

УДК 537.226  
 © 1991

## ОБ ИЗГИБНЫХ КОЛЕБАНИЯХ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ В КРИСТАЛЛАХ

*В. Н. Нечаев, А. М. Рощупкин*

Исследованы изгибные колебания межфазных границ ( $s \cdot m \neq 0$ , где  $s$  — вектор пластического сдвига при фазовом превращении,  $m$  — единичный вектор нормали к инвариантной плоскости) в кристалле. Показано, что при любом направлении распространения изгибной волны смещения атомов локализованы вблизи границы. При  $s \cdot m = 0$  локализованные упругие волны данного типа переходят в волны, локализованные на двойниковых границах. Если же  $s \parallel m$ , то — в волны Рэлея.

Исследованию волн, локализованных вблизи внутренних поверхностей раздела в кристаллах, посвящены работы [1-8]. В более ранних работах [1, 2], а также в [3] внутренние границы раздела рассматривались как геометрические поверхности, на которых задавались граничные условия для уравнений теории упругости и электростатики. Этот подход, восходящий к классическим работам по волнам Рэлея, Лява, Стоунли [4], достаточен, например, для описания волн, локализованных вблизи границы раздела двух кристаллов. Применительно к двойниковым и доменным границам более реалистичный способ исследования колебаний, учитывающий способность границ к консервативному перемещению, развит в работах [5-7]. В [5] исследованы длинноволновые колебания кристалла с двойниковой границей. Та же задача для сегнетоэлектрика — сегнетоэластика решена в [6]. В работах [7] изучены изгибные колебания доменных границ в сегнетоэлектриках. Спектр изгибных колебаний дислокационной стенки рассмотрен в [8].

В перечисленных выше работах не учитывался тот факт, что при смещении границы возможно пластическое изменение объема среды. Это обстоятельство особенно важно для межфазных границ, так как известно, что структурный фазовый переход в кристалле обязательно сопровождается дилатацией материала. Хотя изменение объема в значительном числе случаев невелико, учет его тем не менее существен, поскольку, как показано ниже, приводит к качественной перестройке спектра колебаний кристалла границей. Заметим, что эти вопросы представляют значительный интерес также в связи с объяснением свойств высокотемпературных сверхпроводников [9].

Исходная система уравнений, описывающая колебания кристалла с межфазной границей, включает в себя динамическое уравнение теории упругости, записанное в напряжениях [5, 10]

$$\frac{1}{c_i^2} \left( \frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial t^2} - \frac{1}{2(1+\nu)} \delta_{ik} \frac{\partial^2 \sigma_{ll}}{\partial t^2} \right) - \Delta \sigma_{ik} - \frac{1}{1+\nu} \left( \frac{\partial^2 \sigma_{ll}}{\partial x_i \partial x_k} \right) - \delta_{ik} \Delta \sigma_{ll} =$$

$$= \rho \frac{\partial}{\partial t} (j_{ik} + j_{ki} - \delta_{ik} j_{ll}) - 2\mu \eta_{ik}, \quad (1)$$

и уравнение движения границы [11]

$$\{\sigma_{ik}\} s_{ik}^p = 0. \quad (2)$$

Здесь  $\sigma_{ik}$  — тензор напряжений,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\mu$  — модуль сдвига,  $c_t$  — скорость поперечного звука,  $\rho$  — плотность вещества кристалла,

$$s_{ik}^p = m_i s_k \quad (3)$$

— тензор пластической дисторсии при фазовом превращении,  $\mathbf{m}$  — единичный вектор нормали к инвариантной плоскости,  $\mathbf{s}$  — вектор сдвига при фазовом превращении,  $j_{ik}$  — тензор плотности потока дислокаций превращения,

$$\eta_{ik} = e_{kjm} \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \right) (\rho_{in} - \frac{1}{2} \delta_{in} \rho_{ll}) \quad (4)$$

— симметричный тензор несовместности деформаций [12],  $\rho_{in}$  — тензор плотности дислокаций превращения,  $e_{ilm}$  — символ Леви-Чивита, фигурные скобки в выражении (2) обозначают полусумму значений тензора напряжений по обе стороны от границы в непосредственной близости от нее.

Согласно [11], тензор плотности потока дислокаций превращения  $j_{ik}$  имеет вид

$$j_{ik} = V s_{ik}^p \delta(\zeta) \quad (5)$$

где  $V$  — проекция скорости движения границы на положительное направление единичного вектора нормали  $\mathbf{n}$  к границе в каждой точке;  $\zeta$  — координата, отсчитываемая от границы вдоль вектора  $\mathbf{n}$ .

Плотность дислокаций превращения  $\rho_{ik}$ , возникающих при прогибе межфазной границы, при заданной пластической дисторсии  $s_{mn}^p$  также легко определяется с помощью соотношения [11]

$$\rho_{in} = e_{ilm} n_l s_{mn}^p \delta(\zeta) \quad (6)$$

Подставляя выражение (6) в (4) и разбивая оператор дифференцирования по координатам на касательную, обозначаемую в дальнейшем штрихованным тензорным индексом, и нормальную составляющие

$$\partial/\partial x_j = \partial/\partial x'_j + n_j (\partial/\partial \zeta),$$

нетрудно привести тензор несовместности  $\eta_{ik}$  к виду [5]

$$\eta_{ik} = \eta_{ik}^{(1)} + \eta_{ik}^{(2)}, \quad (7)$$

$$\eta_{ik}^{(1)} = e_{ilm} n_e e_{kjm} n_l n_j u_{mn}^p \delta'(\zeta), \quad (8)$$

$$\eta_{ik}^{(2)} = -e_{ilm} e_{kjm} u_{mn}^p \ell_{j'l'} \delta(\zeta). \quad (9)$$

Здесь  $\delta'(\zeta) = (d/d\zeta) \delta(\zeta)$ ,  $u_{mn}^p$  — тензор пластической деформации,

$$\ell_{j'l'} = -\partial n_l / \partial x_{j'} \quad (10)$$

— симметричный тензор кривизны [13]. Учитывая соотношения (5), (7)–(10), приводим исходное уравнение (1) к виду

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c_t^2} \left( \frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial t^2} - \frac{1}{2(1+\nu)} \delta_{ik} \frac{\partial^2 \sigma_{ll}}{\partial t^2} \right) - \Delta \sigma_{ik} - \frac{1}{1+\nu} \left( \frac{\partial^2 \sigma_{ll}}{\partial x_i \partial x_k} - \delta_{ik} \Delta \sigma_{ll} \right) = \\ & = \rho (2u_{ik}^p - \delta_{ik} u_{ll}^p) \frac{\partial}{\partial t} (V \delta(\zeta)) - 2\mu e_{ilm} e_{kjm} n_l n_j u_{mn}^p \delta'(\zeta) + \\ & + 2\mu e_{ilm} e_{kjm} u_{mn}^p \ell_{j'l'} \delta(\zeta). \end{aligned} \quad (11)$$

Введем обозначение  $f = \sigma_{ik} u_{ik}^p$ . Умножив (11) на  $u_{ik}$ , получим уравнение для величины  $f$

$$\frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \Delta f - \frac{3}{1+\nu} u_{ik}^p \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_k} - \frac{3}{1+\nu} u_{il}^p \left( \frac{1}{2c_l^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \Delta p \right) =$$

$$= \rho [2(u_{ik}^p)^2 - (u_{il}^p)^2] \frac{\partial}{\partial t} (V \delta(\zeta)) - 2\mu \alpha_{ij} n_i n_j \delta'(\zeta) + 2\mu \alpha_{ij} k_{i'j'} \delta(\zeta). \quad (12)$$

Второе уравнение для величины  $p$ , замыкающее систему, получается в результате свертки (11)

$$\frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \Delta p = -\frac{2}{3} \mu \frac{1+\nu}{1-\nu} \left[ \frac{1}{2c_l^2} u_{il}^p \frac{\partial}{\partial t} (V \delta(\zeta)) + \right.$$

$$\left. + \beta_{ij} n_i n_j \delta'(\zeta) - \beta_{ij} k_{i'j'} \delta(\zeta) \right]. \quad (13)$$

Здесь  $p = -1/3 \sigma_{il}$  — давление;  $c_l$  — скорость продольного звука,

$$\alpha_{ij} = e_{ilm} e_{kjm} u_{ik}^p u_{mn}^p = \frac{1}{2} [(\mathbf{m} \times \mathbf{s})_l (\mathbf{s} \times \mathbf{m})_j + (\mathbf{s} \times \mathbf{m})_l (\mathbf{m} \times \mathbf{s})_j],$$

$$\beta_{ij} = e_{klm} e_{kjm} u_{mn}^p = \delta_{ij} u_{ii}^p - u_{ij}^p.$$

Уравнения (12), (13) вместе с граничным условием  $f(\zeta) = 0$ , следующим из уравнения (2), представляют собой полную систему соотношений, описывающих колебания кристалла с межфазной границей.

Для простоты анализа ограничимся в дальнейшем случае малых колебаний межфазной границы. Пусть инвариантная плоскость совпадает с координатной плоскостью  $(x, y)$ , а вектор  $\mathbf{m}$  направлен вдоль оси  $z$ :  $m = (0, 0, 1)$ . Вектор  $\mathbf{s}$  выберем лежащим в плоскости так, что проекция  $\mathbf{s}$  на ось  $x$  была положительна:  $\mathbf{s} = (s_x, 0, s_z)$ .

Тогда в линейном по смещению границы  $u = u(x, y, t)$  приближении, учитывая, что единичный вектор нормали  $\mathbf{n}$  к границе имеет компоненты

$$\mathbf{n} = (-\partial u / \partial x, -\partial u / \partial y, 1),$$

а также равенства (справедливые в том же приближении)

$$\alpha_{ij} n_i n_j \delta'(\zeta) = \frac{1}{2} \{ [\mathbf{m} \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{m})] [\mathbf{s} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{s})] +$$

$$+ [\mathbf{s} \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{m})] [\mathbf{m} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{s})] \} \delta'(z) = 0,$$

$$\beta_{ij} k_{i'j'} \delta(\zeta) = 1/2 s_x^2 k_{yy} \delta(z),$$

$$\beta_{ij} n_i n_j \delta'(\zeta) = (\mathbf{n} \times \mathbf{m}) (\mathbf{m} \times \mathbf{s}) \delta'(z) = s_x (\partial u / \partial x) \delta'(z),$$

$$\beta_{ij} k_{i'j'} \delta(\zeta) = s_x k_{i'j'} \delta(z) = s_x (\partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2) \delta(z) = s_x \Delta_{\perp} u \delta(z),$$

вместо (12), (13), получаем

$$\left( \frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \left( f + \frac{3\nu}{1+\nu} s_z p \right) + \frac{3}{1+\nu} s_j \frac{\partial^2}{\partial z \partial x_j} p =$$

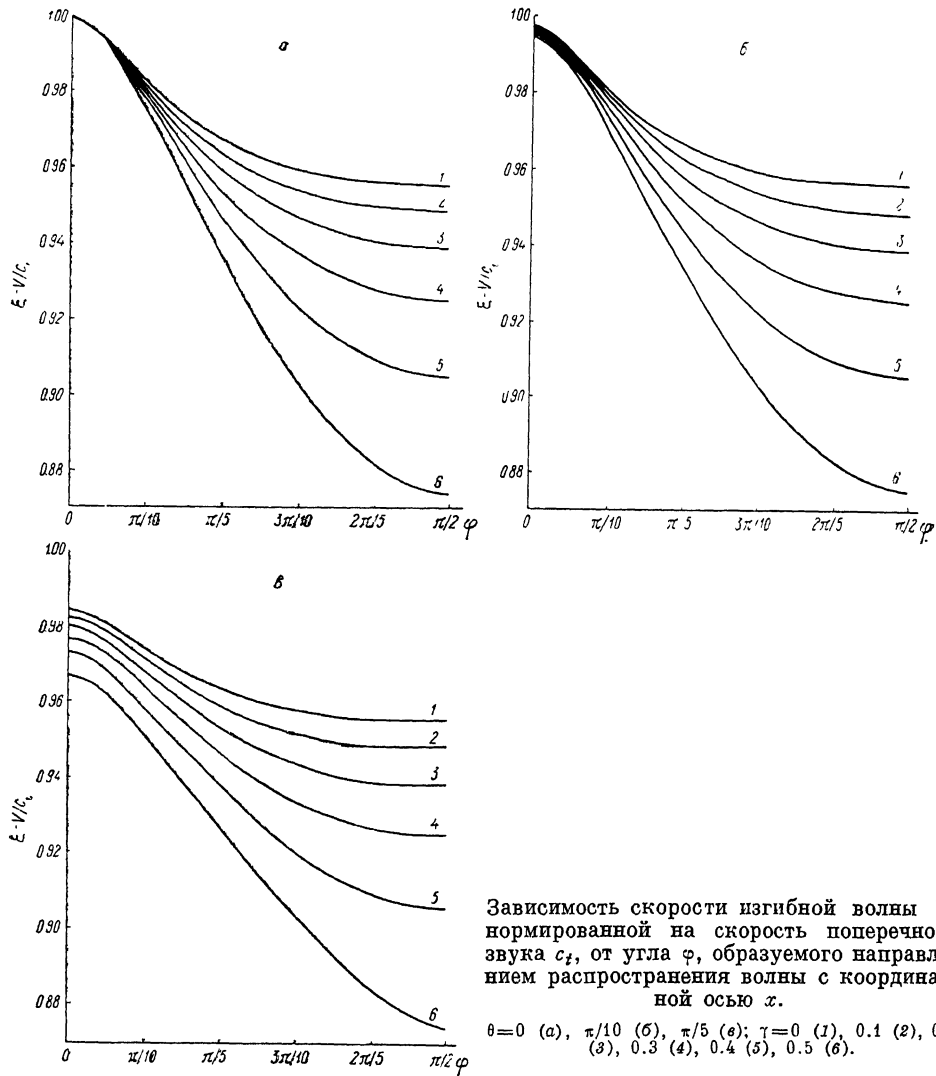
$$= \mu \left[ (s^2 + s_z^2) \left( \frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - 2s_x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right] \delta(z) + 2\mu s_x s_x \frac{\partial u}{\partial x} \delta'(z), \quad (14)$$

$$\frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \Delta p = -\frac{2(1+\nu)}{3(1-\nu)} \mu \left[ s_x \left( \frac{1}{2c_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta_{\perp} u \right) \delta(z) + s_x \frac{\partial u}{\partial x} \delta'(z) \right]. \quad (15)$$

Исследование этой системы уравнений удобно проводить в Фурье-представлении. Определяя из уравнения (15) Фурье-образ давления  $\bar{p}(\mathbf{q}, \omega)$  и подставляя в (14), находим  $\bar{f}(\mathbf{q}, \omega)$  как функцию  $\bar{u}(\mathbf{q}, \omega)$ . С целью дальнейшего исследования только упругих волн, локализованных вблизи межфазной границы, а также для упрощения выкладок в выражении для  $\bar{f}(\mathbf{q}, \omega)$  оставим только слагаемые, четные по  $q_x$ , поскольку, согласно [5] и равенству (2), именно эти слагаемые формируют спектр локализованных колебаний

$$\bar{f}(\mathbf{q}, \omega) = \mu s_x^2 \left[ \frac{k_y^2 - \omega^2/c_i^2}{q^2 - \omega^2/c_i^2} + \frac{2}{1 - \nu} \frac{k_x^2 q_z^2}{(q^2 - \omega^2/c_i^2)(q^2 - \omega^2/c_l^2)} \right] \bar{u} + \\ + 2\mu s_z^2 \left[ \frac{k^2 - \omega^2/c_l^2}{q^2 - \omega^2/c_l^2} + \frac{\nu}{1 - \nu} \frac{k^2 - \omega^2/2c_l^2}{q^2 - \omega^2/c_l^2} - \frac{1}{1 - \nu} \frac{(k^2 - \omega^2/2c_l^2) q_z^2}{(q^2 - \omega^2/c_l^2)(q^2 - \omega^2/c_i^2)} \right] \bar{u}. \quad (16)$$

Здесь использовано обозначение  $k^2 = q_x^2 + q_y^2$ . Уравнение движения межфазной границы получаем в результате частичного Фурье-обращения выражения (16) по переменной  $z$  и затем требуя выполнения условия (2)



$$\left\{ \frac{k_y^2 - \omega^2/c_i^2}{\sqrt{k^2 - \omega^2/c_i^2}} + \frac{4}{\omega^2/c_i^2} k_x^2 (\sqrt{k^2 - \omega^2/c_i^2} - \sqrt{k^2 - \omega^2/c_l^2}) + \right. \\ \left. + 2 \frac{s_z^2}{s_x^2} \left[ \sqrt{k^2 - \omega^2/c_l^2} + \frac{\nu}{1 - \nu} \frac{k^2 - \omega^2/2c_l^2}{\sqrt{k^2 - \omega^2/c_l^2}} - \frac{2}{\omega^2/c_i^2} (k^2 - \omega^2/2c_l^2) \right] \times \right. \\ \left. \times (\sqrt{k^2 - \omega^2/c_l^2} - \sqrt{k^2 - \omega^2/c_i^2}) \right\} \bar{u} = 0. \quad (17)$$

Приравнявая нулю выражение, стоящее перед Фурье-образом смещения границы  $\bar{u}$  в (17), находим дисперсионное уравнение для изгибных колебаний межфазной границы. Из структуры уравнения (17) ясно, что зависимость частоты  $\omega$  собственных колебаний границы от волнового

вектора  $k$  имеет акустический характер  $\omega = Vk = \xi c_i k$ , где  $\xi$  — относительная скорость распространения изгибной волны, является корнем следующего трансцендентного уравнения:

$$\frac{\cos^2 \varphi - \xi^2}{\sqrt{1 - \xi^2}} + \frac{4}{\xi^2} \left[ \sin^2 \varphi + \operatorname{tg}^2 \theta \left( \frac{1}{2} \xi^2 - 1 \right) \right] (\sqrt{1 - \gamma \xi^2} - \sqrt{1 - \xi^2}) + 2 \operatorname{tg}^2 \theta \left[ \sqrt{1 - \xi^2} + \frac{\nu}{1 - \nu} \frac{1 - \xi^2/2}{\sqrt{1 - \gamma \xi^2}} \right] = 0, \quad (18)$$

где  $\varphi = \operatorname{arctg} k_x/k_y$ ,  $\operatorname{tg}^2 \theta = s_z^2/s_x^2$ ,  $\gamma = c_i^2/c_l^2 = (1 - 2\nu)/2(1 - \nu)$ . При  $\theta = 0$  уравнение (18) совпадает с аналогичным уравнением (23) работы [5].

Сравнивая (18) с уравнением (23) работы [5], видим, что учет пластического изменения объема при смещении границы приводит к добавлению к дисперсионному уравнению ряда слагаемых, зависящих от упругих свойств среды (через посредство  $\nu$ ) и не зависящих от направления распространения волны.

В предельном случае  $\theta \rightarrow \pi/2$  ( $\operatorname{tg}^2 \theta \rightarrow \infty$ ) (18) переходит в уравнение

$$\sqrt{1 - \xi^2} + (1 - 2\gamma) \frac{1 - \xi^2/2}{\sqrt{1 - \gamma \xi^2}} = \frac{2}{\xi^2} \left( 1 - \frac{1}{2} \xi^2 \right) (\sqrt{1 - \gamma \xi^2} - \sqrt{1 - \xi^2}),$$

которое в свою очередь можно свести к уравнению [4]

$$\xi^6 - 8\xi^4 + 8(3 - 2\gamma)\xi^2 - 16(1 - \gamma) = 0,$$

определяющему скорость поверхностной волны Рэлея.

Таким образом, если пластическая деформация, сопровождающая фазовое превращение, является деформацией бейновского типа ( $s \parallel m$ ), то локализованные на межфазной границе волны представляют собой аналог волн Рэлея, локализованных вблизи свободной поверхности.

В общем случае уравнение (18) с помощью несложных преобразований приводится к алгебраическому уравнению пятой степени (см. Приложение). Результаты численного анализа этого уравнения приведены на рисунке, откуда видно, что с ростом  $\theta$  ослабевает зависимость  $\xi$  от  $\varphi$  и осуществляется плавный переход от волн, характерных для двойниковых границ [5], к волнам Рэлея. При любом направлении распространения изгибной волны вдоль границы ( $\theta \neq 0$ ) ее скорость  $V = \xi c_l$  меньше скорости поперечного звука  $c_t$  в объеме кристалла и, следовательно, спектр изгибных волн отделен от сплошного спектра колебаний кристалла конечной щелью, величина которой (см. рисунок) зависит от коэффициента Пуассона  $\nu$  и направления распространения волны. Величина отщепления определяет степень локализации колебаний вблизи межфазной границы [5].

#### ПРИЛОЖЕНИЕ

Вводя новую переменную  $z = \sqrt{1 - \xi^2}$ , перепишем уравнение (18) в виде

$$\sqrt{1 - \gamma + \gamma z^2} \{ 4z^2 [\sin^2 \varphi - 1/2 \operatorname{tg}^2 \theta (1 + z^2)] - (1 - z^2)(z^2 - \sin^2 \varphi) - 2z^2(1 - z^2) \operatorname{tg}^2 \theta \} = 4z(1 - \gamma + \gamma z^2) [\sin^2 \varphi - 1/2 \operatorname{tg}^2 \theta (1 + z^2)] + (1 - 2\gamma)z(1 - z^2) \operatorname{tg}^2 \theta. \quad (\text{П. 1})$$

Теперь легко видеть, что, для того чтобы уравнение имело решение, необходимо выполнение условия

$$\psi = \frac{4z(1 - \gamma + \gamma z^2) [\sin^2 \varphi - 1/2 \operatorname{tg}^2 \theta (1 + z^2)] + (1 - 2\gamma)z(1 - z^2) \operatorname{tg}^2 \theta}{4z^2 [\sin^2 \varphi - 1/2 \operatorname{tg}^2 \theta (1 + z^2)] - (1 - z^2)(z^2 - \sin^2 \varphi) - 2z^2(1 - z^2) \operatorname{tg}^2 \theta} \geq 0. \quad (\text{П. 2})$$

Возводя в квадрат обе части равенства (П. 1) и приводя подобные слагаемые, сводим исходное трансцендентное уравнение к алгебраическому

$$z^{10} + \left[ \frac{(1 - 4\beta^2) + (-3 + 6\alpha - 8\beta + 8\alpha\beta)\gamma}{\gamma - \beta^2} \right] z^8 +$$

$$+ \left[ \frac{(6\alpha - 8\beta - 2 + 8\alpha\beta - 6\beta^2) + (3 - 10\alpha + 16\beta - 16\alpha\beta + 9\alpha^2 + 16\beta^2)\gamma - 16\alpha^2\gamma^2}{\gamma - \beta^2} \right] z^6 +$$

$$+ \left[ \frac{(1 - 4\alpha + 8\beta + 9\alpha^2 - 8\alpha\beta + 12\beta^2) + (-1 + 2\alpha - 8\beta - 35\alpha^2 + 8\alpha\beta - 16\beta^2)\gamma + 32\alpha^2\gamma^2}{\gamma - \beta^2} \right] z^4 +$$

$$+ \left[ \frac{(-2\alpha - 10\alpha^2 - \beta^2) + (2\alpha + 27\alpha^2)\gamma - 16\alpha^2\gamma^2}{\gamma - \beta^2} \right] z^2 + \alpha^2(1 - \gamma) = 0. \quad (\text{П. 3})$$

Здесь  $\alpha = \sin^2 \varphi$ ,  $\beta = \text{tg}^2 \theta$ . Относительно  $z^2$  уравнение (П. 3) является уравнением пятой степени. Корни уравнения (П. 3), удовлетворяющие условию (П. 2), будут также корнями дисперсионного уравнения (18).

#### Список литературы

- [1] Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972. 280 с; Lifshitz I. M., Kosevich A. M. // Rep. Progr. Phys. 1966. V. 29. P. 217—254; Косевич А. М., Хохлов В. И. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 1. С. 56—61.
- [2] Кессених Г. Г., Любимов В. Н., Санников Д. Г. // Кристаллография. 1972. Т. 17. № 3. С. 591—594; Maerfeld C., Tournois P. // Appl. Phys. Lett. 1971. V. 19. P. 19; Любимов В. Н., Санников Д. Г. // Кристаллография. 1979. Т. 24. № 1. С. 5—10; Бурлак Г. Н., Коцаренко Н. Я., Кошечая С. В. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 5. С. 1222—1225.
- [3] Косевич Ю. А., Сыркин Е. С. // Акуст. журн. 1988. Т. 34. № 1. С. 113—116; Косевич Ю. А., Сыркин Е. С. // ФНТ. 1989. Т. 15. С. 614—620.
- [4] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. С. 134; Викторов И. А. Звуковые поверхностные волны в твердых телах. М.: Наука, 1981. С. 308.
- [5] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 6. С. 77—82.
- [6] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 243—247.
- [7] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1908—1910; Нечаев В. Н. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 7. С. 2090—2093.
- [8] Косевич А. М., Поляков М. А. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 10. С. 2941—2946; Чицко К. А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 1. С. 36—45.
- [9] Horovitz B., Barsch G. R., Krumhans J. A. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 16. P. 8895—8898; Barsch G. R., Horovitz B., Krumhans J. A. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 11. P. 1251—1254; Суслов И. М. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 3. С. 949—965.
- [10] Bross H. // Phys. St. Sol. 1964. V. 5. N 2. P. 329—342.
- [11] Косилов А. Т., Первозников А. М., Рошупкин А. М. // Поверхность. 1983. № 10. С. 36—51.
- [12] Де Вит Р. Континуальная теория дислокаций. М.: Мир, 1977. С. 18, 113—114.
- [13] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1970. С. 496.

Воронежский политехнический институт

Поступило в Редакцию  
6 июля 1990 г.