

НЕЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ ПЕРЕСТРОЙКИ СТРУКТУРЫ СВЕРХТОНКИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСЛОЁВ ПРИ ИНТЕНСИВНЫХ НАГРУЗКАХ

Э.Л. Аэро^{*}, А.Н. Булыгин, Ю.В. Павлов

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,

Большой пр. 61, В.О., Санкт-Петербург, 199178, Россия

*e-mail: 16aero@mail.ru

Аннотация. Рассматриваются кристаллы со сложной решеткой, состоящей из двух подрешеток. Рассмотрены произвольно большие смещения подрешеток \mathbf{u} . В основу построения нелинейной теории положен дополнительный элемент трансляционной симметрии, характерный для сложных решеток, но ранее не введенный 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. Вариационные уравнения макроскопических и микроскопических смещений оказываются нелинейным обобщением линейных уравнений акустических и оптических мод, полученных Карманом, Борном, Хуан Кунем. Микроскопические поля смещений описываются нелинейным уравнением синус-Гордона. Для двумерных полей макро и микросмещений развиты новые методы точных решений уравнения синус-Гордона с переменным коэффициентом перед синусом. Они описывают взаимодействие нелинейных деформаций со структурными неоднородностями твердого тела, вызванными внешними полями напряжений и деформаций. Решаются плоские и двумерные задачи для сверхтонких слоёв кристаллов, в которых развиваются эффекты наномасштабных взаимодействий. Наряду с континуальными проявляются и дискретные силы, обуславливающие пристенную и граничную перестройку молекулярной структуры. Рассмотрены также численные решения о распространении ударных поверхностных волн типа кинков и солитонов, а также поверхностных возмущений, возникающих при сухом трении.

1. Общие уравнения двумерной теории

Введем смещения \mathbf{U} центра инерции пары атомов (элементарной ячейки) или акустические смещения и относительные смещения \mathbf{u} внутри ячейки (за счет изменения взаимного расстояния атомов) следующим образом [1, 2]

$$\mathbf{U} = (m_1 \mathbf{U}_1 + m_2 \mathbf{U}_2) / (m_1 + m_2), \quad \mathbf{u} = (\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) / b. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{U}_1 и \mathbf{U}_2 - смещения атомов (с массами m_1 m_2) первой и второй подрешеток соответственно, b - период подрешеток.

Исходим из лагранжиана как периодической функции микросмещений:

В уравнении (4) величина P представляет собой эффективный потенциальный барьер перестройки решетки, зависящий от деформационного градиента $U_{i,k}$. Его можно исключить, выразив с помощью соотношения (7) через тензор напряжений σ_{ik} .

Уравнение (3) представляет собой уравнение упругого континуума, а уравнение (4) учитывает дискретную структуру решетки. Второе слагаемое справа в (4) описывает взаимодействие соседних атомов в элементарной ячейке и учитывает ближний порядок в решетке. Величина l_i - орт вектора микросмещения соседних атомов u_i .

Уравнение (4) имеет форму обобщенного векторного уравнения синус-Гордона с переменным коэффициентом P перед синусом, поскольку коэффициент включает слагаемое – макроскопический градиент смещения (макродеформацию). Последняя вообще говоря зависит от координат и времени. Именно это обстоятельство является весьма интересной проблемой в физике кристаллических тел. Дело в том, что коэффициент P представляет собой эффективный межатомный потенциальный барьер – энергию активации связей. Он является, как уже отмечалось, весьма чувствительным инструментом управления микроструктурой и свойствами решетки с помощью макроскопических полей деформаций и напряжений. В случае одномерных полей напряжений коэффициент P можно считать постоянным, что позволяет находить целый ряд точных решений уравнения синус-Гордона и анализировать влияние микроструктурных перестроек на распространение нелинейных волн [3-7]. Обобщенное векторное уравнение синус-Гордона в форме (4) вообще говоря слишком сложно для анализа. Удастся однако выявить ряд его точных решений в том случае, когда оно сводится к более простому виду. Это достигается в задачах, связанных с деформациями тонких пластин, узких зазоров, интерфейсных областей. В настоящее время, в связи с интенсивным развитием нанотехнологий, эти проблемы приобретают особую актуальность и имеют достаточно широкую область применения.

2. Двухкомпонентные двумерные микрополя в кристаллах кубической симметрии

Рассмотрим плоскую задачу, положив

$$U_x = U_x(x, y, t), \quad U_y = U_y(x, y, t), \quad U_z = 0, \quad (8)$$

$$u_x = u_x(x, y, t), \quad u_y = u_y(x, y, t), \quad u_z = 0. \quad (9)$$

Распишем систему (3), (4) для кристалла кубической симметрии. Она имеет вид

$$\mu \ddot{u}_x = -Pl_x \sin(u_x^2 + u_y^2)^{1/2} + K_1 u_{x,xx} + K_{23} u_{y,xy} + K_3 u_{x,yy}, \quad (10)$$

$$\mu \ddot{u}_y = -Pl_y \sin(u_x^2 + u_y^2)^{1/2} + K_1 u_{y,yy} + K_{23} u_{x,yx} + K_4 u_{y,xx}, \quad (11)$$

$$\rho \ddot{U}_x = \sigma_{xx,x} + \sigma_{xy,y}, \quad \rho \ddot{U}_y = \sigma_{yy,y} + \sigma_{yx,x}. \quad (12)$$

Здесь компоненты тензора напряжений выражаются через смещения согласно соотношению (7) следующим образом

$$\sigma_{xx} = \lambda_1 U_{x,x} + \lambda_2 U_{y,y} - S_{xx} (1 - \cos(u_x^2 + u_y^2)^{1/2}), \quad (13)$$

Вместо него полезно ввести объединенное уравнение, исключив из (20) первое слагаемое $U_{y,y,y}$ с помощью (19). Получим

$$(\lambda_2 + \lambda_3)\lambda_3 U_{y,xx} + [(\lambda_2 + \lambda_3)^2 - \lambda_1^2] U_{x,xy} = (\lambda_2 + \lambda_3) S_{xy} (1 - \cos u_R)_{,x} - \lambda_1 \sigma_0(y)_{,y}. \quad (21)$$

Интегрируя это выражение по x , имеем

$$(\lambda_2 + \lambda_3)\lambda_3 U_{y,x} + [(\lambda_2 + \lambda_3)^2 - \lambda_1^2] U_{x,y} = (\lambda_2 + \lambda_3) S_{xy} (1 - \cos u_R) - \lambda_1 x \sigma_0(y)_{,y} + \sigma_1(y). \quad (22)$$

Здесь $\sigma_1(y)$ - новая константа интегрирования. На границе тела $x = X_s$ по крайней мере одна величина, например, $U_{x,x}$, $U_{y,y}$, $U_{y,x}$ или $U_{x,y}$, должна быть известна. Достаточно задание и любой из их комбинаций:

$$(aU_{x,x} + bU_{y,y} + cU_{y,x} + dU_{x,y}) \Big|_{x=X_s} = \Phi(y). \quad (23)$$

Используя полученные результаты, обсудим, какой вид принимает уравнение синус-Гордона (10), (11), к анализу которого мы вплотную подошли. Для этого необходимо уточнить вид эффективного потенциала P согласно определения в формуле (5). В ней содержатся, казалось бы, все компоненты $(U_{x,x}, U_{y,y}, U_{x,y}, U_{y,x})$, которые фигурируют в найденных выше формулах. Однако их комбинации связаны в специфические комплексы через материальные константы $S_{x,x}, S_{y,y}, S_{x,y}$, которые не являются произвольными. Необходимо задать две величины. В формуле

$$P = p - S_{xx} U_{x,x} - S_{yy} U_{y,y} - (S_{xy} + S_{yx})(U_{x,y} + U_{y,x}) \quad (24)$$

фигурирует комбинация $S_{xx} U_{x,x} + S_{yy} U_{y,y}$ и две величины $U_{y,x}$ и $U_{x,y}$, из которых вторая величина мала и ею можно пренебречь. Но это не снимает неопределенности, т.к. одна из оставшихся трех оказывается неопределенной, требующей задания извне.

4. Решение уравнений для полей микросмещений

Микросмещения $u_x(x, y)$, $u_y(x, y)$ находятся из уравнений (10), (11). Они образуют систему двух связанных нелинейных уравнений. Связь осуществляется нелинейными тригонометрическими слагаемыми и линейными перекрестными производными $u_{y,xy}$, $u_{x,yx}$. Для случая тонкого слоя система (10), (11) существенно упрощается, поскольку

$$u_x \approx 0, \quad u_R \approx u_y, \quad l_x \approx 0, \quad l_y \approx 1. \quad (25)$$

По этой причине, и учитывая малость компоненты u_x и производной $u_{x,y}$, уравнение (10) примет вид

$$(K_1 u_{x,x} + K_{23} u_{y,y})_{,x} \approx 0. \quad (26)$$

Уравнение (26) один раз проинтегрируется по x и позволяет найти u_x , если известна

$$K_1 u_x = x \varepsilon_o(y) - K_{23} \int u_{y,y} dx . \quad (30)$$

Используя эти соотношения для зависимости макросмещений от микросмещений и напряжений, можно найти и искажение размеров и формы пластины, вычислив макросмещения U_i . Далее с помощью соотношений (13) - (15) находятся и напряжения $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}$. Структурный вклад в них дается формулой

$$1 - \cos u = \frac{8A^2 \operatorname{tn}^2(xK(v_1)/H) \operatorname{dn}^2(yK(v_2)/B)}{A^2 + \operatorname{tn}^2(xK(v_1)/H) \operatorname{dn}^2(yK(v_2)/B)} . \quad (31)$$

Другой пример частного решения уравнения (27) дается выражением

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{dn} \frac{xK(v_1)}{H} \operatorname{dn} \frac{yK(v_2)}{B}, \quad A^2 = \frac{1}{(1-v_1^2)(1-v_2^2)} . \quad (32)$$

Некоторые особенности суперструктуры связаны с ограниченностью функции Якоби $\operatorname{dn}(\ast)$, когда правая часть решения не обращается в бесконечность, хотя и может быть велика при $v_1 \rightarrow 1, v_2 \rightarrow 1$. Это значит, что $u_y < 2\pi$, т.е. атомы не перескакивают в соседние ячейки, как это происходит при возникновении сингулярностей.

6. Решения ударных динамических задач численными методами

Численными методами решалась система уравнений (10) – (15) для различных динамических воздействий на образец. Результаты расчетов приведены на Рис. 1, 2.

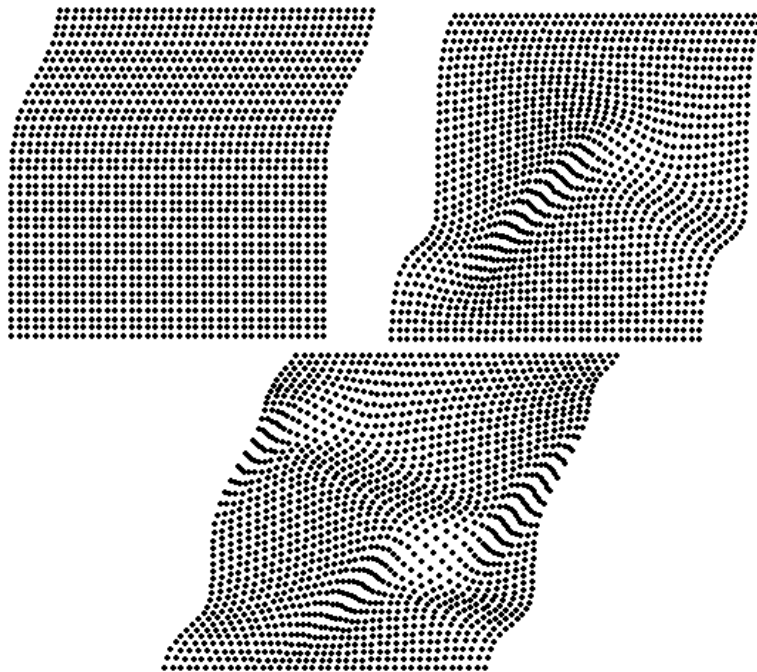


Рис. 1. На рисунке показано распространение ударного воздействия вдоль верхней границы сосредоточенной силой, приложенной в левом верхнем углу. На последнем рисунке видно отражение возмущения от нижней заторможенной границы.

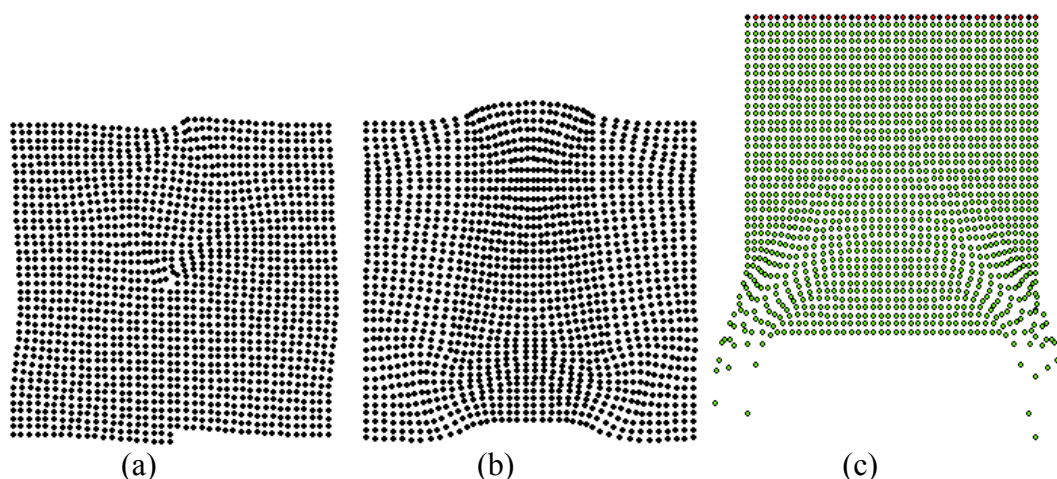


Рис. 2. а) Возникновение дислокации из-за асимметричного воздействия (левая половина закреплена, правая подвержена распределенному удару).
 б) Проникновение ударной волны через образец. Удар осуществляется штампом по середине нижнего основания.
 в) Удар штампом с шириной образца по нижнему основанию. Динамический отклик.

7. Заключение

В наш век нанотехнологий возникли новые проблемы теоретического исследования сверхтонких поверхностных явлений [10]. Это ставит перед физикой и механикой материалов новые задачи. Теория их свойств, поведение в различных условиях, выявление границ и перспектив применения нанопокровов требует пристального внимания. Трудности описания новых явлений во многом связаны с развитием новых моделей механики материалов. В настоящей работе предпринята попытка выявления возможностей нового подхода к наномасштабным явлениям в сверхтонких слоях и покрытиях, выявлению возможностей и особенностей их поведения в критических условиях эксплуатации. Мы попытались выделить класс задач, которые удастся решить современными методами аналитической теории, методами численного моделирования и математического эксперимента. Это стало возможным благодаря последним успехам в области физики и механики наномасштабных явлений.

Здесь не следует упускать из виду не только материаловедческие задачи. Такие области как нанотрибология, микромеханика МЭМов. Развитие этих областей также заслуживает своего внимания.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 10-01-00243-а.

Литература

- [1] М. Борн, Кунь Хуан, *Динамическая теория кристаллических решеток* (И. Л., М., 1958).
- [2] А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки. Физическая механика кристаллов* (Вища школа, Харьков, 1988).
- [3] Э.Л. Аэро // *Успехи механики* **1**, № 3 (2002) 130.
- [4] E.L. Aero // *J. Eng. Math.* **55** (2006) 81.
- [5] Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин // *Изв. РАН. Механика Твердого Тела* № **5** (2007) 170.
- [6] Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин // *Вычисл. мех. сплош. сред* **1** (2008) 14.

- [7] A.V. Porubov, E.L. Aero, G.A. Maugin // *Phys. Rev. E* **79** (2009) 046608.
 [8] Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин, Ю.В. Павлов // *Физика и механика материалов* **11** (2011) 137.
 [9] Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин, Ю.В. Павлов // *Дифференциальные уравнения* **47** (2011) 1428.
 [10] B.N.J. Persson, F. Mugele // *J. Phys.: Condensed Matter* **16** (2004) R295.

THE NONLINEAR THEORY OF REORGANIZATION OF STRUCTURE OF SUPERTHIN CRYSTAL LAYERS AT INTENSIVE LOADINGS

E.L. Aero^{*}, A.N. Bulygin, Yu.V. Pavlov

Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,
Bolshoj 61, Vasilievskii Ostrov, St. Petersburg 199178, Russia

*e-mail: 16aero@mail.ru

Abstract. Crystals with the complex lattice consisting from two sublattices are considered. Big shifts of the sublattices are investigated. The additional element of translation symmetry is put in a basis of creation of the nonlinear theory. It is characteristic for complex lattices, but earlier not entered in solid states physics. Flat and two-dimensional problems are solved for superthin crystal layers in which effects of nanoscale interactions take place. The discrete forces are considered. They are cause of boundary reorganization of molecular structure together with the continuous forces. Also numerical solutions on distribution of shock surface waves such as kinks and solitons, and also the surface perturbations are considered.

References

- [1] M. Born, K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices* (Clarendon Press, Oxford, 1954).
 [2] A.M. Kosevich, *Theory of Crystall lattices. Physical Mechanics of Crystals* (Vysha Shkola, Khar'kov, 1988).
 [3] E.L. Aero // *Uspekhi mechaniki* **1**, #3 (2002) 130.
 [4] E.L. Aero // *J. Eng. Math.* **55** (2006) 81.
 [5] E.L. Aero, A.N. Bulygin // *Izvestiya RAN. Mekhanika Tverdogo Tela*, **5** (2007) 170.
 [6] E.L. Aero, A.N. Bulygin // *Vychislitel'naya Mekhanika Sploshnikh Sred* **1** (2008) 14.
 [7] A.V. Porubov, E.L. Aero, G.A. Maugin // *Phys. Rev. E* **79** (2009) 046608.
 [8] E.L. Aero, A.N. Bulygin, Yu.V. Pavlov // *Mater. Phys. Mech.* **11** (2011) 137.
 [9] E.L. Aero, A.N. Bulygin, Yu.V. Pavlov // *Differential Equations* **47** (2011) 1442.
 [10] B.N.J. Persson, F. Mugele // *J. Phys.: Condensed Matter* **16** (2004) R295.