

УДК 539.3

НЕЛИНЕЙНЫЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ВНУТРЕННЕЙ ПЕРЕСТРОЙКИ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

© 2011 г.

А.В. Порубов, Б.Р. Андриевский

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург

alexey.porubov@gmail.com

Поступила в редакцию 24.08.2011

Аналитически и численно исследованы процессы локализации нелинейных волновых решений связанных уравнений, описывающих динамические процессы в сложной кристаллической решетке, в частности образование дефектов структуры. Показано, как нелинейное взаимодействие полей макродеформаций и относительных смещений атомов в решетке приводит к изменению характера локализации последних, включая смену знака и направления распространения локализованной волны относительного смещения, описывающего различные внутренние структурные изменения в решетке.

Ключевые слова: нелинейная волна, внутренняя структура, локализация, макродеформация.

Не так давно была развита существенно-нелинейная континуальная теория микродеформаций в кристаллах на основе модели взаимно проникающих подрешеток [1]. Она позволяет предсказывать глубокие структурные перестройки решетки, образование дефектов структуры и других повреждений. В основу теории была положена модель сложной решетки, состоящей из двух подрешеток, введены векторы смещения центра масс пары атомов \mathbf{U} и относительного смещения атомов подрешеток \mathbf{u} . Ограничиваясь одномерным пределом теории, из [1] получаем следующую систему нелинейных связанных уравнений для функций $U(x, t)$ и $u(x, t)$:

$$\begin{aligned} \rho U_{tt} - EU_{xx} &= S(\cos u - 1)_x, \\ \mu u_{tt} - \kappa u_{xx} &= (SU_x - p)\sin u. \end{aligned}$$

Выражения для коэффициентов даны в [1, 2]. Прежде всего анализ решений уравнений производится на основе точных решений в виде бегущей волны. С этой целью вводится фазовая переменная $\theta = x - Vt$, которая позволяет вывести не связанное обыкновенное дифференциальное уравнение для $v = U_\theta$ [2]:

$$v_\theta^2 = a_0 + a_1 v + a_2 v^2 + a_3 v^3 + a_4 v^4.$$

Его точные решения в виде локализованной волны суть

$$v_1 = \frac{A}{Q \cosh(k\theta) + 1}, \quad v_2 = -\frac{A}{Q \cosh(k\theta) - 1}.$$

Решение для относительного смещения атомов $u(\theta)$ получается при помощи формулы связи [2]:

$$\cos(u) = 1 - \frac{(E - \rho V^2)v - \sigma}{S},$$

где σ есть константа интегрирования. Последняя формула позволяет, в частности, описать движущиеся локализованные дефекты, используя точные решения для $v(\theta)$.

Однако эти решения являются частными, требующими специальных начальных условий. С практической точки зрения важно знать, как поведет себя начальное возмущение достаточно произвольной формы. Поэтому было предпринято численное исследование эволюции различных начальных локализованных возмущений решений u и U (или $v = U_\theta$).

Показано, что изменение формы начального импульса для v , а также его начальной скорости существенным образом влияет на возникновение и распространение локализованной волны u . Процесс образования бегущей локализованной волны u постоянной формы сопровождается колебательным изменением ее амплитуды, однако в итоге возникает волна, распространяющаяся вместе с волной v , согласно точному решению в виде бегущей волны. Важным обстоятельством является начальное относительное положение исходных импульсов u и v , поскольку точное решение предполагает их совпадение.

Установлено, что при распространении начальных импульсов в одном направлении величина относительного начального смещения может приводить к смене знака амплитуды образующейся локализованной волны u . При встречном движении волн u и v помимо смены знака имеет

место захват волны u , в результате которого она меняет направление движения на противоположное и распространяется строго вместе с волной v . Начальная скорость также влияет на процесс локализации, причем существенное изменение поведения волн происходит при изменении начальной скорости v .

Найденные решения позволяют предсказывать локализованные процессы внутренней пере-

стройки в кристаллической решетке.

Работа поддержана РФФИ, гранты №09-01-00469а и 10-01-00243-а.

Список литературы

1. Аэро Э.Л., Булыгин А.Н. // Физика твердого тела. 2007. №5. С. 190–207.
2. Porubov A.V., Aero E.L., Maugin G.A. // Phys. Rev. E. 2009. V. 79. P. 046608.

NONLINEAR DYNAMIC PROCESSES OF INTERNAL REARRANGEMENTS IN A CRYSTALLINE LATTICE

A.V. Porubov, B.R. Andrievsky

The processes of localization of nonlinear wave solutions of coupled nonlinear equations are studied analytically and numerically. These equations account for dynamic processes in complex crystalline lattices, in particular, nucleation of defects in the structure. It is shown that the interaction of the fields of macro-strains and relative inter-atomic displacements leads to variations in the relative displacements including the change of the sign of the amplitude and the direction of propagation of the localized wave of relative displacement describing various structural variations in the lattice.

Keywords: nonlinear wave, internal structure, localization, defect, macrostrain.