

УДК 539.3

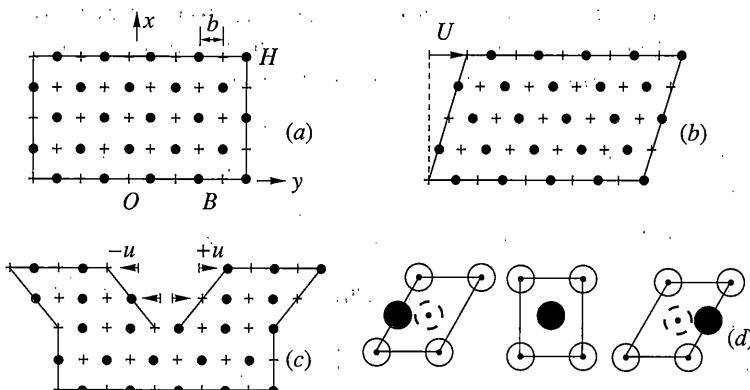
© 2007 г. Э. Л. АЭРО, А. Н. БУЛЫГИН

**СИЛЬНО НЕЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУРЫ
ВСЛЕДСТВИЕ УПРУГИХ И НЕУПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ**

Развита существенно нелинейная теория упругих и неупругих микродеформаций, приводящих к формированию в нейnanoструктурных образований. На основе модели взаимно проникающих подрешеток дано обобщение известной теории акустических и оптических колебаний на случай нелинейного взаимодействия подрешеток. Это позволяет рассматривать силы взаимодействия подрешеток как периодические (например, синусоидальные) функции относительного смещения подрешеток. Получены уравнения для макроскопического и микроскопического поля смещений, содержащие два характерных масштаба nanoструктуры. Найден ряд их решений, описывающих эффекты снижения потенциальных межатомных барьеров в поле внешних напряжений, формирование дефектов и доменной nanoструктуры в результате бифуркационных переходов. Выявлена их устойчивость.

1. Введение и постановка задачи. В настоящее время немалое внимание исследователей привлекает проблема структурных и фазовых превращений в nanostructuredированных материалах, проблема деградации свойств под нагрузкой (старение, усталость) и связанных с ними процессов возникновения дефектов структуры и других ее нарушений. Распространенный подход к этим проблемам основывается на искусственном введении конкретных, заранее "спроектированных" элементов нарушения кристаллической структуры с последующим отслеживанием их "судьбы" в условиях интенсивного силового (и температурного) воздействия. Казалось бы более универсальный подход основан на введении в континуальную и даже кристаллическую модель твердого тела внутренних степеней свободы. Многочисленные попытки ее решения показали, что в пределах линейной теории действительно 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 [1–3]. Основные новые результаты – появление новых мод оптических колебаний, пространственно-временная дисперсия упругих свойств и приграничные эффекты в статике. Кардинальные же структурные перестройки оказываются за пределами линейного подхода. Переход к существенно нелинейным уравнениям, как это было показано в [4], дает возможность предсказывать глубокие структурные перестройки, понижение потенциальных барьеров, переключение межатомных связей, возникновение сингулярных дефектов и других повреждений, фазовые превращения.

В основу теории положим модель сложной решетки, состоящей из двух подрешеток, которые совмещаются (сливаются в одну) сдвигом на постоянный структурный вектор u_0 , являющийся параметром сложной решетки (фиг. 1, a). На фиг. 1, b показана схематически малая ее деформация без относительного сдвига подрешеток, когда



Фиг. 1

сохраняется локальная топология – ближний порядок (ближайшее окружение каждого атома). Эта модель приводит к классическому континууму. На фиг. 1, *d* показано его изменение при большой деформации, когда положение атома в центре ячейки становится неустойчивым и он переходит на грани ячейки, меняя кристаллографическую симметрию. На фиг. 1, *c* близкая ситуация реализуется при образовании двойника – вблизи разлома легко усматривается нарушение числа ближайших соседей одного сорта.

Эта модель известна в физике твердого тела. После континуализации получается неклассический двойной континуум, который в принципе может учсть изменение ближнего порядка, но при больших деформациях. Однако модель разработана в линейном и ангармоническом приближениях. В линейной теории кристаллической решетки [1] получаются два уравнения – для акустических (*U*) и “оптических” (*u*) смещений соответственно. Введение в теорию изменений локальной топологии с помощью внутренних степеней свободы (поля *u*) оказывается эффективным, если перейти к следующему обобщению линейного приближения.

Рассмотрим произвольно большие смещения подрешеток *u*. В основу построения нелинейной теории положим дополнительный элемент трансляционной симметрии, характерный для сложных решеток, который однако не был введен ранее в физике твердого тела. Очевидно, что смещение одной подрешетки относительно другой на один период (или их целое число) до совмещения этой подрешетки с самой собой снова воспроизводит структуру сложной решетки. Это значит, что ее энергия должна быть периодической функцией относительного жесткого смещения подрешеток *u*, инвариантной к подобной трансляции. Разумеется сохраняется и классический принцип трансляционной симметрии, приводящий к инвариантности энергии решетки к совместной трансляции *U* обеих подрешеток на один период сложной решетки. Данный подход позволяет ввести в микромеханику новые параметры кристалла, на основе которых становится возможным описание микромеханизмов кардинальных структурных перестроек решетки. Это характеристики ближнего порядка, потенциальные барьеры, характерные размеры элементов структуры и межфазных границ, бифуркационные параметры.

2. Общие уравнения. Введем величины смещения *U* центра инерции пары атомов (элементарной ячейки) и относительного их смещения *u* внутри ячейки (за счет изменения *u*₀) следующим образом

$$U = (m_1 U_1 + m_2 U_2) / (m_1 + m_2), \quad u = (U_1 - U_2) / a \quad (2.1)$$

Здесь \mathbf{U}_1 и \mathbf{U}_2 – смещения атомов (с массами m_1, m_2) первой и второй подрешеток соответственно, a – период подрешеток. Построим вариационные уравнения движения, определяющие поля $\mathbf{U}(t, x, y, z)$, $\mathbf{u}(t, x, y, z)$, исходя из лагранжиана

$$L = (1/V) \int_V^t [1/2\rho \dot{\mathbf{U}}_m \dot{\mathbf{U}}_n + 1/2\mu \ddot{\mathbf{u}}_n \ddot{\mathbf{u}}_n - D] dt dV \quad (2.2)$$

Здесь D – энергия деформаций и структурных изменений

$$D = (1/V) \int_V [1/2\lambda_{ikmn} U_{i,k} U_{m,n} + 1/2k_{ikmn} u_{i,k} u_{m,n} + (p - S_{ik} U_{i,k}) \Phi(u_R)] dV \quad (2.3)$$

Производные по времени обозначены точками сверху, а пространственные производные, запятой в тензорных индексах. Далее введены обозначения для тензорных материальных коэффициентов: макроупругости (λ_{ikmn}), микроупругости (k_{ikmn}), стрикции (S_{ik}), половины межатомного потенциального барьера или энергии активации межатомных связей (p). Величина $\Phi(u_R)$ представляет собой периодическую энергию взаимодействия подрешеток, которая будет проанализирована подробно позднее.

Отметим, что все материальные тензоры имеют четный ранг. Это значит, что рассматриваются кристаллы, обладающие центром симметрии, для которых тензоры нечетных рангов обращаются в нуль. Этот последний случай рассмотрен в [5].

Общие вариационные уравнения для полей макро- и микросмещений имеют вид

$$\rho \dot{\mathbf{U}}_i = \lambda_{ikmn} U_{k,mn} - S_{in} [\Phi(u_R)]_{,n} \quad (2.4)$$

$$\mu \ddot{\mathbf{u}}_i = k_{ikmn} u_{k,mn} - (p - S_{nk} U_{n,k}) \partial \Phi / \partial u_i \quad (2.5)$$

Первое уравнение полезно переписать в стандартной форме уравнения механики сплошной среды

$$\rho \dot{\mathbf{U}}_i = \sigma_{ik,k} \quad (2.6)$$

введя определение тензора напряжений

$$\sigma_{ik} = \lambda_{ikmn} U_{m,n} - S_{ik} \Phi(u_R) \quad (2.7)$$

Соотношения (2.5)–(2.7) представляют трансляционно инвариантные уравнения динамики двойного континуума. Прежде чем заняться их анализом уточним вид периодической энергии взаимодействия подрешеток Φ .

В общем случае энергия Φ является функцией трех проекций: $u_1 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{k}$, $u_2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{m}$, $u_3 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ вектора \mathbf{u} на орты кристаллографических осей ($\mathbf{k}, \mathbf{m}, \mathbf{n}$). Они инвариантны к точечным преобразованиям общей системы координат. Тогда для вектора силы взаимодействия пары атомов запишем

$$\mathbf{F} = \partial \Phi / \partial \mathbf{u} = (\partial \Phi / \partial u_1) \mathbf{k} + (\partial \Phi / \partial u_2) \mathbf{m} + (\partial \Phi / \partial u_3) \mathbf{n} \quad (2.8)$$

В этом общем случае речь должна идти о тройко периодической функции $\Phi(u_R)$ при взаимной трансляции подрешеток Бравэ вдоль направлений векторов $\mathbf{k}, \mathbf{m}, \mathbf{n}$ на периоды a_1, a_2, a_3 соответственно. Основная идея состоит в том, чтобы построить скалярную периодическую функцию от простейших поворотных инвариантов u_R векторного поля, выбранных, в частности, в виде

$$u_R = \sqrt{u_i \alpha_{ik} u_k} \quad (2.9)$$

Построение конкретной теории требует введения функции Φ в явной форме. Простейшим случаем будет

$$\Phi \rightarrow p[1 - \cos \sqrt{(u_i \alpha_{ik} u_k)}], \quad \alpha_{ik} = a_1^{-2} k_i k_i + a_2^{-2} m_i m_i + a_3^{-2} n_i n_i \quad (2.10)$$

Здесь α_{ik} – тензор обратных периодов решетки (a_1, a_2, a_3); $\mathbf{k}/a_1, \mathbf{m}/a_2, \mathbf{n}/a_3$ – векторы обратной решетки. Очевидно $\mathbf{k}a_1, \mathbf{m}a_2, \mathbf{n}a_3$ есть векторы решетки Бравэ. Сила взаимодействия соседних атомов имеет вид

$$F_i = \frac{\partial \Phi}{\partial u_i} = \frac{\partial \Phi}{\partial u_R} \frac{\partial u_R}{\partial u_i} = \frac{\partial u_R}{\partial u_i} \sin u_R, \quad u_R = \sqrt{u_i \alpha_{ik} u_k} \quad (2.11)$$

Для кристаллов кубической симметрии ($a_1 = a_2 = a_3 = a$) получим более простые соотношения

$$\alpha_{ik} = a^{-2} (k_i k_i + m_i m_i + n_i n_i), \quad u_R^2 = u_i \alpha_{ik} u_i = u^2 a^{-2} \quad (2.12)$$

$$F_i = p L_i \sin u_R; \quad u_R^2 = (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)/2, \quad L_i = u_i/u, \quad u = \sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2} \quad (2.13)$$

Очевидно, u – абсолютная величина вектора микросмещений, L_i – его орт.

Легко видеть, что обе функции периодичны вдоль направлений $\mathbf{k}, \mathbf{m}, \mathbf{n}$ с периодами a_1, a_2, a_3 соответственно. Поскольку смещение \mathbf{u} исчисляется в единицах относительно периода решетки Бравэ (в данном направлении), то периодами этой функции являются целые числа. В частности, если $F \rightarrow p \sin(2\pi u)$, то смещению $u = |\mathbf{u}| = 1$ отвечает переход подрешеток в новое, но кристаллографически эквивалентное (ближайшее) структурное состояние. Но при таком переходе происходит переключение связей и изменение ближайших соседей каждого атома, т.е. изменение локальной топологии.

Перепишем общие уравнения для случая, когда периодическая функция Φ выбрана согласно (2.10) и учитываются соотношения (2.12). Получим

$$\sigma_{ik} = \lambda_{ikmn} U_{m,n} - S_{ik}(1 - \cos u_R) \quad (2.14)$$

$$\mu \ddot{u}_i = k_{ikmn} u_{k,mn} - p \frac{\partial u_R}{\partial u_i} \sin u_R, \quad u_R = \sqrt{u_i \alpha_{ik} u_k} \quad (2.15)$$

Первое соотношение позволяет рассматривать напряжение как сумму упругой части (первое слагаемое) и неупругой, обусловленной перестройкой микроструктуры решетки. Последняя исчезает при нулевых микросмещениях и достигает предельно высокого значения равного S_{ik} , когда $u = \pi$, т.е. при сдвиге всех атомов из потенциальных ям в максимумы – на вершины межатомных потенциальных барьеров. Очевидно, величина материального тензора S_{ik} является тем максимальным (теоретическим) пределом для неупругих напряжений, который отвечает потере устойчивости решетки. С ним связаны пластические деформации, фазовые переходы и другие бифуркационные процессы. Они определяются полем микросмещений, которое является решением уравнения (2.15). Это достаточно сложное для анализа уравнение, относящееся к кристаллу любого класса симметрий.

3. Одномерный и однокомпонентный случай для тел с центром симметрии. Рассмотрим весьма простой одномерный и однокомпонентный случай, который удается проанализировать точно до конца в общем виде. Условия одномерного и однокомпонентного движения имеют вид:

$$U_i \rightarrow U(x), \quad u_i \rightarrow u(x), \quad F_i(u_k) \rightarrow p \sin u \quad (3.1)$$

В этом разделе под U и u подразумевается любая из векторных компонент, но не абсолютная величина вектора. Тогда инвариантное выражение для энергии макро- и микродеформаций с учетом их взаимодействия (нелинейной стрикции) примет вид

$$D = (1/H) \int_0^H [(\lambda/2)(U_x)^2 + (k/2)(u_{,x})^2 + (p - SU_{,x})(1 - \cos u)] dx \quad (3.2)$$

Кроме того, U_x и $u_{,x}$ – макро- и микроскопические градиенты; λ , k – макро- и микроскопические модули; S – коэффициент нелинейной стрикции (максимальные внутренние напряжения, обусловленные изменением атомарной структуры); $2p$ – межатомный потенциальный барьер в недеформированной решётке (энергия активации атомных связей в элементарной ячейке).

Соответствующие уравнения равновесия имеют вид

$$0 = \lambda U_{,xx} - S(1 - \cos u)_{,x} \quad (3.3)$$

$$0 = ku_{,xx} - (p - SU_{,x}) \sin u \quad (3.4)$$

Первый интеграл первого уравнения имеет вид

$$\lambda U_{,x} - S(1 - \cos u) = \sigma - \text{const} \quad (3.5)$$

Здесь σ представляет собой фактически напряжение в теле, обусловленное как макроскопическими деформациями, так и микросмещениями. Исключая с его помощью макрогradientный член во втором получим отдельное уравнение для микроскопического поля

$$(k/p)u_{,xx} = (\beta - \beta_0) \sin u + \beta_0 \sin u \cos u \quad (3.6)$$

Здесь β – бифуркационный параметр с пороговым значением β_0 :

$$\beta_0 = S^2/p\lambda; \quad \beta = 1 - S\sigma/\lambda p \quad (3.7)$$

Уравнение (3.6) один раз интегрируется. Его первый интеграл имеет вид

$$l_0^2(u_{,x})^2 = 2\beta(1 - \cos u) - \beta_0(1 - \cos u)^2 + 2g \quad (3.8)$$

Здесь l_0^2 – длина когерентности решётки, играющая роль материального наномасштаба. Кроме того, полезно ввести еще два масштаба l_1^{-2} и l_2^{-2} , определив их соотношениями:

$$l_0^2 = k/p; \quad \beta = 1 - \sigma/\sigma_t; \quad \beta_0 = S^2/p\lambda; \quad l_1^{-2} = l_0^{-2}\beta; \quad l_2^{-2} = l_0^{-2}\beta_0 \quad (3.9)$$

Уравнение структурных превращений (3.6) и его первый интеграл (3.8) имеет три коэффициента. Два из них (l_0 и β_0), зависящие лишь от свойств кристалла, будем считать фиксированными.

Однако третий (β или l_1) зависит и от внешнего напряжения σ . Это значит, что масштаб l_1 или эффективный потенциальный барьер $P = 2\beta$ могут изменяться в широких пределах.

В результате могут преодолеваться две точки бифуркации и кардинально меняться атомная структура и свойства кристалла. Эти точки задаются следующим значениями бифуркационного параметра: $\beta = 0$ и $\beta = \beta_0$. Они разбивают весь интервал существования решений на три участка, которые будут рассмотрены.

Безразмерная константа интегрирования g в уравнении (3.8) позволяет удовлетворять, вообще говоря, произвольным граничным условиям. В частности, если на границе равны нулю микросмещения ($u_s = 0$), то величина pg представляет поверхностную энергию микрографиентов на границе

$$pg = (k/2)(u_{,x}^2)_s; \quad u_s = 0; \quad x = x_s \quad (3.10)$$

Далее будет показано, что уравнение (3.6) интегрируется в общем виде с учетом произвольных граничных условий. Однако на уровне первого интеграла (3.8) можно сделать в общем виде ряд полезных заключений о характере решений. Так выражение для полной энергии (3.2) может быть проинтегрировано в общем виде при произвольных граничных условиях. Переидем для этого к интегрированию в (3.2) по микроскопическому полю (вместо интегрирования по пространству) используя замену $dx = du/u_{,x}$, где $u_{,x}$ находится из (3.8). В результате получим выражение для плотности энергии

$$D - \frac{\sigma^2}{2\lambda} = \frac{pl_0}{H} \int_0^{u_s} \frac{(1 + \beta)(1 - \cos u) - \beta_0(1 - \cos u)^2 + g}{\sqrt{(2\beta(1 - \cos u) - \beta_0(1 - \cos u)^2 + 2g)}} du \quad (3.11)$$

$$H = \int_0^{u_s} du [2\beta(1 - \cos u) - \beta_0(1 - \cos u)^2 + 2g]^{-1/2} \quad (3.12)$$

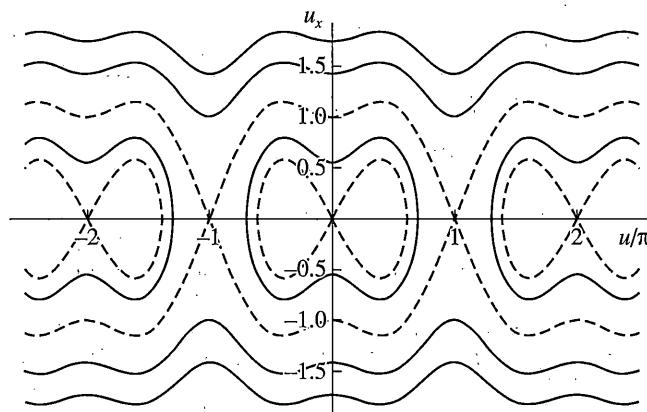
Существенно, что этот интеграл выражается в общем виде, но через эллиптические функции. Он представляет микроскопическую энергию изменения структуры тела при деформировании в зависимости лишь от граничных значений микроскопического поля u_s и его градиентов и, разумеется, от материальных констант λ, p, S . Для его вычисления в принципе не требуется знания решения уравнения микрополя (3.8).

С помощью (3.11), (3.12) можно подтвердить сделанное выше утверждение о физическом смысле константы как безразмерной поверхностной энергии. Действительно, интегрируя в этих формулах по тонкому приграничному слою, где реализуются граничные условия $u \rightarrow 0, x \rightarrow x_s$, легко показать, что с учетом (3.10) $D \rightarrow D_s = pg$. Что касается самих этих решений, то важные качественные их особенности можно выявить построив фазовый портрет уравнения (3.8), то есть зависимость микрографиентов $u_{,x}$ от микрополя u .

На фиг. 2 фазовый портрет представлен для случая $2\beta = 1; \beta_0 = 0.75$. При этом по вертикальной оси отложено значение микрографиента $l_0 u_{,x}$, а по горизонтальной — микросмещения u . Каждой кривой отвечает одно из решений, определяемое одним из значений константы интегрирования $2g = -0.3; 0; 0.3; 1; 2; 3$, поскольку согласно (3.9) при $u = 0$ имеем $2g = l_0 u_{,x}$.

Все множество решений разделено на три группы сепаратрисами, обозначенными штриховыми кривыми. “Малые” сепаратрисы ($g = 0$), похожие на восемерки (мелкие штрихи) ограничивают области, внутри которых имеются по две подобласти замкнутых кривых с центрами, отвечающими состояниям устойчивого равновесия. Самым замкнутым кривым отвечают периодические зависимости $u(x)$, которые представляют собой два подсемейства частных решений. Это модулированные доменные nanoструктуры, явный вид которых будет представлен. Они ограничены как по величине микросмещений, так и по величине микрографиентов. Существенно, что им отвечают самые малые значения константы g , т.е. градиентной энергии $l_0^2(u_{,x})^2$ (при $u = 0$).

За пределами “малой” сепаратрисы (при больших значениях этой энергии) лежит область, ограниченная “большой” сепаратрисой ($2g = 1$), (обозначенной крупным



Фиг. 2

штрихом). Третье семейство периодических решений – замкнутые кривые, охватывающие оба упомянутых центра равновесия. Эти решения связаны с большими микросмещениями соседних атомов, не выходящих однако за пределы элементарной ячейки.

И, наконец, за пределами “большой” сепаратрисы (при больших g) лежит область незамкнутых кривых, которым отвечают решения, не ограниченные величиной микросмещений. Эти решения описывают пластическое течение решетки.

Можно, воспользовавшись формальной аналогией с колебаниями маятниковой системы (считая условно градиент u_x скоростью маятника), представить наглядную картину его прохождения через некоторые потенциальные барьеры. Двум упомянутым центрам отвечают точки равновесия в двух потенциальных ямах, разделенных потенциальным барьером в точке самопересечения “малой” сепаратрисы. Переход через этот барьер с конечной скоростью (при больших значениях g) отвечает замкнутым кривым охватывающим эту сепаратрису. Если же скорость стремится к нулю, то маятник достигает точки бифуркации (неустойчивого равновесия) – седловой точки самопересечения сепаратрисы. Поскольку время нахождения вблизи сепаратрисы велико, соответствующие состояния представляют практический интерес. Это солитоны поля микросмещений или дефекты решетки. Их физический смысл будет выяснен.

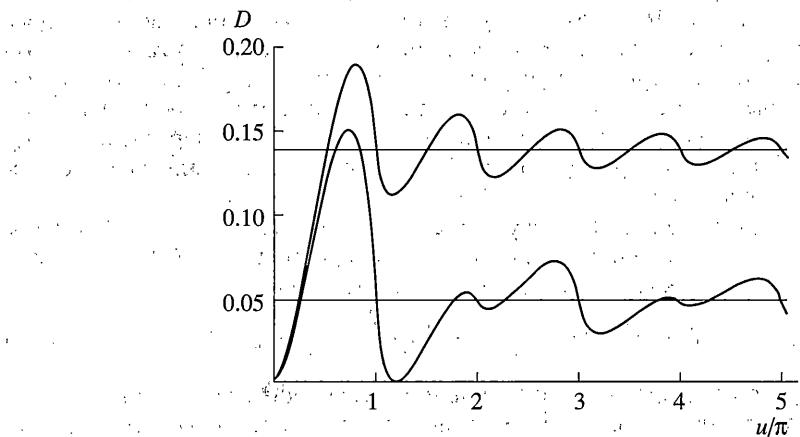
Второй (“большой” сепаратрисе) отвечает также неустойчивое состояние на вершине более высокого потенциального барьера, соответствующее второй седловой точке самопересечения этой сепаратрисы ($|u| = \pi$; $u_x = 0$). На “большой” сепаратрисе реализуются кинковые решения, также описывающие дефекты структуры.

Интересная особенность различных ветвей структурных деформаций заключается в том, что каждая из них разбивается двумя точками бифуркаций ($\beta = 0$ и $\beta = \beta_0$) на три интервала. Данным точкам бифуркации отвечают два порога по растягивающим напряжениям: σ_{t1} и σ_t . Рассмотрим их последовательно.

I. Область устойчивых состояний идеальной решетки, но метастабильных состояний наноструктур. Она реализуется при положительных значениях бифуркационного параметра ($\beta > \beta_0$), когда напряжения растяжения меньше наименьшего предельного значения

$$\sigma < \sigma_{t1}; \quad \sigma_{t1} = \sigma_t - S; \quad \sigma_t = p\lambda/S \quad (3.13)$$

На фиг. 3 показаны зависимости плотности энергии от микросмещения $D(u)$ при разных значениях напряжений и $g = 0$. Верхняя кривая с абсолютным минимумом при



Фиг. 3

$u = 0$ и метастабильным, при $u = u_0$, относится к нулевому напряжению. Нижняя кривая получена при напряжении, равном первому порогу (границе между областями I и II). Оба состояния (с искаженной и неискаженной микроструктурой) оказываются энергетически равнозначными.

II. Область ограниченно устойчивого (метастабильного) состояния идеальной решетки, но устойчивого состояния наноструктуры ($0 < \beta < \beta_0$), когда напряжения достигают больших значений, отвечающих интервалу

$$\sigma_t - S < \sigma < \sigma_t \quad (3.14)$$

Его протяженность равна величине максимального внутреннего напряжения S . В этой области кривые плотности энергии (на фиг. 3 не показаны) и отличаются обратным расположением минимумов. Метастабильным оказывается неискаженное состояние $u = 0$, а наноструктурированное $u = u_0$, устойчивым.

III. Абсолютная неустойчивость идеальной кристаллической структуры и абсолютная устойчивость наноструктуры ($\beta < 0$), когда растягивающие напряжения превышают верхний порог

$$\sigma > \sigma_{t2} \quad (3.15)$$

В этом случае зависимость $D(u)$ имеет при $u = 0$ не минимум, а максимум. Решетка спонтанно переходит в наноструктурированное состояние, которому отвечают минимумы. Заметим, что подобная ситуация характерна для сегнетоэластических и мартенситных переходов [6]. В данной работе эта последняя область не рассматривается, т.е. полагается, что $\beta > 0$.

4. Крупномасштабные ограниченно устойчивые микроструктуры. Уравнение (3.8) имеет ограниченные осциллирующие (в пространстве) решения, ответственные за возникновение периодических доменных структур. Они возникают в условиях ограниченной устойчивости, когда выполняются условия II области устойчивости ($\sigma_t - S < \sigma < \sigma_{t2}$). Им на фазовых портретах (фиг. 2) отвечают замкнутые кривые, охватывающие точки как устойчивого равновесия типа центра, так и седловую точку. Соответствующие траектории занимают область между "большой" и "малой" сепаратрисами. Легко видеть, что их амплитуды (отрезки, отсекаемые на горизонтальной оси) ограничены и не превышают величины π , т.е. половины периода решетки. Это значит, что

речь идет о малых или в крайнем случае об ангармонических нелинейностях. Здесь имеем дело в чистом виде с самим наноструктурированным материалом – системой доменов с относительно регулярной структурой (почти идеальной решеткой) и границами между ними (доменными стенками), в которых развиваются значительные, но ограниченные микроградиенты. В пределах предлагаемой теории, оперирующей двумя масштабами, описание этих структур может быть проведено на языке размеров доменов и толщины междоменных границ.

Рассмотрим ниже случай доменных структур с низкой энергией границ. Эти наноструктуры характеризуются периодическими полями микросмещений. Соответствующее ограничение на поверхностные микроградиенты имеет вид

$$0 < g < g_p = 2(\beta_0 - \beta); \quad \beta = 1 - \sigma/\sigma_{t1}; \quad \beta_0 = S^2/p\lambda, \quad \sigma_{t2} = p\lambda/S \quad (4.1)$$

Напомним, что g это градиентная энергия при $u = 0$. Если последнее условие реализуется на границе, то g является просто поверхностной микроструктурной энергией. Предельный случай $g = 0$ будет далее рассмотрен.

Имеем семейство решений

$$1 - \cos u = \frac{2\gamma \operatorname{sn}^2(x/l)}{1 - (\kappa^2 - \gamma) \operatorname{sn}^2(x/l)} \quad (4.2)$$

$$\gamma = gl^2/2l_0^2 \quad (4.3)$$

$$l^{-4} = (2\beta_0 g + \beta^2) l_0^{-4}, \quad l_0^{-2} = p/k \quad (4.4)$$

Решение (4.2) удовлетворяет граничному условию

$$u = 0, \quad x = 0, 2H, 4H, \dots \quad (4.5)$$

Эти точки отвечают границам ламелей. Была выбрана равной нулю константа интегрирования x_0 , аддитивная координате x . Тем самым константу g следует рассматривать как энергию межламельярных границ. Она входит явным образом в формулы (4.3), (4.4). Пространственный период микрополя, т.е. величина $2H$ связана так называемым дисперсионным соотношением с параметрами l и ν следующим образом:

$$H/l = K(\kappa) \quad (4.6)$$

Здесь $K(\kappa)$ – полный эллиптический интеграл первого рода, а κ – его модуль, изменяющийся от 0 до 1:

$$\kappa^2 = \frac{1 + 2g/\beta + \sqrt{(1 + 8g\beta_0/\beta^2)}}{2\sqrt{(1 + 8g\beta_0/\beta^2)}} \quad (4.7)$$

Поскольку по определению $K(\kappa) \geq \pi/2$, то величина периода ограничена снизу. Точнее

$$H \geq H_m = lK(\kappa_m); \quad \kappa_m = \min \kappa, \quad 2\kappa_m^2 = 1 + \sqrt{(\beta/\beta_0 - \beta^2/4\beta_0^2)} \quad (4.8)$$

Данное неравенство означает, что толщина ламели $2H$ не может быть произвольно малой. Это относится к решению (4.2) справедливому, как уже отмечалось, при ограниченных величинах g в точках (4.5) в соответствии с неравенством (4.1). Стоит отметить, что наименьшая величина периода микрополя $2H_m$ достигается при определенном значении граничного градиента

$$g_m = g_p/4\beta_0 \quad (4.9)$$

Разумеется, оно меньше максимально допустимого g_p . Точка $g = g_m$ разбивает интервал существования решения (4.2) на две области, что легко усматривается из зависимости (4.7) модуля k от g . В интервале $0 < g < g_m$ величина модуля падает от 1 до наименьшего значения k . В интервале же $g_m < g < g_p$ снова происходит рост этой величины до 1.

Рассмотрим эти области по порядку. Низкоградиентные микроструктуры ($0 < g < g_m$) интересны вблизи нулевого значения g , где $k \rightarrow 1$. При этом решение (3.2) имеет вид узкого пика шириной $2lk$, сосредоточенного около центров ламелей $|x| = H, 3H, \dots$, где $|u| = \pi$. На их широких границах $|x| = 0, 2H, \dots$ микросмещения равны нулю и эта область слабо деформированной решетки занимает почти всю ширину ламели, исключая центр. Ясно, что такая низкоградиентная микроструктура обладает малой энергией структурных изменений, которая сосредоточена в основном в области пиков – области локализованных микродеформаций. Существенно, что эти области устроены подобно π -стенкам в ферромагнетиках. В них атомы сдвинуты на половину межатомного расстояния, разумеется, в самом центре пика. Эта стенка является антифазной границей между двумя практически идеальными решетками.

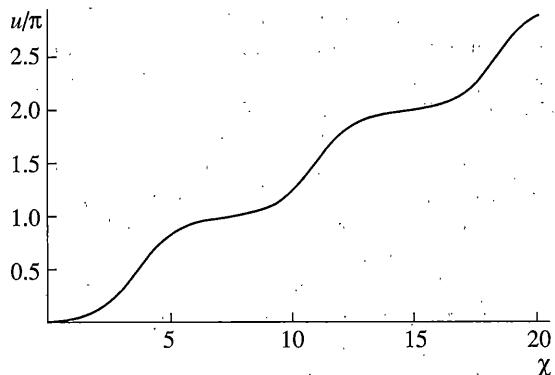
Среднеградиентные микроструктуры ($g_m < g < g_p$) интересны вблизи верхнего предела $g \leq g_p$, где так же как и в первом случае $k \rightarrow 1$. Но здесь решение (4.2) имеет вид П-образной функции поперечной координаты (первый полупериод эллиптического синуса) в интервале $0 < x < 2H$ (в пределах всей ширины ламелей), где $u = \pi$, $0 < x < H$. Соседняя ламель ($0 > x > -2H$) имеет микрополе $u = -\pi$. Они разделены весьма узким погранслоем толщиной $2l \ll 2H$ и образуют кинк. Этот погранслой в отличие от предыдущего случая представляет собой 2π -стенку, в пределах которой происходит проскальзывание атомов на один период решетки. Существенно также и то, что решетка за пределами погранслоя находится в возбужденном метастабильном состоянии – атомы сдвинуты из ям на вершины потенциальных барьеров, где возникают слабые локальные минимумы.

Здесь решение (4.2) имеет вид П-образной функции поперечной координаты – первый полупериод эллиптического синуса в интервале $0 < x < H$. В первом же интервале решение (4.2) имеет вид пика, сосредоточенного около точки $x = H$. Оба контура повторяются вдоль оси координат с периодом $2H$. Высокоградиентная ветвь $g_m < g < g_p$ описывает более-менее однородные участки микрополя, разделенные резкими границами (зерна). Низкоградиентная ветвь $0 < g < g_m$ описывает весьма плавные границы (аморфизованные участки).

Степень неоднородности микрополя характеризуется величиной l – масштабом неоднородности микрополя. Если точки (4.5) определяют координаты границ областей (ламелей), то l задает ширину погранслоя в их окрестности или ширину межзеренных границ. В соответствии с определением (4.4) аддитивной величиной является ее обратная четвёртая степень. Она складывается из двух слагаемых. Первое пропорционально произвольной константе g (плотности градиентной энергии границы при $u = 0$), а второе пропорционально квадрату бифуркационного параметра β – остаточной прочности решетки в поле напряжений. Когда достигается предел прочности ($\beta = 0$), ширина границы, очевидно, увеличивается, они аморфизуются и происходит перестройка неравновесной структуры. В отсутствие же напряжений она стабилизируется и границы становятся уже.

5. Супермелкомасштабные структуры. Оставаясь по-прежнему в области ограниченной устойчивости по напряжениям, можно получить явную и общую формулу для семейства решений уравнения (3.8) и при условии, когда граничный градиент, напротив, велик, т.е.

$$g > g_p = 2(\beta_0 - \beta) > 0 \quad (5.1)$$



Фиг. 4

На фазовом портрете (фиг. 2) это внешняя по отношению к “большой” сепаратрисе область неограниченных значений как микросмещений, так и градиентов. В этом случае имеем следующее семейство решений

$$1 - \cos u = \frac{2 \operatorname{sn}^2(x/l)}{1 + j \operatorname{cn}^2(x/l))} \quad (5.2)$$

$$2l_0^2 l^{-2} = g + \beta + \sqrt{(\beta^2 + 2g\beta_0)} \quad (5.3)$$

$$j = 2l_0^2 l^{-2}/g - 1 \quad (5.4)$$

Существенно, что микрополе, полученное обращением формулы (4.12), не представляет простой периодической функции координаты x , а представляют собой регулярно растущую или ниспадающую “лестницу” одинаковых “ступенек” (фиг. 4):

$$u(x) = \pi - 2am[K(v) - F(x, v)] \quad (5.5)$$

Здесь $K(v)$ и $F(x, v)$ – полный и неполный эллиптический интегралы второго рода, ам обозначает амплитуду Якоби. При $v = 1$ ступеньки резкие, а при $v = 0$ полностью размыты так, что функция $u(x)$ – прямая линия. Этому решению отвечает на фазовом портрете (фиг. 2) область вне “больших” сепаратрис.

Ширина каждой ступеньки $2H$, связана дисперсионным соотношением с шириной погранслоя между ступеньками l и параметром резкости ступенек v следующим образом

$$H/l = K(v) \quad (5.6)$$

$$v^2 = 2 \frac{\sqrt{(\beta^2 + 2g\beta_0)}}{g + \beta^2 + \sqrt{(\beta^2 + 2g\beta_0)}} \quad (5.7)$$

Данная наноструктура представляет собой также доменную структуру в пространстве с шириной доменов $2H$, но в отличие от предыдущей доменной структуры поле $u(x)$ непрерывно нарастает, образуя подобно доменным 2π -стенкам в ферромагнетиках межфазные границы шириной l , в пределах которых микрографиент не меняет своего знака. В предыдущем случае в центре межфазной границы градиент обращался в нуль – аналог π -стенки в ферромагнетике.

Рассматриваемая наноструктура, как и предыдущая доменная, также характеризуется двумя размерами (l и H), которые связаны с характерными масштабами (l_1 и l_2) – коэффициентами уравнения (3.8) или (3.6) через бифуркационный параметр β и материальные параметры β_0 и l_0 : $l_1^2 = l_0^2 \beta$ и $l_2^2 = l_0^2 \beta_0$. Существенно, что эти масштабы зависят (через β) от напряжения.

Наличие выраженных, достаточно резких ступенек означает возникновение достаточно регулярных систем дефектов. Подобная картина наблюдается в регулярной доменной структуре полисинтетического двойника или пластинчатой структуре мартенсита. Напротив, сглаженный характер распределения $u(x)$ (с вырождением в линейную функцию координаты) свидетельствует о распределенных по пространству искажениях ближнего порядка решетки. В физике твердого тела часто прибегают в таких случаях к искусенному понятию о непрерывном распределении дислокаций с малыми векторами Бюргерса.

В отличие от предыдущего случая снимаются ограничения на константу интегрирования g сверху, что приводит к возникновению мелкомасштабной микроструктуры. Обращаясь к формулам (5.3), (5.4), видим, что коэффициент j в формуле решения (5.2) стремится (при большом градиенте g) к нулю. К нулю стремится и модуль v , при котором эллиптический синус переходит в круговой. Тогда

$$1 - \cos u = 2 \sin^2(x/l) = 1 - \cos(x/l) \quad (5.8)$$

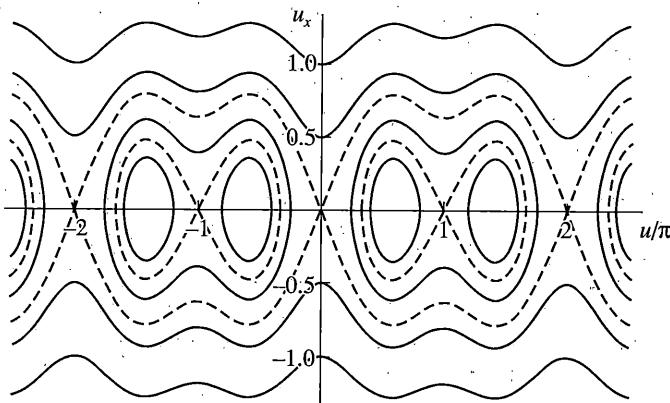
Второй знак равенства справа реализует известное тригонометрическое соотношение. Отсюда следует, что при больших градиентах микрополе является линейной функцией координаты. Как уже указывалось, “лестница” вырождается в прямую линию $u = x/l$. В силу вырождения эллиптических функций в круговые оба масштаба доменной структуры оказываются равными. Величина l фактически является и периодом (погранслой распространяется на всю ширину ламели). Действительно, поскольку, согласно (5.6), модуль эллиптического интеграла стремится к нулю и сам эллиптический интеграл в (5.5) достигает минимального значения равного $\pi/2$. Тогда для минимального значения толщины ламели получим

$$2H_m = \pi l \quad (5.9)$$

Учитывая, что при $g \rightarrow \infty$ характерный масштаб l становится минимальным, приходим к выводу, что и размер зерна (ламели) оказывается весьма малым. В результате получается мелкомасштабная слоевая (в одномерном случае) микроструктура с размытыми относительно широкими границами. Подобного рода наноструктуры возникают при интенсивном сдвиге в условиях стесненных (давлением) сдвиговых деформаций.

Напомним, что результаты данного пункта относятся к области II метастабильного состояния неискаженной решетки и устойчивого наноструктурированного состояния, когда напряжения оказываются выше первого порогового значения $\sigma_t - S$ ($\beta < \beta_0$). В этом случае зависимость плотности энергии $D(u)$ от микросмещений отличается от представленной на фиг. 3 более высоким положением минимума при $u = 0$. Это значит, что рассмотренные ранее доменные структуры могут образовываться и путем термоактивационного преодоления потенциального барьера, зависящего от напряжений и снижающегося при возрастании растягивающих напряжений.

6. Апериодические решения типа дефектов структуры между удаленными низкоэнергетическими границами. Рассмотрим здесь решения в бесконечном пространстве, подчиняющиеся граничным условиям: $u = 0$; $u_x = 0$; $|x| \rightarrow \infty$. Они означают, что на удаленных границах решетка идеальна, что отвечает нулевому значению константы ин-



Фиг. 5

тегрирования $g = 0$. Соответствующие солитоноподобные решения уравнения (3.8) относятся к “малым” сепаратрисам на фазовых портретах.

В настоящей двухмасштабной теории соответствующие решения содержат размеры дефектов и расстояние между ними. Здесь существенны также и их энергетические характеристики – потенциальные барьеры. Отметим, что коэффициент β_0 в уравнении (3.6) отвечает за взаимодействие дефектов. Поэтому конкретный вид решения зависит от области устойчивости, т.е. от интервала значений бифуркационного параметра (напряжения). В области устойчивых дефектов $I(\beta > \beta_0)$, где $\sigma < \sigma_t - s$, решение имеет вид

$$\operatorname{tg} \frac{u}{2} = \frac{2\beta \exp \chi}{\beta - (\beta - \beta_0) \exp 2\chi} \quad (6.1)$$

Здесь введена безразмерная координата

$$\chi = (x + X)/l_1; \quad l_1^{-2} = l_0^{-2}\beta \quad (6.2)$$

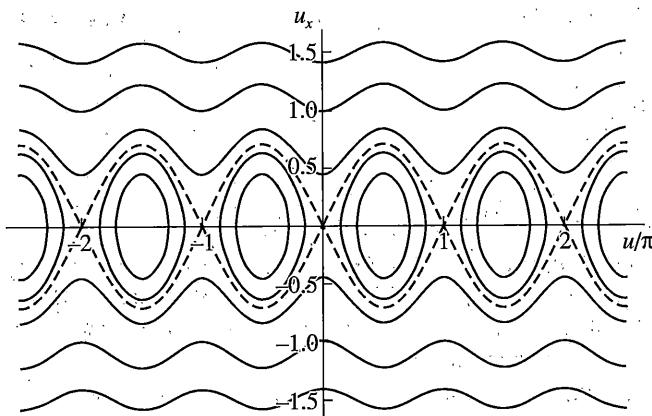
где X – координата центра дефекта. Функция $i(\chi)$ имеет вид солитона с пределами $u = 0(|x| \rightarrow \infty)$ и максимальным значением $u = u_0 (x = 0)$. Этому решению соответствует “малая” сепаратриса на фиг. 5.

В частном случае одиночной дислокации ($\beta_0 = 0$) формула (6.1) переписывается (после тригонометрических преобразований) так

$$\operatorname{tg} \frac{u}{4} = \exp \chi; \quad \chi = \frac{x}{l_1} \quad (6.3)$$

Отметим, что здесь в отличие от (6.1) в аргументе тангенса фигурирует в качестве делителя величина 4 вместо 2. В результате получается классическое выражение для полной дислокации Френкеля–Конторовой в виде кинка с пределами на бесконечности $\pi, -\pi$. На фиг. 5 ему отвечает “большая” сепаратриса, изображенная крупным штрихом. Существенное отличие от классических моделей состоит в том, что определенная в (6.1) ширина дислокации l_1 здесь зависит от напряжения, что будет далее обсуждаться.

В нашей модели предсказываются и частичные дислокации поскольку, исходное уравнение (3.8) в форме первого интеграла имеет дополнительное слагаемое с коэф-



Фиг. 6

фициентом β_0 . В зависимости от его величины решение (6.1) представляет частичные дислокации, их ассоциации и дефекты упаковки. Так при $\beta_0/\beta = 1$ решение (6.1) описывает дефект типа полудислокации и представляет собой кинк с вдвое меньшей амплитудой, равной π . На фиг. 6 ему также отвечает “большая” сепаратриса, но с расстоянием между седловыми центрами равным π . Как показано [7, с. 187], это дефект упаковки, представляющий собой незавершенный сдвиг или линию скольжения на половину межатомного расстояния, которая обрывается внутри кристалла, заканчиваясь частичной дислокацией. Интересна промежуточная ситуация, когда уравнение (4.1) описывает ассоциацию двух полудислокаций одного знака при следующем значении параметра взаимодействия: $2\beta_0 = 1.999\beta$ (см. [7]).

Другое решение обнаруживается в интервале II (между двумя точками бифуркации $0 < \beta < \beta_0$), когда растягивающие напряжения достигают больших значений, отвечающих интервалу $(\sigma_t - S < \sigma < \sigma_t)$. Здесь

$$\operatorname{tg} \frac{u}{2} = \frac{A}{\operatorname{ch} \chi}; \quad A^2 = \frac{\beta}{(\beta_0 - \beta)}; \quad \chi = \frac{(x - X)}{l_1}. \quad (6.4)$$

Данный дефект (типа антисолитона на пьедестале π) описывается при сильных взаимодействиях между частичными дислокациями разных знаков. Это, по видимому, одномерный вариант дислокационной петли (с радиусом l_1) — сидячей дислокации Франка или дефекта упаковки внедрения ([7, с. 251]. На фиг. 2 ему отвечает “малая” сепаратриса, имеющая вид восемерки. Интересно, что при весьма сильных взаимодействиях между полудислокациями ($\beta_0 = 20\beta$) размер петли l_1 не уменьшается, но его амплитуда (вектор Бюргерса) становится значительно меньше 0.5.

7. Апериодические дефекты структуры между удаленными высокозенергетическими границами. Еще одна ветвь апериодических решений типа дефектов соответствует интервалу II ($0 < \beta < \beta_0$), когда напряжения достигают больших значений, отвечающих интервалу $(\sigma_t - S < \sigma < \sigma_t)$. Они возникают при отличных от нуля значениях константы интегрирования: $g = g_p$, $g_p = 2(\beta_0 - \beta)$, отвечающих граничным условиям: $|u| = \pi$; $u_x = 0$; $|x| \rightarrow \infty$. Здесь также возникает три решения.

Первое покажем на примере, когда $2g = 1$, $2l_1^{-2} = 1$, $l_2^{-2} = 0.75$. Речь идет о “большой” сепаратрисе ($g = g_p$) на фиг. 2. Соответствующее решение относится к интервалу II

($0 < \beta < \beta_0$), когда напряжения достигают больших значений, отвечающих интервалу ($\sigma_t - S < \sigma < \sigma_r$). Оно имеет вид

$$\operatorname{tg} \frac{u}{2} = \sqrt{\frac{\beta_0 - \beta}{2\beta_0 - \beta}} \operatorname{sh} \chi \quad (7.1)$$

$$\chi = (x + X)/l; \quad l^{-2} = l_0^{-2}(2\beta_0 - \beta) \quad (7.2)$$

Это кинк, который описывает микрополе (с пределами: $-\pi; x \rightarrow \infty, +\pi, x \rightarrow -\infty$), порожденное дислокацией с центром $\chi = -X$ и вектором Бюргерса $B = 2\pi b$. Она похожа на дислокации Пайерлса и Френкеля–Конторовой и переходит в них при замене функции $\operatorname{sh} \chi$ на χ и $\exp \chi$ соответственно.

Если $\beta_0 = \beta$, то возникает второе решение, которое имеет вид

$$\operatorname{tg} u/2 = \exp \chi_0 \quad (7.3)$$

совпадающее с (6.2). Здесь

$$\chi = (x + X)/l; \quad l^{-2} = l_0^{-2}\beta_0 \quad (7.4)$$

Данное решение отвечает сепаратрисе на фиг. 6 и представляет собой частичную дислокацию – кинк с пределами 0 и π , ширина которого не зависит от напряжения.

Третье решение ($2g = -0.4$) имеет (при $\beta_0 < \beta < 2\beta_0$) вид

$$\operatorname{tg} u/2 = A \operatorname{ch} \chi \quad (7.5)$$

$$\chi = (x + X)/l; \quad l^{-2} = l_0^{-2}(2\beta_0 - \beta); \quad A^2 = \frac{\beta - \beta_0}{2(2\beta_0 - \beta)} \quad (7.6)$$

Этому решению отвечает сепаратриса типа восьмерки на фиг. 6. Микрополе (7.6) представляет собой солитон (на пьедестале π), который имеет ширину l , зависящую от напряжения. При наименьшей ширине $l = l_0$ ($\beta \geq \beta_0$) его амплитуда наибольшая ($u_0 = \pi$), а при $\beta = \beta_0$ его ширина бесконечна, а амплитуда нулевая ($u_0 = 0$). Его формально можно представить как связанное состояние двух π -кинков противоположных знаков. Подобного рода ассоциация наблюдается как дислокационная петля. Размер соответствующего вакансационного диска имеет порядок l . При $l \rightarrow \infty$ решение (7.6) переходит в константу $u = \pi$ и возникает бесконечно протяженный дефект упаковки типа антифазной границы.

Существенное отличие дислокаций (6.1), (6.4) от классической дислокации Френкеля–Конторовой и Пайерлса состоит в том, что ширина дислокаций (6.1), (6.4) l и дефекта упаковки (7.6) зависит согласно (6.1) и (7.6) от напряжения σ . Существует предельное значение напряжения σ_t ($\beta = 1$), при котором $l \rightarrow \infty$. Это значит, что дефекты (6.1) (7.6) расплываются с ростом растягивающих напряжений ($\sigma \rightarrow \sigma_t$) и суживаются с ростом напряжений сжатия. Это существенно повышает их подвижность в первом случае и снижает во втором, поскольку силовой барьер для дислокации пропорционален $\exp(-l/B)$. Поэтому становится понятной подвижность реальной дислокации при низких температурах, необъяснимая в пределах модели Пайерлса и Френкеля–Конторовой.

Итак, всеnanoструктуры, рассмотренные ранее метастабильны (или вовсе неустойчивы) в интервале I, где напряжения растяжения ниже наименьшего (первого) порога ($\sigma_t - S$). Здесь устойчива неискаженная решетка. В интервале II, где напряжения ниже верхнего (второго) порога (σ_r), но выше низшего, nanoструктуры устойчивы, а неис-

каженная решетка метастабильна. В интервале III, где напряжения весьма велики (выше второго порога), неискаженная решетка абсолютно неустойчива и спонтанно переходит в наноструктурированное состояние. Этот переход может быть реализован и путем понижение температуры аустенита, сегнетоэластика [6].

8. Об эффективных свойствах сильно деформированной решетки. Представляют интерес эффективные макроскопические свойства (упругость, податливость), учитывающие влияние структурных изменений. Вклад микросмещений в напряжения дается общей формулой (2.14) или в одномерном случае (3.5). Поскольку само поле, как это следует из формул для решений, также зависит от напряжений, то соотношение (3.5) можно рассматривать в качестве аналога нелинейного материального соотношения. Сравним два однородных состояния решетки – недеформированное $\epsilon = 0$ и деформированное $\epsilon = \pi$. Последнее возникает вдали от ядра дефекта, где решетка испытала пластическую деформацию. В первом случае (3.5) дает закон Гука идеальной решетки, а во втором случае имеем

$$\sigma = \lambda\epsilon - 2S \quad (8.1)$$

Здесь $2S$ представляет собой величину собственных напряжений, порожденных микросмещениями (изменением ближнего порядка и, в частности, дефектом). Величина же $2S/\lambda$ представляет собой остаточную деформацию.

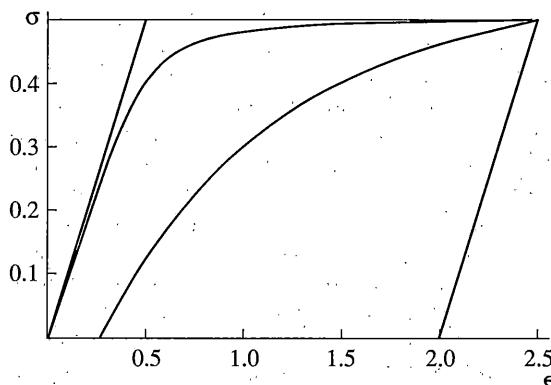
Однако поскольку деформированная решетка оказывается в окрестности дефекта существенно неоднородной, то свойства, которые выражаются таким соотношением, тоже будут функцией пространственных координат. Кроме того, нужно иметь ввиду, что такого рода материальные соотношения оказываются неуниверсальными – они зависят от вида частного решения уравнения микрополя. Тем не менее можно продемонстрировать особенности структурных изменений в окрестности дефекта на разном удалении от него, представив (3.5) в виде зависимости напряжений от деформаций. Так, используя формулу решения (7.1) для микрополя полной дислокации (отличающейся от классической дислокации Френкеля–Конторовой наличием зависимости размера ядра от напряжения) в (3.5), воспользуемся сначала известным соотношением между $1 - \cos \epsilon$ и $\operatorname{tg} \epsilon$ и перепишем (3.5) в виде

$$\sigma = \lambda\epsilon - 2S \frac{A^2}{A^2 + \operatorname{sh}^2 \chi} \quad (8.2)$$

Здесь напряжения входят в A^2 и χ :

$$A^2 = \frac{\beta}{\beta - \beta_0}; \quad \chi = x\sqrt{\beta}/l_0; \quad \beta = 1 - \sigma/\sigma_i \quad (8.3)$$

Учитывая эти выражения в (8.2), получим зависимости безразмерных напряжений от безразмерных деформаций, представленные на фиг. 7. Прямая, исходящая из начала координат демонстрирует зависимость напряжений от деформаций далеко от центра дислокации, где решетка практически идеальна. Центр дислокации находится в точке $x = 0$. Следующая кривая (правее) соответствует конечному расстоянию от центра. Вторая кривая отвечает более близкому расстоянию до центра ядра. И наконец, крайняя правая прямая, исходящая из точки $\epsilon = 2$ показывает зависимость напряжений от деформаций в центре ядра, где пластические деформации наибольшие и равны $\epsilon = 2$. Нелинейный характер двух кривых очевиден. Все зависимости ограничены верхним пределом (горизонтальная линия), отвечающим наибольшему порогу по напряжениям $\sigma_i = 0.5$. Дальнейший их ход не показан, поскольку исходная формула (5.1) ограничена аналогичным образом.



Фиг. 7

Можно определить и понятие эффективного модуля упругости Λ (в случае гуковского тела просто модуль упругости λ):

$$\Lambda = \partial\sigma/\partial\epsilon, \quad \epsilon = U_x \quad (8.4)$$

Дифференцируя соотношение (3.5) по напряжению и производя элементарные преобразования, получим для обратного коэффициента упрочнения выражение

$$\Lambda^{-1} = \lambda^{-1} + (S/\lambda)\partial(1 - \cos u)/\partial\sigma \quad (8.5)$$

Используя полученные в предыдущих пунктах решения, можно найти явные выражения, которые содержат зависимость от напряжений и от пространственной координаты, несущую определенную информацию о нелинейных и неоднородных свойствах сильно деформированного кристалла.

Отметим также еще одно обстоятельство. Можно проинтегрировать по пространственной координате то же самое соотношение (3.5), используя явные зависимости микрополя от координаты. В результате может быть выявлена зависимость от нее и макроскопического поля $U(x)$, т.е. полностью завершена задача о деформировании решетки с учетом кардинальных изменений ее атомарной структуры.

Заключение. Предпринята попытка построения универсальной модели неупругого деформирования материалов, в которойnanoструктурные элементы (дефекты, границы, неоднородности) не вносятся заранее, а возникают в результате сильно нелинейных бифуркационных процессов перестройки идеальной структуры сложной решетки. Возможность реализации этого замысла может показаться нереальной, если принять во внимание трудности учета сильно нелинейных эффектов, желание не утратить преимуществ диффеоморфизма, лежащего в основе традиционных методов механики материалов, необходимость введения масштабных факторов, дискретности структуры; установления связи микро- и макроописания. Однако универсальная модель классического континуума уже не удовлетворяет современной проблематике нового материаловедения, что и побуждает некоторых авторов к ее пересмотру.

Важной особенностью адекватной теории структурных перестроек должна быть существенная нелинейность процессов, которые могут достигать точек бифуркации структуры и приводить к кардинальным изменениям существующих свойств и появлению новых. К ним нужно отнести возможность описания самого процесса зарождения дефектов и других повреждений структуры.

Построение теории оказалось возможно путем обобщения известной модели сложной решетки, элементарная ячейка которой содержит более одного атома. Существу-

ющие теории однако линейны или в крайнем случае учитывают ангармонизмы невысокой степени.

В настоящей теории сильно нелинейные уравнения строятся с учетом принципа внутренней трансляционной симметрии сложной решетки – взаимная трансляция подрешеток на один период (или более) не меняет структуры всей решетки. Это дает возможность сразу ввести периодическую силу взаимодействия соседних атомов в элементарной ячейке, которая отвечает за перестройку локальной топологии решетки. Некогерентность деформированных подрешеток является принципиальным, узловым механизмом, который в отличие от классической модели гладкого многообразия не сохраняет локальной топологии среды в процессе деформирования. В результате удается проследить ряд интересных механизмов структурных превращений на уровне точных решений нелинейных уравнений. Впервые удается выявить такие нетривиальные эффекты как переключение межатомных связей за счет понижения потенциальных барьеров под влиянием внешних напряжений. В результате предсказывается образование дефектов решетки в изначально идеальной структуре, ее фрагментация с разрывными границами, потеря устойчивости однородных деформаций за порогом интенсивного воздействия на тело, возникновение полос скольжения и двойниковых включений, неупругие бездиффузионные деформации, нарушение дальнего и ближнего порядка, реконструкция поверхности. Интересно, что в условиях сложнопрояженного состояния наряду с разупрочнением возможны и обратные эффекты – упрочнение решетки. Получены критерии переходов в форме разветвляющихся зависимостей амплитуды микроскопического поля от напряжений и размеров доменов вновь образующейся микроструктуры. Эти последние результаты выходят за рамки одномерного приближения, но они были получены ранее [4].

Ближайшей перспективой данного подхода является проблема динамики и кинетики процессов перестройки структуры. Поскольку динамические уравнения написаны также в достаточно общей форме, остается приступить к обстоятельному их исследованию. Некоторые их решения представлены в работе [4].

И, наконец, отметим еще одно принципиальное обстоятельство. Использован новый принцип внутренней трансляционной симметрии, который позволил построить нелинейную теорию на основе трансляционно инвариантного функционала. Естественно было бы учесть и относительную точечную симметрию сложной решетки (поворот одной подрешетки относительно другой), введя инвариантность энергий к относительным поворотам подрешеток (наряду конечно с общей симметрией сложной решетки как единого объекта). Это дает возможность предсказывать наряду с дислокациями также и дисклинации, т.е. ввести еще один масштабный уровень описания столь сложных явлений, которые развиваются в наноструктурированных материалах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Иностр. лит., 1958. 488 с.
2. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки. Харьков, Вища шк., 1988. 204 с.
3. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. М.: Наука, 1975. 415 с.
4. Аэро Э.Л. Сильно нелинейная теория упругих и неупругих деформаций кристаллических тел // Мат. моделирование систем и процессов. Изд. Пермского технич. гос. ун-та: 2006. № 14. С. 27–55.
5. Aero E.L. Micromechanics of a double continuum in a model of a medium with variable periodic structure // J. Eng. Math. 2005. V. 1. P. 1–15.
6. Бойко В.С., Гарбер Р.И., Косевич А.М. Обратимая пластичность кристаллов. М.: Наука, 1991. 279 с.
7. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.