01;05

Термомеханическая модель кристаллических упругопластических сред

© *В.Л. Попов*

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
University of Paderborn, Department of Theoretical Physics, Germany

Поступило в Редакцию 16 июня 1999 г.

Предложена модель твердого тела, по своей математической форме аналогичная теории Гинзбурга–Ландау для сверхпроводников. Обсуждается эффект потери сдвиговой устойчивости кристаллического тела в поле сдвиговых напряжений, вводится классификация кристаллических тел на кристаллические тела первого и второго рода в зависимости от характера проникновения дефектов в объем материала.

Существенный недостаток классической теории дислокаций состоит в том, что она исходит из рассмотрения идеального кристалла, который считается абсолютно устойчивым. Насколько нам известно, вопросы термодинамической устойчивости в связи с механическими воздействиями — неопосредованным повышением температуры (например, плавления в результате накопления дислокаций) — до сих пор не рассматривались в литературе: в классической теории дислокаций тело может "выдержать" любую плотность дефектов и любые напряжения, не превышающие предела текучести. Даже достижение предела текучести не рассматривается в механике сплошных сред как потеря термодинамической устойчивости тела и переход в другую фазу. Между тем, хорошо известно, что механические воздействия могут приводить к потере термодинамической устойчивости, что в рамках термодинамики твердого тела находит свое выражение в диаграммах состояния в пространстве "температура (термодинамическая переменная) — давление (механическая переменная)".

При повышении температуры устойчивость тела по отношению к сдвиговым напряжениям может происходить не только в результате преодоления предела текучести, но и путем плавления. Оба эти типа воздействия — механическое и тепловое — традиционно рассматриваются независимо друг от друга соответственно в рамках термодинамики и механики твердого тела. Тот факт, что такое рассмотрение может при определенных условиях оказаться неадекватным, становится особенно очевидным при температуре плавления: бесконечно малое изменение температуры приводит при этом к потере механической устойчивости тела (модуль сдвига обращается в нуль), а бесконечно малое изменение давления или сдвигового напряжения приводит к потере термодинамической устойчивости тела (плавлению). Механические свойства кристаллических твердых тел не могут поэтому, вообще говоря, рассматриваться независимо от их термодинамической устойчивости. В настоящей работе предложена модель кристаллического твердого тела, которая описывает на единой основе как механические, так и термодинамические свойства твердых тел. По своей математической форме предлагаемая модель аналогична теории Гинзбурга–Ландау [1] для сверхпроводников. Некоторые моменты, аналогичные развиваемой модели, можно найти в работе [2].

Исходным пунктом термодинамической теории фазовых переходов Ландау является выбор параметра порядка η — величины, которая характеризует качественное изменение состояния тела в точке фазового перехода. В случае плавления качественное изменение может быть охарактеризовано модулем сдвига μ, который отличен от нуля в твердой и равен нулю в жидкой фазе. Для того чтобы проиллюстрировать основные идеи термомеханической модели, начнем рассмотрение с перехода кристалл–жидкий кристалл. Этот переход в общем случае не связан с изменением точечной симметрии тела и поэтому в принципе может происходить как переход второго рода [3]. Хотя кристаллические тела обычно при повышении температуры переходят в изотропную жидкость, в [9] было показано, что существует теоретическая возможность перехода в промежуточную фазу (стабильную или метастабильную), не обладающую дальним трансляционным, но обладающую дальним ориентационным порядком; модуль сдвига промежуточной фазы равен нулю. С учетом флуктуаций этот переход может происходить как фазовый переход второго рода [8]. Ниже мы рассматриваем переход второго рода из кристаллической в названную промежуточную фазу. Обобщения модели на случай перехода первого рода, близкого к переходу второго рода (с малым скачком параметра порядка и термодинамических величин в точке перехода) не представляет трудности.

Существенным предположением феноменологической теории фазовых переходов Ландау является существование разложения свободной энергии тела в ряд по степеням параметра порядка и его градиентов. Это предполагает, что параметр порядка может принимать любые значения в окрестности нуля. Поскольку модуль сдвига всегда неотрицателен, он сам не может быть выбран в качестве параметра порядка, может быть, однако, представлен как квадрат такового:

$$\mu = \eta^2. \tag{1}$$

В общем случае пространственно неоднородного распределения параметра порядка (системы с изменяющимся от точки к точке модулем сдвига) разложение свободной энергии содержит степени как параметра порядка, так и его градиентов. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только слабо неоднородных систем при температурах, близких к температуре фазового перехода, что позволит рассматривать только низшие степени параметра порядка и его градиентов, необходимые для описания устойчивого состояния как кристаллической, так и жидкокристаллической фазы:

$$F_{therm} = \int dV \left\{ a\eta^2 + \frac{b}{2}\eta^4 + g(\nabla\eta)^2 \right\}, \tag{2}$$

здесь a, b, g — функции термодинамических параметров состояния — температуры и давления.

Легко показать, что коэффициент $a(T)$ в члене второго порядка должен обращаться в нуль в точке фазового перехода. Действительно, в симметричной фазе минимуму F должно соответствовать значение $\eta = 0$ параметра порядка; для этого очевидно необходимо, чтобы $a > 0$. С другой стороны от точки перехода, в кристаллической фазе, устойчивому состоянию должно соответствовать отличное от нуля значение η, что возможно только при $a < 0$. Если величина a с одной стороны точки перехода положительна, а с другой — отрицательна, то в самой точке перехода a должна обращаться в нуль.

Для того чтобы сама точка фазового перехода соответствовала устойчивому состоянию, то есть в этой точке F как функция η имела бы минимум (при $\eta = 0$), необходимо, чтобы коэффициент b в члене четвертой степени был положителен.

Поскольку функция $a(T)$ в точке перехода обращается в нуль, она в свою очередь может быть разложена по степеням "расстояния" от критической температуры, причем разложение начинается с члена первого порядка:

$$a(T) = \alpha \cdot (T - T_c). \tag{3}$$

Здесь T_c есть температура фазового перехода. При температурах, близких к температуре перехода, коэффициент $b(T)$ может быть замещен на $b(T_c)$. Разложение свободной энергии принимает, таким образом, вид

$$F_{therm} = \int dV \left\{ \alpha(T - T_c)\eta^2 \frac{b}{2}\eta^4 + g(\nabla\eta)^2 \right\}. \tag{4}$$

Функционал (2) (или (4)) описывает систему в состоянии с минимальной энергией, то есть в упругонедеформированном состоянии. В кристаллической фазе, вследствие неисчезающей поперечной жесткости системы, среда может быть переведена в деформированное метастабильное состояние. Для описания этого состояния необходимо к свободной энергии (2) добавить свободную энергию упругой деформации, которая, вообще говоря (при наличии также и отличного от нуля тензора пластической дисторсии) имеет следующий вид[1]:

$$F_{el} = \int dV \left\{ \mu \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \beta_{ij} - \beta_{ji} \right)^2 - \frac{1}{3}(u_{ll})^2 \right] + \frac{K}{2}(u_{ll})^2 \right\}, \tag{5}$$

где u_i есть вектор полных смещений, β_{ij} — тензор пластической дисторсии, а K — модуль объемного сжатия.

В среде с микроструктурой (в определенном в [4] смысле) к свободной энергии (4) должна быть добавлена энергия упругой деформации структурных элементов, которая в среде с фиксированной характеристической длиной является квадратичной функцией тензора плотности дислокаций α_{km} [4]:

$$F_\alpha = \int dV \cdot C_{ijkm}\alpha_{ij}\alpha_{km}, \tag{6}$$

$$\alpha_{km} = e_{ijk}\frac{\partial \beta_{jm}}{\partial x_i}. \tag{7}$$

Конкретная форма тензора C_{ijkm} зависит от структурных особенностей среды. Явные выражения для C_{ijkm} для сред соответственно с одной

[1] Для простоты мы считаем тело изотропным.

и тремя взаимно перпендикулярными системами скольжения были найдены в [4,5].

Подчеркнем, что представления о тензоре пластической дисторсии и тензоре плотности дислокаций, как показано в работах [8,9], могут быть использованы как ниже точки фазового перехода (в кристаллической фазе), так и выше точки перехода (в жидкокристаллической фазе). Эта возможность связана с сохранением "локально-кристаллического" порядка также и в жидкой фазе. При этом переход из твердой в жидкую фазу связывается с образованием конечной плотности незамкнутых (неограниченно длинных) дислокаций. Точно так же существование в среде моментных напряжений (описываемых членом (6) в свободной энергии) не связано непосредственно с наличием дальнего кристаллического порядка; оно предполагает, однако, наличие локальной анизотропии среды.

Полная свободная энергия имеет, таким образом, вид

$$F_{tot} = F_{therm} + F_{el} + F_{\alpha} = \int dV \cdot \Bigg\{ C_{ijkm}\alpha_{ij}\alpha_{km} + g(\nabla\eta)^2$$

$$+ \eta^2 \left[\frac{1}{4} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \beta_{ij} - \beta_{ji} \right)^2 - \frac{1}{3}(u_{ll})^2 \right]$$

$$+ \frac{K}{2}(u_{ll})^2 + a\eta^2 + \frac{b}{2}\eta^4 \Bigg\}. \tag{8}$$

Для сравнения напомним выражение для функционала Гинзбурга–Ландау [1] для свободной энергии сверхпроводника:

$$F = \int \Bigg[\frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{4m}(\nabla|\psi|)^2 + \frac{\hbar^2}{4m}|\psi|^2 \left(\nabla\Phi - \frac{2e}{\hbar c}\mathbf{A} \right)^2$$

$$+ \alpha(T - T_c) \cdot |\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 \Bigg] dV. \tag{9}$$

Аналогичная структура обоих функционалов очевидна. При этом имеют место следующие аналогии между отдельными полями (см. таблицу).

Основное отличие функционала (8) упругопластического тела от функционала Гинзбурга–Ландау состоит в том, что в случае упругопластического тела вместо скалярной фазы Φ выступает векторное поле $\mathbf{u}$.

Сверхпроводник		Упругопластическое тело	
Абсолютная величина волновой функции	$\lvert\psi\rvert$	Абсолютная величина параметра порядка	$\lvert\eta\rvert$
Концентрация сверхпроводящих электронов	$n_s = \lvert\psi\rvert^2$	Модуль сдвига	$\mu = \eta^2$
Фаза волновой функции	Φ	Вектор полных смещений	$\mathbf{u}$
Векторный потенциал	$\mathbf{A}$	Тензор пластической дисторсии	$\widehat{\beta}$
Индукция магнитного поля	$\mathbf{B} = rot\mathbf{A}$	Тензор плотности дислокаций	$\widehat{\alpha} = rot\widehat{\beta}$

Соответственно являются тензорами второго ранга потенциал $(\widehat{\beta})$ и напряженность поля (последняя — определяемая в обоих случаях как ротор потенциала).

В качестве примера эффекта, описываемого функционалом (8), рассмотрим кристалл в упругом состоянии, при температуре ниже температуры плавления, в однородном поле напряжений. Функционал (8) сводится при этом к

$$F = \int dV \left\{ \alpha(T - T_c)\eta^2 + \frac{b}{2}\eta^4 + \eta^2\varepsilon^2 \right\}, \tag{10}$$

где ε — тензор упругой деформации.

При $T < T_c$ и $\varepsilon = 0$ коэффициент при второй степени параметра порядка отрицателен, что означает, что тело находится в твердом состоянии с модулем сдвига

$$\mu = \eta^2 = \frac{\alpha(T_c - T)}{b} \neq 0. \tag{11}$$

По мере роста упругих искажений модуль коэффициента в члене второго порядка становится меньше. Соответственно убывают параметр порядка и модуль сдвига:

$$\mu = \eta^2 = \frac{\alpha(T_c - T) - \varepsilon^2}{b}. \tag{12}$$

При определенном значении деформации

$$\varepsilon_c = \sqrt{\alpha(T_c - T)} \tag{13}$$

поперечная жесткость среды становится равной нулю. Мы приходим к выводу, что потеря устойчивости среды в термодинамическом смысле — обращение в нуль модуля сдвига и, тем самым, переход среды в "жидкоподобное" состояние возможен не только в результате повышения температуры, но и путем создания в среде достаточно большой сдвиговой деформации. Вывод о локальном занулении модуля упругости в областях концентраторов напряжений был сделан ранее на основе анализа экспериментальных данных В.Е. Паниным (см., например, [6]). Соответствующее состояние твердого тела получило наименование *сильновозбужденного состояния* твердого тела.

На основе функционала (8) твердые тела, аналогично сверхпроводникам, могут быть подразделены на твердые тела первого и второго рода. Для этого введем две характеристические длины: корреляционный радиус флуктуаций $\xi(T)$

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{g}{\alpha(T_c - T)}} \tag{14}$$

и "лондоновскую глубину проникновения" $\delta(T)$, определяющую характеристическую длину неоднородности плотности дислокаций вблизи поверхности тела (эта длина была введена в [7]):

$$\delta(T) = \sqrt{\frac{C}{2\mu}} = \sqrt{\frac{bC}{2\alpha(T_c - T)}}. \tag{15}$$

Здесь C есть характерная величина тензора моментных упругих констант (C_{ijkl} в (6)). Параметр Гинзбурга–Ландау определяется как отношение двух названных длин

$$\kappa = \frac{\delta(T)}{\xi(T)} = \sqrt{\frac{bC}{2g}}. \tag{16}$$

Твердым телам второго рода соответствуют значения параметра Гинзбурга–Ландау $\kappa \gg 1$. Эти тела теряют свою устойчивость по отношению к сдвиговой деформации путем постепенного проникновения вихревых нитей в объем твердого тела. Если же твердое тело относится к первому роду ($\kappa \ll 1$), то оно при повышении внешнего воздействия претерпевает фазовый переход первого рода при превышении тензором плотности дислокаций определенного критического значения на поверхности тела.

Отметим, что, несмотря на теоретическую возможность переходов второго рода ”кристалл–жидкий кристалл” (обсуждение этого вопроса см., например, в заключении статьи [8]), на практике эти переходы, как правило, являются переходами первого рода. Если мы имеем дело с переходом первого рода, близким ко второму, то он может быть описан путем добавления к функционалу (8) члена третьей степени:

$$F' = \int c\eta^3 dV. \tag{17}$$

Подробный анализ как такого более сложного функционала, так и ”смешанного состояния”, описываемого функционалом (8) при $\kappa \gg 1$ существенно более сложен, чем в случае сверхпроводников, ввиду более высокого тензорного ранга основных полей и не может быть проведен в рамках данного краткого сообщения.

Автор благодарен фонду Александра Гумбольдта за финансовую поддержку.

Список литературы

[1] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Часть 2. М.: Наука, 1978.
[2] *Marques J.L.* // Continuum Models and Discrete Systems (CMDS9). Proceedings of the 9th International Symposium. World Scienntific Publishing Co., Singapore, 1999. P. 576–583.
[3] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976.
[4] *Popov V.L., Kröner E.* // Physical Mesomechanics. 1998. V. 1. N 1. P. 103–112.
[5] *Kröner E, Popov V.* // Computational Materials Science, 1999 (in press).
[6] *Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Елсукова Т.Ф., Иванчин А.Г.* // Известия вузов. Физика. 1982. № 6. С. 5–27.
[7] *Попов В.Л.* // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. С. 79–82.
[8] *Обухов С.П.* // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. С. 1978–1984.
[9] *Паташинский А.З., Шумило Б.И.* // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. С. 315–329.