ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА 2019, том 83, № 2, с. 303–313

УДК 539.3

НЕЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СРЕД, ДОПУСКАЮЩИХ МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ: ПЛОСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ

© 2019 г. Э. Л. Аэро[1], А. Н. Булыгин*, Ю. В. Павлов

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия
** e-mail: bulygin_an@mail.ru*

Поступила в редакцию 12.05.2017 г.
После доработки 13.10.2017 г.
Принята к публикации 27.12.2017 г.

Разрабатываются математические методы решения уравнений статики плоской нелинейной деформации кристаллических сред со сложной решеткой, допускающих мартенситные превращения. Уравнения статики, составляющие систему четырех связанных нелинейных уравнений, сводятся к системе отдельных уравнений. Вектор макросмещений ищется в форме Папковича–Нейбера. Вектор микросмещений находится из уравнения синус-Гордона с переменным коэффициентом (амплитудой) перед синусом и уравнения Пуассона. Для случая постоянной амплитуды найден класс двояко-периодических решений, которые выражаются через эллиптические функции Якоби. Показано, что нелинейная теория приводит к набору решений, описывающих фрагментацию кристаллической среды, появление дефектов структуры разного типа, фазовые превращения и другие особенности деформирования, которые реализуются под действием интенсивных силовых нагрузок и не описываются классической механикой сплошной среды.

Ключевые слова: кристаллические среды, уравнение синус-Гордона, интенсивные силовые нагрузки

DOI: 10.1134/S0032823519020024

Для решения современных проблем получения и изучения новых материалов необходимы аналитические модели, которые могли бы позволять прогнозирование эксплуатационных и прочностных свойств получаемых материалов. Классическая континуальная модель уже не применима к решению новых проблем в области наномасштабов. Была предложена [1, 2] нелинейная модель деформирования кристаллических сред со сложной решеткой, позволяющая описать специфические процессы деформирования, реализуемые в современных технологиях получения новых материалов. Было показано [3], что нелинейная модель может быть использована для описания мартенситных превращений. В последние годы успешно разрабатывается механика многоуровневого деформирования и фазовых переходов, в том числе и мартенситных превращений [4, 5].

---

[1] Аэро Эрон Люттович (14.05.1934–11.07.2016) – д-р физ. мат. наук, профессор, основатель и первый руководитель лаборатории микромеханики материалов Ин-та проблем машиноведения РАН – один из создателей современной моментной механики сплошных сред. Первым написал уравнения движения твердых сред с вращательным взаимодействием частиц, удовлетворяющих принципу инвариантности к жесткому вращению. Идеи, развитые в этих работах, были затем им и другими сотрудниками распространены на вязкие жидкости и жидкие кристаллы. В последние годы он разработал нелинейную теорию кристаллических сред со сложной решеткой, описывающую особенности деформирования кристаллических сред, которые реализуются в современных технологиях получения новых материалов с наноструктурой.

1. Нелинейная модель деформирования кристаллических сред со сложной решеткой. Ограничимся рассмотрением двух подрешеток, которые совмещаются сдвигом на постоянный структурный вектор $\mathbf{u}$. Введем смещение $\mathbf{U}$ центра инерции пары атомов элементарной решетки и относительного их смещения $\mathbf{u}$ внутри ячейки следующим образом [6]:

$$\mathbf{U} = \frac{m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 \tag{1.1}$$

Здесь $\mathbf{v}_1$ и $\mathbf{v}_2$ – смещения атомов с массами m_1 и m_2 первой и второй подрешеток. Вектор $\mathbf{u}$ учитывает изменение ближнего порядка в решетке, изменение внутренней геометрии среды и ее структуры. Его можно принять за параметр порядка.

Уравнения движения, определяющие векторы $\mathbf{U}(t,x,y,z)$ (акустическая мода) и $\mathbf{u}(t,x,y,z)$ (оптическая мода), получим из вариационного принципа

$$J = \int_0^t\int_0^\tau L(u_i, \dot{u}_i, u_{i,k}, \dot{U}_i, U_{i,k})dtd\tau \tag{1.2}$$

Функция Лагранжа L представляет собой разность между плотностью кинетической энергии Q и плотностью энергии деформирования D:

$$L = Q - D \tag{1.3}$$

$$Q = \frac{\rho}{2}\dot{U}_i\dot{U}_i + \frac{\mu}{2}\dot{u}_i\dot{u}_i; \quad D = \frac{1}{2}\lambda_{ilmn}e_{il}e_{mn} + \frac{1}{2}k_{ilmn}\varepsilon_{il}\varepsilon_{mn} + \frac{1}{2}C_{ilmn}e_{il}\varepsilon_{mn} + R\Phi(u_s) \tag{1.4}$$

Запятая в нижнем индексе означает частную производную по координате, индекс которой указан после запятой, а точка сверху означает частную производную по времени. Далее ρ – средняя плотность массы атомов, μ – приведенная плотность пары атомов:

$$\rho = \frac{m_1 + m_2}{2V}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)V} \tag{1.5}$$

V – объем элементарной ячейки. Первые два слагаемых во втором выражении (1.4) учитывают вклад в плотность энергии упругих макро- и микродеформаций; третье слагаемое – плотность энергии взаимодействия акустической и оптической мод, оно отвечает за принципиально важное взаимодействие поля деформаций с микроскопическим полем, с которым связана перестройка атомной конфигурации внутри элементарной ячейки кристаллической решетки. Тензоры λ_{ilmn} и k_{ilmn} – коэффициенты упругости и микроупругости, C_{ilmn} – микроскопические модули взаимодействия акустической и оптической мод, e_{il} и ε_{il} – тензоры деформации и микродеформации

$$e_{il} = \frac{1}{2}(U_{i,l} + U_{l,i}), \quad \varepsilon_{il} = \frac{1}{2}(u_{i,l} + u_{l,i}) \tag{1.6}$$

Последнее слагаемое во втором выражении (1.4) отвечает энергии жесткого сдвига подрешеток и позволяет реализовать переходы через точки структурной неустойчивости решетки с образованием, в частности, новых фаз типа мартенситных. Аргумент функции Φ равен скалярному произведению вектора $\mathbf{B}$ обратной решетки [7] на вектор $\mathbf{u}$:

$$u_s = \mathbf{B}\cdot\mathbf{u} \tag{1.7}$$

Для кристаллов кубической, ромбической и тетрагональной систем векторы $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ и $\mathbf{a}_3$ элементарной решетки взаимно ортогональны. Для этих систем взаимно ортогональными будут и векторы обратной решетки. Для кристаллов кубической системы размеры ячейки $b_1 = b_2 = b_3 = b$, а

$$\mathbf{B} = \frac{2\pi}{b}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \tag{1.8}$$

Определение (1.8) называют физическим, в отличие от кристаллографического определения

$$\mathbf{B} = \frac{1}{b}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}), \tag{1.9}$$

которое принимается в настоящей работе, и следовательно, для кристаллов кубической системы

$$u_s = \frac{1}{b}(u_x + u_y + u_z) \tag{1.10}$$

По физическому смыслу функция $\Phi(u_s)$ должна быть четной и периодической. В общем случае (при выполнении условий Дирихле) ее можно разложить в ряд Фурье

$$\Phi(u_s) = (1 - \cos u_s) + \delta(1 - \cos 2u_s) + \ldots \tag{1.11}$$

Здесь учтено, что энергия взаимодействия подрешеток равна нулю, когда $u_s = 0$. В пионерской работе [8] и большинстве современных работ ([9, 10] и др.) принимается, что

$$\Phi(u_s) = 1 - \cos u_s \tag{1.12}$$

Множитель перед функцией $\Phi(u_s)$

$$R = p - s_{il}e_{il} \tag{1.13}$$

представляет собой эффективный межатомный барьер — энергию активации связей. Здесь p — половина энергии активации жесткого сдвига решеток, а s_{il} — тензор нелинейной механострикции. Выбор коэффициента R — весьма чувствительный инструмент управления микроструктурой и структурой решетки с помощью макроскопических полей деформаций и напряжений.

Отметим, что все материальные тензоры в выражении для плотности энергии деформирования D, имеют четный ранг. Это значит, что рассматриваются кристаллические среды, обладающие центром симметрии, для которых тензор нечетного ранга обращается в нуль. Градиентные слагаемые в выражении для плотности энергии D обеспечивают ее инвариантность при микротрансляциях, а выбор функции $\Phi(u_s)$ обеспечивает инвариантность D к взаимным трансляциям подрешеток в некотором заданном и фиксированном направлении. Смещение подрешеток на период (или целое число периодов) означает переход подрешеток в новое, но кристаллографически эквивалентное структурное состояние. При таком переходе происходит переключение связей и изменение ближайших соседей каждого атома, т.е. изменение локальной топологии.

Уравнения движения, определяющие векторы $\mathbf{U}(t, x, y, z)$ и $\mathbf{u}(t, x, y, z)$, находим из вариационного принципа. Их компоненты имеют вид

$$\rho \ddot{U}_i = \sigma_{il,l}; \quad \sigma_{il} = \lambda_{ilmn}e_{mn} + C_{ilmn}\varepsilon_{mn} - s_{il}\Phi(u_s) \tag{1.14}$$

$$\mu \ddot{u}_i = \chi_{il,l} - R\frac{\partial \Phi(u_s)}{\partial u_i}; \quad \chi_{il} = k_{ilmn}\varepsilon_{mn} + C_{ilmn}e_{mn} \tag{1.15}$$

Выражение для тензора напряжений σ_{il} отличается от классического двумя последними слагаемыми. Первые два слагаемых — упругая составляющая сдвигового напряжения, последнее — неупругая составляющая. Если в плоскости с нормалью n построить вектор силы, соответствующий тензору σ_{ik}, то этот вектор с компонентами $F_i = s_{ik}n_k\Phi(u_s)$ будет принципиально отличаться от первых двух: он квадратично зависит от компонент вектора микросмещений $\mathbf{u}$, а его направление не зависит от направления $\mathbf{u}$. Вектор силы с компонентами $F_i = s_{ik}n_k\Phi(u_s)$ можно принять за силу трения. Эти компоненты малы при малых микросмещениях и достигают предельно высокого значения $2s_{il}$, когда $u_s = (2n+1)\pi$ (предполагается, что функция $\Phi(u_s)$ дается формулой (1.12)), т.е. при сдвиге атомов из потенциальных ям на вершины межатомных потенциальных барьеров. Очевидно, что значения компонент материального тензора s_{il} — пределы неупругих напряжений, описывающие потери устойчивости решетки. Далее возможны пластические деформации, фазовые переходы типа аустенитно-мартенситных и другие бифуркационные процессы. Они определяются полем микросмещений $\mathbf{u}$, которое является решением уравнений (1.15).

Тензоры λ_{ilmn}, k_{ilmn}, C_{ilmn} симметричны к перестановке пар индексов и индексов пары между собой. Далее, ради определенности, ограничимся рассмотрением кристаллических сред кубической симметрии (КСКС). Для них эти материальные тензоры имеют независимыми лишь три компоненты. Пусть это будут

$$\lambda_{1111}, \lambda_{1122}, \lambda_{1212}, \quad k_{1111}, k_{1122}, k_{1212}, \quad C_{1111}, C_{1122}, C_{1212}$$

В дальнейшем от тензорных обозначений перейдем к более простым матричным обозначениям

$$\lambda_{11}, \lambda_{12}, \lambda_{44}, \quad k_{11}, k_{12}, k_{44}, \quad C_{11}, C_{12}, C_{44},$$

предложенным Фойгтом [11]. Учтем, также, что для сред кубической симметрии $s_{il} = s\delta_{il}$. Материальные соотношения для КСКС примут вид

$$\sigma_{il} = \begin{cases} (\lambda_{11} - \lambda_{12})e_{il} + (C_{11} - C_{12})\varepsilon_{il} + (\lambda_{12}e + C_{12}\varepsilon - s\Phi(u_s))\delta_{il}, & i = l \\ 2\lambda_{44}e_{il} + 2C_{44}\varepsilon_{il}, & i \neq l \end{cases}$$

$$\chi_{il} = \begin{cases} (k_{11} - k_{12})\varepsilon_{il} + (C_{11} - C_{12})e_{il} + (k_{12}\varepsilon + C_{12}e)\delta_{il}, & i = l \\ 2k_{44}\varepsilon_{il} + 2C_{44}e_{il}, & i \neq l \end{cases} \tag{1.16}$$

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}, \quad \varepsilon = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$$

Анизотропию КСКС характеризуют величины

$$a_1 = \frac{2\lambda_{44}}{\lambda_{11} - \lambda_{12}}, \quad a_2 = \frac{2k_{44}}{k_{11} - k_{12}}, \quad a_3 = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \tag{1.17}$$

(факторы анизотропии [12]). Если среда изотропная, то

$$a_1 = a_2 = a_3 = 1 \tag{1.18}$$

2. Плоская деформация. Уравнения статики и их общее решение. Деформированное состояние будем называть статически плоским, параллельным оси x_3, если

$$\begin{gathered} U_x = U_x(x, y), \quad U_y = U_y(x, y), \quad U_z = 0 \\ u_x = u_x(x, y), \quad u_y = u_y(x, y), \quad u_z = 0 \end{gathered} \tag{2.1}$$

Тогда уравнения статики в напряжениях, описывающие плоскую деформацию в рамках нелинейной модели, примут вид

$$\sigma_{xx,x} + \sigma_{xy,y} = 0, \quad \sigma_{yx,x} + \sigma_{yy,y} = 0 \tag{2.2}$$

$$\chi_{xx,x} + \chi_{xy,y} - \frac{b}{2}(p - s\,\mathrm{div}\,\mathbf{U})\sin u_s = 0, \quad \chi_{yx,x} + \chi_{yy,y} - \frac{b}{2}(p - s\,\mathrm{div}\,\mathbf{U})\sin u_s = 0 \tag{2.3}$$

Для КСКС

$$\begin{gathered}\sigma_{xx} = \lambda_{11}e_{xx} + \lambda_{12}e_{yy} + C_{11}\varepsilon_{xx} + C_{12}\varepsilon_{yy} - s\Phi(u_s), \quad \sigma_{xy} = 2\lambda_{44}e_{xy} + 2C_{44}\varepsilon_{xy} \quad (x \leftrightarrow y)\\ \sigma_{zz} = \lambda_{12}(e_{xx} + e_{yy}) + C_{12}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) - s\Phi(u_s), \quad \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0\end{gathered} \tag{2.4}$$

В уравнениях (2.3) и соотношениях (2.4) учтено, что для сред кубической системы $s_{ik} = s\delta_{ik}$. Для этих сред

$$\begin{gathered}\chi_{xx} = k_{11}\varepsilon_{xx} + k_{12}\varepsilon_{yy} + C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy}, \quad \chi_{xy} = 2k_{44}\varepsilon_{xy} + 2C_{44}e_{xy}, \quad (x \leftrightarrow y)\\ \chi_{zz} = k_{12}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + C_{12}(e_{xx} + e_{yy}), \quad \chi_{xz} = \chi_{yz} = 0\end{gathered} \tag{2.5}$$

Уравнения статики в перемещениях получаются при подстановке выражений (2.4) и (2.5) соответственно в уравнения (2.2) и (2.3):

$$\lambda_{44}\Delta\mathbf{U} + (\lambda_{12} + \lambda_{44})\,\mathrm{grad\,div}\,\mathbf{U} + C_{44}\Delta\mathbf{u} + (C_{12} + C_{44})\,\mathrm{grad\,div}\,\mathbf{u} - s\,\mathrm{grad}\,\Phi(u_s) = 0 \tag{2.6}$$

$$\begin{gathered}k_{44}\Delta\mathbf{u} + (k_{12} + k_{44})\,\mathrm{grad\,div}\,\mathbf{u} + C_{44}\Delta\mathbf{U} + (C_{12} + C_{44})\,\mathrm{grad\,div}\,\mathbf{U} -\\ - \mathbf{B}(p - s\,\mathrm{div}\,\mathbf{U})\sin u_s = 0\end{gathered} \tag{2.7}$$

Здесь

$$\mathbf{U} = U_x\mathbf{i} + U_y\mathbf{j}, \quad \mathbf{u} = u_x\mathbf{i} + u_y\mathbf{j}, \quad \mathbf{B} = b^{-1}(\mathbf{i} + \mathbf{j}), \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

и, кроме того, принято, что среда слабо анизотропная, т.е. $a_1 \approx 1$, $a_2 \approx 1$, $a_3 \approx 1$. Решения уравнений плоской деформации анизотропной среды были рассмотрены ранее [13].

Уравнения статики (2.6) и (2.7) – это система четырех связанных нелинейных уравнений. Вектор макросмещений $\mathbf{U}$ будем искать в виде Папковича–Нейбера

$$\mathbf{U} = a\mathbf{A} + \mathrm{grad}\chi \tag{2.8}$$

Здесь a, χ и $\mathbf{A}$ – произвольная постоянная, скалярная функция $\chi(x, y)$ и векторная функция $\mathbf{A}(x, y)$. Если выражение (2.8) подставить в уравнение (2.6), то можно убедиться, что оно будет решено, если векторы $\mathbf{A}$ и $\mathbf{u}$ удовлетворяют уравнению

$$a\lambda_{44}\Delta\mathbf{A} + C_{44}\Delta\mathbf{u} = 0, \tag{2.9}$$

а скалярная функция χ – решение уравнения Пуассона

$$\Delta\chi = \frac{1}{\lambda_{12} + 2\lambda_{44}}\left[s\Phi(u_s) - a(\lambda_{12} + \lambda_{44})\,\mathrm{div}\,\mathbf{A} - (C_{12} + C_{44})\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}\right] \tag{2.10}$$

Если выражение (2.8) подставить в уравнение (2.7), то его можно привести к следующему:

$$\begin{gathered}k_{44}\Delta\mathbf{u} + aC_{44}\Delta\mathbf{A} + C\,\mathrm{grad}\,\Phi(u_s) - \mathbf{B}(p - s\,\mathrm{div}\,\mathbf{U})\sin u_s +\\ + \mathrm{grad}\{a[C_{12} + C_{44} - C(\lambda_{12} + \lambda_{44})]\,\mathrm{div}\,\mathbf{A} + [k_{12} + k_{44} - C(C_{12} + C_{44})]\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}\} = 0\\ C = \frac{C_{12} + 2C_{44}}{\lambda_{12} + 2\lambda_{44}}\end{gathered} \tag{2.11}$$

Из уравнения (2.11) видно, что уравнение (2.7) будет решено, если принять, что

$$\begin{gathered}\mathrm{div}\,\mathbf{A} = \mathrm{div}\,\mathbf{u}, \quad a = \frac{k_{12} + k_{44} - C(C_{12} + C_{44})}{(\lambda_{12} + \lambda_{44})C - (C_{12} + C_{44})}\\ k_{44}\Delta\mathbf{u} + aC_{44}\Delta\mathbf{A} + sC\,\mathrm{grad}\,\Phi(u_s) - \mathbf{B}(p - s\,\mathrm{div}\,\mathbf{U})\sin u_s = 0\end{gathered} \tag{2.12}$$

Из последнего уравнения (2.12) с помощью уравнения (2.9) можно исключить $\Delta\mathbf{A}$ и получить отдельные уравнения для нахождения вектора микросмещений $\mathbf{u}$

$$K\Delta u_x + sC\frac{b^2}{2}\sin u_s\frac{\partial u_s}{\partial x} - \frac{b}{2}(p - s\,\mathrm{div}\,\mathbf{U})\sin u_s = 0 \quad (x \leftrightarrow y); \quad K = \frac{b^2}{2}\left(k_{44} - \frac{C_{44}^2}{\lambda_{44}}\right) \tag{2.13}$$

которые преобразуются к более простому виду. Если их сложить, то после элементарных алгебраических преобразований получаем уравнение для нахождения u_s

$$K\Delta u_s = P\sin u_s$$
$$P = p - \frac{s}{\lambda_{12} + 2\lambda_{44}}[\mathrm{div}\,\mathbf{u}_+ + s\Phi(u_s)], \quad \mathbf{u}_+ = (a\lambda_{44} - C_{12} - C_{44})\mathbf{u} + \frac{b^2}{2}(C_{12} + 2C_{44})\mathbf{B}u_s \tag{2.14}$$

Для определения вектора микросмещений $\mathbf{u}$ к уравнению (2.14) нужно добавить уравнения для нахождения компоненты u_x или u_y. Они имеют вид

$$\Delta\left(u_x - \frac{b}{2}u_s\right) = f, \quad \Delta\left(u_y - \frac{b}{2}u_s\right) = -f; \quad f = \lambda\left(\frac{\partial u_s}{\partial y} - \frac{\partial u_s}{\partial x}\right)\sin u_s, \quad \lambda = \frac{sCb^2}{4K} \tag{2.15}$$

Таким образом, реализация нелинейной модели сведена к решению уравнения (2.14). Если функция u_s найдена, то компонента u_x или u_y, как видно из соотношений (2.15), определяется из решения уравнения Пуассона с известной функцией f. К решению уравнения Пуассона приводят и задачи нахождения скалярной функции χ:

$$\Delta\chi = \frac{1}{\lambda_{12} + 2\lambda_{44}}\{s\Phi(u_s) - [(C_{12} + C_{44}) + a(\lambda_{12} + \lambda_{44})]\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}\} \tag{2.16}$$

и вектора $\mathbf{A}$ из уравнения (2.8).

3. Решения уравнений оптической моды и соответствующие им структуры микродеформаций. В литературе отсутствуют аналитические методы решения уравнения СГ с переменной амплитудой. Были построены [14] функционально-инвариантные решения (2 + 1)- и (3 + 1)-мерных уравнений СГ для частного вида амплитуд. Уравнение (2.14) можно привести к хорошо изученным случаям постоянной амплитуды [15–18], если наложить некоторые ограничения на модель или на поле микродеформаций. Так, если не учитывать зависимость потенциала взаимодействия подрешеток от деформации среды, т.е. принять $s = 0$, то уравнение (2.14) становится уравнением СГ с постоянными коэффициентами K и p:

$$l^2\Delta u_s = \sin u_s, \quad l = \sqrt{\frac{K}{p}} \tag{3.1}$$

Оно же получится, если допустить, что

$$\mathrm{div}\,\mathbf{u}_+ + s\Phi(u_s) = 0 \tag{3.2}$$

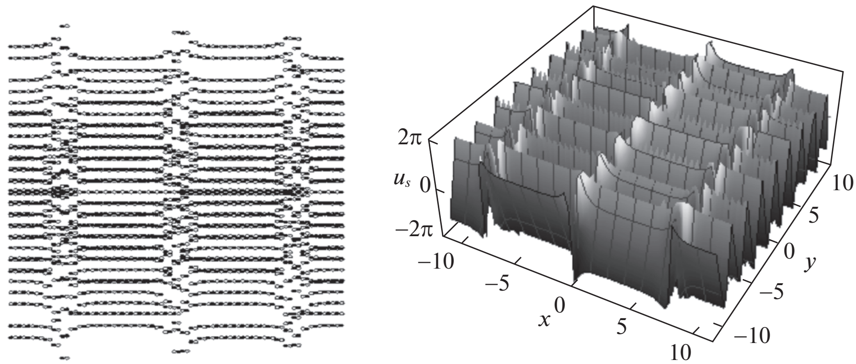
В случае, когда поле микросмещений удовлетворяет уравнению

$$\mathrm{div}\,\mathbf{u}_+ = 0, \tag{3.3}$$

уравнение (2.14) станет двойным уравнением СГ с постоянными P_1 и P_2 коэффициентами:

$$l^2\Delta u_s = P_1\sin u_s + P_2\sin 2u_s; \quad P_1 = 1 - 2P_2, \quad P_2 = \frac{s^2}{2p(\lambda_{12} + 2\lambda_{44})} \tag{3.4}$$

Как было показано выше, функция $u_s(x, y)$ позволяет рассчитать макроскопические (U_x, U_y) и микроскопические (u_x, u_y) смещения. Для этого нужно поставить и решить соответствующую краевую задачу. Решению краевых задач должно предшествовать



Фиг. 1

построение общего решения уравнений нелинейной модели, что является основным содержанием настоящей работы. Авторы ограничились нахождением частного вида функции $u_s(x, y)$. Функция $u_s(x, y)$ имеет простой механический смысл – это микросмещение вдоль вектора обратной решетки. Она описывает перестройку кристаллической решетки в поле внешних напряжений. На простых решениях уравнений (3.1) и (3.2) рассмотрим примеры образующихся структур.

В литературе широко известен метод решения уравнения СГ (3.1), основанный на подстановке

$$u = 4\,\mathrm{arctg}(G(x, y)), \quad G(x, y) = \Phi_1(x)\Phi_2(y) \tag{3.5}$$

$$\left(\frac{d\Phi_1}{dx}\right)^2 = \frac{a + b\Phi_1^2 + c\Phi_1^4}{K}, \quad \left(\frac{d\Phi_2}{dy}\right)^2 = \frac{c + d\Phi_2^2 + a\Phi_2^4}{K} \tag{3.6}$$

Здесь a, b, c, d – произвольные постоянные, причем $b + d = p$. Решение (3.5) основано на предположении, что $K > 0$. Если $K < 0$, то решением уравнения (3.1) будет

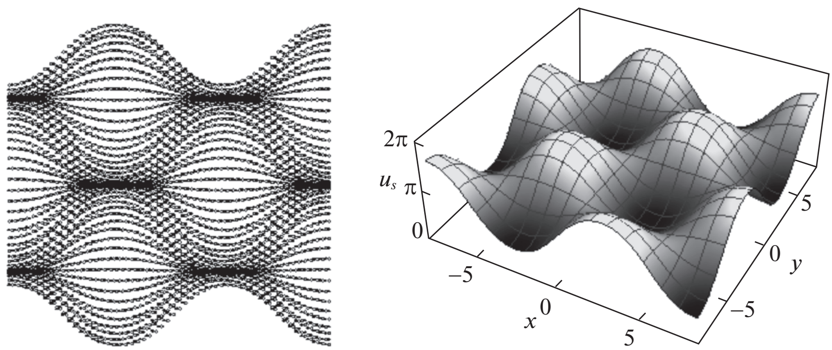
$$u = \pi + 4\,\mathrm{arctg}(G(x, y)) \tag{3.7}$$

Подстановку (3.5) связывают с Лэмом (G.L. Lamb Jr.) [19], хотя первым ее использовал Steuerwald [20].

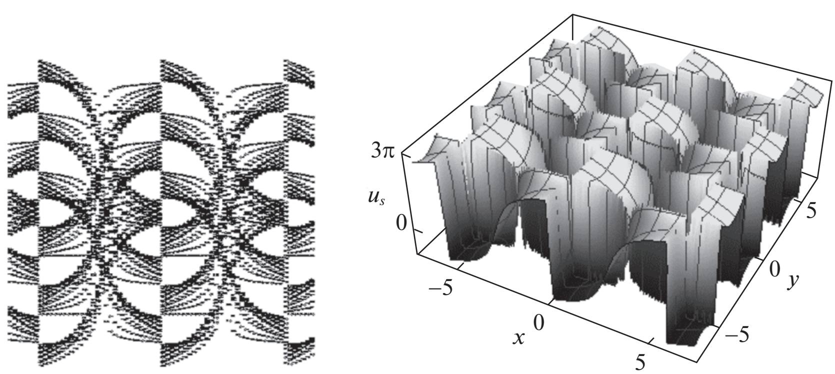
Функции $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(y)$ находятся из соотношений (3.6) обращением соответствующих эллиптических интегралов методом Лежандра. Способ Лежандра достаточно сложный. Был предложен [21] метод нахождения функций $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(y)$, основанный на дифференциальных уравнениях, которым удовлетворяют эллиптические функции Якоби (модифицированный метод Лэма). Предложенный подход позволяет получить широкий класс двоякопериодических решений СГ уравнения. Ниже приведены примеры решений из этого класса и представлены их графические изображения. На левых фрагментах фигур микросмещение $u_s(x, y)$ лежит в плоскости OXY в направлении вертикальной оси, а на правых фрагментах микросмещение перпендикулярно плоскости $OX'Y'$, для которой вектор $\mathbf{B}$ – нормаль.

На фиг. 1–4 показаны микросмещения, которые описываются соответствующим решением, согласно данным, указанным в таблице 1 и содержащим полный эллиптический интеграл первого рода $\mathrm{K}(\nu)$ и эллиптические функции Якоби.

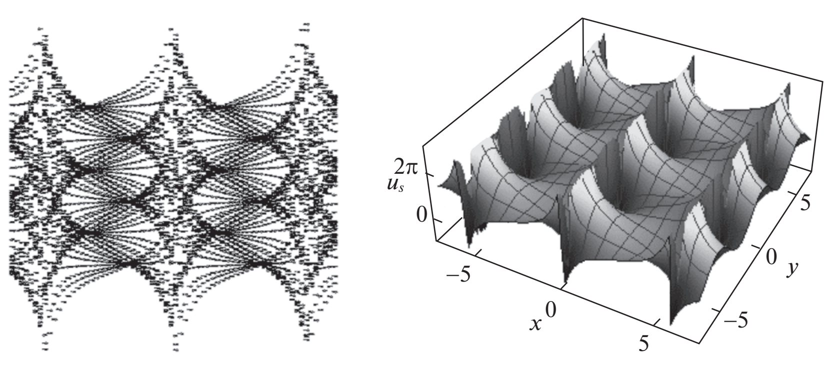
На фиг. 1 видно, что в среде возникают дефекты типа микропор. В случаях, представленных на фиг. 2–4, возникает сверхрешетка. На фиг. 2 среда внутри фрагмента



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

деформирована неоднородно, верхние и нижние плоскости фрагментов сильно сжаты. На фиг. 3 и 4 фрагменты деформированы резко неоднородно, нарушается сплошность среды, причем на фиг. 3 видны возникающие дефекты типа микропор сложной формы, а на фиг. 4 внутри фрагментов микропоры не образуются.

Таблица 1.

Фиг.	$\dfrac{A^2H^2}{\mathrm{K}^2(\nu_1)}$	$\dfrac{A^2B^2}{\mathrm{K}^2(\nu_2)}$	A^2	ν_1	ν_2
1	$u_s = 4\,\mathrm{arctg}\left[A\dfrac{\mathrm{tn}(y/B,\nu_2)}{\mathrm{sn}(x/H,\nu_1)}\right]$				
	$(A^2-1)(A^2\nu_1^2-1)$	$(A^2-1)(A^2\nu_1^2-1)$	$\sqrt{1-\nu_2^2}\nu^{-1}$	0.999	0.9
2	$u_s = \pi + 4\,\mathrm{arctg}[A\,\mathrm{sn}(x/H,\nu_1)\,\mathrm{sn}(y/B,\nu_2)]$				
	$(1+A^2)(A^2+\nu_1^2)$	$(1+A^2)(A^2+\nu_2^2)$	$\nu_1\nu_2$	0.5	0.5
3	$u_s = \pi + 4\,\mathrm{arctg}\left[\dfrac{A}{\mathrm{tn}(x/H,\nu_1)\,\mathrm{sn}(y/B,\nu_2)}\right]$				
	$(1-A^2)(1-A^2(1-\nu_1^2))$	$(1-A^2)(A^2\nu_2^2-1)$	$\dfrac{1}{\nu_2\sqrt{1-\nu_1^2}}$	0.4	0.2
4	$u_s = \pi + 4\,\mathrm{arctg}\left[\dfrac{A\,\mathrm{cn}(y/B,\nu_2)}{\mathrm{tn}(x/H,\nu_1)\,\mathrm{dn}(y/B,\nu_2)}\right]$				
	$(1-A^2)(1-A^2(1-\nu_1^2))$	$A^2(1-A^2)(1-A^2(1-\nu_1^2))$	$\dfrac{\nu_2}{\sqrt{1-\nu_1^2}}$	0.4	0.2

Модифицированный метод позволяет из решений, которые выражаются через эллиптические функции Якоби, построить решения, которые выражаются через круговые или гиперболические функции. Это можно сделать, если воспользоваться известными предельными соотношениями

$$\begin{aligned}
&\nu \to 0:\ \ \mathrm{sn}(u,\nu) \to \sin u, \quad \mathrm{cn}(u,\nu) \to \cos u, \quad \mathrm{dn}(u,\nu) \to 1 \\
&\nu \to 1:\ \ \mathrm{sn}(u,\nu) \to \mathrm{th}\,u, \quad \mathrm{cn}(u,\nu) \to \frac{1}{\mathrm{ch}\,u}, \quad \mathrm{dn}(u,\nu) \to \frac{1}{\mathrm{ch}\,u}
\end{aligned} \tag{3.8}$$

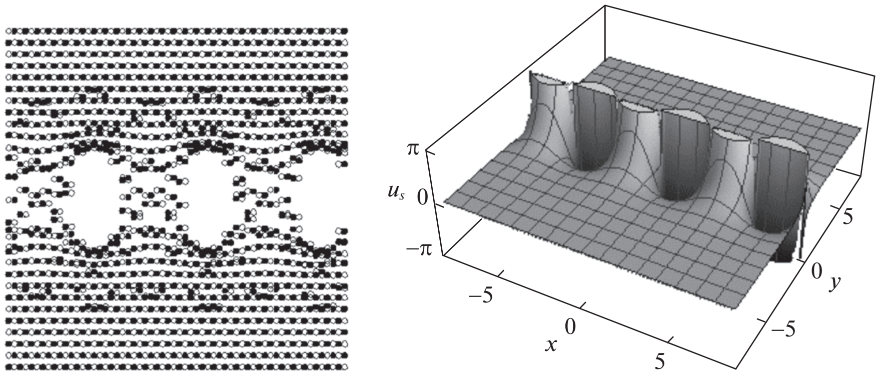
Находим (ψ – произвольная постоянная).

$$G = \begin{cases} \mathrm{ch}\psi\,\dfrac{\sin(x/\mathrm{sh}\psi)}{\mathrm{sh}(y/\mathrm{th}\psi)} \\ \mathrm{sh}\psi\,\dfrac{\mathrm{ch}(x/\mathrm{ch}\psi)}{\mathrm{ch}(y/\mathrm{cth}\psi)} \\ \cos\psi\,\dfrac{\mathrm{sh}(y/\sin\psi)}{\cos(x/\mathrm{tg}\,\psi)} \end{cases} \tag{3.9}$$

На фиг. 5 изображено микросмещение, которое описывает первое решение (3.9), при $\psi = \pi/4$. Видно, что в плоскости $y = 0$ возникают регулярно расположенные поры. Объем кристалла практически недеформирован.

Приведенные примеры показывают, что построенная нелинейная теория кристаллических сред описывает структуры, которые реализуются в современных технологиях получения материалов с наноструктурой под действием интенсивных внешних воздействий.

4. Заключение. Найдены точные аналитические решения уравнений нелинейной модели деформирования кристаллических сред со сложной решеткой для случая



Фиг. 5

плоской деформации. Решение системы четырех связанных нелинейных уравнений, из которых определяются макроскопические U_x, U_y и микроскопические u_x, u_y смещения, сведено к решению уравнения СГ с переменным коэффициентом (амплитудой) перед синусом. Из него находится функция u_s — микросмещение вдоль вектора обратной решетки. Макро- и микросмещения находятся из решений соответствующих уравнений Пуассона, правые части которых однозначно определяются функцией u_s. Полученные общие решения позволяют на основе уравнений нелинейной модели проводить конкретные инженерные расчеты современных технологий получения новых материалов и режимов их эксплуатации.

Авторы благодарят А.Л. Корженевского за обсуждения.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (16-01-00068-а, 17-01-00230-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Аэро Э.Л.* Микромасштабные деформации в двумерной решетке – структурные переходы и бифуркации при критическом сдвиге // Физ. тверд. тела. 2000. Т. 42. Вып. 6. С. 1113–1119.
2. *Аэро Э.Л.* Существенно нелинейная микромеханика среды с изменяемой периодической структурой // Успехи механ. 2002. Т. 1. № 1. С.130–176.
3. *Корженевский А.Л., Аэро Э.Л., Булыгин А.Н.* Микроскопическая теория образования мартенситных фаз // Изв. РАН. Сер. физич. 2005. Т. 69. № 9. С. 1271–1281.
4. *Исупова И.Л., Трусов П.В.* Математическое моделирование бездиффузионных фазовых превращений в сталях // Вестник Пермск. ун-та. Сер. Физика. 2012. Вып. 4(22). С. 73–78.
5. *Няшина Н.Д., Трусов П.В.* Моделирование мартенситных превращений в сталях: кинематика мезоуровня // Вестник ПНИПУ. Механика. 2014. № 4. С. 118–151.
6. *Born M., Huang K.* Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon, 1954 = *Борн М., Хуан Кунь*. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1958.
7. *Шаскольская М.П.* Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984.
8. *Конторова Т.А., Френкель Я.И.* К теории пластической деформации и двойникования. I // ЖЭТФ. 1938. Т. 8. Вып. 1. С. 89–95.
9. *Braun O.M., Kivshar Y.S.* The Frenkel–Kontorova Model. Concepts, Methods, and Applications. N. Y.: Springer, 2004.
10. *Porubov A.V., Aero E.L., Maugin G.A.* Two approaches to study essentially nonlinear and dispersive properties of the internal structure of materials // Phys. Rev. E. 2009. V. 79. No. 4. 046608.

11. *Voigt W.* Lehrbuch der Kristalphysik. Leipzig: Teubner, 1910.
12. *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics. N. Y.: Wiley, 1956 = *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: ГИФМЛ, 1963.
13. *Лехницкий С.Г.* Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука, 1977.
14. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н., Павлов Ю.В.* Решения уравнения синус-Гордон с переменной амплитудой // Теор. мат. физ. 2015. Т. 184. № 1. С. 79–91.
15. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н., Павлов Ю.В.* Решения трехмерного уравнения синус-Гордона // Теор. мат. физ. 2009. Т. 158. № 3. С. 370–377.
16. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н., Павлов Ю.В.* Новый подход к решению классического синус-Гордона уравнения и его обобщений // Диффер. уравн. 2011. Т. 47. № 10. С. 1428–1438.
17. *Aero E.L., Bulygin A.N., Pavlov Yu.V.* Functionally invariant solutions of nonlinear Klein-Fock-Gordon equation // Appl. Math. Comput. 2013. V. 223. No. 1. P. 160–166.
18. *Aero E.L., Bulygin A.N., Pavlov Yu.V.* Nonlinear model of deformation of crystal media with complex lattice: Mathematical methods of model implementation // Math. Mech. Solids. 2016. V. 21. № 1. P. 19–36.
19. *Lamb G.L., Jr.* Analytical Descriptions of Ultrashort Optical Pulse Propagation in a Resonant Medium // Rev. Modern Phys. 1971. V. 43. No. 2. P. 99–124.
20. *Steuerwald R.* Uber Enneper'sche Flachen und Backlund'sche Transformationen // Abhandl. Bayerischen Akad. Wissensch. Neue Folge. 1936. Bd. 40. No. 1. S. 1–105.
21. *Aero E.L., Bulygin A.N., Pavlov Yu.V.* Mathematical methods for solution of nonlinear model of deformation of crystal media with complex lattice // Proc. Int. Conf. "Days on Diffraction 2015". St. Petersburg: LGU, 2015. P. 8–13.