1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 11
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 11

УДК 539.2 : 678.01

РАЗРЫВНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ

А. И. Мелькер

С учетом ангармонизма пятого порядка получено уравнение движения для напряженной ангармонической цепочки атомов. Показано, что все коэффициенты этого уравнения можно выразить через четыре параметра: скорость звука, постоянную Грюнайзена, деформацию, соответствующую пределу прочности межатомной связи, и деформацию, отвечающую разрывной длине. Для волн, бегущих с постоянной скоростью, уравнение движения сводится к выражению, которое можно интерпретировать как уравнение нелинейного осциллятора, описывающего коллективные возбуждения системы (флуктуации плотности). Получены условия, при которых волны деформации движутся с дозвуковой, звуковой и сверхзвуковой скоростями. Соответствующие решения имеют вид кноидальных, уединенных и разрывных волн. Эти решения позволяют классифицировать все виды деструкции напряженных ангармонических цепочек атомов.

Попытки описать разрушение с помощью динамической теории нелинейных решеток в настоящее время ограничены одномерными (квазиодномерными) моделями [1-4], поскольку теория нелинейных двумерных и трехмерных решеток только начинает создаваться [5, 6]. При этом обычно исследуют стационарные решения уравнений движения атомов типа уединенных или кноидальных волн. В [1] предположили, что нелинейные колебания атомов в напряженной ангармонической цепочке можно приближенно описать с помощью гамильтониана типа φ^4. В этом случае уравнение, описывающее смещение атомов из положения равновесия, имеет решение в виде кинка, амплитуда и ширина которого зависят от деформации цепочки. Такое решение позволяет описать медленно меняющуюся составляющую разрывной флуктуации плотности. В то же время при феноменологическом подходе [1] остается открытым вопрос о законности сделанных предположений.

С другой стороны, с помощью микроскопического подхода [4], при котором парный потенциал взаимодействия атомов аппроксимировали полиномом четвертой степени, учитывая одновременно кубический и квартетный ангармонизм, удалось строго получить все коэффициенты соответствующего уравнения движения, установить их физический смысл и построить классификацию дилатонов (нелинейных волн деформации растяжения), которые создают флуктуации плотности. Однако аппроксимирующий полином четвертого порядка даже со сделанной в [4] поправкой на точку перегиба неограниченно возрастает при увеличении расстояния между соседними атомами, что исключает разрыв ангармонической цепочки. Кроме того, в [4] рассмотрены лишь сверхзвуковые нелинейные волны деформации, в то время как наблюдаемые в молекулярно-динамических машинных экспериментах дилатоны, вызывающие разрушение, движутся с дозвуковой скоростью.

В связи с этим в данной работе ангармонический потенциал межатомного взаимодействия, имеющий точку перегиба (типа Ми, Морзе, Леннард—Джонса и т. п.), аппроксимировали полиномом пятой степени, который допускает разрыв межатомной связи, и исследовали стационарные решения уравнения движения, получающегося при такой аппроксимации.

1. Уравнение движения

Рассмотрим аналогично [4] деформированную на ε одномерную ангармоническую цепочку атомов с параметром $h=r_0(1+\varepsilon)$, где r_0 — равновесное расстояние между атомами в ненапряженной цепочке. Обозначим через u_n смещение атома n из его положения равновесия. Учтем взаимодействие только ближайших соседей и аппроксимируем потенциальную энергию межатомной связи φ полиномом пятой степени. Можно показать, что в результате перехода от дискретного аргумента n к непрерывной координате x получается следующее уравнение движения:

$$m\ddot{u}=h^2\varphi''(\varepsilon)\left(u''+\frac{h^2}{12}u^{\mathrm{IV}}\right)+h^3\varphi'''(\varepsilon)\left(uu'+\frac{h^2}{6}u'u'''+\frac{h^2}{12}u'u^{\mathrm{IV}}\right)+$$
$$+\frac{h^4}{2}\varphi^{\mathrm{IV}}(\varepsilon)(u')^2u''+\frac{h^5}{6}\varphi^{\mathrm{V}}(\varepsilon)(u')^3u'', \tag{1}$$

где m — масса атома, $\varphi(\varepsilon)\equiv\varphi[r_0(1+\varepsilon)]$, штрих обозначает дифференцирование по x. Сделаем замену $\ddot{u}=V^2u''$ и обозначим $u'=z$, где z — флуктуация деформации (плотности). После интегрирования по x уравнение движения переходит в обыкновенное дифференциальное уравнение для волн деформации, бегущих с постоянной скоростью V

$$\frac{h^4}{12}[\varphi''(\varepsilon)+h\varphi'''(\varepsilon)z]z''+\frac{h^5}{24}\varphi'''(\varepsilon)(z')^2+[h^2\varphi''(\varepsilon)-mV^2]z+\frac{h^3}{2}\varphi'''(\varepsilon)z^2+$$
$$+\frac{h^4}{6}\varphi^{\mathrm{IV}}(\varepsilon)z^3+\frac{h^5}{24}\varphi^{\mathrm{V}}(\varepsilon)z^4=\mathrm{const}. \tag{2}$$

Аналогично [4] обозначим

$$h^2\varphi''(\varepsilon)=mc^2(\varepsilon),\qquad h\varphi'''(\varepsilon)/\varphi''(\varepsilon)=-2\gamma(\varepsilon), \tag{3}$$

где $c(\varepsilon)$ — скорость звуковых колебаний, $\gamma(\varepsilon)$ — постоянная Грюнайзена. Используя (3), перепишем уравнение (2) в виде

$$h^2[1-2\gamma(\varepsilon)z]z''-h^2\gamma(\varepsilon)(z')^2+12\left[1-\frac{V^2}{c^2(\varepsilon)}\right]z-12\gamma(\varepsilon)z^2+\frac{2h^2\varphi^{\mathrm{IV}}(\varepsilon)}{\varphi''(\varepsilon)}z^3+$$
$$+\frac{h^3\varphi^{\mathrm{V}}(\varepsilon)}{2\varphi''(\varepsilon)}z^4=\mathrm{const}. \tag{4}$$

Известно [4, 7], что типичный ангармонический потенциал межатомного взаимодействия, который допускает разрыв межатомной связи, имеет два характерных расстояния r_1 и r_2. Первое (точка перегиба) соответствует пределу прочности межатомной связи, второе (разрывная длина) играет важную роль в теории прочности полимеров [8]. Условия перегиба и разрыва имеют вид

$$\varphi''(r_1)=\varphi'(r_2)=\varphi(r_2)=0, \tag{5}$$

где $r_i=r_0(1+\varepsilon_i)$, $i=1, 2$. Обозначим $\varepsilon_i r_0=\Delta_i$ и разложим $\varphi(\Delta_i)$ в ряд по Δ, ограничившись членом с производной пятого порядка

$$\varphi(\Delta_i)\equiv\varphi(\varepsilon_i)=\sum_{n=0}^{5}\frac{(\Delta_i-\Delta)^n}{n!}\varphi^n(\varepsilon). \tag{6}$$

В принципе можно найти коэффициенты $\varphi^{\mathrm{IV}}(\varepsilon)$, $\varphi^{\mathrm{V}}(\varepsilon)$, разложив какой-либо конкретный потенциал межатомного взаимодействия (Морзе, Леннард—Джонса и т. п.) в ряд. Однако если затем синтезировать исходный потенциал, то нетрудно убедиться, что синтезированный потенциал весьма далек от исходного при $\varepsilon\geqslant\varepsilon_1$, т. е. в той области, которая наиболее важна для анализа разрушения [9]. Поэтому аналогично [4] используем выражения (5), (6), из которых следует, что

$$\frac{h^2\varphi^{\mathrm{IV}}(\varepsilon)}{\varphi''(\varepsilon)}=\frac{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\,q_1/4-(\varepsilon_1-\varepsilon)\,q_2/3}{(\varepsilon_2-\varepsilon)/4-(\varepsilon_1-\varepsilon)/3},$$

$$\frac{h^3\varphi^{\mathrm{V}}(\varepsilon)}{\varphi''(\varepsilon)}=\frac{(1+\varepsilon)(q_1-q_2)}{(\varepsilon_2-\varepsilon)/4-(\varepsilon_1-\varepsilon)/3}, \tag{7}$$

где

$$q_1=2\left(\frac{1+\varepsilon}{\varepsilon_1-\varepsilon}\right)^2\left[2\gamma(\varepsilon)\frac{\varepsilon_1-\varepsilon}{1+\varepsilon}-1\right],$$

$$q_2=-6\left(\frac{1+\varepsilon}{\varepsilon_2-\varepsilon}\right)^2\left[\gamma(\varepsilon)\frac{\varepsilon_2-\varepsilon}{1+\varepsilon}-\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_2-\varepsilon}\right]. \tag{8}$$

Здесь учтено, что $\varphi'(\varepsilon)\simeq\varepsilon r_0\varphi''(\varepsilon)$.

Отметим, что отношение $\varepsilon_2/\varepsilon_1$ равно 5.77 и 5.84 для потенциала Морзе и Леннард—Джонса соответственно [4, 7], а величина ε_1 обычно составляет [8] 0.1—0.2. Таким образом, при заданной деформации ангармонической цепочки ε все коэффициенты уравнения движения, которое учитывает ангармонизм пятого порядка, можно выразить через четыре параметра $c(\varepsilon)$, $\gamma(\varepsilon)$, ε_1 и ε_2.

По физическому смыслу постоянная интегрирования в уравнении (4) — это сила однородного поля, в котором находится наша система. Единственной внешней силой, действующей на рассматриваемую ангармоническую цепочку атомов, является сила растяжения, которая смещает на εr_0 положения равновесия атомов, совершающих колебания. Однако эту силу мы уже учли, когда ввели зависимость коэффициентов уравнения от деформации ε, поэтому в нашем случае постоянная интегрирования равна нулю. По сравнению с аппроксимацией полиномом четвертого порядка [4] в уравнении движения появились три новых члена: $-2\gamma(\varepsilon)zz''$, $-\gamma(\varepsilon)(z')^2$ и $h^3\varphi^{\mathrm{V}}(\varepsilon)/\varphi''(\varepsilon)$. Первый член описывает вклад ангармоничности колебаний плотности в кинетическую энергию системы [10]; второй член учитывает силу трения, пропорциональную квадрату скорости изменения поля деформаций; третий принимает во внимание ангармонизм пятого порядка в потенциальной энергии взаимодействия атомов.

Введем безразмерную координату $\xi=x/h$ и перепишем уравнение движения (4) в виде

$$[1-2\gamma(\varepsilon)z]\,z''-\gamma(\varepsilon)(z')^2=F(z), \tag{9}$$

где $F(z)$ — полином четвертого порядка. Обозначим $[z'(\xi)]^2=y(z)$, тогда $z''(\xi)=y'(z)/2$, и мы получим линейное уравнение первого порядка

$$^1/_2\,[1-2\gamma(\varepsilon)\,zy(z)]'=F(z). \tag{10}$$

Результат интегрирования можно представить в виде

$$\frac{\mu(z)}{2}[z'(\xi)]^2+\Phi(z,\ V)=E, \tag{11}$$

где E — постоянная интегрирования.

Будем рассматривать ξ как время, z — как координату некоторой материальной точки, а E — как ее полную энергию. Тогда выражение (11) описывает движение материальной точки массы $\mu(z)=1-2\gamma(\varepsilon)z$ в потенциальной яме

$$\Phi(z,\ V)=P_5(z)=Dz^5+Az^4+Bz^3+Cz^2, \tag{12}$$

где

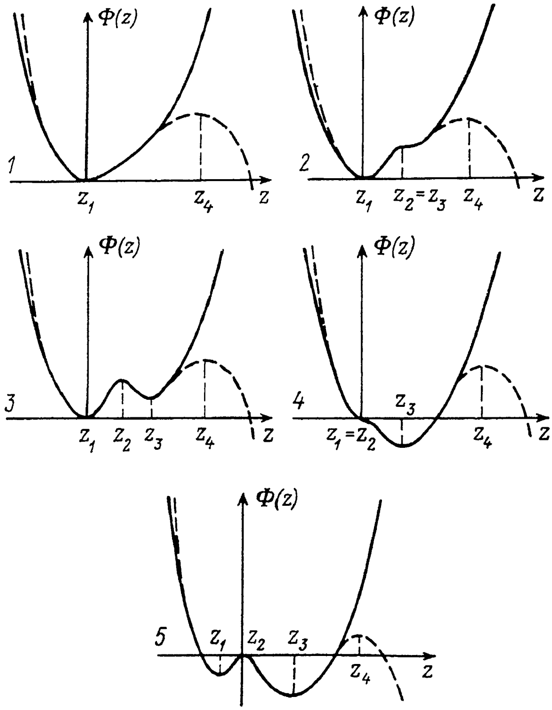
$$D=\frac{\varphi^{\mathrm{V}}}{10\varphi''},\qquad A=\frac{\varphi^{\mathrm{IV}}}{2\varphi''},\qquad B=-4\gamma(\varepsilon),\qquad C=6\left[1-\frac{V^2}{c^2(\varepsilon)}\right]. \tag{13}$$

Таким образом, систему (11) можно интерпретировать как нелинейный осциллятор, описывающий в длинноволновом приближении флуктуации плотности в деформированной ангармонической цепочке атомов. Не следует путать парный ангармонический потенциал межатомного взаимодействия $\varphi(\varepsilon)$ с потенциальной энергией $\Phi(z, V)$, найденной в длинноволновом приближении. Последняя функция описывает потенциальную энергию флуктуаций плотности (деформации) в ангармонической цепочке атомов и является результатом коллективных возбуждений системы. Решив (11) относительно $z'(\xi)$, найдем в неявном виде флуктуацию плотности (деформации) как функцию координаты

$$\xi = \int_0^z \frac{\mu(z)\,dz}{\sqrt{E - \Phi(z, V)}}. \tag{14}$$

2. Виды уединенных волн

Обсудим сначала вид функции $\Phi(z, V)$ в более простом случае аппроксимации потенциала межатомного взаимодействия $\varphi(\varepsilon)$ полиномом



Потенциальная энергия флуктуаций деформации (плотности).

четвертого порядка. Здесь [4] $\mu(z)=1$, $D=0$ и выражение (11) принимает вид

$$^1/_2 \cdot [z'(\xi)]^2 + P_4(z) = E. \tag{15}$$

Условие экстремума $P'_4(z)=0$ приводит к уравнению

$$4Az^3 + 3Bz^2 + 2Cz = z(z^2 + pz + q) = 0, \tag{16}$$

где $p=3B/4A$, $q=C/2A$. Это уравнение, вообще говоря, имеет три корня: $z_1 < z_2 < z_3$. В зависимости от соотношения между коэффициентами уравнения наблюдается пять видов кривых (см. рисунок). Эти кривые соответствуют следующим условиям: *1*) $q > p^2/4$, $z_1=0$; *2*) $q=p^2/4$, $z_1=0$, $z_2=z_3=|p|/2$; *3*) $q < p^2/4$, $z_1=0$, $z_{2,3}=|p|/2\cdot(1\mp\sqrt{1-4q/p^2})$; *4*) $q=0$, $z_1=z_2=0$, $z_3=|p|$; *5*) $q<0$, $z_{1,3}=|p|/2\cdot(1\mp\sqrt{1+4|q|/p^2})$, $z_2=0$. При выполнении первого, второго или третьего условий волны деформации движутся с дозвуковой скоростью; если реализуется четвертое условие, то со звуковой скоростью; если пятое, — то со сверхзвуковой скоростью. В общем случае решением уравнения движения при любых условиях являются кноидальные волны деформации, в частном случае (при определенном значении E) получается решение типа уединенных волн [4].

Рассмотрим частные случаи. Точки остановки, где скорость $dz/d\xi$ обращается в нуль, являются корнями уравнения $\Phi(z, V)=E$, которое определяет границы области движения. Уединенные волны могут образоваться, когда по крайней мере одна из точек остановки совпадает с точкой z_2 внутреннего максимума потенциальной энергии, т. е. $E=\Phi(z_2, V)$. Если отсчитывать энергию от этого уровня, то выражение (14) можно переписать в виде

$$\xi=\int\limits_0^z \frac{dz}{z\sqrt{-Az^2-Bz-C}}. \tag{17}$$

При $C>0$ (дозвуковые волны) решение имеет вид

$$z=\frac{1}{\sin(\sqrt{C}\,\xi)+|B|/2C}. \tag{18}$$

Обычно [4] $|B|/2C>1$, поэтому решение (18) представляет собой вырожденную кноидальную волну. Если же $C=0$ (звуковая волна), то получается солитонное решение

$$z=\frac{|B|/A}{1+\frac{B^2}{A}\xi^2}. \tag{19}$$

Что касается сверхзвуковых уединенных волн, то они были рассмотрены ранее [4].

Учтем теперь ангармонизм пятого порядка в потенциале межатомного взаимодействия $\varphi(\varepsilon)$. Соответствующая функция $\Phi(z, V)$ показана на рисунке штрихом. Нетрудно оценить положение экстремумов: $z_4\simeq A/|D|$, $z_3\simeq|B|/A$, $z_2\simeq C/|B|$, $z_1\simeq C/|B|$ (последняя оценка имеет место только для условия *5*). Например, для потенциала Морзе, используя результаты [4], получим: $z_4\simeq 1$, $z_3\simeq 1/2$, $z_2\simeq|z_1|\simeq 1/7$. При этом приближенное выражение для разрывных флуктуаций плотности можно найти следующим образом. Вычитая из уравнения (11) уравнение (15), получим

$$\gamma(\varepsilon)\,[z'(\xi)]^2\simeq -Dz^4, \tag{20}$$

откуда

$$z=\sqrt{\frac{\gamma(\varepsilon)}{|D|}}\,\frac{1}{|\xi|}. \tag{21}$$

Условия *1* и *2* (см. рисунок) соответствуют одностадийному разрыву межатомной связи, когда эта связь необратимо удлиняется до $z_4\sim\varepsilon_2$. Условие *3* отвечает двухстадийному разрыву: здесь вначале образуется аномально растянутая связь (закритический дилатон [4]) со средней деформацией z_3, флуктуация деформации в течение нескольких периодов атомных колебаний запирается в правой потенциальной яме (см. рисунок), а затем эта связь удлиняется до z_4 и окончательно разрывается. Если выполняется условие *4*, то флуктуации деформации в основном положительны (соответственно отрицательны флуктуации плотности), и это эквивалентно термодеструкции. Условие *5* отвечает дроблению ангармонической цепочки, когда в ней вначале со сверхзвуковой скоростью распространяется волна релаксации, в которой аномально растянутые связи чередуются со сжатыми, а затем цепочка дробится на части [9].

Таким образом, анализируя форму потенциальной энергии $\Phi(z, V)$, связанную с флуктуацией деформации (плотности), можно классифицировать и описать в терминах уединенных волн все виды деструкции напряженных ангармонических цепочек, наблюдаемые в машинных экспериментах.

Литература

[1] *Мелькер А. И.* ФТТ, 1982, т. 24, № 10, с. 4086—4088.
[2] *Мелькер А. И., Овидько И. А.* ФТТ, 1985, т. 27, № 2, с. 594—597.
[3] *Melker A. I., Ivanov A. V.* Phys. St. Sol. (a), 1985, vol. 91, N 1, p. K41—K44.
[4] *Мелькер А. И., Иванов А. В.* ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3396—3402.
[5] *Тода М.* Теория нелинейных решеток. М.: Мир, 1984. 262 с.
[6] *Бётгер Х.* Принципы динамической теории решетки. М.: Мир, 1986. 392 с.
[7] *Михайлин А. И., Мелькер А. И.* Химическая физика, 1985, т. 4, № 1, с. 15—20.
[8] *Бартенев Г. М.* Прочность и механизм разрушения полимеров. М.: Химия, 1984. 280 с.
[9] *Мелькер А. И., Михайлин А. И., Кузнецова Т. Е.* МКМ, 1979, № 4, с. 720—723.
[10] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика. М.: Физматгиз, 1958. 206 с.

Ленинградский политехнический
институт им. М. И. Калинина
Ленинград

Поступило в Редакцию
19 октября 1987 г.
В окончательной редакции
16 июня 1988 г.