

УДК 539.213

© 1991

ТЕОРИЯ ВЯЗКОУПРУГОГО ПЕРЕХОДА БЕССТРУКТУРНОЙ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ

В. Г. Барьяхтар, А. И. Олемской

Изложена феноменологическая теория, в рамках которой на основе постулированного поведения модуля сдвига описывается эволюция поперечной составляющей вектора смещения и сдвиговых компонент тензоров упругих напряжений и деформации в процессе вязкоупругого превращения.

Рассмотрим конденсированную среду, не обладающую каким-либо пространственным порядком и состоящую из неделимых структурных единиц типа атомов. Пусть, кроме того, она не обладает никакой структурой макроскопического масштаба (например, дисклинационной). По мере изменения внешних условий такая среда может претерпевать переход из низкоэнергетического упругого состояния, которое в изотропном приближении характеризуется ненулевым значением модуля сдвига μ , в высокоэнергетическое пластичное (текущее) состояние, где низкочастотное значение $\mu=0$, а вязкость имеет конечное значение $\eta < \infty$, спадающее по мере возбуждения системы. Примером такого рода превращения служит стеклование жидкости.

Хотя теория стеклования привлекает сейчас повышенное внимание [1, 2] картина превращения не выяснена даже в принципе [3, 4]. Ограничимся рассмотрением более простого явления, чем стеклование, а именно термодинамической картины вязкоупругого перехода. Наиболее простым образом он реализуется при постепенном нагружении идеального кристалла, когда вслед за гуковским (упругим) участком, где скалывающие компоненты напряжений τ и деформации ϵ связаны линейным соотношением $\tau = \mu\epsilon$, наблюдается излом, после которого (в рамках идеализированной модели Генки) следует пологий участок пластического течения, где $\tau(\epsilon) = \text{const} \leq \sigma$. В упругой области реализуется поперечная фоновая ветвь возбуждений с законом дисперсии $\omega = \omega(\mathbf{k}) - i/\tau(\mathbf{k})$, где время релаксации $\tau(\mathbf{k})$ настолько велико, что при всех существенных значениях волнового числа \mathbf{k} реактивная составляющая $\omega(\mathbf{k})$ намного превосходит диссипативную $\tau^{-1}(\mathbf{k})$. В пластической области данная реактивная мода переходит в диссипативную гидродинамическую моду течения с законом дисперсии $\omega = -i\nu\mathbf{k}^2$, где $\nu = \eta/\rho$ — кинематическая вязкость [5-7]. Имеется, кроме того, диффузионная мода $\omega = -iD\mathbf{k}^2$.

Несмотря на предпринятые попытки описания самого вязкоупругого перехода [8-10] и учета его влияния на процесс образования новой фазы [11, 12], в настоящее время последовательная теория, позволяющая представить единым образом картину вязкоупругого перехода, отсутствует. Предлагаемая работа предпринята с целью восполнения этого пробела.

Для построения непротиворечивой схемы следует прежде всего выяснить физический смысл «параметра порядка», представляющего данный переход как фазовое (точнее, кинетическое [13]) превращение. Если в качестве «неупорядоченной» фазы принимается пластическое состояние, то роль параметра порядка играет сдвиговая компонента ϵ тензора упру-

гой деформации, которая отлична от нуля только в упругом состоянии. Характерно, что при этом величина ε играет самостоятельную роль и не сводится к смещению \mathbf{u} (в частности, нельзя считать ε компонентой тензора $(1/2)(\nabla\mathbf{u} + \mathbf{u}\nabla)$). Если параметр порядка сводится к вектору смещения \mathbf{u} , то соответствующая гидродинамическая мода имеет диссипативный характер в пластической области и реактивный в упругой.

Очевидно, основные особенности вязкоупругого перехода могут быть представлены использованием любого из указанных параметров ε , \mathbf{u} , которые в рамках полевой идеологии являются составляющими напряженности и потенциала соответственно [9]. Рассмотрим сначала схему, основанную на исследовании картины деформации, а затем смещения. Кроме того, будем использовать как термодинамическую теорию Ландау [14], так и корреляционную теорию Мори [15].

Разложение свободной энергии F по сдвиговой компоненте ε тензора упругой деформации имеет вид (см. [14])

$$F = \frac{1}{2} \mu(\mathbf{k}) \varepsilon^2 + \frac{A}{4} \varepsilon^4, \quad (1)$$

где $\mu(\mathbf{k})$ — диспергирующий модуль сдвига, A — положительная константа ангармонизма. С точностью до первых не исчезающих степеней волнового вектора можно записать

$$\mu(\mathbf{k}) = \mu + \gamma k^2, \quad (2)$$

где модуль сдвига $\mu = 0$ в пластичном состоянии и $\mu > 0$ в упругом. Очевидно, в отличие от члена μ , отвечающего колебательному движению, дисперсионное слагаемое обусловлено поступательным перемещением атомов в результате диффузии.

Диссипативная функция, связанная с вязким течением среды, записывается в виде

$$Q = (\eta/2) \dot{\varepsilon}^2, \quad (3)$$

где η — сдвиговая вязкость; точка означает дифференцирование по времени, зависимость от которого далее полагается в гармоническом виде с частотой ω .

Исходя из (1)–(3), стандартным образом [14] находим уравнение для определения равновесного значения деформации

$$(\mu + \gamma k^2 - i\eta\omega) \varepsilon_0 + A\varepsilon_0^3 = 0. \quad (4)$$

При наличии внешнего поля τ оно добавляется в правую часть (4) и выражение для упругой податливости $S = d\varepsilon/d\tau$ принимает вид

$$S^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = (\mu + \gamma k^2 - i\eta\omega) + 3A\varepsilon_0^2. \quad (5)$$

Подставляя равновесное значение ε_0 из (4) в (5), получаем выражение для диспергирующего модуля сдвига $\mu(\omega, \mathbf{k}) = (2S(\omega, \mathbf{k}))^{-1}$

$$\mu(\omega, \mathbf{k}) = \mu + \gamma k^2 - i\eta\omega. \quad (6)$$

Условие обращения в нуль полученного модуля определяет закон дисперсии $\omega = -i/\tau(\mathbf{k})$ диссипативной моды со временем релаксации

$$\tau(\mathbf{k}) = \frac{\eta}{\mu + \gamma k^2}. \quad (7)$$

При значительных величинах μ в упругой области дисперсией можно пренебречь и (7) переходит в обычное выражение $\tau = \eta/\mu$ для времени релаксации вязкоупругой среды [16]. В пластичной области, где $\mu = 0$, получаем выражение $\tau(\mathbf{k}) = (\eta/\gamma)k^{-2}$, наличие особенности k^{-2} в котором указывает на гидродинамическую моду диффузии.

Для выяснения физического смысла коэффициента γ следует учесть, что выражение (7) при $\mu=0$ должно давать коэффициент диффузии $D \sim \sim l^2/\tau$ ($k \sim l^{-1}$) на расстояние l . Подставляя сюда, согласно (7), τ ($k \sim l^{-1}$) $\sim (\eta/\gamma)l^2$, независимо от масштаба l получаем $D \sim (\gamma/\eta)$.

С другой стороны, поскольку процесс диффузии переходит в пластическое течение на межатомных расстояниях a , в соотношении Эйнштейна—Смолуховского $D \sim T/\eta l$, где T — температура в энергетических единицах, следует положить $l \sim a$. Сравнивая два полученных выражения для коэффициента диффузии, находим $\gamma \sim T/a$. Далее, учитывая, что среднеквадратичная скорость теплового движения $\bar{v}^2 \sim T/m$, где $m = \rho a^3$ — масса атома, ρ — плотность, получаем окончательную оценку

$$\gamma = T/a \sim \rho \overline{(v/a)^2}. \quad (8)$$

С учетом этого обстоятельства из (2) находим выражение

$$c^2(\mathbf{k}) = c^2 + a\bar{v}^2(a\mathbf{k})^2, \quad a \sim 1 \quad (9)$$

для диспергирующей скорости поперечных звуковых волн. Видно, что ее перенормировка обуславливается тепловым движением атомов, которое и является причиной диффузии. Во избежание недоразумений отметим, что найденная в (9) (равно как и ниже в (10)) дисперсия ни в коем случае не носит тривиальный характер, связанный с дискретностью решетки [17]. Это обуславливается тем, что рассматривается область $k \ll a^{-1}$, значительно удаленная от границы зоны Бриллюэна.

Для исследования фононного спектра вязкоупругой среды следует воспользоваться разложением типа (1) по смещениям u . Это эквивалентно тому, что свободная энергия (1) дополняется кинетической энергией $(\rho/2)\dot{u}^2 = (\rho/2)(\dot{\xi}/k)^2$, а модуль (6) — слагаемым $-\rho(\omega/k)^2$. В результате закон дисперсии принимает вид

$$\omega = -(i/2)v\mathbf{k}^2 \pm ck\sqrt{1 - (\lambda^2/4 - \xi^2)\mathbf{k}^2}, \quad v = \eta/\rho, \quad (10)$$

где введены два масштаба

$$\xi = (\gamma/\mu)^{1/2}, \quad \lambda = v/c. \quad (11)$$

Первый из них характеризует процесс диффузии и, согласно (8), оценивается значением $\xi \sim (T/\mu a^3)^{1/2} a$, которое при типичных значениях величин почти на порядок меньше межатомного расстояния. Что касается масштаба пластичности λ , то в силу оценки $v_{\min} \sim ca$ для наименьшего значения кинематической вязкости, его величина ограничена снизу значением $\lambda \sim a$. В действительности всегда $\lambda \gg a$: так, в точке стеклования, фиксируемой значением $\eta \sim 10^{13}$ Пуаз [2], при $\rho \sim 10$ г/см³, $c \sim \sim 10^5$ см/с имеем $\lambda \sim 10^7$ см. Во всяком случае, как правило, масштабы пластичности и диффузии находятся в соотношении $\lambda \gg \xi$.

Гидродинамическая мода (10) носит реактивный характер в предельно длинноволновой области $k \ll \lambda^{-1}$, где процессы вязкого течения не сказываются и реализуется обычный закон дисперсии фононов $\omega = \pm ck$ (диффузионными процессами пренебрегаем, поскольку $\xi < a$ и они могут проявляться лишь на границе зоны Бриллюэна). В промежуточной области $2/\lambda < k \ll a^{-1}$ реализуется диссипативная мода течения среды $\omega = -i v \mathbf{k}^2$. Характерно, что процессы диффузии приводят к положительной дисперсии скорости звука

$$c(\mathbf{k}) = c\sqrt{1 - (\lambda^2/4 - \xi^2)\mathbf{k}^2}, \quad (12)$$

тогда как течение среды ее уменьшает. Если в согласии с произведенными выше оценками величин ξ , λ влиянием диффузии можно, как правило, пренебречь, то пластичность может привести даже к обращению в нуль величины $c(\mathbf{k})$ (а следовательно, и диспергирующего модуля сдвига $\mu(\mathbf{k}) = \rho c^2(\mathbf{k})$) в точке $k_0 = 2/\lambda$.

Найденные выражения (7), (10) не исчерпывают всей информации о гидродинамических модах вязкоупругой среды. Далее удобно воспользоваться техникой Мори, представляющей собой коррелятор плотностей в виде цепной дроби [15]

$$\varphi(\omega) = -\frac{g}{\omega + K(\omega)}, \quad (13)$$

$$K(\omega) = -\frac{\omega_0^2}{\omega + M(\omega)}, \quad \dots \quad (14)$$

Здесь для краткости опущена зависимость от волнового вектора; g , ω_0 — сжимаемость и собственная частота, связанные соотношением $g\omega_0^2=1$. Удобство представления Мори обусловлено поэтапным выражением низших корреляторов через высшие. Так, коррелятор плотностей $\varphi(\omega)$ выражается в виде дроби (13) через коррелятор потоков $K(\omega)$, определяющий диспергирующий коэффициент диффузии $D(\omega) = -iK(\omega)/k^2$. В свою очередь $K(\omega)$ представляется равенством (14) через функцию памяти

$M(\omega)$, являющуюся коррелятором полей напряжений. Принимая предположение о каком-либо из высших корреляторов, обрываем бесконечную дробь (13), (14), что и позволяет найти закон дисперсии из условия расходимости низшего кор-

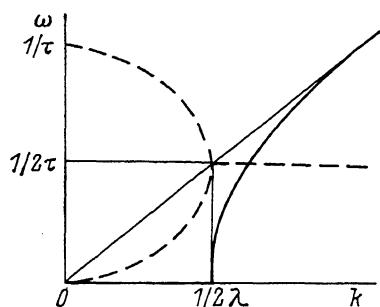


Рис. 1. Действительная (сплошная линия) и мнимая (штриховая линия) составляющие закона дисперсии сдвиговых напряжений вязкоупругой среды.

релятора. При этом оказывается, что рассмотрение зависимости $\varphi(\omega)$ отвечает использованию разложения Ландау по смещениям, а особенности зависимости $K(\omega)$ дают диссипативный закон дисперсии, получаемый при разложении по деформации.

Для определения фононного спектра в диссипирующей среде примем простейшую аппроксимацию $M(\omega) = i/\tau$, где, согласно (7), время релаксации в упругой среде имеет в гидродинамическом пределе $k \rightarrow 0$ значение $\tau = \eta/\mu$. Соответственно собственная частота $\omega_0 = ck$, где $c^2 = \mu/\rho$. В результате закон дисперсии, отвечающий расходимости коррелятора $\varphi(\omega)$, имеет вид [10]

$$\omega = -i/2\tau \pm ck\sqrt{1 - (2\lambda k)^2}. \quad (15)$$

Полученная зависимость обладает в отличие от (10) замечательной особенностью (рис. 1) — она носит чисто диссипативный характер в длинноволновой области $k < (2\lambda)^{-1}$ и выходит на обычную асимптотику $\omega = \pm ck$ в пределе $k \gg (2\lambda)^{-1}$. Граничное значение $k_g = 1/2\lambda$ волнового числа, отделяющее длинноволновую диссипативную область $k < k_g$ от промежуточной реактивной $k_g \ll k \ll a^{-1}$, задает в прямом пространстве масштаб $\Lambda \equiv k_g^{-1} = 2\lambda$, разделяющий упругую и пластическую зоны. Физически это отвечает релаксации сдвиговых полей напряжений на расстояниях, превышающих длину Λ . Очевидно, именно эта длина должна подразумеваться под обрезающим параметром в формулах типа энергии дислокации $E = (\mu a^2/4\pi) \ln(\Lambda/a)$ [17]. Следует отметить, что, согласно (11), эта длина существенно зависит (через сдвиговую вязкость $\eta = \nu\rho$) от температуры. Поэтому в структурно-неоднородной среде, характеризуемой макроскопическим масштабом $L \gg a$, с изменением температуры происходит вязкоупругий (или по-другому вязкохрупкий [8]) переход, точка которого фиксируется условием $\Lambda(T) = L$.

Указанная выше релаксация упругого поля на конечных длинах Λ носит нетривиальный смысл, поскольку она не может быть сведена к обыч-

ной экранировке источника поля (типа дебаевской в электростатике). Действительно, поскольку рассматривается бесструктурная среда, то отсутствуют сами носители экранирующего заряда (в чисто упругой среде, впрочем, мультиполем низшего порядка является диполь, а не монополь и возможна только дипольная, недебаевская экранировка [9]). Таким образом, релаксация упругого поля связана не с поведением одиночных структурных единиц, а с коллективной гидродинамической модой пластического течения. Данное обстоятельство наглядно продемонстрировано на рис. 2, где указан вид координатной зависимости $U(r)$ потенциальной энергии атома (не путать с потенциалом межатомного взаимодействия). Здесь последовательно показаны элементарные акты движения атома при колебаниях, диффузии и пластической деформации. Если два первых процесса связаны с движением в неизменном потенциальном рельефе $U(r)$, то элементарный акт пластического течения обеспечивается флуктуационным уменьшением барьера, разделяющего равновесные положения атомов. Такое предположение подтверждается отмеченным выше

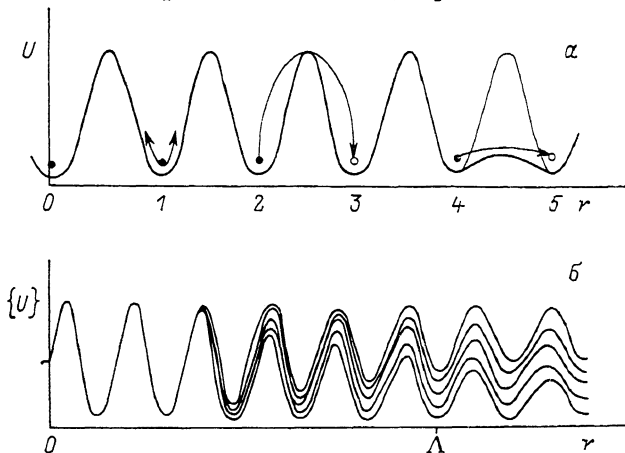


Рис. 2. Вид координатной зависимости потенциальной энергии атомов.

а — иллюстрация элементарных актов колебаний (атом 1), диффузии (атом 2) и пластического течения (атом 4); б — ансамбль потенциальных рельефов, реализуемый на макроскопическом отрезке времени.

обстоятельством противоположного влияния диффузии и пластического течения на ангармонизм потенциального рельефа: согласно (12), диффузия увеличивает, а пластичность уменьшает его кривизну.

Таким образом, учет эффектов пластического течения требует в согласии с эргодической гипотезой перехода от быстро флуктуирующего потенциального рельефа $U_i(r)$ к ансамблю рельефов $\{U(r)\}$ [9]. Если в идеально упругой среде ($\eta = \infty$) весь ансамбль сводится к однозначно определенной зависимости $U(r)$, то с уменьшением сдвиговой вязкости $\eta < \infty$ ширина ансамбля возрастает. Разумеется, в любой заданной точке r потенциальную энергию можно фиксировать заданным значением U . Однако в упруговязкой среде зависимость $\{U(r)\}$ будет носить однозначный характер лишь в области «ближнего порядка» размером Λ , а вне ее размытие становится существенным (рис. 2, б). Именно таким образом — с нарастанием расстояния $r > \Lambda$ — на потенциальном рельефе проявляются коллективные эффекты пластического течения.

Проведенное рассмотрение показывает, что поведение вязкоупругой среды характеризуется наличием трех гидродинамических мод, описывающих эволюцию поперечной составляющей вектора смещения и сдвиговых компонент тензоров упругой деформации и напряжения. Закон дисперсии (10) первой из них имеет в упругой области длинноволновую реактивную составляющую в обычном линейном виде $\omega = \pm ck$. В пластической области ($\mu = 0$) соотношение (10) дает обычную диссипативную моду $\omega =$

$= -i\nu\mathbf{k}^2$ течения среды. Такой же вид $\omega = -iD\mathbf{k}^2$, $D = \gamma/\eta$ имеет здесь и диффузионная мода, обуславливающая релаксацию упругой деформации ε . Микроскопически их различие выражается в том, что элементарные акты диффузии обеспечиваются термоактивационными скачками через неизменный потенциальный барьер, разделяющий равновесные положения атомов, тогда как при пластическом течении происходит перестройка самого потенциального рельефа. В идеальном пластической среде, где $\mu = 0$ и барьеры практически отсутствуют, перемещение атомов происходит безактивационно и диффузия сводится к пластическому течению. Именно в силу этого обстоятельства деформация ε сводится к компоненте векторного произведения $[\mathbf{k}\mathbf{u}]$ и выполняется соотношение Эйнштейна—Смолуховского $D \equiv \gamma/\eta \sim T/\eta a$.

Закон дисперсии (15) описывает моду изменения упругих напряжений в вязкоупругой среде. В длинноволновой области $2\lambda k < 1$ он отвечает их релаксации со временем $\tau = \eta/\mu$, а в коротковолновом пределе $\lambda k \gg 1$ обычным акустическим колебаниям.

Список литературы

- [1] Гетзе В. Фазовые переходы жидкость—стекло. М.: Наука, 1991. 237 с.
- [2] Jäckle J. // Rep. Progr. Phys. 1986. V. 49. N 2. P. 171—231.
- [3] Jäckle J. // J. Phys.: Cond. Matter. 1989. V. 1. N 2. P. 267—276.
- [4] Stein D. L., Palmer R. G. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 16. P. 12035—12038.
- [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1988. 733 с.
- [6] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Ч. 2. М.: Наука, 1978. 448 с.
- [7] Форстер Д. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980. 288 с.
- [8] Трефилов В. И., Мильман Ю. В., Казо И. Ф. // ДАН СССР. 1984. Т. 286. № 6. С. 1399—1401.
- [9] Олемской А. И., Петрунин В. А. // Изв. вузов, физика. 1987. № 1. С. 82—121.
- [10] Олемской А. И., Кацнельсон А. А., Умрихин В. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 2. С. 318—321.
- [11] Барьяхтар В. Г., Ехилевский С. Г., Токий В. В., Яблонский Д. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 8. С. 2329—2337.
- [12] Ройтбурд А. Л., Темкин Д. Е. // ДАН СССР. 1986. Т. 288. № 1. С. 111—115.
- [13] Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980. 404 с.
- [14] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [15] Mori H. // Progr. Theor. Phys. 1965. V. 33. N 3. P. 423—455.
- [16] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 246 с.
- [17] Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка. 1981. 328 с.

Институт металлофизики АН Украины
Сумы

Поступило в Редакцию
18 апреля 1991 г.