

07,13

Динамическая неустойчивость поверхности твердых тел под нагрузкой

© Ю.А. Хон¹, Н. Zapolsky², П.П. Каминский¹, А.Н. Пономарев¹

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

² GPM, UMR 6634, University of Rouen Normandy, Rouen, France

E-mail: khon@ispms.tsc.ru

(Поступила в Редакцию 14 июня 2017 г.)

Рассмотрен механизм динамической неустойчивости поверхности твердого тела под нагрузкой, определяемой возмущениями электронной плотности и изменением межатомного взаимодействия. Данная неустойчивость проявляется при возбуждении динамических смещений атомов в поверхностном слое, которые могут приводить к образованию живущих конечное время структур в виде волн с большой амплитудой. Такие структуры наблюдались ранее экспериментально на растянутой поверхности (111) германия.

Работа выполнена по проекту 23.1.2. Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы. The research was supported by a Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme Fellowship within the 7th European Community Framework Programme (Grant Agreement Number 612552).

DOI: 10.21883/FTT.2018.07.46119.189

1. Введение

Состояние свободной поверхности твердых тел определяет ход многих практически важных процессов, таких как начало перехода к неупругой (обратимой и необратимой) деформации, зарождение и накопление микротрещин при различных условиях деформирования. Выяснено, что плоская поверхность твердого тела под действием приложенной нагрузки становится неустойчивой относительно возмущений с длиной волны $\lambda > \lambda_c$ [1–3]. В континуальном приближении для полубесконечного твердого тела при одноосном растяжении $\lambda_c \approx \frac{\gamma E}{\sigma^2}$. Здесь σ , E , γ — напряжение, модуль Юнга и поверхностная энергия соответственно [1–3]. Толщина поверхности принимается равной нулю. Неустойчивость проявляется и развивается при переносе массы. Как правило, рассматривается механизм диффузионного массопереноса с коэффициентом диффузии, зависящим от локального значения кривизны поверхности. Расчеты, проведенные в модели полубесконечной двумерной среды, показывают, что имеется только один сценарий развития упруго-диффузионной длинноволновой неустойчивости (длина волны превышает критическое значение) при наличии начального возмущения. А именно, плоская поверхность упруго напряженного твердого тела эволюционирует в сторону образования структур в виде канавок и прилегающих к ним валов [3]. Чем глубже канавки, тем они острее, тем быстрее протекает массоперенос. Такие канавки наблюдаются экспериментально при постоянной нагрузке порядка 1 GPa в аморфных сплавах [4], платине [5]. Канавки ориентированы перпендикулярно оси действия нагрузки. Профили канавок и валов получаются гладкими.

В работе [6] на изотропно растянутой поверхности (111) нагруженного монокристалла германия были обнаружены крупномасштабные структуры в виде высоких волн на фоне мелкой хаотической ряби. Термины „волна“ и „рябь“ введены в [6]. Высота волны доходит до 100 nm, а амплитуда ряби до 10 nm. Такой рельеф поверхности формируется в начале области неупругой обратимой деформации при нагрузке, превышающей ≈ 40 МПа. При нагрузке до 36 МПа никаких изменений на поверхности не наблюдается. Волны живут конечное время, составляющее единицы — десятки минут. При данной нагрузке они образуются неоднократно. С течением времени устанавливается стационарное хаотичное распределение волн. Каждая волна и рябь имеют фрактальную структуру.

Механизм и условия образования такого необычного рельефа поверхности нагруженных твердых тел остаются не ясными. По механизму упруго-диффузионной неустойчивости развиваются только трещино-подобные структуры в виде канавок и валов. Исключается и возбуждение по механизму тепловых флуктуаций из-за крайне малой вероятности когерентного смещения большого числа атомов. Проблематичным оказывается и механизм восходящей диффузии, поскольку возникает задача объяснения смены знака коэффициента диффузии (с положительного на отрицательный).

Возможная причина такого положения дел заключается в том, что при определении условий морфологической неустойчивости и ее развития не учитываются возможные изменения в электронной подсистеме твердого тела при деформации. Неявно предполагается, что по электронным степеням свободы может быть проведено усреднение (адиабатическое приближение), а параметры

межатомного взаимодействия не зависят от величины нагрузки и формы поверхности. В частности, это отражается в постоянстве модулей упругости и поверхностной энергии. Указанные приближения, строго говоря, применимы для изолированной системы. Твердое тело под нагрузкой представляет открытую систему. При этом плоская и искривленная поверхности представляют два квантовых состояния твердого тела с различающимися распределениями ядер (ионов) и электронов. При увеличении нагрузки энергетические уровни, соответствующие этим состояниям, сближаются и могут пересекаться. В этом случае электронные переходы между уровнями (перераспределение электронной плотности) могут вызывать неадиабатические (подбарьерные) переходы атомов [7]. А это меняет динамику атомов с адиабатической на неадиабатическую. Состояния, в адиабатическом приближении устойчивые относительно малых возмущений в распределении атомов, при учете электронных степеней свободы могут оказаться неустойчивыми. Данный тип неустойчивости будем называть динамической неустойчивостью по двум причинам. Во-первых, при возмущении электронной плотности меняются характеристики межатомного взаимодействия, и возбуждается динамический ближний порядок в распределении атомов [8]. Термин „динамический“ подчеркивает, что возбуждение данного ближнего порядка обязано действию внешней силы. Во-вторых, изменение межатомных расстояний приводит к дополнительным (динамическим) смещениям атомов.

В строгой постановке длина волны, при которой наступает динамическая неустойчивость, может быть найдена, например, методом функционала плотности. А решение задачи о развитии динамической неустойчивости и кинетике образования пространственно-временных структур на поверхности твердого тела под нагрузкой предполагает использование методов неадиабатической молекулярной динамики [9]. При этом на каждом временном шаге требуется вычисление электронной плотности и потенциальной энергии системы для различных распределений ядер. Характерные размеры наблюдаемых на поверхности неоднородностей (десятки–сотни нанометров) и характерные времена (минуты–десятки минут) [6] делают строгое решение указанных задач практически невозможным. Требуются другие подходы к описанию формирующихся на поверхности пространственно-временных структур при развитии динамической неустойчивости твердого тела под нагрузкой. Один из таких подходов предлагается ниже.

2. Модель динамической неустойчивости твердого тела под нагрузкой

Рассматривается полубесконечный однородный изотропный однокомпонентный образец с плоской поверхностью, содержащий N атомов. Каких-либо ограничений

на толщину поверхностного слоя не накладывается. Образец деформируется одноосным растяжением под действием приложенного напряжения σ . Толщина образца равна h , длина — L , ширина — b и объем $V = hbL$. Размеры образца удовлетворяют условиям $h \gg \lambda_0$, $L \gg \lambda_0$, $b \gg \lambda_0$, λ_0 — характерный размер неоднородностей. В экспериментах [6] характерные размеры неоднородностей ≈ 10 – 100 nm. Ось x декартовой системы координат направлена вдоль оси растяжения. Ось z перпендикулярна плоскости образца. Плоская поверхность образца параллельна плоскости x, y . Начало координат находится в плоскости $z = 0$. Образец расположен в области $z \leq 0$. Зависимость $z = z(x)$ описывает одномерный профиль поверхности.

Обозначим функции распределения ядер (ионов) [10] и электронов в образце с плоской поверхностью через $\rho_0(\mathbf{r})$, $n_0(\mathbf{r})$ соответственно. Потенциальная энергия $U_0[\rho_0, n_0]$ такой системы представляет универсальный функционал плотности электронов [11]. При постоянном значении σ потенциальная энергия системы в принципе может быть вычислена. Точно также может быть вычислена потенциальная энергия образца с искривленной поверхностью $U[\rho, n]$. Здесь $\rho(\mathbf{r})$, $n(\mathbf{r})$ — функции распределения ядер и электронов в образце с искривленной поверхностью соответственно. При $\sigma < \sigma_c$ $U_0 < U$, плоская поверхность устойчива относительно возмущений в распределении ядер и электронной плотности. Возмущения $\sim \exp(ikx)$ с любым значением волнового вектора k затухают. При $\sigma = \sigma_c$ для возмущений с волновым вектором $k_d = 2\pi/\lambda_d$ (λ_d — длина волны возмущения) имеет место равенство $U = U_0$. Для возмущений с другими волновыми векторами энергия возрастает. При $\sigma > \sigma_c$ $U < U_0$, система находится в неравновесном состоянии. Возмущения с волновыми векторами вблизи k_d понижают энергию системы и нарастают. Наступает динамическая неустойчивость, определяемая возрастанием числа атомов с ближним порядком, характерным для поверхностного слоя. А это ведет к искривлению поверхности. В общем случае $k_d \neq k_c = 2\pi/\lambda_c$.

Может возникнуть естественный вопрос: почему при расчетах свойств кристаллов с поверхностью, например, методом функционала плотности динамическая неустойчивость не была замечена? Ответ прост. Дело в том, что при расчетах энергии системы с различными распределениями ионов и электронов всегда предполагается периодичность системы. А пространственный период расчетной ячейки выбирается малым по сравнению с возможным характерным размером неоднородностей. Существующая точность расчетных методов не позволяет различать состояния с разностью энергий порядка 10^{-8} eV/atom. Таков порядок величины упругой энергии при $\sigma/E \approx 10^{-4}$. Проводить же расчеты с периодом десятки и сотни нанометров нереально.

Функции U и U_0 представляют два листа потенциальной энергии системы, пересекающихся вдоль некоторой линии при $\sigma \geq \sigma_c$. Переход с одного листа на другой возможен двумя путями. Первый путь определяется

термически активированными смещениями атомов. Атомы преодолевают потенциальный барьер под действием внешней силы и тепловых флуктуаций. На квантовом языке это означает, что релаксация системы определяется механизмом фонон-фононного взаимодействия. Отличительной особенностью термически активируемых смещений является их некогерентность. Упругодиффузионная неустойчивость проявляется при данном механизме релаксации.

Второй путь релаксации системы определяется возмущениями электронной плотности и возбуждением динамических смещений атомов. Отметим три отличительные особенности таких смещений. Во-первых, их возбуждение практически не зависит от температуры, а определяется только величиной действующей силы. Во-вторых, динамические смещения являются когерентными. В-третьих, переход системы в состояние с более низкой потенциальной энергией происходит без преодоления потенциального барьера. Именно этот путь релаксации рассматривается в дальнейшем.

Для анализа пространственно-временных структур воспользуемся методами, основанными на выделении в системе вблизи порога устойчивости системы медленно меняющихся в пространстве и времени амплитуд неустойчивых мод (параметров порядка) [12,13]. Представим возмущение электронной плотности в одномерном случае в виде

$$\Delta n(x, t) = s e^{ik_{ax}} + s^* e^{-ik_{ax}}. \quad (1)$$

Здесь $s(x, t)$ — не сохраняющийся параметр порядка, символом „*“ обозначено комплексное сопряжение. Отклонение Δz от плоскости $z = 0$, вызванное динамическими смещениями, представим в аналогичном (1) виде

$$\Delta z(x, t) = q e^{ik_{ax}} + q^* e^{-ik_{ax}} \quad (2)$$

с амплитудой $q(x, t)$. Параметр порядка q также является не сохраняющейся величиной.

Кинетические уравнения для параметров порядка в общем случае можно записать в виде [14]

$$t_q \frac{\partial q}{\partial t} = Q(q, s, \sigma) + l_q^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}, \quad (3)$$

$$t_s \frac{\partial s}{\partial t} = S(q, s, \sigma) + l_s^2 \frac{\partial^2 s}{\partial x^2}. \quad (4)$$

Здесь Q, S — функции источников, t_q, t_s, l_q, l_s — характерные времена и характерные длины изменения параметров порядка. Чтобы продвинуться дальше, воспользуемся моделью двух связанных бистабильных сред. В этой модели функции источников представляются в виде

$$Q = a_q q + b_q q^2 - d_q q^3 + c_q p q, \quad (5)$$

$$S = a_s p + b_s s^2 - d_s s^3 - c_s q s. \quad (6)$$

Первые три слагаемых в правых частях (5), (6) описывают не связанные бистабильные среды. Бистабильная

среда может находиться в одном из двух устойчивых однородных стационарных состояниях ($q_0 = 0, q_1 > 0$ и $s_0 = 0, s_1 > 0$). Последние слагаемые в (5), (6) описывают связь между средами. Коэффициенты в (5), (6) в общем случае зависят от σ . С помощью замены переменных

$$\tilde{q} = q d_q^{\frac{1}{3}}, \quad \tilde{t}_q = t_q d_q^{-\frac{1}{3}}, \quad \tilde{a}_q = a_q d_q^{-\frac{1}{3}},$$

$$\tilde{b}_q = b_q d_q^{-\frac{2}{3}}, \quad \tilde{l}_q^2 = l_q^2 d_q^{-\frac{1}{3}}, \quad \tilde{c}_q = c_q (d_q d_p)^{-\frac{1}{3}}, \quad (7)$$

$$\tilde{s} = s d_s^{\frac{1}{3}}, \quad \tilde{t}_s = t_s d_s^{-\frac{1}{3}}, \quad \tilde{a}_s = a_s d_s^{-\frac{1}{3}},$$

$$\tilde{b}_s = b_s d_s^{-\frac{2}{3}}, \quad \tilde{l}_s^2 = l_s^2 d_s^{-\frac{1}{3}}, \quad \tilde{c}_s = c_s (d_q d_s)^{-\frac{1}{3}} \quad (8)$$

уравнения (3), (4) с учетом (5), (6) приводятся в виду (знак „~“ в дальнейшем опускается)

$$t_q \frac{\partial q}{\partial t} = (a_q + c_q s)q + b_q q^2 - q^3 + l_q^2 \frac{d^2 q}{dx^2}, \quad (9)$$

$$t_s \frac{\partial s}{\partial t} = (a_s - c_s q)s + b_s s^2 - s^3 + l_s^2 \frac{d^2 s}{dx^2}. \quad (10)$$

При $c_q = 0, c_s = 0$ каждое из уравнений (9), (10) описывает эволюцию одной бистабильной среды. Например, уравнение (9) имеет единственное устойчивое однородное стационарное решение $q_0 = 0$ при $a_q < -b_q/4$. Это означает, что плоская поверхность устойчива относительно любых возмущений. А это имеет место при $\sigma < \sigma_c$. Из уравнения $a_q = -b_q/4$ находится величина σ_c . При $a_q > 0$ решение $q_1 = \frac{b_q}{2} + \left(\frac{b_q^2}{4} + a_q\right)^{1/2}$ абсолютно устойчиво, а q_0 — неустойчиво. Это означает, что плоская поверхность неустойчива относительно сколь угодно малых возмущений. Отсюда, кстати, следует, что коэффициент $b_q \geq 0$. В интервале $\frac{-b_q^2}{4} < a_q < 0$ имеются два устойчивых решения q_0 и q_1 . При $-b_q^2/4 < a_q < -2b_q^2/9$ решение q_0 абсолютно устойчиво, а q_1 относительно устойчиво. При $-2b_q^2/9 < a_q < 0$ решение q_0 относительно устойчиво, а q_1 абсолютно устойчиво. Для перехода из состояния q_0 в состояние q_1 необходимо начальное возмущение конечной амплитуды. Однородное решение $q_2 = \frac{b_q}{2} - \left(\frac{b_q^2}{4} + a_q\right)^{1/2}$ всегда неустойчиво. Таким образом, коэффициент a_q может быть как положительным, так и отрицательным. Точно такие же решения (при замене q на s) имеет уравнения (10) при $c_s = 0$. Заметим, что каждое из уравнений (9), (10) в отдельности представляет частный случай уравнения Гинзбурга–Ландау. Уравнения (9), (10) при $c_q \neq 0$ и $c_s \neq 0$ описывают эволюцию двух связанных бистабильных сред.

3. Решения кинетических уравнений

Детальный анализ возможных типов решений уравнений (9), (10) и их устойчивости в области $s \geq 0, q \geq 0$

проводится стандартными методами. Отметим лишь те из них, которые потребуются в дальнейшем. Прежде всего, это однородное стационарное решение $s_0 = 0$, $q_0 = 0$. Оно устойчиво при выполнении неравенств

$$a_q + a_s < 0, \quad a_q a_s > 0. \quad (11)$$

При

$$a_s < -\frac{b_s^2}{4}, \quad a_q < -\frac{b_q^2}{4} \quad (12)$$

решение $s_0 = 0$, $q_0 = 0$ единственно и абсолютно устойчиво. Любые начальные возмущения параметров порядка затухают. Условия (12) определяют область нагрузок, при которых динамическая неустойчивость отсутствует. Если нарушается какое-либо неравенство в (11), (12), то могут существовать однородные стационарные решения $s_h > 0$, $q_h > 0$, устойчивые относительно малых однородных возмущений. Эти решения существуют только при $b_s > 0$. В зависимости от соотношения между параметрами в (11), (12) возможно два типа решений, различающиеся устойчивостью точки равновесия s_0 , q_0 . Решения первого типа характеризуются тем, что точка равновесия s_0 , q_0 устойчива относительно малых однородных возмущений. Эти решения существуют, когда неравенства (11) выполняются, но $-\frac{b_s^2}{4} < a_s < 0$ (нарушается первое неравенство в (12)). Это означает, что состояние с плоской поверхностью неустойчиво относительно возмущений электронной плотности. Решения второго типа существуют, когда нарушается второе неравенство в (11) и первое неравенство в (12), либо не выполняются все неравенства в (11), (12). Тогда точка равновесия s_0 , q_0 становится неустойчивой относительно малых возмущений параметров порядка.

Особый интерес представляют локализованные решения $q(x, t)$, $s(x, t)$ в виде автосолитонов [14]. Автосолитоны представляют локализованные неравновесные области и могут быть статическими, бегущими, или пульсирующими. На периферии автосолитона решения переходят в стационарные однородные решения в точке равновесия s_0 , q_0 либо s_h , q_h . Автосолитоны возбуждаются, когда состояние, устойчивое относительно малых однородных возмущений, становится неустойчивым относительно неоднородных возмущений конечной амплитуды. Такие состояния могут существовать в тех точках равновесия, где

$$Q'_s > 0, \quad S'_q < 0. \quad (13)$$

Штрих означает производную в точке равновесия. Условия

$$\tau = \frac{t_s}{t_q} \ll 1, \quad (14)$$

$$l = \frac{l_s}{l_q} \ll 1 \quad (15)$$

способствуют развитию неустойчивости. Бегущие автосолитоны возбуждаются при $\tau < l$, а статические при

$l < \tau$. В одномерном случае статические автосолитоны представляют страты (полосы). Переменная s меняется резко на длине, сравнимой с l_s . Переменная q меняется плавно на расстоянии порядка l_q .

Согласно экспериментальным данным [6] возникающие волны остаются неподвижными, а поверхность на периферии волны остается плоской (с точностью до амплитуды мелкой ряби). То есть параметры порядка равны нулю. Поэтому стационарным однородным решением q_0 , s_0 должно быть решение первого типа. Статические автосолитоны могут возбуждаться при выполнении условий (14), (15) и $l < \tau$.

Полученное выше условие $b_s > 0$, означает, что для возбуждения параметра порядка s нужен источник начальных возмущений. В качестве такого источника выступают тепловые флуктуации в распределении атомов. Термически активируемые смещения, меняя локально ближний порядок, приводят к отклонению электронной плотности от исходного значения и выступают в качестве источника начальных возмущений электронной плотности. На это указывает и тот факт, что для возбуждения возмущений с большой амплитудой требуется инкубационный период около одного часа. То есть характерная частота процесса ω составляет величину порядка 10^{-3} s^{-1} . Число атомов N в таком кластере ближнего порядка легко оценить. По порядку величины $\omega \approx \omega_D (1/6)^N$, $\omega_D \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$ — дебаевская частота. Для $\omega \approx 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ получаем $N \approx 20$, а характерный размер кластера порядка 10 nm.

Анализ условий зарождения статических автосолитонов и их особенностей возможен только на основе численного решения (см. Приложение) уравнений (9), (10). В качестве примера взяты параметры

$$\begin{aligned} a_q &= -0.3, & b_q &= 0.2, & a_s &= -0.03, \\ b_s &= 0.6, & c_q &= 3.5, & c_s &= -0.1. \end{aligned} \quad (16)$$

В этом случае имеется стационарное однородное решение $q_h = 0.19$, $s_h = 0.07$, которое устойчиво относительно малых однородных возмущений, но неустойчиво относительно неоднородных возмущений. В зависимости от соотношения между τ и l возможны три типа неравновесных локализованных возбуждений в системе.

При $l \ll \tau$ формируется устойчивое локализованное в окрестности начального возмущения неоднородное распределение параметров порядка в виде статического автосолитона. На рис. 1 приведена пространственно-временная структура при $\tau = 1$, $l_s = 0.1$, $l = 0.1$. Динамика параметров порядка имеет следующие особенности. До момента времени $t \approx 15$ происходит нарастание переменной s , переменная q меняется слабо. После этого наблюдается быстрый рост переменной q , амплитуда которой достигает наибольшего значения при $t \approx 27$. При этом амплитуда возрастает за время $\Delta t \approx 7$. Амплитуда переменной s несколько уменьшается. Затем оба параметра порядка с течением времени монотонно уменьшаются до стационарных значений с амплитудами

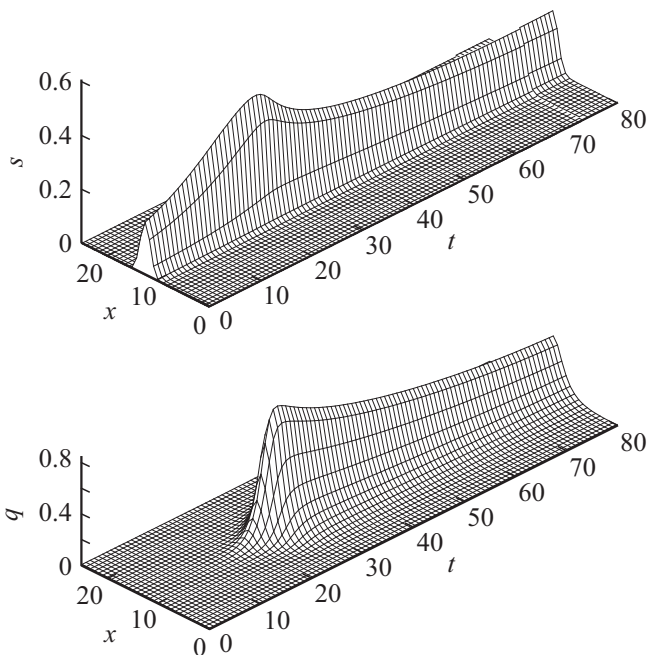


Рис. 1. Пространственно-временное распределение параметров порядка s (верхний рисунок) и q (нижний рисунок) при $\tau = 1$, $l_s = 0.1$, $l_q = 1$ ($l = 0.1$). Длина расчетной области $L = 25$, начальные возмущения с $\sigma_s = 1$, $\sigma_q = 1$, $\Delta s = 0.2$, $\Delta q = 0.001$ заданы в точке $x_0 = 12.5$.

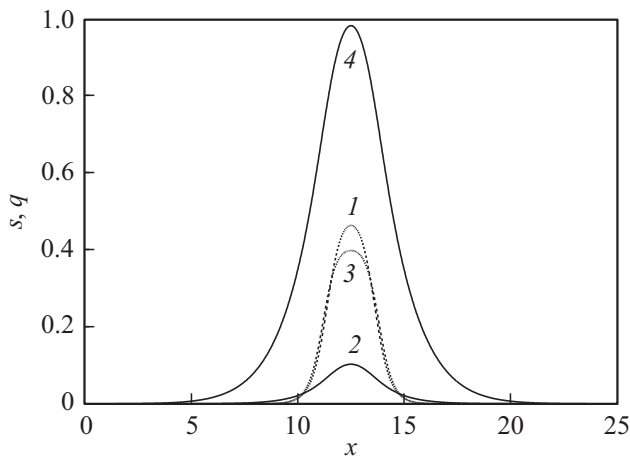


Рис. 2. Пространственное распределение параметров порядка s (кривые 1,3) и q (кривые 2,4) в моменты времени $t = 20$ (кривые 1,2) и $t = 26$ (кривые 3,4). Значения параметров системы уравнений (9), (10) те же, что и на рис. 1.

$s \approx 0.23$, $q \approx 0.45$. Таким образом, основные качественные изменения в системе протекают в течение короткого (≈ 7 единиц) промежутка времени. Но готовятся они на протяжении сравнительно длительного периода времени эволюции переменной s . Если следить только за эволюцией параметра порядка q , то эти изменения оказываются неожиданными и их трудно объяснить с точки зрения, например, теории диффузии. На рис. 2 приведены пространственные распределения параметров по-

рядка в моменты времени $t = 20$ и $t = 26$. Автосолитон имеет наибольшую ширину в тот момент времени, когда его амплитуда становится максимальной (при $t \approx 27$). При $l = 0.1$ и $l_s = a_0$ (a_0 — межатомное расстояние) величина $l_q \approx 10a_0$. Наибольшая ширина основания автосолитона составляет около $10l_q \approx 100a_0 \approx 300$ nm. Возбуждение автосолитона зависит от амплитуды и ширины начального возмущения переменной s . Так при $\Delta s = 0.08$ и $s_s = 1$ автосолитон не возбуждается, а при $s_s = 2$ и том же самом значении Δs возбуждается. При этом резкое нарастание переменной q происходит по

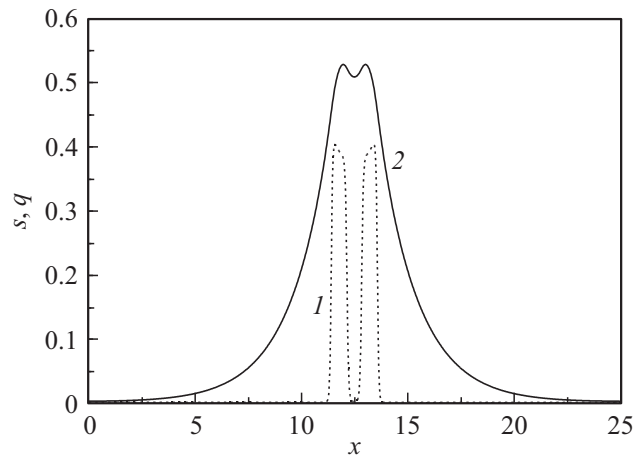


Рис. 3. Пространственное распределение параметров порядка s (кривая 1) и q (кривая 2) при $l_s = 0.01$, $l_q = 1$ ($l = 0.01$). Остальные значения параметров системы уравнений (9), (10) те же, что и на рис. 1.

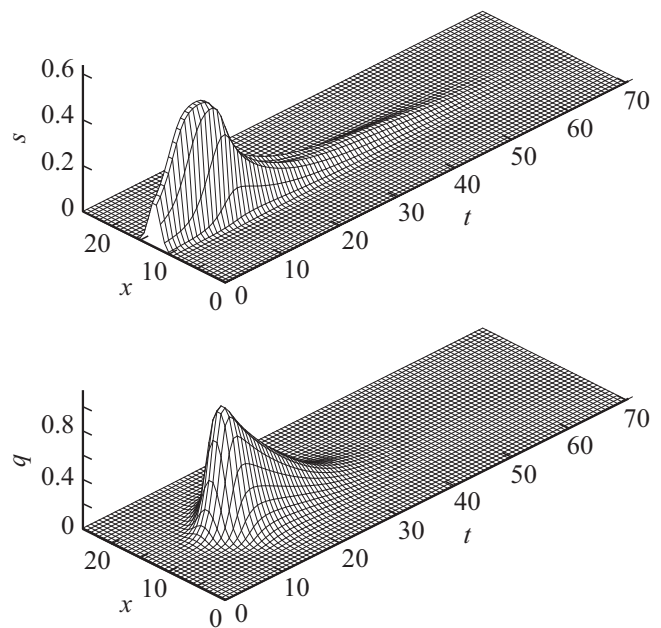


Рис. 4. Пространственно-временное распределение параметров порядка s (верхний рисунок) и q (нижний рисунок) в затухающем автосолитоне при $t_s = 0.2$, $t_q = 1$ ($\tau = 0.2$), $l_s = 0.1$, $l_q = 1$ ($l = 0.1$), $\Delta s = 0.2$, $\Delta q = 10^{-3}$.

истечении примерно 90 единиц времени. Таким образом, большая амплитуда и ширина начального возбуждения Δs_c способствуют возбуждению статического автосолитона. При уменьшении l_s при фиксированном значении l_q автосолитон расщепляется на два более узких (рис. 3).

При увеличении l_s и фиксированном значении l_q возбуждается пульсирующий автосолитон, амплитуда которого периодически меняется со временем. При $l > 0.5$ пульсирующие автосолитоны не возбуждаются.

Особый интерес представляет случай, когда τ уменьшается, приближаясь к l . Возбуждается осциллирующий затухающий автосолитон, в котором амплитуда последующей пульсации становится меньше амплитуды предыдущей. При этом уменьшается и число пульсаций. Число пульсаций и время затухания автосолитона определяется величиной τ . Чем меньше τ , тем быстрее затухает автосолитон. На рис. 4 приведен пример затухающего автосолитона для $\tau = 0.2$, $l = 0.1$. В этом случае второй пульсации не возникает. По истечении примерно 30 единиц времени поверхность становится снова плоской. При уменьшении амплитуды начального возмущения Δs возрастает время, в течение которого происходит нарастание параметра порядка s .

4. Обсуждение результатов

Возбуждение затухающих автосолитонов может быть ассоциировано с образующимися на плоской поверхности короткоживущими локализованными структурами [6]. На первый взгляд, образование таких структур представляется неожиданным и не совсем ясным. Для прояснения ситуации обратимся к уравнениям (9), (10) при значениях параметров (16). Имеются два решения s_0 , q_0 и $q_h = 0$, 19 , $s_h = 0.07$, устойчивые относительно малых однородных возмущений. Но решение s_h , q_h может быть неустойчивым относительно неоднородных возмущений конечной амплитуды. Решения s_0 , q_0 и s_h , q_h отделены друг от друга областью комплексных значений параметров порядка. По этой причине для возбуждения автосолитона необходимо возмущение с амплитудой, превышающей критическое значение. При наличии такого возмущения параметр порядка s при $q = 0$ начинает возрастать. При достаточно больших значениях s может выполняться неравенство

$$a_q^* = (a_q + c_q s) > 0. \quad (17)$$

Тогда в тех точках пространства, где коэффициент $a_q^* > 0$, параметр порядка q начинает возрастать при сколь угодно малом возмущении. Это приводит к уменьшению коэффициента $a_s^* = (a_s - c_s q)$ в уравнении (9) и уменьшению параметра порядка s . Дальнейший сценарий зависит от соотношения между скоростями $v_q = l_q/t_q$ и $v_s = l_s/t_s$. Если $\tau \approx 1$, то $v_q \gg v_s$, и переменная s убывает медленно. В результате устанавливается стационарное локализованное состояние,

соответствующее статическому автосолитону (рис. 1). При малых τ переменная s быстро убывает до значений, меньших критического значения. Дальнейший рост параметра порядка s становится невозможным. Система эволюционирует к решению в точке O , автосолитон затухает. Заметим, что без учета параметра порядка s подобную локализацию переменной q объяснить трудно. Приходится предполагать наличие источников таких смещений. В рамках рассматриваемой модели никаких источников вводить не надо. Все образующиеся структуры являются результатом эволюции неравновесной нелинейной системы.

Возникает вопрос: почему именно германий демонстрирует столь необычную реакцию на приложенную нагрузку, а, например, аморфное железо [5] или платина [6] нет? Во-первых, кристалл германия является хрупким, в нем не реализуются типичные для металлов сдвиговые механизмы деформации. При всестороннем растяжении естественно ожидать возбуждение островков динамического ближнего порядка, в которых среднее расстояние между атомами a больше, чем вне островков a_0 . Смещения атомов в направлении, перпендикулярном поверхности, приводят к образованию выпуклых участков (автосолитонов, волн [6]). Амплитуда автосолитона (волны) определяется толщиной поверхностного слоя d , в котором произошло возбуждение динамического ближнего порядка, и величиной a . Так, например, при $a \approx 5 \cdot 10^{-2} a_0$ и $d \approx 10^3 a_0 \approx 0.1 \mu\text{m}$ высота волны составит $\approx 150 \text{ nm}$. Напомним, что в изолированном кристалле расстояния между слоями атомов, перпендикулярными поверхности, постепенно возрастают по мере удаления вглубь кристалла [15]. Характерная толщина поверхностного слоя достигает десяти межатомных слоев. При этом изменение расстояния между двумя внешними слоями может достигать десяти процентов. Подчеркнем, что возбуждение динамического ближнего порядка обусловлено откликом всей системы. Поэтому толщина слоя вблизи поверхности зависит от величины нагрузки. Образование мелкой хаотической ряби на поверхности обусловлено тепловыми флуктуациями с малой амплитудой.

5. Заключение

Морфологическая неустойчивость плоской поверхности твердого тела под нагрузкой наступает, когда упругая энергия системы может быть понижена за счет увеличения площади поверхности. Неустойчивость проявляется в условиях, когда процессы переноса массы позволяют осуществить указанное увеличение. В научной литературе подробно исследован случай упруго-диффузионной неустойчивости, когда перенос вещества осуществляется диффузией атомов. Изменение в электронной подсистеме твердого тела при этом не учитываются. Наблюдаемое экспериментально изменение морфологии поверхности (111) нагруженного монокри-

сталла германия в виде образования живущих конечное время высоких волн на фоне мелкой ряби [1] отражает другой тип неустойчивости — динамической. Она проявляется в виде динамических (когерентных) смещений атомов в поверхностном слое, вызванных изменением межатомного взаимодействия при электронных переходах между пересекающимися энергетическими уровнями твердого тела, соответствующих разным типам ближнего порядка в распределении атомов.

Вблизи порога устойчивости рассмотрены две неустойчивые моды, одна из них связана с возмущениями электронной плотности, а вторая — с возмущениями в распределении ядер (ионов). В модели двух связанных бистабильных сред получена система двух нелинейных уравнений, описывающих эволюцию амплитуд этих мод (параметров порядка). Найдены условия, при которых уравнения имеют локализованные решения в виде статических автосолитонов трех типов: стационарных, пульсирующих и затухающих. Затухающим автосолитонам могут соответствовать живущие конечное время волны с большой амплитудой. При этом для возбуждения затухающего автосолитона требуется начальное возмущение электронной плотности конечной амплитуды. Источником такого возмущения являются крупные тепловые флуктуации. Это объясняет наличие длительного (около одного часа) инкубационного периода образования волны. Источником мелкой ряби являются малые тепловые флуктуации в распределении атомов. Случайный характер тепловых флуктуаций объясняет хаотичность распределения ряби и высоких волн.

Приложение

Численное решение уравнений (9), (10) проводилось по чисто неявной схеме [16]. Начальные условия: $s(x, t = 0) = 0$, $q(x, t = 0) = 0$. Граничные условия: $0 \leq x \leq L$, $\frac{ds}{dx}|_{x=0} = \frac{dq}{dx}|_{x=L} = 0$, $\frac{dq}{dx}|_{x=0} = \frac{dq}{dx}|_{x=L} = 0$, L — размер расчетной области. Начальные возмущения параметров порядка с амплитудами Δs , Δq и дисперсиями σ_s , σ_q задавались в точке x_0 в виде $\Delta q \exp[-\sigma_q(x - x_0)^2]$, $\Delta s \exp[-\sigma_s(x - x_0)^2]$.

Список литературы

- [1] R.J. Asaro, W.A. Tiller. *Met. Trans.* **3**, 1789 (1972).
- [2] M.A. Grinfeld. *Sov. Phys. Dokl.* **31**, 831 (1986).
- [3] D.J. Strolovitz. *Acta Met.* **37**, 621 (1988).
- [4] В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Н. Светлов, Е.В. Степин, Письма в ЖЭТФ **57**, 343 (1993).
- [5] С.А. Князев, В.Е. Корсуков. *ФТТ* **47**, 876 (2005).
- [6] С.Н. Журков, В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Н. Светлов, А.П. Смирнов. Письма в ЖЭТФ **51**, 324 (1990).
- [7] Е.А. Соловьев. *УФН* **157**, 437 (1989).
- [8] В.Е. Егорушкин, Н.В. Мельникова. *ЖЭТФ* **103**, 214 (1993).
- [9] Raymond Kapral. *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 073201 (2015).
- [10] Y.M. Jin, A.G. Khachatryan. *J. Appl. Phys.* **100**, 013519 (2006).
- [11] P. Hohenberg, W. Kohn. *Phys.Rev.* **136**, B864 (1964).
- [12] I.S. Aranson. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 99 (2002).
- [13] M.C. Cross, P.C. Hohenberg. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 854 (1993).
- [14] Б.С. Кернер, В.В. Осипов. *УФН* **157**, 201 (1989).
- [15] A.V. Bakulin, S.E. Kulkova, M.S. Aksenov, N.A. Valisheva. *J. Phys. Chem. C* **120**, 17491 (2016).
- [16] А.А. Самарский, А.В. Гулин. *Численные методы*. Наука, М. (1989). 432 с.

Редактор Т.Н. Василевская