

## 0.1 Модель деформированных монокристаллов.

Классическая граничная задача континуальной механики может быть сформулирована с учетом атомистической структуры материала. Одной из трудностей на этом пути является то, что часто не существует естественного способа определения параметра порядка. Рассмотрения единственной, изолированной дислокации недостаточно для понимания поведения материала, тогда как попытки численно смоделировать достаточное количество дислокаций требуют дорогостоящих вычислений, и неэlegantны концептуально.

Микроскопическое моделирование основано на фундаментальном допущении, что макроскопическое поведение материала состоит из микроскопических процессов, понимание которых дает возможность количественного предсказания макроскопического поведения. При микроскопическом моделировании эволюция соответствующих (микроскопических) степеней свободы описываются явно. В этом пути обычно сначала вычисляют полную энергию. Разработаны вычислительные алгоритмы минимизирующие энергию данной конфигурации - возможно метастабильной - для фиксированного набора атомов. Например, для определения структуры ядра дислокации можно взять за основу информацию о межатомных взаимодействиях.

Континуальная механика, в свою очередь, основана на допущении, что на расстоянии постоянной решетки рассматриваемое поле изменяется настолько медленно, что атомистические степени свободы можно считать "размытыми" на достаточно большой области. В частности существует явное отображение большого числа атомистических степеней свободы в единственное векторное поле смещений, именно:

$$\{\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{x})\} \quad (1)$$

Одним из значительных достижений континуального подхода является значительное уменьшение степеней свободы исследуемой модели. Заменяя множество атомистических координат  $\{\mathbf{r}_i\}$  на поле смещений приходим вместо  $3N$  дискретных дифференциальных уравнений к системе из 3-х ДУрЧп. Уже эти уравнения можно исследовать методами анализа такими как метод конечных элементов.

Рассмотрим два произвольных атома с номерами  $m$  и  $n$ . Пусть  $v(n)$  - это координата равновесного положения атома, а  $u(n)$  - вектор его смещения. Тогда изменение квадрата расстояния между рассматриваемыми

атомами в результате их смещений

$$\begin{aligned} \delta l^2(m, n) = & |v(m) + u(m) - v(n) - u(n)|^2 - |v(m) - v(n)|^2 = \\ & [v(m - n) + \delta u(m, n)]^2 - v^2(m - n), \end{aligned} \quad (2)$$

где для сокращения записи обозначено

$$\delta u(m, n) = u(m) - u(n). \quad (3)$$

Представим изменение квадрата расстояния в виде

$$\delta l^2(m, n) = 2l(m, n), \quad (4)$$

введя обозначение

$$I(m, n) = v(m - n)\delta u(m, n) + \frac{1}{2}\delta u^2(m, n). \quad (5)$$

отсюда следует симметричность этого инварианта по  $n, m$

$$I(m, n) = I(n, m). \quad (6)$$

Величина  $I(m, n)$  является инвариантом второго порядка по отношению к смещениям пары атомов. Расстояние между двумя атомами решетки инвариантно как относительно поступательного перемещения его как целого, так и относительно поворота его как целого. Изменение же потенциальной энергии между атомами происходит всегда, когда изменяется расстояние между атомами. Потенциальная энергия инвариантна относительно смещений и поворотов решетки как целого.

Рассмотрим случай когда поле смещений слабо зависит от номеров узлов, и потому смещения соседних атомов мало отличаются друг от друга. В таком длинноволновом пределе вектор смещения  $u(n)$  можно считать непрерывной функцией координаты  $v = v(n)$ . Тогда для любой пары близких атомов, разлагая  $u(m)$  в ряд около атома  $n$  запишем

$$u^i(m) = u^i(n) + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} x_k(m - n) + \dots \quad (7)$$

- где  $i, k = 1, 2, 3$  пространственные индексы. Можно положить

$$\delta u^i(m, n) = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} x_k(m - n) \quad (8)$$

Подставляя (8) в (5), получаем

$$I(m, n) = \varepsilon_{ik} x^i(m - n) x^k(m - n), \quad (9)$$

где

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u^i}{\partial x^k} + \frac{\partial u^k}{\partial x^i} + \frac{\partial u^l}{\partial x^i} \frac{\partial u^l}{\partial x^k} \right). \quad (10)$$

Соотношение (10) совпадает с обычным определением тензора деформаций сплошной среды.

**Правило Коши-Борна.** Некоторые модели упругих кристаллов имеют значительные преимущества над чисто атомистическими моделями рассмотренными выше. Возможно самым простым примером континуальной теории является анизотропная линейная теория упругости. В частности, если материал подвергается деформации, которая параметризуется тензором малых деформаций  $\epsilon$ , то плотность энергии деформации выражается соотношением:

$$W = \frac{1}{2} c_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}, \quad (11)$$

где  $c_{ijkl}$  - модули упругости, и общая энергия тела может быть записана просто как:

$$E^{tot} = \int_{\Omega} W(\epsilon) dV. \quad (12)$$

Заметим, что с помощью тензора упругих модулей энергия связанная с, возможно сложными, смещениями атомов в результате деформации, пакуется в несколько параметров материала. Линейные модули упругости являются тем мостом, который объединяет наши представления о атомистической структуре материала с континуальной, возможно нелинейной, теорией упругости.

Как только суммарная энергия определена как функция смещений атомов с их положений равновесия, на множество важных вопросов можно дать количественный ответ. Например можно найти затраты энергии на инфинитиземальную деформацию. Вспомним, что суммарная энергия кристалла может быть выражена в виде ряда по степеням смещения. Квадратичные члены этого ряда дают линейные модули упругости. Однако в этом разделе, нас будут интересовать нелинейные эффекты связанные с деформацией.

Рассматривая градиент деформации в точке - локально, можно изучать лишь однородные в пространстве деформации. При этом считается что *каждый вектор* среды получит одинаковое приращение длин и углов в соответствии с (2.99). Тогда макроскопическая деформация соответствует деформации векторов одной элементарной ячейки, это соответствие называется *привлком Коши-Борна*. Малую деформацию можно также считать однородной, тогда как уже упоминалось начальный и текущий базисы близки, квадратичные члены по смещениям исчезают и тензоры Кош-Грина и Альманси совпадают, и мы имеем снова градиент деформации.

Пусть

$$v(l) = e^l x_l, \quad l \in \mathbb{Z}^3 \quad (13)$$

- координаты атомов недеформированной конфигурации кристалла. Сдесь  $\{x_l, l = 1, 2, 3\}$  базис Браве недеформированной решетки.

Координаты атомов в деформированной конфигурации, можно выразить соотношением:

$$v'(l) = u_{*x} v(l), \quad l \in \mathbb{Z}^3, \quad (14)$$

где  $u_{*x}$  локальный градиент деформации.

Тут возможны два частных случая, длина векторов остается неизменной, а углы между векторами меняются, и наоборот.

Рассмотрим преобразование кристалла из кубической симметрии в орторомбическую, т.е. углы между векторами остаются  $90^\circ$ , но длина трех осей изменяется. Начальное и конечное состояния связываются преобразованием  $u_{*x}$  в котором только диагональные компоненты  $u_{*x,11} = \alpha$ ,  $u_{*x,22} = \beta$ ,  $u_{*x,33} = \gamma$  отличны от нуля. С точки зрения упругой энергетики, такое преобразование несет как нелинейность так и невыпуклость (см. мат. опред. выпуклости).

В рамках представления Коши-Борна, плотность энергии  $W_{u_{*x}}$  выражается как энергия на единицу объема однородно деформированной решетки и может быть рассчитана через атомистический потенциал. Следовательно, кристалл рассматривается как нелинейный упругий континуум наделенный плотностью энергии деформации. В частности, первый тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа и Лагранжев тензор касательной жесткости записываются так:

$$P_{ij} = \frac{\partial W}{\partial u_{*x,ij}}, \quad (15)$$

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 W}{\partial u_{*x,ij} \partial u_{*x,kl}}. \quad (16)$$

Таким образом, основным является предположение о том, что локальный градиент  $u_{*x}$  отображения  $u$  является также и континуальным градиентом деформации.

В качестве примера рассмотрим случай на атомарном уровне взаимодействия описываются методом погруженного атома. Тогда, плотность энергии деформации записывается в виде:

$$W = \frac{1}{\Omega} [U(\rho) + \Phi], \quad (17)$$

где  $\Omega$  объем элементарной ячейки. И после утомительных вычислений получим

$$P_{ij} = \frac{1}{\Omega} \sum_l \left\{ \left[ U'(\rho) f'(r(l)) + \frac{1}{2} \Phi'(r(l)) \right] \frac{x_i(l) x_j(l)}{r(l)} \right\} u_{*x,js}^{-1} \quad (18)$$

и

$$C_{ijkl} = \frac{1}{\Omega} \left\{ U''(\rho) \cdot \left[ \sum_l f'(r(l)) \frac{\partial r(l)}{\partial u_{*x,ij}} \right] \left[ \sum_l f'(r(l)) \frac{\partial r(l)}{\partial u_{*x,km}} \right] + \sum_l \left[ \left( U'(\rho) f''(r(l)) + \frac{1}{2} \phi''(r(l)) \right) \frac{\partial r(l)}{\partial u_{*x,ij}} \frac{\partial f(l)}{\partial u_{*x,km}} + \left( U'(\rho) f'(r(l)) + \frac{1}{2} \phi'(r(l)) \right) \frac{\partial^2 r(l)}{\partial u_{*x,ij} \partial u_{*x,km}} \right] \right\} \quad (19)$$

где

$$r(l) = |v(l)|, \quad (20)$$

$$\frac{\partial r(l)}{\partial u_{*x,ij}} = \frac{v_i(l) v_j(l)}{r(l)} u_{*x,js}^{-1}. \quad (21)$$

и

$$\frac{\partial^2 r(l)}{\partial u_{*x,ij} \partial u_{*x,km}} = \frac{[\delta_{ik}(r(l))^2 - v_i(l) v_k(l)] v_s(l) v_d(l)}{(r(l))^3} u_{*x,js}^{-1} u_{*x,md}^{-1}. \quad (22)$$

В приведенных выше формулах, правило Коши-Борна используется для двух целей: использование сугубо атомистических данных для описания поведения материала; постановка краевой задачи для решения аналитическими методами.

**Метод квазиконтинуума.** В непосредственной близости ядра дислокации смещения атомов не описываются малой деформацией. Это следствие нелинейности и невыпуклости суммарной энергии полученной из атомистического анализа. *Метод квазиконтинуума* предоставляет схему вычислений на атомистическом уровне, что требуется вблизи ядра дислокации, без потери в целом удовлетворительного описания дальнедействующего поля дислокаций обеспечиваемого континуальным описанием.

В частности мы рассмотрим квазиконтинуум Тадмора (quasicontinuum theory of Tadmor). Теория строится из стандартного атомистического описания с последующим систематическим избавлением от избыточных степеней свободы. Это достигается сдерживающей возможностью

Рассмотрим моноатомный слой(поверхность). Выполняя над ним градиентную деформацию, как было отмечено, мы изменяем лишь его внутреннюю геометрию, т.е. меняем длины векторов и углы между ними.

После воздействия градиентной (однородной) деформации на идеальную кристаллическую решетку

она остается идеальной.

$$\hat{v} = u_{*x} v \quad (23)$$

Рис.

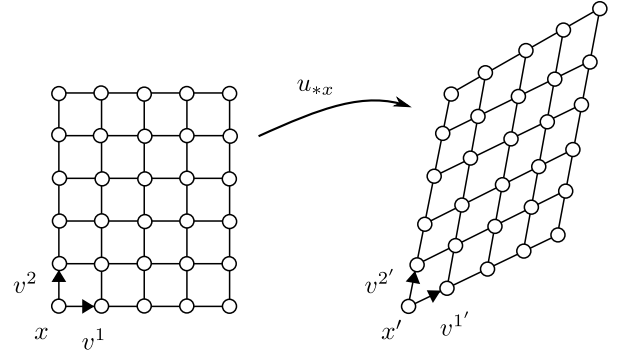


Рис. 1: Воздействие градиентной деформации на идеальную кристаллическую решетку.

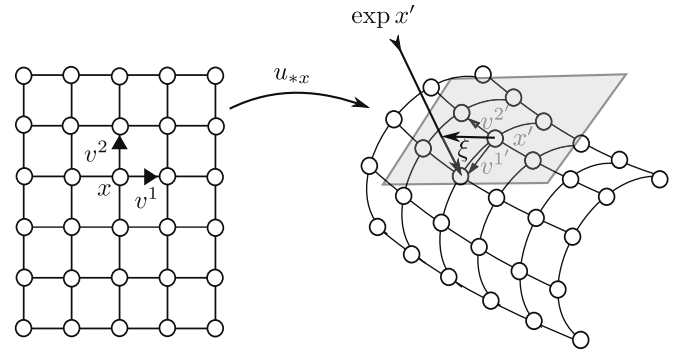


Рис. 2: Изометрия плоскости на часть тора. Меняется лишь способ вложения поверхности в  $R_3$ . Внутренняя геометрия неизменна.

Запишем выражение (23) покомпонентно

$$\hat{v}^i = v^i + \frac{\partial u^i}{\partial x^j} v^j \quad (24)$$

Это линейное преобразование в котором второй член представляет смещение частицы из  $v$  в  $\hat{v}$ .

Рассмотрим потенциальную энергию

С физической точки зрения векторы решетки имеют конечные длины, тем не менее в выражении (23) участвуют инфинитезимальные векторы. Взаимно однозначное соответствие между ними выполняется пока деформация почти однородна на расстоянии векторов физической решетки. Выполняя над ним градиентные преобразования мы имеем лишь его внутреннюю геометрию, т.е. меняем длины и углы.

Если мы хотим рассматривать неоднородную деформацию, то геометрические свойства тел нужно рассматривать глобально. Другими словами, нужно

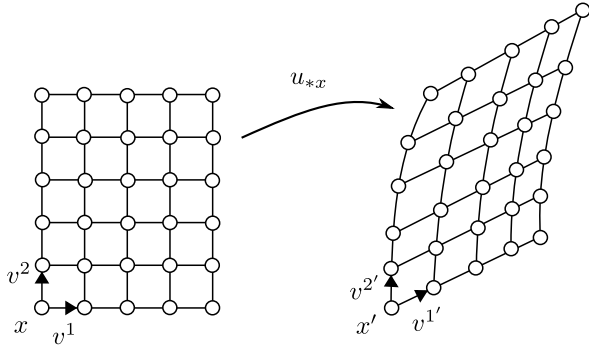


Рис. 3: Неоднородная деформация. Показано изменение внутренней геометрии решетки.

учитывать зависимость геометрических свойств от точки на  $M$ .

Деформированный вектор решетки зависит теперь не только от деформации поверхности(или кривой на поверхности) в данной точке, определяемых с помощью первой квадратичной формы, но также и от деформации в соседних точках, определяемых с помощью второй квадратичной формы.

Можно сказать, что это модель высшего порядка, так как, для поверхностей она включает не только метрику, но также и ее производные (символы кристоффеля зависят от метрики и ее производной).

Модели в которых учитывается влияние соседних точки называются также *нелокальными*.

Мы можем выполнить над нашим слоем изометричное преобразование, изменив лишь способ его погружения в  $\mathbb{R}^3$ . Тогда внутренняя геометрия никак не изменится. Но очевидно, физическое состояние решетки изменится. Это изменение и описывается *геометрией погружения* (на основе второй квадратичной формы). Рис.

В этом случае атомы лежат на изогнутой поверхности, а векторы решетки можно представить как хорды этой поверхности. В этом случае неясно как выполнять однородную деформацию. Тем более в общем случае метрика кривизна не всегда совместимы, т.е. может не существовать поверхности с такими внутренними и внешними свойствами.

Ясно, что отображение касательных пространств не может здесь применяться прямо. Однако можно использовать экспоненциальное отображение для поднятия и опускания векторов в касательное пространство и обратно.

Пусть  $A$  обозначает недеформированный вектор решетки, определенный как хорда между точками  $X$  и  $Y$ , т.е.  $A = \vec{XY}$ . В окрестности неособой точки экспоненциальное отображение обратимо. Предположим, что точка  $Y$  достаточно близка к точке  $X$ , так

что  $\exp_X$  обратимо в точке  $Y$ . Если  $\exp_X^{-1}$  применить в точке  $Y$  то результатом будет вектор  $W \in T_X M$ . Этот вектор как обычно может быть отображен градиентным отображением  $F$  в вектор  $w \in T_x N$ , который затем отображается в точку  $z \in N$  посредством  $\exp_{\Phi(X)=x}$ . После этого деформированный вектор решетки может быть определен как хорда поверхности  $N$  с началом в точке  $x$  и концом в точке  $z$ .

Определим отображение

$$\mathcal{F}_X := \exp_{\Phi(X)} \circ F(X) \circ \exp_X^{-1} \quad (25)$$

из  $M$  в  $N$ , такое что

$$\mathcal{F}_X : M \rightarrow L_X M \rightarrow L_{\Phi(X)M} M \quad \text{которое} \quad (26)$$

$$Y \rightarrow \exp_X^{-1}(Y) \rightarrow w = FW \rightarrow z = \exp_{\Phi(X)}(w).$$

Тогда, данный недеформированный вектор  $A = \vec{XY}$  решетки получается в два этапа. Сначала получается точка  $z = \mathcal{F}_X(Y)$ , затем вектор  $a = \Phi(\vec{X})z$ .

*Определение 0.1.1* Экспоненциальным правилом Коши-Борна называется отображение

$$a = \mathcal{F}_X(A) := \exp_{\Phi(X)} \circ F(X) \circ \exp_X^{-1}(A). \quad (27)$$

Это отображение преобразует векторы недеформированной решетки в векторы деформированной в соответствии геометрий *непрерывно деформированного* тела.

Прямое применение этой модели связано с практическими трудностями, которые возникают при определении геодезических. Однако можно воспользоваться аппроксимацией, редуцирующей модель, все же, к локальной, но практически всегда вычислимой.

*Замечание.* Отображение  $\mathcal{F}_X$ , отображает точки  $M$  в  $N$  внутренне, т.е. может быть выполнено "изнутри" многообразия не прибегая к объемлющему евклидовому пространству. Тем не менее экспоненциальное правило Коши-Борна всегда внешнее. Его внешняя часть обусловлена тем, что векторы - хорды поверхности(или кривой на поверхности).

В этом расширенном кинематическом правиле, градиент деформации выражает изменение внутренней длины между атомами (определяемой как кратчайшая кривая между ними в многообразии), и также внутренних углов, но не обязательно длин и углов в объемлющем евклидовом пространстве, которые и являются объектом исследований в атомистических моделях. В действительности, при рассмотрении поверхностей локальная аппроксимация экспоненциального правила Коши-Борна зависит от второй квадратичной формы, объекта внешней геометрии.

Для наглядности рассмотрим случай цепочки атомов.

Энергия деформации атомистической системы состоит из энергии растяжения векторов решетки  $V_x(a_k)$  и энергии отклонения векторов от первоначального положения  $V_\theta$ :

$$U_{chain}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}^n) = \sum_{k=1}^{n_B} V_s(a_k) + \sum_{i=1}^{m_B} V_\theta(\Theta_i), \quad (28)$$

где  $a_k$  обозначает межатомное расстояние,  $\Theta_i$  обозначает угол отклонения связи. Такой вид понетенциала выбран для простоты, но эта модель может быть обобщена для более реалистичных понетциалов. Экспоненциально правило Коши-Борна обеспечивает связь между континуальной деформацией и дискретной структурой кристаллической решетки, и совместима с любым выбором межатомных потенциалов. Так как начальное состояние выбрано плоским, экспоненциальное правило Коши-Борна упрощается до

$$\mathbf{a} = \exp_{\Phi(X)} \circ \mathbf{F}(X) \mathbf{A}.$$

Деформационное отображение описывается его евклидовыми компонентами

$$[\mathbf{F}] = [\Phi^1_{,X}, \Phi_{,X}^2]$$

где  $(\cdot)_{,X}$  обозначает дифференцирование по  $X$ .

Тензор деформации Грина  $C$  это скаляр, чей корень квадратный это растяжение  $\Lambda$  деформированной цепочки.

$$\Lambda = \sqrt{C} = \sqrt{(\Phi^1_{,X})^2 + (\Phi^2_{,X})^2}$$

Кривизна  $k$  деформированной цепочки может быть записана как:

$$k = \frac{1}{\Lambda^3} (\Phi^2_{,X} \Phi^1_{,XX} - \Phi^1_{,X} \Phi^2_{,XX}), \quad (29)$$

И геометрически может быть представлена как величина обратная радиусу кривизны.

Как уже упоминалось, нахождение геодезических связано с интегрированием нелинейной системы уравнений, что связано с математическими трудностями, поэтому экспоненциальное правило Коши-Борна может быть аппроксимировано. В этой аппроксимации энергия деформации зависит от локальной деформации кривой на которой лежит цепочка.

Сопоставим каждой точке кривой окружность с радиусом  $r = \frac{1}{k}$ . Таким образом, окружность локально представляет собой часть рассматриваемой кривой. Экспоненциально отображение окружности определено. Геодезическая окружности, очевидно, суть сама окружность.

Первая часть экспоненциального правила Коши-Борна отображает вектор решетки  $\mathbf{A}$  длины  $A$  в вектор касательный к кривой, евклидовы компоненты которого  $[(w)] = A[(F)]$  и является уже рассмотренной

ранее градиентной деформацией. Следовательно, его длина это

$$w = \sqrt{C} A \quad (30)$$

Экспоненциально отображение окружности показано на Рис.

Рис.

Длина касательного вектора  $\mathbf{w}$  переносится на геодезическую отображением  $\exp_{\Phi(X)} \mathbf{w}$ . И мы имеем все точки для построения горды деформированной кривой в рассматриваемой точке. Таким образом длина дуги окружности определяемая вектором  $\mathbf{a}$  равна  $w$ .

Пусть  $\theta$  обозначает угол образованный двумя векторами деформированной решетки. Рассмотрим треугольник  $aO\Phi(X)$ . Это равнобедренный треугольник и его равные углы равны  $\theta/2$ . Существует третий угол, образованный дугой окружности длины  $w$ , он равен  $\gamma = \pi$ . Учитывая что  $r = 1/k$ :

$$w = \gamma r = (\pi - \theta)/k. \quad (31)$$

Следовательно длина  $\mathbf{a}$ :

$$a = \|\mathbf{a}\| = 2r \sin \frac{\gamma}{2}, \quad (32)$$

следовательно

$$a = \frac{2}{k} \sin \frac{k w}{2}, \quad \theta = \pi - k w. \quad (33)$$

Заметим, что величины  $a$  и  $\theta$ , являющиеся аргументами (28), выражены в терминах континуальной деформации. Таким образом, мы можем рассматривать  $a$  и  $\theta$ , как величины определяющие величину деформации, выраженные в терминах  $C$  и  $k$ , и эти величины будут использоваться для построения моделей сред с учетом микроструктуры.

В случае цепочки атомов ячейка характеризуется одним вектором  $\mathbf{a}$ , и одним углом  $\theta$ . Энергия этой деформированной ячейки отождествляется с энергией деформации континуума умноженной на недеформированный объем этой ячейки  $A \cdot W(\Phi) = V_s(a) + V_\theta(\theta)$ .

Континуальная энергия деформации зависит от деформационного отображения  $\Phi$  через величины  $C$  и  $k$  характеризующие деформацию локально.

Следовательно упругий потенциал цепочки, лежащей на непрерывной кривой может быть записан в виде:

$$W(C, k) = \frac{1}{A} \left[ V_x \left( \frac{2}{k} \sin \frac{k \sqrt{C} A}{2} \right) + V_\theta \left( \pi - k \sqrt{C} A \right) \right] \quad (34)$$

Общая энергия деформации континуальной системы аппроксимирующая атомистическую энергию, может быть записана в виде

$$U_{rope}(\Phi) = \int_{\Omega_0} W(C, k) d\Omega_0. \quad (35)$$

Следует заметить, что при изометричных преобразованиях атомной цепочки, согласно правилу Коши-Борна энергия цепочки останется неизменной, что очевидно неверно (если только преобразования не являются поворотами, или сдвигами цепочки как целого). В свою очередь экспоненциальное правило Коши-Борна опишет изменение энергии в соответствии в выбранной моделью межатомных взаимодействий.

Рассмотрим теперь применение экспоненциального правила Коши-Борна к двумерным решеткам. Используем ЕПКБ аппроксимацию в главных направлениях. Будем отдельно рассматривать каждое главное направление  $V_1$  и  $V_2$  тензора кривизны, и две поправки для касательных деформированных векторов решетки  $w$  полученных экспоненциальным отображением. Для локальной аппроксимации выберем два цилиндра, радиусов  $\frac{1}{k_1}$  и  $\frac{1}{k_2}$

Пусть имеем изначально плоский кристалл, экспоненциальное правило Коши-Борна урочается до

$$a = \exp_{\Phi(X)} \circ F(X)A, \quad (36)$$

Таки образом  $M$  и  $L_X M_0$  отождествляются. Первая часть ЭПКБ является градиентным преобразованием

$$w = FA$$

*Замечание.* Касательный вектор  $w$  является продолжением вектора  $A$ .

Задача на собственные значения определяет главные направления выраженные в недеформированной конфигурации, и главные кривизны поверхности  $N$ .

На рисунке видно, что только продолжения  $V_1$  и  $V_2$ , которые обозначены  $v_1$  и  $v_2$  соответственно являются ортогональными в евклидовом смысле. На этом рисунке также показан общий недеформированный вектор решетки  $A$ . Заметим, что  $v_1$ ,  $v_2$  и  $w$  векторы касательные к поверхности.

Рассмотрим вспомогательную евклидову координатную систему в  $\mathbb{R}^3$ ,  $\{\tilde{x}^1, \tilde{x}^2, \tilde{x}^3\}$  с центром в точке  $x = \Phi(X)$ . Пусть ее оси параллельны к  $v_1, v_2$  и  $v_1 \times v_2$ . Ассоциированный базис обозначим  $\mathcal{B} = \{v_1, v_2, v_1 \times v_2\}$ . Заметим, что  $\mathcal{B}$  и  $\tilde{\mathcal{B}}$  повернуты друг относительно друга только как целое.

Рассмотрим, также ограничение координатной системы на  $L_X M$ ,  $\{\tilde{x}^1, \tilde{x}^2\}$  с базисом  $\tilde{\mathcal{B}}_{L_X M} = \{v_1, v_2\}$ .

Определим угол  $\beta$  между  $v_1$  и  $w$  (лежат в  $L_{\Phi(X)} M$ ).

Вспомним, что главные направления нормированы на  $C$ . Тогда для угла  $\beta$  можно записать:

$$\cos \beta = \frac{V_1 \cdot C^b \cdot A}{\sqrt{A \cdot C^b \cdot A}}, \quad \sin \beta = \frac{V_2 \cdot C^b \cdot A}{\sqrt{A \cdot C^b \cdot A}}. \quad (37)$$

Длина касательного деформированного вектора  $w$  может быть получена как

$$\|w\| = \sqrt{A \cdot C^b \cdot A} = \sqrt{C_{AB} A^A A^B}. \quad (38)$$

Компоненты  $w$  в базисе  $\tilde{\mathcal{B}}_{L_X M}$  могут быть вычислены как проекции  $w$  на базисные векторы (посредством скалярного произведения) следующим образом:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} w^1 \\ w^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle w | v_1 \rangle \\ \langle w | v_2 \rangle \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} V_1 \cdot C^b \cdot A \\ V_2 \cdot C^b \cdot A \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} C_{AB} A^A (V_1)^B \\ C_{AB} A^A (V_2)^B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (39)$$

На рисунке Рис. представлено экспоненциальное правило Коши-Борна для поверхности с отрицательной Гауссовой кривизной.

Рис.

Рассмотрим вспомогательный цилиндр  $C_\infty$  радиуса  $\frac{1}{k_1}$  проходящий через точку  $x = \Phi(X)$  с касательным пространством  $L_X M$ . Его ось перпендикулярна вектору  $v_1$ . Используя определение координатной системы данное выше, цилиндр  $C_1$  может быть изометрически отображен из  $L_X M$  в  $\mathbb{R}^3$  по формуле:

$$\begin{aligned} C_\infty : f_1(\tilde{x}^1, \tilde{x}^2) &= \\ \left\{ \frac{1}{k_1} \sin k_1 \tilde{x}^1; \tilde{x}^2; \frac{1}{k_1} (1 - \cos k_1^1) \right\} \end{aligned} \quad (40)$$

Геодезические цилиндра проходящие через точку  $x$  и касательные к  $w$  дается формулой

$$\begin{aligned} c(s) &= \\ \left\{ \frac{1}{k_1} \sin[k_1(\cos \beta)s]; (\sin \beta)s; \frac{1}{k_1} (1 - \cos[k_1(\beta)]) \right\} \end{aligned} \quad (41)$$

где  $s$  параметр длины дуги.

Полагая  $s = \|w\|$  образ вектора  $w$  при экспоненциальном отображении выразится в виде:

$$[\exp_{x, C_1} w] = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{k_1} \sin k_1 w^1 \\ w^2 \\ \frac{1}{k_1} (1 - \cos k_1 w^1) \end{pmatrix} \right\}. \quad (42)$$

Окончательно, поправка в направлении первой главной кривизны, это разница между (42) и вектором  $w$ :

$$\tilde{B} = \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{k_1} \sin k_1 w^2 - w^1 \\ 0 \\ \frac{1}{k_1} (1 - \cos k_1 w^1) \end{pmatrix} \right\} \quad (43)$$

Для рассмотрения второй главной кривизны выберем другой вспомогательный цилиндр с радиусом  $1/k_2$ , во вспомогательной координатной системе

$$C_2 : f_2(\tilde{x}^1, \tilde{x}^2) = \left( \tilde{x}^1; \frac{1}{k_2} \sin k_2 \tilde{x}^2; \frac{1}{k_2} (1 - \cos k_2 \tilde{x}^2) \right) \quad (44)$$

и аналогично

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{k_2} \sin k_2 w^2 - w^2 \\ \frac{1}{k_2} (1 - \cos k_2 w^2) \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Экспоненциальное правило Коши-Борна  $a = \exp_{\Phi(X)} \circ F A$  тогда выразится в виде отображения

$$a = F A + \Delta w_1 + \Delta w_2 \quad (46)$$

Вводя обозначение  $\mathcal{L}(x) = \sin x/x$ , выражение для деформированного вектора решетки в ортонормальном базисе выразится в виде :

$$\tilde{B} = \begin{Bmatrix} a^1 \\ a^2 \\ a_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} w^1 \mathcal{L}(k_1 w^1) \\ w^2 \mathcal{L}(k_2 w^2) \\ \frac{k_1 (w^1)^2}{2} \mathcal{L}^2(k_1 w^1/2) + \frac{k_2 (w^2)^2}{2} \mathcal{L}^2(k_2 w^2/2) \end{Bmatrix}. \quad (47)$$

Учитывая что  $k_{1,2}$  и  $V_{1,2}$  получены в ходе решения задачи на собственные значения замечаем, что  $[a]_{\tilde{B}}$  зависит только от недеформированного вектора решетки  $A$ , тензора деформации Грина  $C$ , и ограничения тензора кривизны.

Длина вектора решетки может быть определена просто как

$$a = ||a|| = \sqrt{a^c a^c}$$

Угол между двумя деформированными векторами

$$\theta = \arccos \frac{\langle a|b \rangle}{ab} = \arccos \frac{a^c b^c}{ab}$$

Таким образом мы получаем величины характеризующие деформацию в виде зависимостей

$$a = f(C, K; A), \quad \theta = g(C, K; A, B) \quad (48)$$

Кривизну поверхности  $M$  мы при  $k = 2$  можем себе ясно представить, так как мы живем в объемлющем пространстве  $R^3$ . Однако кривизна самого пространства  $R^3$  уже не так очевидна. Для выяснения смысла этих понятий, а также места их в теории твердого тела нужно рассмотреть еще некоторые дополнительные геометрические структуры. Эти построения позволят нам по иному рассматривать дислокации в кристаллах.