мезоскопическом уровне, рассмотрим среднее (по объему домена) значение безразмерной плотности полной энергии как сумму макроскопической энергии, перекрестного слагаемого, отвечающего за взаимодействие мод, и микроскопической энергии

$$2\check{D} = \eta_1 \varepsilon_1^2 + \eta_2 \varepsilon_2^2 + 2\eta_2 \varepsilon_1 \varepsilon_2 - 2L + 2D, \quad (19)$$

$$D = \frac{E}{8\rho BH}, \quad \eta_1 = \frac{\lambda_1}{\rho}, \quad \eta_2 = \frac{\lambda_2}{\rho},$$

$$\varepsilon_1 = \frac{\partial U_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_2 = \frac{\partial U_y}{\partial y}; \quad (20)$$

три первых слагаемых (энергия макроскопических деформаций) отвечают симметрии ромбоэдрической, тетрагональной, гексагональной и кубической систем; D — безразмерная плотность микроскопической энергии (9). Принципиально для мезоскопической теории то, что эта величина может быть вычислена и проанализирована как функция только размеров доменов и материальных параметров — длин корреляции l_1, l_2 .

Уточним вид перекрестного члена L в выражении для полной энергии. Его можно строить как линейную функцию средних микродеформаций, поскольку в принятом приближении макроскопические деформации однородны и дефектов не учитывают.

Однако при этом следует иметь в виду, что средняя (по всему домену) микродеформация равна нулю. Средняя же по полудомену величина отлична от нуля, но меняет знак при переходе к соседнему полудомену вдоль оси OY . Заметим, что этот результат один и тот же для обоих случаев: $A < 1$ и $A > 1$. Иными словами, полудомены образуют двойниковую структуру — пару ротаторов разных знаков (рис. 1). Такая микроструктура совместима с безротационным макроскопическим полем чистого сдвига, что и предусмотрено при его задании.

Поскольку формально сумма средних микродеформаций (микроротаций) в полном домене равна нулю, ее нельзя использовать как термодинамическую переменную. Здесь ситуация аналогична антисегнетоэлектрику и антиферромагнетику. В феноменологической теории в качестве термодинамического среднего нужно брать разность микродеформаций в полудоменах, которая также определена с точностью до знака.

Учитывая вышесказанное, нужно использовать абсолютное значение среднего микроградиента. В размерной форме это величина $1/H$. Однако в дальнейшем более удобна безразмерная величина l_1/H . Тогда перекрестный член в выражении для полной энергии (19) следует записать в виде

$$L = \chi_1 \frac{\varepsilon_1}{\check{H}} + \chi_2 \frac{\varepsilon_2}{\check{B}}, \quad \check{H} = \frac{H}{l_1}, \quad \check{B} = \frac{B}{l_2},$$

$$\chi_1 > 0, \quad \chi_2 > 0. \quad (21)$$

Здесь χ_1, χ_2 — стрикционные коэффициенты, которые по определению считаются положительными. Введены также безразмерные масштабы суперструктуры \check{H} и \check{B} .

Знаки компонент тензора деформаций в этом выражении могут быть любыми. Однако их выбор, если речь идет о возникновении устойчивой суперструктуры, должен быть таким, чтобы перекрестный член L входил в (19) со знаком минус. Тогда нужно принять, что $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$. (Уместна аналогия с бифуркационной задачей при сжатии, но не при растяжении (!) тонкого стержня). Именно в этом случае взаимодействие микро- и макродеформаций приводит к снижению потенциального барьера и возникновению минимума, т.е. к появлению устойчивой суперструктуры. Действительно, наличие перекрестного члена L в (19) является причиной снижения полной энергии за счет возникновения микроротаций противоположных знаков (рис. 1). Поэтому возможна ее минимизация при некоторых значениях размеров H, B ячеек суперструктуры.

Это требует вычисления интеграла в выражении для энергии микродеформаций (9). В результате приходим к выражению для плотности полной энергии \check{D} как функции только двух переменных величин (\check{H}, \check{B}) и двух заранее заданных величин ($\varepsilon_1, \varepsilon_2$).

Рассмотрим условия экстремума полной энергии. Выпишем сначала выражения для частных производных полной энергии. Раскрывая в (19) выражение (21) для L , пишем

$$\frac{\partial \check{D}}{\partial (1/\check{H})} = -\chi_1 \varepsilon_1 + \check{D}_H, \quad \frac{\partial \check{D}}{\partial (1/\check{B})} = -\chi_2 \varepsilon_2 + \check{D}_B. \quad (22)$$

Здесь частные производные по определению имеют вид

$$\check{D}_H = \frac{\partial D}{\partial (1/\check{H})} \quad (B = \text{const}),$$

$$\check{D}_B = \frac{\partial D}{\partial (1/\check{B})} \quad (H = \text{const}). \quad (23)$$

Обращение в нуль производных полной энергии (22) дает необходимые условия ее экстремума

$$0 = -\chi_1 \varepsilon_1 + \check{D}_H, \quad 0 = -\chi_2 \varepsilon_2 + \check{D}_B. \quad (24)$$

Иной смысл этих соотношений — условие равновесия макро- и микродеформаций. Они позволяют ответить на вопрос о возможности возникновения микродеформаций только под воздействием макроскопических деформаций без какого-либо другого влияния. Заметим, что внешние управляющие параметры $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ в принципе независимы. Однако их влияния на микроструктуру, накладываясь друг на друга, должны быть совместимыми. Формально мы имеем здесь два нелинейных уравнения для двух неизвестных размеров равновесного домена.

Обратимся теперь к анализу устойчивости суперструктуры. Уточним вначале характер потенциала (19). Он имеет сложный, седлообразный, вид в пространстве переменных \check{H}, \check{B} с минимумами по \check{H} и максимумами по \check{B} . Каждая ветвь максимума заканчивается (слева и справа) минимальным значением плотности энергии в некоторых конечных точках.

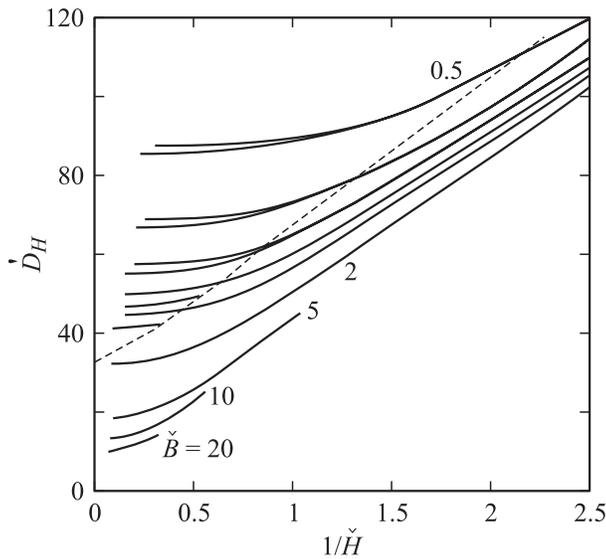


Рис. 2. Графики производных (по $1/\dot{H}$) плотности энергии микродеформаций при $\dot{B} = 20, 10, 5, 2$ и 0.5 . Штриховая линия — граница раздела областей упругих (слева) и упругопластических деформаций.

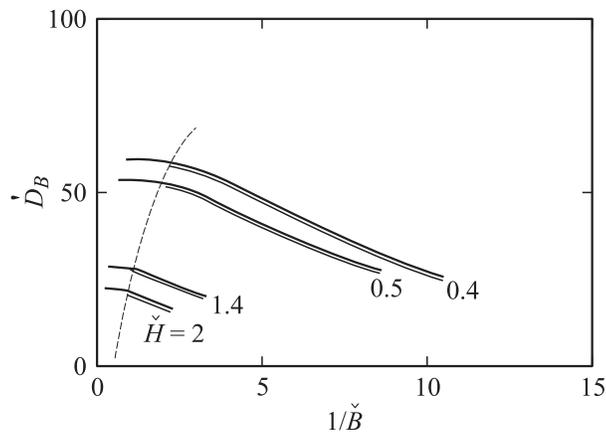


Рис. 3. Графики производных (по $1/\dot{B}$) плотности энергии микродеформаций при $\dot{H} = 2, 1.4, 0.5, 0.4$. Штриховая линия — граница раздела областей упругих (справа) и упругопластических деформаций.

Соответствующее явное выражение достаточно громоздкое, поэтому его особенности проще всего продемонстрировать с помощью графиков производных (22) по этим переменным. На рис. 2 и 3 показаны зависимости $\dot{D}_H(1/\dot{H})$ и $\dot{D}_B(1/\dot{B})$ при постоянных \dot{B} и \dot{H} соответственно.

Штриховые кривые на обоих рисунках отвечают границе области чисто упругих доменов. На рис. 2 эта область расположена слева, а на рис. 3 — справа от границы. Эти ограничения не относятся к упругопластическим микродеформациям. Поэтому имеются области смешанных состояний (на рис. 2 — слева от указанной границы). Здесь все кривые раздвоены: каждому

значению параметра $\dot{B} = \text{const}$ отвечают две кривые, и нижняя (доходящая лишь до границы) соответствует чисто упругим доменам. Напротив, на рис. 3 область смешанных состояний лежит справа от границы, но раздвоение кривых мало заметно.

Обращает на себя внимание то, что каждая кривая на обоих рисунках начинается и заканчивается в определенной точке. Это значит, что исключаются предельно большие и предельно малые значения размеров \dot{B} , \dot{H} . Заметим, что на рис. 2 слишком удаленные конечные точки оказались за пределами его поля.

Кривые (рис. 2), идущие вверх, очевидно демонстрируют условие положительности второй производной плотности полной энергии по $1/\dot{H}$, а нисходящие кривые на рис. 3, напротив, отвечают условию отрицательности второй производной по $1/\dot{B}$, т. е.

$$D_{HH} > 0, \quad D_{HH} = \frac{\partial^2 D}{\partial (1/\dot{H})^2},$$

$$D_{BB} < 0, \quad D_{BB} = \frac{\partial^2 D}{\partial (1/\dot{B})^2}. \quad (25)$$

Эти результаты позволяют оценить производные (22) полной энергии и сделать заключение об ее экстремумах. Из соответствующих выражений видно, что эти производные отличаются от производных \dot{D}_H , \dot{D}_B (представленных на рисунках) сдвигом вниз или вверх на постоянные, пропорциональные компонентам макродеформаций ε_1 , ε_2 . Если последние равны нулю одновременно, то функция $\dot{D}(\dot{B}, \dot{H})$ не имеет экстремумов, поскольку ее производные не обращаются в нуль (кривые на рисунках лежат выше оси абсцисс). То же самое получается, когда обе компоненты отрицательны: формулы (22) определяют сдвиг производных в сторону увеличения положительных значений.

Ясно, что сверхструктуры могут возникать, когда компоненты макродеформаций положительны. Тогда производные полной энергии получаются сдвигом кривых $\dot{D}_H(\dot{H}, \dot{B})$ и $\dot{D}_B(\dot{H}, \dot{B})$ вниз на величины, пропорциональные компонентам тензора макродеформаций. В результате создаются условия формирования устойчивых доменов. Анализ показывает, что они связаны с начальными и конечными точками кривых на рис. 3. Опуская детали, проиллюстрируем результаты с помощью рис. 4.

Сначала коснемся проблемы совместимости условий возникновения доменов (24). На рис. 4 соответствующие зависимости представлены в координатах $(1/\dot{H}, 1/\dot{B})$. Серия штриховых кривых, идущих вниз и направо, отвечает постоянным значениям $\dot{D}_H \sim \varepsilon_1$, убывающим в сторону начала координат. Серия же штриховых прямых (в масштабах рисунка) соответствует постоянным значениям $\dot{D}_B \sim \varepsilon_2$, убывающим также в сторону начала координат. Точки их пересечения представляют собой решения нелинейной системы (24). Координаты этих точек дают размеры равновесных, но неустойчивых (по размеру \dot{B}) доменов.

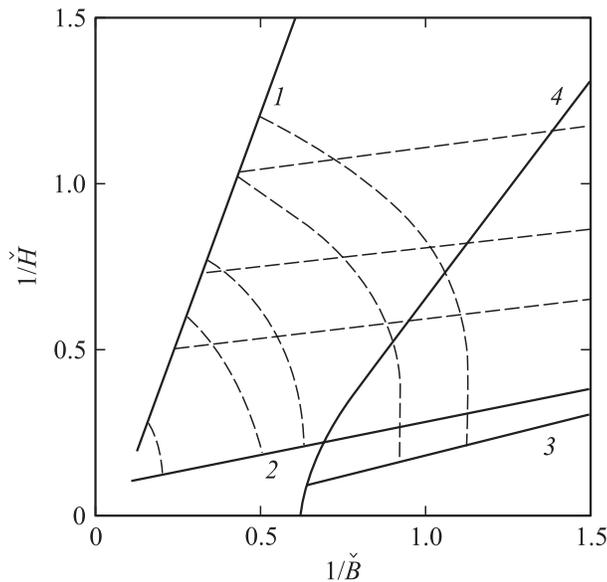


Рис. 4. Области существования равновесных доменов при заданных макроскопических деформациях. Сплошные линии отвечают устойчивым доменам: 1 и 2 — упругопластическим, 3 и 4 — чисто упругим. Штриховые линии — домены с неустойчивой длиной и устойчивой толщиной.

Линия 1 (почти прямая в масштабах рис. 4!) соответствует начальным точкам ($\check{B} = \check{B}_0$) кривых на рис. 3, т.е. горизонтально удлиненным устойчивым упругопластическим доменам. Прямая 2 отвечает нижним концам ($\check{B} = \check{B}_{00}$) этих кривых, т.е. вертикально удлиненным устойчивым упругопластическим доменам. Прямая 3 соответствует чисто упругим устойчивым коротким доменам, а кривая 4 — этим же доменам, но более длинным: $\check{B} = \check{B}_c$.

Точки пересечения прямой 1 с указанным семейством штриховых линий дают оба размера (\check{B}_0, \check{H}_0) устойчивых упругопластических доменов (горизонтально вытянутых). Для того чтобы выявить соответствующее значение $\check{D}_B \sim \varepsilon_2$, необходимо найти ординату \check{D}_B начальной точки \check{B}_0 кривой $\check{H}_0 = \text{const}$ на рис. 3.

Что касается вертикально вытянутых устойчивых упругопластических доменов, то им отвечают точки пересечения серии этих же штриховых кривых с прямой 2. Ординаты точек пересечения дают значения длины \check{B}_{00} , а величина $\check{D}_B \sim \varepsilon_2$ (ордината конечной точки кривой на рис. 3) — значение второго параметра макроскопических деформаций.

Ясно, что все состояния упругопластических доменов заключены в бифуркационную вилку. Каждая ее граничная ветвь отвечает устойчивым состояниям (наименьшим значениям полной энергии), а промежуточные точки седлообразные. Переход с одной ветви на другую требует преодоления потенциального барьера. Первая ветвь (прямая 1) отвечает доменам с резкими поперечными границами (узкими стенками). Устойчивые

же домены второй ветви имеют резкие горизонтальные границы (линии скольжения), но размытые поперечные.

Итак, устойчивы анизотропные горизонтально удлиненные ($\check{B} \rightarrow \check{B}_0$), а также вертикально вытянутые ($\check{B} \rightarrow \check{B}_{00}$) упругопластические домены. Последние возникают раньше (при меньших значениях ε_2).

Для чисто упругих доменов также имеем бифуркационную вилку. Первая ветвь (коротких доменов) — наклонная прямая 3 на рис. 4, а вторая ветвь (более длинных доменов) образована границей области существования упругих доменов — сплошной кривой 4 того же рисунка. Переход с одной ветви на другую требует преодоления соответствующего потенциального барьера. И здесь короткие домены (первая ветвь) имеют резкие горизонтальные и расплывчатые поперечные границы. Более длинные домены (но все же $\check{B} < \pi/2$), отвечающие второй ветви, напротив, имеют расплывчатые горизонтальные границы.

В результате приходим к важному выводу. Определенному значению пары компонент макроскопических деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ отвечают только два устойчивых домена: упругий и упругопластический. С ростом макроскопических размеров доменов уменьшаются; им соответствуют две пары расходящихся (в сторону меньших размеров доменов) ветвей устойчивых доменов с разной анизотропией. Каждая из них требует определенного сочетания компонент тензора макроскопических деформаций или определенного пути деформирования тела. В противном случае не происходит подразделения доменов по анизотропии, а может возникнуть смесь тех и других в силу отмеченной выше бифуркации.

Рассмотрим деформационный порог возникновения суперструктуры. Для его выявления отнесем соотношение (24) к наименьшему устойчивому (не обязательно нулевому) значению средней микродеформации $\varepsilon_{1b}, \varepsilon_{2b}$, отметив это нижним индексом.

Возможность существования порога видна уже из того, что производные \check{D}_H, \check{D}_B (на рис. 2 и 3) не обращаются в нуль (стремятся к постоянным значениям) при стремлении к нулю средних микродеформаций $1/\check{H}, 1/\check{B}$. Эти пределы и определяют деформационные пороги. Явное выражение для пороговых значений следовало бы получить с помощью соотношения (9), которое позволяет в принципе вычислить \check{D}_{Hb} и \check{D}_{Bb} как константы в степенном разложении производных \check{D}_H, \check{D}_B по $1/\check{H}$ и $1/\check{B}$. Экстраполяцией прямых 1 и 2 (рис. 4) можно показать, что величины порогов составляют $\check{D}_H \approx 8, \check{D}_B \approx 0$. Тогда из (24) можно было бы получить и пороговые значения макроскопических деформаций $\varepsilon_{1b}, \varepsilon_{2b}$. Ниже соответствующих точек (бифуркаций) суперструктура просто не образуется, и тело деформируется как сплошная среда с упругим потенциалом (первые три члена в (19)).

Взаимодействие мод, учитываемое в этом разделе, приводит к появлению дополнительных вкладов не в макроскопические деформации, а в напряжения. Соответствующие выражения получаются дифференцирова-

нием полной энергии (19) по деформациям ε . Тогда линейные слагаемые L дают вклады от микродеформаций.

Таким образом, модель нелинейно взаимодействующих подрешеток позволяет эффективно описывать упругие и неупругие процессы изменения ближнего и дальнего порядка, т. е. структурные превращения в поле внешних деформаций.

Принципиальным преимуществом адекватной теории является существенная нелинейность описываемых процессов. Они должны преодолевать точки бифуркации структуры и приводить к кардинальным изменениям существующих свойств и появлению новых. Впервые удастся выявить такие нетривиальные эффекты, как образование дефектов решетки в изначально идеальной структуре, фрагментация решетки, потеря устойчивости однородных деформаций за порогом интенсивного воздействия на тело, возникновение полос скольжения и двойникование, нарушение дальнего и ближнего порядка, переключение связей. Возможно описание неупругих бездиффузионных микродеформаций при мартенситных переходах. Иными словами, изменение локальной топологии учитывается в данной теории явным образом.

Микроскопическое поле можно рассматривать как поле некогерентных смещений подрешеток, а его градиенты (средние по домену) — как параметр нарушения трансляционной симметрии сложного кристалла. В деформированном состоянии подрешетки становятся несоразмерными, в результате чего и возникает крупномасштабная суперструктура. В принципе это поле может быть резко переменным (в пределе разрывным) в макромасштабах в местах скопления дефектов, границ скольжения, областей переключения связей.

Список литературы

- [1] И.А. Кунин. Теория упругих сред с микроструктурой. Наука, М. (1975). 415 с.
- [2] М.Р. Короткина. В сб.: Упругость и неупругость. МГУ, М. (1975). В. 4. С. 225.
- [3] М. Борн, Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. ИЛ, М. (1958). 488 с.
- [4] А.М. Косевич. Теория кристаллической решетки. Вища шк., Харьков (1988). 304 с.
- [5] Д.Л. Лэм. Введение в теорию солитонов. Мир, М. (1983). 294 с. [G.L. Lamb. Elements of Soliton Theory. Wiley, N.Y. (1980).]
- [6] Э.Л. Аэро. ФТТ **42**, 1113 (2000).
- [7] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. Специальные функции. Наука, М. (1977). 342 с. [E. Jahnke, F. Emde, F. Losch. Tafel horerer Funktionen. Tourner, Stuttgart (1960).]