

УДК 539.3

© 2000 г. Э.Л. Аэро

**НЕЛИНЕЙНАЯ
ТЕОРИЯ УПРУГОГО МИКРОСДВИГА
В ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ.
НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ОДНОРОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ**

Предлагается теория кристаллической решетки с существенно нелинейным взаимодействием между атомами при произвольных взаимных смещениях в условиях упругого сдвига слоя. Энергия двумерных деформаций содержит периодический и градиентные члены. Уравнение равновесия в форме синус-Гельмгольца (с двумя характерными длинами когерентности) решается точно. Показано, что однородная (вдоль слоя) деформация сдвига неустойчива и стабилизируется за счет модуляций. В результате возникает суперструктура с большими периодами, т.е. происходит изменение дальнего трансляционного порядка. Получены соотношения, связывающие размеры ячейки и амплитуду поля смещений, которые дают условия существования суперструктуры. Обнаружен бифуркационный переход от чисто упругой деформации решетки к упругопластической.

Некоторые результаты теории изложены в кратком сообщении [1]. В настоящей работе дано не только их обоснование, но и выявлен физический смысл структурных переходов и точек бифуркации. Основной акцент теории перенесен на проблему устойчивости упругого сдвига.

В континуальной механике нет принципиальной разницы между пространственно однородными и неоднородными деформациями. Между тем, если учесть трансляционную симметрию, связанную с периодическим строением тела, то априори ясно, что различие существенно. Первые в отличие от вторых не нарушают дальнего трансляционного порядка. В континуальной теории учитывается точечная, но не трансляционная симметрия, поэтому не поддаются описанию некоторые эффекты, в том числе изменение структуры тела.

Между тем при больших деформациях структура реального тела меняется существенно. Не говоря уже о возникновении и активизации дефектов в самом широком смысле этого слова, в нем становятся возможными явления потери устойчивости однородных деформаций. Так, в телах, обладающих слоистой периодической структурой (композитах, смектических жидких кристаллах), наблюдаются при одноосном растяжении поперек слоев ундуляции, или волнообразные искажения плоских слоев. Структура выдерживает однородные деформации (увеличение межслоевых расстояний) лишь до определенного предела. Далее становятся более выгодными деформации изгиба, т.е. неоднородные деформации.

Представляется вероятным аналогичный эффект при большом однородном сдвиге, который может с некоторого момента сопровождаться передачей энергии сдвига другим степеням свободы, порождающим неоднородные деформации. Возможно, что это происходит при больших деформациях, снижающих межатомные потенциальные барьеры и ослабляющих внутреннее кристаллическое поле, поддерживающее трансляционный порядок в системе. В результате его нарушения становятся более предпочтительными не столь энергоемкие неоднородные деформации.

Для предсказания подобного рода структурной неустойчивости нужна конечно теория, учитывающая дальний трансляционный порядок в системе и возможность его изменения. Наиболее простая модель должна учитывать конкуренцию межатомного потенциала (ответственного за поддержание периодического порядка) и градиентных членов, обуславливающих его нарушение. Имея в виду сглаженное по пространству описание, нет смысла исходить из парных

межатомных потенциалов – это описание излишне детально. Достаточно ввести потенциал взаимодействия атомных цепочек друг с другом как периодическую функцию взаимных смещений и атомов соседних цепочек. Этим можно было бы ограничиться, если бы цепочки были нерастяжимыми. Однако при этом была бы потеряна способность системы к неоднородным деформациям растяжения. Поэтому в потенциале должны присутствовать градиентные члены, ответственные за конечную растяжимость цепочек и за их неоднородный сдвиг в поперечном направлении.

1. Основные уравнения. Будем исходить из наиболее простой формы суммарного потенциала E применительно к модели полиатомного слоя толщиной H , подвергнутого сдвига вдоль оси OY . Структура слоя представляется двумерной квадратной решеткой с периодом b . Энергию E участка слоя протяженности $2B$ принимаем в виде

$$2E = \int_0^H \int_0^B [k_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + k_2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + 2p(1 - \cos 2\pi u)] dx dy \quad (1.1)$$

Здесь u – микросмещение (в единицах b) вдоль слоя (оси OY), k_1 – микромодуль сдвига, k_2 – микромодуль продольного растяжения решетки, p – амплитуда межатомного периодического потенциала, равно как и амплитуда (наибольшее значение) силы сцепления.

Микромодули отличны, строго говоря, от соответствующих модулей в макроскопической теории упругости, которая оперирует макросмещениями U (смещениями макрочастиц относительно их начальных положений), т.е. акустическими степенями свободы. Микросмещения u соответствуют как бы оптическим модам деформаций, которые возбуждаются при потере устойчивости структуры.

Первые два члена в (1.1) отвечают микроградиентам. Третий член в (1.1) соответствует энергии однородного сдвига жестких монослоев (цепочек), а первые два учитывают их податливость или упругость двумерной решетки при сдвиге и растяжении вдоль оси координат OY . В случае жестких монослоев простое условие, когда поле микросмещений является константой, означает не жесткое смещение всей решетки как целого, а однородную сдвиговую ее микродеформацию, которая по существу и равна относительной (в единицах b) величине микросмещения u . При жестком микросдвиге соседних цепочек на величину одного межатомного расстояния в кристалле получается деформация двойникования. Заметим, что рассматривается фактически трехмерная решетка с двумерными полями деформаций. Истинно же двумерные решетки обладают спецификой по части флуктуаций и корреляционных функций, что выходит за рамки настоящей теории.

Уравнение равновесия, соответствующее минимуму функционала (1.1), имеет вид

$$k_1(\partial^2 u / \partial x^2) + k_2(\partial^2 u / \partial y^2) - p \sin 2\pi u = 0 \quad (1.2)$$

Это нелинейное уравнение, известное как уравнение синус-Гельмгольца, очевидно, содержит две характерные длины когерентности решетки

$$l_1 = \sqrt{k_1 / p}, \quad l_2 = \sqrt{k_2 / p} \quad (1.3)$$

Они определяют мезоскопические масштабы, которые появляются в данной теории, в отличие от теории континуальной, безмасштабной. В масштабах, меньших мезоскопических, дальний трансляционный порядок полностью нарушается градиентами деформаций. Решетка сохраняет определенный трансляционный порядок лишь на больших расстояниях.

При $l_1 \rightarrow 0$ приходим к одномерной модели Френкеля–Конторовой – упругой цепочке атомов, взаимодействующих с периодической подложкой. В предлагаемой же модели рассматривается система параллельных, взаимодействующих друг с другом

(а не с подложкой!) цепочек, способных как к проскальзыванию друг относительно друга, так и к непрерывному деформированию. Первые два члена в уравнении равновесия (1.2) отвечают континуальным, сглаженным по атомарным масштабам силам, а третий, нелинейный член, учитывает межатомные структурные силы. При усреднении по размерам, превышающим мезоскопические масштабы, структурные силы исчезают и модель переходит в континуальную. Не является тривиальным и случай, когда континуальные силы обращаются в нуль при равных нулю градиентах микросмещений. Тогда структурные силы самоуравновешиваются, если $u = \pm 1$, что прямо следует из уравнения (1.2). Этому случаю соответствует образование двойника.

Если (1.2) соответствует минимуму функционала (1.1), то максимуму отвечает уравнение с обратным знаком перед нелинейным членом. Их решения u_+ , u_- , как нетрудно видеть, связаны преобразованием (меняющим знак у синуса), т.е.

$$u_-(x, y) = u_+(x, y) - \frac{1}{2} \quad (1.4)$$

$$k_1(\partial^2 u_+ / \partial x^2) + k_2(\partial^2 u_+ / \partial y^2) + p \sin 2\pi u_+ = 0 \quad (1.5)$$

Они отличаются трансляцией структуры на половину периода решетки (в единицах b), в действительности, в ту и в другую сторону. Однако в (1.4) предусмотрено лишь одно направление, что удобно для дальнейшей формулировки граничных условий. В результате преобразования (1.4) переходим от стабильной к неустойчивой конфигурации решетки, когда одни атомы перемещаются из локальных минимумов на вершины потенциальных барьеров, а другие – с вершин в минимумы. Ясно, что при сдвиге более чем на половину периода происходит переключение межатомных связей с изменением соседей частиц – ситуация в сплошнородной модели невозможная. В настоящей теории это допустимо (возникают упругопластические сдвиги), но этот случай не рассматривается.

Здесь интересуемся лишь упругими микродеформациями в слое, когда на границах возникает предельно допустимый (критический) сдвиг $2u \leq 1$, а в остальном объеме сдвиг меньше. Прежде чем перейти к доказательству устойчивости неоднородных, модулированных вдоль слоя деформаций, обратимся к анализу точного двумерного решения u уравнения (1.2) для бесконечного слоя толщиной H , которое подчиним граничным условиям критического сдвига

$$u_-(0, y) = -\frac{1}{2}, \quad u_-(H, y) = +\frac{1}{2}, \quad u_-(x, y + 2mB) = u_-(x, y), \quad m = \pm 1, 2, \dots \quad (1.6)$$

В этом случае речь идет о взаимном сдвиге соседних цепочек на границах $x = 0$ и $x = H$ на половину периода исходной решетки, в ту и в другую сторону, когда атомы выходят на вершины микрорельефа. Знаки в первых двух равенствах можно заменить на обратные ввиду равнозначности сдвига влево и вправо. Очевидно, внутри слоя (толщиной H) эти сдвиги, конечно, меньше половины межатомного расстояния. Такая деформация вправе именоваться чисто упругой. Третье условие в (1.6) является условием периодичности деформаций вдоль слоя.

2. Построение решения. Для нахождения решения поставленной задачи в форме (1.4) необходимо обратиться непосредственно к уравнению (1.5). Воспользуемся методом Лэма [2] разделения переменных для уравнения синус-Гельмгольца (1.5), согласно которому решение ищется в виде

$$\operatorname{tg}(\pi u_+ / 2) = Q_1 / Q_2, \quad Q_1 = Q(x), \quad Q_2 = Q(y) \quad (2.1)$$

С помощью этого представления исходное уравнение (1.5) разделяется на два обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнения относительно частных функций Q_1, Q_2

$$(\partial Q_1 / \partial x)^2 = a^2(Q_1^2 + B_1)(Q_1^2 + C_1) \quad (2.2)$$

$$(\partial Q_2 / \partial y)^2 = a^2(Q_2^2 - B_2)(C_2 - Q_2^2)$$

В оригинальной работе [2] справа в этих уравнениях фигурирует три произвольные постоянные интегрирования, которые заранее подобраны так, чтобы исходное уравнение удовлетворялось. Целесообразно записать, как это и было сделано [3], двучлены справа через пять постоянных (a, B_1, B_2, C_1, C_2) и получить (путем подстановки выражения (2.2) в (1.2)) в явном виде два дополнительных соотношения, которым эти постоянные подчиняются

$$B_1 C_1 = B_2 C_2, \quad a^2(B_1 + C_1) - a^2(B_2 + C_2) = 1 \quad (2.3)$$

Уравнения (2.2) имеют решения в эллиптических функциях. Введение на промежуточном этапе избыточных постоянных интегрирования дает более широкие возможности для выбора тех или иных эллиптических функций, ориентируясь на заданные граничные условия. Далее этот выбор проверяется с помощью соотношений (2.3), которые оказываются условиями существования решения.

Подробно процедура построения интересующего нас решения описана ранее в [4, 5]. Оно имеет вид двоякопериодической функции

$$\operatorname{tg}(\pi u_+ / 2) = \pm \operatorname{tn}(q_1 x) / (A \operatorname{sn}(q_2 y)) \quad (2.4)$$

$$A^2 = v_2 / \sqrt{1 - v_1^2}, \quad q_1 = K_1 / H, \quad q_2 = K_2 / B$$

Здесь q_1, q_2 – пространственные эллиптические частоты, H и $2B$ полупериоды эллиптического тангенса tn и синуса sn Якоби соответственно, а K_1, K_2 – полные эллиптические интегралы первого рода, известным образом зависящие от своих аргументов – модулей v_1, v_2 [6]. Последние определены в интервале от 0 до 1.

Справедливы следующие асимптотики [6]:

$$K \rightarrow \infty, \quad \operatorname{tn} \rightarrow \sinh, \quad \operatorname{sn} \rightarrow \operatorname{th}, \quad v \rightarrow 1 \quad (2.5)$$

$$K \rightarrow \pi/2, \quad \operatorname{tn} \rightarrow \operatorname{tg}, \quad \operatorname{sn} \rightarrow \sin, \quad v \rightarrow 0$$

Они, в частности, показывают, что модули v_1, v_2 и K_1, K_2 определяют степень эллиптичности соответствующих функций и степень их локализации по соответствующим осям, а с нею и величины градиентов смещений. Последние в принципе могут быть неопределенно велики и при ограниченных периодах $2H, 4B$ или пространственных частотах поля смещений.

Выражение (2.4) представляет собой неустойчивое решение, поскольку удовлетворяет уравнению (1.5). Однако оно позволяет построить устойчивое решение уравнения (1.2) в форме (1.4), удовлетворяющее нужным граничным условиям (1.6), в чем легко убедиться. Отправляясь же прямо от уравнения (1.2), это было бы сделать затруднительно.

Решение периодически по оси OY (с периодом $4B$) в силу периодичности функции sn . Поскольку она знакопеременна, все поперечные сечения слоя характеризуются сложным профилем смещений. Ясно, что выражение (2.4) – периодическое решение и по оси OX с периодом $2H$, однако само поле микросмещений может нарастать в положительном направлении оси OX . Полученное решение (1.4), (2.4) показывает, что и в деформированном состоянии, когда на некоторых линиях достигаются условия критического сдвига, возможен трансляционный порядок, реализующийся в виде доменной суперструктуры.

3. Дисперсионные соотношения. Продолжая анализ упругой конфигурации (2.4), (1.4), (1.6), рассмотрим критерии ее существования. Обратим вначале внимание на то, что решение (2.4) содержит после удовлетворения граничным условиям две произвольные постоянные интегрирования v_1, v_2 . Они в принципе находятся из (2.3), которые следует назвать дисперсионными соотношениями, поскольку накладываются связи на пространственные частоты q_1, q_2 . Их можно выразить через указанные

постоянные так:

$$(2 - v_1^2)k_1q_1^2 - (1 + v_2^2)k_2q_2^2 + p = 0 \quad (3.1)$$

$$k_1q_1^2 = A^2k_2q_2^2, \quad p \geq 0 \quad (3.2)$$

Первое является прообразом самого уравнения (1.5) и получается подстановкой в него выражения (2.4). Отметим, что если исходить из устойчивого решения (1.4), то его необходимо подставить в уравнение (1.2). Разумеется, получим то же соотношение (3.1).

Второе слагаемое в (3.1) отвечает градиентам смещений вдоль слоя, ответственным за неоднородное растяжение цепочек. Существенно, что знак перед ним, в отличие от первого слагаемого, отрицателен. Это значит, что имеет место конкуренция соответствующих сил в установлении равновесия. Если продольные растяжения (сжатия) создают силы, направленные против структурных сил, удерживающих порядок, то поперечные градиенты действуют в том же направлении, что и структурные силы. Уже из расстановки знаков в (3.1) следует, что для его выполнения (возникновения устойчивых упругих деформаций) необходимо, чтобы продольные градиенты превалировали бы над поперечными. В противном случае равенство в (3.1) невозможно. Первые, очевидно, стабилизируют большой сдвиг, который становится неустойчивым в отсутствие продольных модуляций.

Соотношение между градиентами задается вторым дисперсионным соотношением (3.2) в зависимости от величины параметра A , который определен изначально в (2.4). Соотношение же (3.2) придает этому параметру простой смысл отношения характерных энергий микросдвига и микрорастяжения. Он играет определяющую роль в вопросах устойчивости этих деформаций. Его критическая величина может быть уточнена после элементарного преобразования соотношений (3.1) и (3.2) в два следующих условия:

$$-S = A^2P_1 = P_2 \quad (3.3)$$

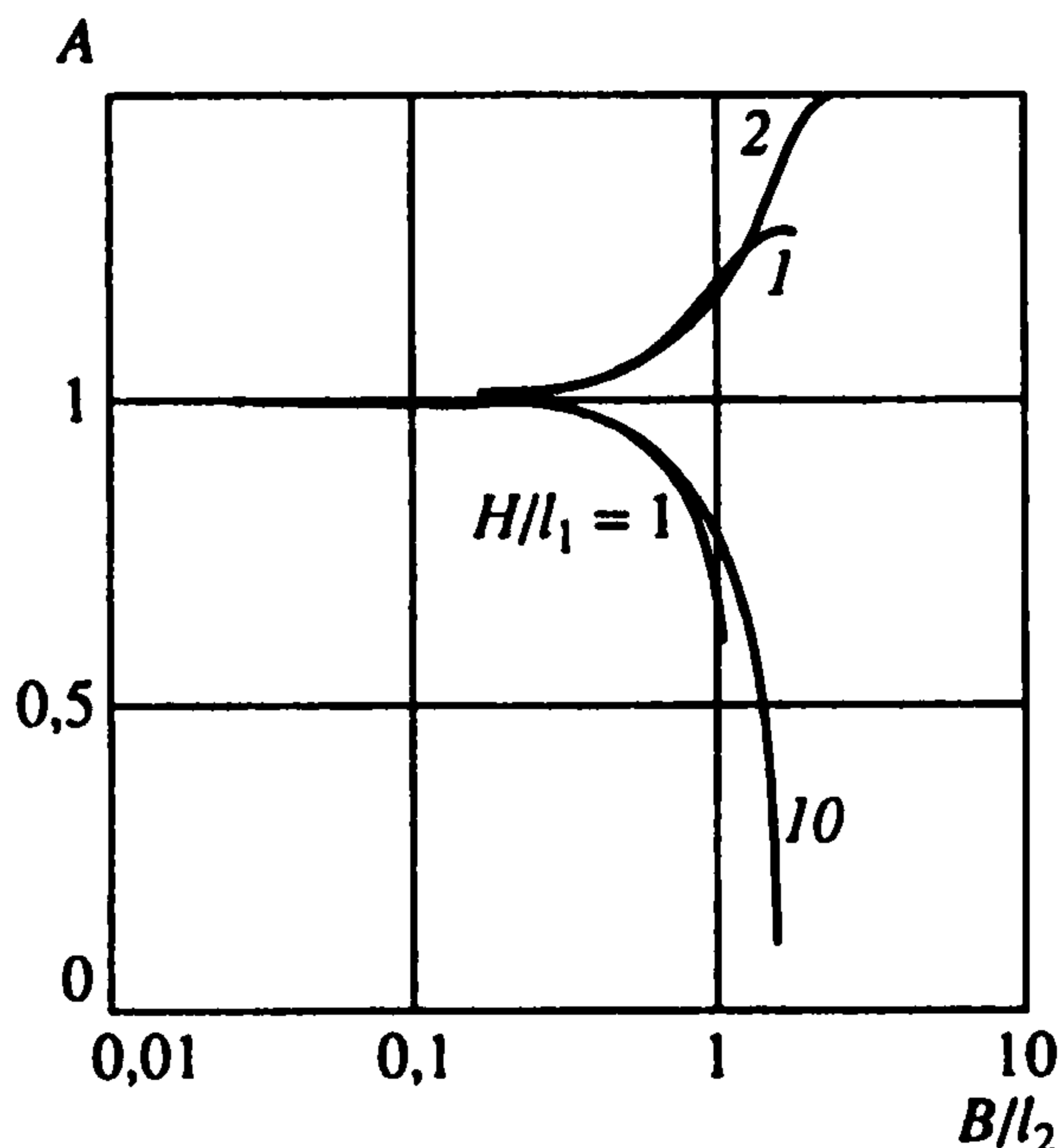
Здесь

$$S = (A^2 - 1)(1 - v_2^2 / A^2); \quad P_1 = p / (k_1q_1^2), \quad P_2 = p / (k_2q_2^2) \quad (3.4)$$

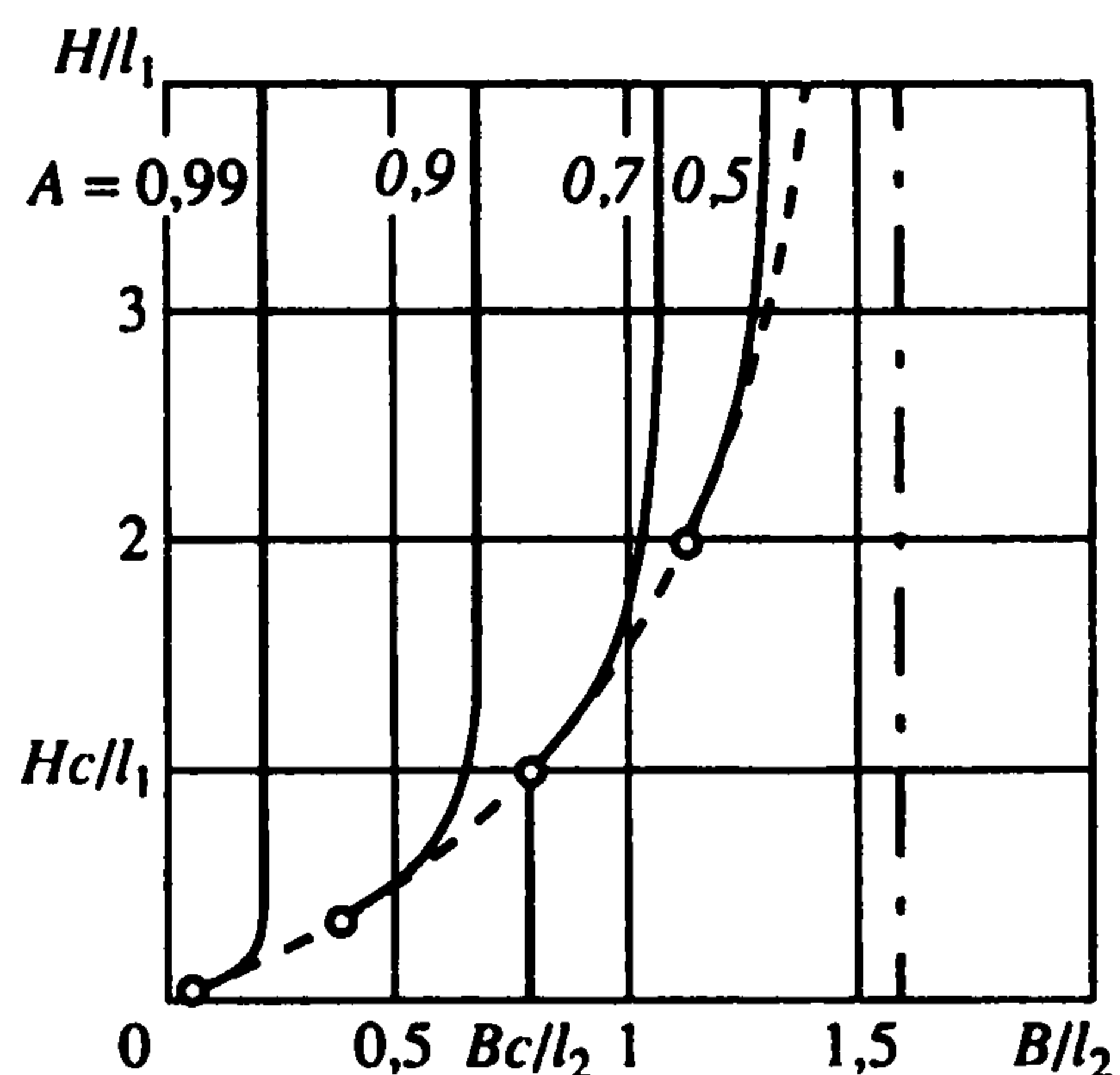
Отметим, что фактически в (3.3) получено разделение дисперсионных соотношений относительно пространственных эллиптических частот q_1, q_2 . В нелинейной теории частоты выражаются не только через материальные константы, но и зависят от параметра A . Отметим также, что вновь введенные в (3.4) величины P_1 и P_2 (эффективные относительные потенциалы) имеют смысл некоторых коллективных характеристик взаимодействия не отдельных атомов, а участков цепей длиной $4B$ и $2H$ в суперструктуре. Они, так же как и решеточный потенциал p недеформированной структуры, положительны.

Последнее весьма существенно, поскольку требует неравенства $A < 1$, при котором $S < 0$ и дисперсионные соотношения в форме (3.3), т.е. условия существования устойчивого решения, выполняются. Значениям A , большим единицы, когда начинают превалировать поперечные градиенты, соответствует, как это отмечено и ранее, неустойчивая упругая конфигурация решетки и отрицательные значения эффективных барьеров P_1, P_2 . Как было показано [1], стабилизация возможна и в области значений параметра $A > 1$ – за счет пластического сдвига. Тогда можно построить устойчивое решение, но с новыми граничными условиями, переход к которому происходит через точку $A = 1$.

По этой причине интересно рассмотреть точку структурного перехода $A = 1$ с других позиций. Ей соответствует, как это следует из (3.3), и условие обращения в нуль потенциального барьера $p = 0$, скажем, за счет температуры. При этом структурные силы исчезают – происходит исчезновение и трансляционного порядка в



Фиг. 1



Фиг. 2

результате потери устойчивости подрешеток к сдвигу. Тогда модель вырождается в два независимых бесструктурных континуума, связанных лишь граничными условиями. Действительно, оба поля (микро- и макросмещений) подчиняются теперь одинаковым уравнениям классической теории упругости. Ясно, что условию $S = 0$ или $A = 1$ соответствует точка ветвления решения уравнения (1.2), а величина A имеет смысл бифуркационного параметра (фиг. 1).

На самом деле не обязательно предполагать, что величина потенциального барьера p обращается в нуль в процессе повышения температуры тела. Это привело бы к кардинальному изменению самой исходной модели. К точке $S = 0$ можно приблизиться, правда лишь асимптотически, устремив к нулю эффективные потенциальные барьеры P_1, P_2 , определенные в (3.4). За счет роста деформационных градиентов, нарушающих трансляционный порядок, подавляется роль решеточного потенциала. В результате, как и в случае $p = 0$, происходит смена знака в S и переход параметра A через значение, равное единице. При этом поперечные и продольные градиенты меняются ролями.

Этот переход означает, что теряется устойчивость к сдвигу деформированных подрешеток (суперструктуры) и происходит существенная перестройка искаженного трансляционного порядка деформированной конфигурации. Поэтому эффективные потенциалы, являющиеся относительными величинами, можно рассматривать в качестве параметров искаженного трансляционного порядка в деформированном кристалле.

Итак, области чисто упругих ($A < 1$) и упругопластических деформаций ($A > 1$) разделены точкой бифуркации $A = 1$, в которой переход сопровождается проскальзыванием на границе на полпериода начальной решетки.

4. Критерии локальной устойчивости деформированной конфигурации. Наряду с неравенством $A < 1$ реализуются дополнительные ограничения на область существования устойчивого упругого сдвига. Они также следуют из дисперсионных соотношений. Для их выявления нужно исключить из соотношений (3.1), (3.2) постоянные интегрирования v_1, v_2 . Определив последние из (3.2), (3.1) через H, B , получим A как функцию тех же величин.

На фиг. 1 представлена зависимость этой величины от масштаба продольных модуляций B (в единицах l_2) при разных толщинах. Очевидно ветвление решений. Рассматриваемый здесь случай упругих деформаций $A < 1$ представлен семейством нижних кривых, каждая из которых соответствует определенному значению толщины: $H/l_1 = 1, 10$. Ясно, что решение существует лишь при достаточно коротковолновых

модуляциях $B/l_2 < \pi/2$, а однородных вдоль слоя деформаций просто нет. Верхнему семейству $A > 1$ соответствует упругопластический сдвиг [1].

Возможен более детальный анализ локальной устойчивости решений. Для этого нужно изобразить взаимосвязь трех величин A, B, H системой зависимостей H от B при разных значениях бифуркационного параметра A (фиг. 2). Тогда получаются кривые существования решения (1.4), (2.4).

В рассматриваемом случае $A < 1$ каждая кривая на плоскости (HB) при заданном значении A имеет по одной асимптоте $B = B_i$ и приходит в конечную точку H_c, B_c , не достигая начала координат, так что выполняются неравенства

$$H \geq H_c, \quad H \leq \infty, \quad B_c \leq B \leq B_i \quad (4.1)$$

Значения этих пределов таковы:

$$H_c = \pi l_1 (1 - A^2) / (2A), \quad B_c = l_2 (1 - A^2) K_{22}, \quad K_{22} = K_2 (v_2 = A^2) \quad (4.2)$$

$$B_2 = \pi l_2 \sqrt{1 - A^2} / 2$$

Ясно, что не все значения параметров H, B допустимы – из (4.1) следуют очевидные ограничения. Полностью исключается вся область больших продольных масштабов суперструктуры. Действительно, величина B не превышает длины когерентности с множителем, зависящим от A , который может оказаться весьма малым при $A \rightarrow 1$. Таким образом, возможны лишь коротковолновые модуляционные структуры, а однородный вдоль слоя упругий сдвиг не реализуется. Однако, если размеры ячейки суперрешетки еще меньше, чем допустимые H_c, B_c , то такая мелкомасштабная суперструктура также неустойчива.

Ясно, что из всего спектра допустимых размеров реализуются как равновесные только наинизшие по энергии структуры. На фиг. 2 отрезок горизонтальной прямой, пересекающий на уровне $H = H_c$ кривые равновесия слева направо, доходит до конечной точки B_c , за пределами которой решение отсутствует – локально устойчивых состояний нет. Эта точка и определяет самую устойчивую конфигурацию, поскольку при соответствующей толщине слоя H_c это наименее деформированная структура – с наибольшим значением периода модуляции B_c . Для любой толщины такая предельная точка и соответствующая наивыгоднейшая модулированная суперструктура (с длиной модуляции B_c) существует.

Разумеется, все еще остается широкий спектр возможных структур. Действительно, исключив из выражений для H_c, B_c в (4.2) параметр A , получим кривую равновесных структур $B_c(H_c)$ (штриховая кривая на фиг. 2). Это нижняя граница области существования, проходящая по начальным точкам кривых и имеющая вертикальную асимптоту (штрихпунктирная линия). Последняя пересекает ось абсцисс в точке $B_i l_2 = \pi/2$.

Вопрос о единственной реальной суперструктуре должен решаться далее путем выбора толщины слоя, о чем будет сказано.

Неравенства (4.1) можно представить как энергетические условия реализации устойчивого критического сдвига, раскрыв, согласно (4.2), соответствующие величины. Тогда получим

$$p \geq k_1 (\pi/2H)^2 (1 - A^2)^2 / A^2 \quad (1 - A^2)^2 / A^2 \leq P_1 \leq (1/A^2 - 1) \quad (4.3)$$

$$k_2 (\pi/2B)^2 (1 - A^2) \geq p \geq (k_2 / B^2) (1 - A^2)^2 K_{22}^2 \quad (1 - A^2)^2 \leq P_2 \leq (1 - A^2) \quad (4.4)$$

Существенным является ограничение по потенциальному барьеру не только снизу, но и сверху. Чтобы понять это последнее, обратимся снова к дисперсионному соотношению (3.1), из которого следует, что для устойчивости упругого сдвига продольные градиенты должны превалировать. Домены же суперструктуры не могут

быть слишком короткими – по крайней мере должны значительно превышать межатомные расстояния. По этой причине слишком большие потенциальные барьеры решетки не могут быть в этом режиме преодолены. Таким образом, чисто упругий критический сдвиг возникает в вилке значений величин p , B или градиентов, как это представлено в соотношениях (4.4).

Чисто упругие, но большие микродеформации и их градиенты возможны, как теперь ясно, без пластического сброса в силу специфического механизма разгрузки. Он реализуется благодаря компенсирующим (стабилизирующим) силам, порожденным градиентами микродеформаций вдоль слоя.

Дело в том, что растяжение (сжатие) цепей вдоль слоя препятствует скатыванию частиц в потенциальные ямы, поскольку это привело бы к дополнительному растяжению (сжатию). Иными словами, соседние цепочки приобретают несоответствие структур. В результате вместо пластических деформаций возникают большие продольные градиенты, отвлекающие на себя избыточную энергию сдвигового деформирования. Такое перераспределение энергии между модами микродеформаций реализуется в мелкомасштабной (вдоль слоя) модулированной структуре, каковая и реализуется при $A < 1$.

Несоответствие в структуре соседних цепочек благоприятно для устойчивости лишь до определенного предела. При больших их длинах $2B$ энергия поперечного сдвига компенсируется недостаточно для обеспечения устойчивости. Поэтому имеем место ограничение чисто упругих структур по этим длинам в соответствии с (4.1).

5. Обсуждение результатов. До сих пор рассматривались, строго говоря, локально устойчивые деформации сдвига, удовлетворяющие условию минимума функционала (1.1). На границе области существования реализуются наиболее плавные, длинноволновые модуляции, которые уже предполагались энергетически более предпочтительными, а потому и более устойчивыми. Им и на самом деле отвечают минимумы интегральной энергии микродеформаций $E/(pHB)$. Получается серия кривых, показывающих падение энергии в сторону роста длины модуляции B при разных толщинах H . Каждая кривая, спускаясь вниз, заканчивается в конечной точке B_m . Дальнейший подъем на каждой кривой не выявляется – он выходит за область существования решения. Таким образом, имеем дело с минимизацией энергии на границе области существования решения.

Взаимосвязь минимизирующих значений B_m , H_m образует кривую энергетически предпочтительных суперструктур, совпадающую с границей области существования решений (штриховая кривая на фиг. 2). Это значит, что $B_m = B_c$, $H_m = H_c$. Последние даются первыми двумя формулами (4.2).

Ясно, что и энергетически предпочтительные суперструктуры образуют целый спектр, т.е. неравнозначны. Однако их нецелесообразно сопоставлять по энергии микродеформаций. Чтобы найти глобально устойчивую суперструктуру, обладающую наинизшей энергией сдвига, необходимо расширить рассмотрение, включив в него и энергию макроскопического поля сдвиговых деформаций ϵ .

Дело в том, что поперечные микродеформации, в отличие от продольных модуляций, устанавливаются не самопроизвольно, а под воздействием сдвиговых макродеформаций ϵ , играющих роль внешнего поля. По достижении некоего порога скачком возникает суперструктура с доменами определенной толщины H_m , зависящей от ϵ . Приравняв H_m величине H_c из (4.2), можно найти и конкретное значение параметра A , а также величину масштаба модуляции B_c . Используя далее эти величины в аргументах эллиптических функций в (2.4), получим в окончательном виде решение (1.4), описывающее единственную суперструктуру, возникающую в макроскопическом поле сдвиговых деформаций.

Проблема глобальной устойчивости и генерации микродеформаций в макроскопическом поле заслуживает специального рассмотрения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (98-01-01076).

ЛИТЕРАТУРА

1. Аэро Э.Л. Структурные переходы в полиатомных слоях и их стабильность при сдвиге // Неорганич. материалы. 1999. № 8. С. 1–4.
2. *Lamb G.L.* Elements of Soliton Theory. N. Y.: Wiley, 1980. – Лэм Г.Л. Введение в теорию солитонов. М.: Мир, 1983. 294 с.
3. Аэро Э.Л. Двумерные ориентационные деформации нематических жидких кристаллов в неоднородных электрических полях, порождаемых поверхностями с электрическим рельефом // Кристаллография. 1995. Т. 40. № 5. С. 889–899.
4. Аэро Э.Л. Плоские граничные задачи для уравнения синус-Гельмгольца в теории упругости жидких кристаллов в неоднородных магнитных полях // ПММ. 1996. Т. 60. Вып. 1. С. 79–87.
5. Аэро Э.Л. Нелинейная динамика закрученной структуры нематических жидких кристаллов в однородном магнитном поле // Изв. РАН. МТТ. 1998. № 1. С. 182–190.
6. *Jahnke E., Emde F., Losch F.* Tafeln horerer Funktionen. Stuttgart: Tourner, 1960. – Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции. М.: Наука, 1977. 342 с.

Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
25.XI.1999