

17.20  
ИЯФ

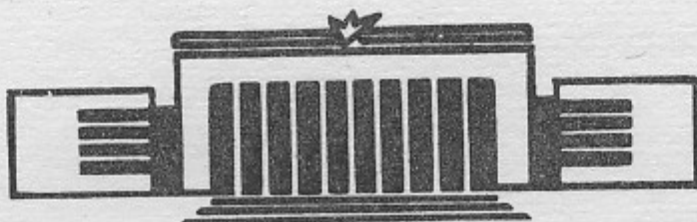
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

А.З.Паташинский, Б.И.Шумило

ДИСЛОКАЦИОННАЯ ТЕОРИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ПРЕПРИНТ 84-103

БИБЛИОТЕКА  
Института ядерной  
Физики СО АН СССР  
ИНВ. № \_\_\_\_\_



НОВОСИБИРСК

V  
+

# ДИСЛОКАЦИОННАЯ ТЕОРИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

А.З.Паташинский, Б.И.Шумило

## АННОТАЦИЯ

Предложена статистическая теория конденсированного состояния вещества, основанная на гипотезе локального кристаллического порядка. Предполагается, что в элементе конденсированного вещества (как в твердой, так и в жидкой фазах) относительное положение атомов коррелировано и обладает федоровской локальной симметрией. Плавление в такой системе есть разрушение дальнего ориентационного порядка с образованием конечной плотности линейных дефектов, которые локально совпадают с дислокациями в кристалле.

В работе вводится понятие касательной (локальной) решетки и описывается класс статистически вероятных конфигураций атомов конденсированного вещества. Показано, что в состоянии с конечной плотностью дислокаций вектор Бюргерса не постоянен вдоль линии дефекта. В континуальном пределе найден гамильтониан конденсированного вещества; выписаны условия самосогласования полей, параметризующих конфигурации системы. Обсуждаются поправки, связанные с учетом ангармонизмов и дисперсии упругих модулей.

## І. В В Е Д Е Н И Е

Представление о том, что молекулы в элементе жидкости или аморфного тела образуют относительно устойчивую группу, было достаточно четко выражено уже в книге Френкеля [1]. О структуре этих групп (кластеров) высказывались различные предположения.

Постулировались варианты структуры, для которых группу атомов нельзя трактовать как часть какой-либо правильной решетки (стохастическая плотная упаковка Бернала [2], псевдодрa [3], [4] и другие). Такие кластеры могут иметь произвольные элементы симметрии, не ограниченные требованиями теоремы Федорова. Таким образом, этот класс моделей объединяет предположение о нефедоровской локальной симметрии вещества.

В работах одного из авторов (А.П.) и А.Митуся [5] была сформулирована гипотеза о локальном кристаллическом порядке в конденсированном веществе, предполагающая федоровскую локальную структуру и в жидкой фазе. Как известно [6], существование состояний с федоровской локальной структурой надежно установлено для двумерных конденсированных систем.

Повидимому, в трехмерных конденсированных системах реализуются как федоровские, так и нефедоровские варианты локальной структуры. Представляется весьма вероятным, что расплавы большинства металлов, а также сжиженные благородные газы обладают локальным кристаллическим порядком. Нефедоровские упаковки возможны в сложных веществах с направленными непарными взаимодействиями между атомами.

Ниже рассматривается конденсированная система, локальная структура которой предполагается близкой к структуре правильной решетки. Класс конфигураций этой системы, представляющих собой малые деформации идеальной решетки, соответствует макроскопически анизотропному кристаллическому состоянию вещества. Как будет показано, существует также более широкий класс конфигураций, отвечающих макроскопически однородной и изотропной фазе с федоровской локальной структурой. Макроскопическая изотропия этой



фаза предполагает независимость ориентации решеток, к которым близка структура достаточно удаленных друг от друга элементов жидкости. Такая независимость обеспечивается благодаря наличию в системе конечной плотности линейных дефектов структуры — дислокаций. Теория изолированных дислокаций в кристалле хорошо известна [7]. Теория дислокаций в локально упорядоченной среде с конечной плотностью дефектов имеет некоторые отличия. Наиболее существенное из них состоит в том, что вектор Бюргера оказывается непостоянным вдоль дислокационной линии и испытывает вращение, определяемое самосогласованно всей совокупностью дефектов.

Цель нашей статьи — описать класс конфигураций конденсированной системы, для которых имеется локальный кристаллический порядок и, вообще говоря, отсутствует дальний порядок. Гипотеза локального кристаллического упорядочения предполагает, что именно такие конфигурации входят с подавляющим весом в статистический ансамбль конденсированного вещества. Для определенности мы будем считать локальную решетку простой кубической. Большая часть построения не зависит от типа локальной решетки, и повторение рассуждений для случая других решеток не вызывает затруднений.

2. Касательная решетка и вектор Бюргера в среде с конечной плотностью дислокаций.

Рассмотрим конфигурацию конденсированного вещества с малой плотностью дефектов, такой что характерное расстояние между дислокациями велико по сравнению с межатомным. Задача, как и в теории дислокаций в кристалле, состоит в установлении соответствия между атомами, которые мы полагаем точками, и узлами идеальной решетки. Утверждение о близости относительного расположения атомов в окрестности данного к положению узлов решетки означает, что возможно взаимно-однозначное отображение атомов на узлы решетки, при котором сохраняется отношение соседства. Ближайшим соседям атома соответствуют узлы ближайшие к его образу на решетке. Пусть такое соответствие установлено в некоторой окрестности атома с координатами  $\vec{z}$ . Наложим решетку на систему и выберем координаты образа  $\vec{z}'$  и поворот решетки  $\hat{g}(\vec{z})$  относительно неподвижного базиса так, чтобы минимизировать величину:

$$\Delta(\vec{z}) = \sum_a (\vec{z}^{(a)} - \vec{z}'^{(a)})^2 \quad (I)$$

Здесь  $\vec{z}^{(a)}$  — координаты атомов, принадлежащих рассматриваемому элементу системы,  $\vec{z}'^{(a)}$  — координаты соответствующих узлов решетки. Радиус области, для которой вычисляется сумма (I), выбран большим по сравнению с размером элементарной ячейки, но малым относительно расстояния между дислокациями.

Мы построили идеальную решетку, касательную к системе в точке  $\vec{z}$ . Построим теперь касательную решетку, выбрав в качестве центра  $\vec{z}_1$  области соседний атом. В окрестности точки  $\vec{z}_1$  имеются атомы, не принадлежащие окрестности точки  $\vec{z}$ . Найдем для этих атомов соответствующие узлы решетки и построим величину  $\Delta(\vec{z}_1)$ . Положение узла  $\vec{z}'_1$  и поворот  $\hat{g}(\vec{z}_1)$  решетки, касательной в точке  $\vec{z}_1$ , найдем из условия минимальности величины  $\Delta(\vec{z}_1)$ , определенной формулой (I). Продвигаясь последовательно вдоль некоторого пути, проходящего по атомам системы, построим вдоль него отображения атомов на узлы идеальной решетки и поле поворота  $\hat{g}(\vec{z})$  касательной решетки. По определению на каждом шагу отображение строится лишь для тех атомов, для которых оно не было установлено на предыдущем шагу (память на один шаг).

Процедура установления соответствия решетке, однозначная на каждом шагу, вообще говоря, не однозначна для пути в целом. При движении по замкнутому контуру может возникнуть неоднозначность отображения — невязка соответствующего контура на решетке. Невязка свидетельствует о том, что контур охватывает линейный дефект. Если касательная решетка не испытывает поворота, наше построение, очевидно, совпадает с известным построением теории дислокации в кристалле, служащим для определения вектора Бюргера дефекта. В этом случае вектор Бюргера есть:

$$\vec{b} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{b}_i \quad (2)$$

где  $n_i$  — целые числа,  $\vec{b}_i$  — векторы элементарных трансляций неподвижной решетки. В нашем случае ориентация касательной решетки различна в различных точках пути, и для произвольного пу-



ти нет инвариантного понятия невязки контура на касательной решетке. Такое понятие существует лишь в системе отсчета, жестко связанной с идеальной касательной решеткой и движущейся вместе с ней. Если концентрация дефектов мала и локальное расположение атомов отвечает малодеформированной решетке, касательную решетку можно считать неизменной для области, размер которой велик по сравнению с ядром дислокации. Стягивая замкнутый путь, охватывающий дислокацию, до размеров, на которых поворотом касательной решетки можно пренебречь, определим (с точностью до поправок, малых в меру малости концентрации дефектов) вектор Бюргера  $\vec{b}(\vec{r})$  дислокации в точке  $\vec{r}$ :

$$\vec{b}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{b}_i(\vec{r}) \quad (3)$$

Здесь, как и в формуле (2),  $n_i$  - фиксированные целые числа. Векторы элементарных трансляций касательной решетки  $\vec{b}_i(\vec{r})$  связаны с соответствующими векторами неподвижной решетки (общей для всей системы) соотношением:

$$\vec{b}_i(\vec{r}) = (\hat{g}(\vec{r}))_{ik} \vec{b}_k^0 \quad (4)$$

При условии малости относительного поворота касательной решетки на размере порядка межатомного

$$a \hat{g}^{-1} \nabla g \ll 1$$

(где  $a$  - межатомный размер) и вектор Бюргера изменяется медленно при движении вдоль линии дефекта. Соотношение (4), заменяющее условие постоянства вектора Бюргера вдоль дислокации, показывает, что этот вектор вращается вместе с касательной (локальной) решеткой. Последнее, очевидно, существенно, если рассматриваются дислокации, длина которых велика по сравнению с расстоянием между дефектами и расстоянием, на котором относительный поворот локальных решеток велик. Именно такие дислокации разрушают трансляционный и ориентационный порядок в кристал-

ле.

Для рассматриваемого класса конфигураций конденсированного вещества мало отношение

$$\rho = a/R\hat{g} \ll 1 \quad (5)$$

где  $a$  - межатомный размер,  $R\hat{g}$  - длина, на которой относительный поворот решеток становится существенным. В младшем по параметру  $\rho$  приближении для описания свойств элемента системы размера  $l < R\hat{g}$  можно, считая решетку неизменной, использовать известные локальные соотношения теории дислокаций в кристалле. Для масштабов  $\lambda \gg a$  система может рассматриваться как континуум, а область размера  $R$  ( $a \ll R \ll R\hat{g}$ ) - как элемент кристалла с дислокациями. Тензор дисторсии  $\beta_{ij}$  связан с тензором плотности дислокаций  $\alpha_{ij}$  известным дифференциальным соотношением [7]:

$$\epsilon_{ikl} \partial_k \beta_{lj} = \alpha_{ij} \quad (6)$$

Тензор  $\alpha_{ij}$  определен так, чтобы интеграл от этой величины по принадлежащему рассматриваемому элементу малому контуру  $\Gamma$  давал суммарный вектор Бюргера, охватываемых дислокаций,

$$\oint_{\Gamma} \alpha_{ij} dx_i = b_j \quad (7)$$

Формулу (6) удобно переписать в виде локального соотношения между тензором плотности дислокаций  $\alpha_{ij}$ , тензором деформации  $u_{ij}$  и полем поворота  $w_i$  относительно локального базиса. Один из возможных вариантов записи следующий:

$$\partial_j w_i = \alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - \epsilon_{ikl} \partial_k u_{lj} \quad (8)$$

Подчеркнем еще раз, что соотношение (8) справедливо для элемента конденсированного вещества такого размера, что для него можно пренебречь относительным поворотом локальной решетки.



Как ясно из вышесказанного, вектор Бюргерса дислокации  $\vec{b}^0$  постоянен в системе отсчета, связанной с локальной решеткой, и равен одному из векторов трансляции касательного кристалла. Компоненты вектора Бюргерса относительно общей для всего тела системы отсчета задаются матрицей поворота, связывающей упомянутые базисы:

$$b_j = U_{j\alpha} b_\alpha^0 \quad (9)$$

Матрица поворота  $U_{ij}$  выражается через вектор инфинитезимальных вращений  $\omega_i$  известной формулой [8]:

$$U_{ij} = (\exp\{-\omega_n \hat{T}_n\})_{ij} \quad (10)$$

где матрицы  $\hat{T}_n$  ( $n = 1, 2, 3$ ) - генераторы группы вращений трехмерного евклидова пространства в векторном представлении. Для малого относительного поворота величину  $\partial_j \omega_i$  нетрудно выразить через матрицу  $U_{ij}$ . Согласно (10):

$$\partial_j \omega_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} U^{\quad km} \partial_j U^{\quad lm} \quad (11)$$

После замены (11) и преобразования к базису общему для всего тела соотношение (8) примет вид:

$$\frac{1}{2} \epsilon_{ikl} U^{\quad km} \partial_j U^{\quad lm} = \alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - \epsilon_{ikl} \partial_k u_{lj} \quad (12)$$

Формула (12) справедлива с точностью до поправок малых по параметру  $\rho$  (5).

Соотношение (12) есть условие самосогласования полей, параметризующих физическую конфигурацию конденсированного вещества. Поворот касательной решетки  $U_{ij}(\vec{r})$  определяется распределением дислокаций  $\alpha_{ij}(\vec{r})$  и деформацией вещества  $u_{ij}(\vec{r})$ . В свою очередь поле  $U_{ij}(\vec{r})$  определяет вращение векторов Бюргерса

дислокаций и тем самым локальное значение величины  $\alpha_{ij}(\vec{r})$ . Для задания конфигурации системы необходимо указать линии дислокаций и значения их векторов Бюргерса в касательной системе координат. "Физический" вектор Бюргерса определяется вместе с поворотом

### 3. Гамильтониан конденсированного вещества.

Энергия конденсированного вещества  $H$  как функционал конфигурации атомов системы может быть записана в виде ряда по величине деформации и плотности дислокаций. В приближении закона Гука [7]:

$$\sigma_{ij} = \Lambda_{ijkl} u_{kl} \quad (13)$$

упругая энергия вещества  $H_{el}$  есть сумма локальных вкладов, зависящих квадратично от тензора деформации  $u_{ij}(\vec{r})$  или (в эквивалентной форме записи) - от тензора напряжения  $\sigma_{ij}(\vec{r})$

$$H_{el} = \int dV \frac{1}{2} \Lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl} = \int dV \Lambda_{ijkl}^{-1} \sigma_{ij} \sigma_{kl} / 2 \quad (14)$$

Тензор упругих модулей  $\Lambda_{ijkl}(\vec{r})$ , записанный в евклидовой системе координат, общей для всего тела, есть функция точки. Он постоянен в локальной системе координат, поворачивающейся вместе с касательной решеткой. Можно выделить изотропную часть  $\Lambda_{ijkl}^{(is)}$  тензора упругих модулей, инвариантную относительно преобразований группы вращений трехмерного пространства  $O_3$ :

$$\Lambda_{ijkl}^{(is)} = \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (15)$$

Здесь  $\mu, \lambda$  - коэффициенты Ламэ. Анизотропная часть тензора инвариантна лишь относительно преобразований точечной группы локальной симметрии. Для конденсированного вещества с локальной кубической симметрией

$$\Lambda_{ijkl}^{(un)} = \Lambda_{ijlcl} - \Lambda_{ijlcl}^{(is)} = \tau T_{ijkl}(\vec{r}) \quad (16)$$



где  $\tau$  - кубический модуль,  $T_{ijkl}(\tau)$  - кубический тензор [5] (подробнее см. ниже).

Как правило, анизотропная часть тензора упругих модулей относительно мала, и в первом приближении ей можно пренебречь. В таком (упруго-изотропном) приближении медленный поворот осей локальной анизотропии не изменяет энергии, которая имеет следующий вид:

$$H_{el} = \int dV \frac{1}{4\mu} (\sigma_{ij}^2 + \rho \sigma_{ii}^2), \quad \rho = \frac{-\nu}{1+\nu} \quad (17)$$

$\nu$  - коэффициент Пуассона. Необходимо найти значение функционала (17) при заданном распределении дислокаций. Удобно ввести для поля  $\sigma_{ij}(\vec{r})$  потенциалы  $\varphi_i(\vec{r}), A_{ij}(\vec{r})$ :

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \mu(\partial_i \varphi_j + \partial_j \varphi_i) + \lambda \delta_{ij} \partial_k \varphi_k - \epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} \quad (18)$$

Представление (18) поля напряжений однозначно, если фиксирована калибровка потенциала  $A_{ij}(\vec{r})$ . Зададим калибровку потенциала условием:

$$\partial_i A_{ij} = 0 \quad (19)$$

Для физических конфигураций тензор  $\sigma_{ij}(\vec{r})$  симметричен. Выполнение этого требования обеспечим, наложив на компоненты поля  $A_{ij}(\vec{r})$  связь:

$$\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} = \epsilon_{jkl} \partial_k A_{li} \quad (20)$$

Энергия  $H_{el}$ , записанная через потенциалы, преобразуется к сумме двух независимых слагаемых:

$$H_{el} = H_{ph} \{ \varphi \} + H_{d} \{ A \} \quad (21)$$

$$H_{ph} \{ \varphi \} = \int dV \left\{ \frac{\mu}{2} (\partial_i \varphi_j)^2 + \frac{\mu + \lambda}{2} (\partial_i \varphi_i)^2 \right\} \quad (22)$$

$$H_{d} \{ A \} = \int dV \left\{ \frac{1}{4\mu} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \rho \delta_{ij} \delta_{kl}) \epsilon_{iml} \epsilon_{kpn} * \partial_m A_{lj} \partial_n A_{pq} + \frac{1}{4\beta} (\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} - \epsilon_{jkl} \partial_k A_{li})^2 + \frac{1}{2\alpha} (\partial_i A_{ij})^2 \right\} \quad (23)$$

Потенциал  $\vec{\varphi}(\vec{r})$  описывает фононные степени свободы системы, которые в линейном приближении (13), как известно, не взаимодействуют с дислокациями. Функционал  $H_{ph} \{ \varphi \}$  - энергия совместной упругой деформации вещества;  $H_{el} \{ A \}$  - энергия упругой деформации, обусловленной распределением дислокаций. Два последних члена в функционале (23) обеспечивают в пределе  $\alpha, \beta \rightarrow 0$  выполнение условий (19, 20) для конфигураций с конечной энергией.

Потребуем выполнения равенства:

$$A_{li}(\vec{r}) = \int dV' \mathcal{D}_{ij}^{ln}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha_{nj}(\vec{r}') \quad (24)$$

где  $\mathcal{D}_{ij}^{ln}(\vec{r})$  - оператор, обратный ядру квадратичной формы (23). Фурье-образ этого оператора в пределе  $\alpha, \beta = 0$  есть:

$$\mathcal{D}_{ij}^{ln}(\vec{q}) = \frac{2\mu}{q^2} \left\{ \frac{1+\rho}{1+2\rho} S_{ij} S_{en} - \frac{1}{2} S_{ie} S_{jn} + \frac{\rho}{1+2\rho} S_{in} S_{je} \right\} \quad (25)$$

где  $S_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j$ ,  $n_i = q_i/|q|$ . Подставив (24) в выражение (23), получим:



$$H_d \{ \alpha \} = \int dV dV' \frac{1}{2} \alpha_{ei}(\vec{r}) D_{ij}^{ei}(\vec{r}-\vec{r}') \alpha_{nj}(\vec{r}') \quad (26)$$

формулу аналогичную формуле Блина [9] для энергии системы дислокаций в упруго-изотропной среде. Формула (26) отличается от известной тем, что вектор Бюргерса не считается постоянным вдоль дислокации. Такое обобщение вида  $H_{el}$  в упруго-изотропном приближении представляется естественным. Гамильтониан конденсированной системы  $H$  наряду с  $H_{el}$  включает энергию ядра дислокаций  $H_c$ , т.е. энергию областей, для описания которых неприменимо приближение теории упругости.

При малой плотности дислокаций ситуация не отличается от известной в теории кристаллов, где вводится энергия ядра дислокаций. Припишем единице длины ядра дислокации энергию  $\epsilon$ , которая в простейшем приближении зависит лишь от модуля вектора Бюргерса. Энергия ядра дефекта есть:

$$\oint \epsilon (|\vec{b}|) \vec{c}_i dx_i \quad (27)$$

Интеграл берется по дислокационной петле,  $\vec{c}_i(\vec{r})$  — единичный вектор, касательный к дислокации в каждой ее точке. Очевидно:

$$H_c = \sum_D \oint \epsilon (|\vec{b}|) \vec{c}_i dx_i \quad (28)$$

Локальная форма записи энергии (21, 28) удобна для построения статистической механики конденсированного вещества. Потенциалы  $\varphi_i$  и  $A_{ij}$ , поле поворота  $U_{ij}$  (представляющее вращение касательной решетки) и поле плотности дислокаций  $\alpha_{ij}$  определяют физическую конфигурацию, причем предполагаются выполненными условия связи (12) и (24). Распределение вероятностей  $DW$  конфигураций рассматриваемой системы в тепловом равновесии при температуре  $T$  есть распределение Гиббса:

$$DW = N \exp \left\{ -\frac{1}{T} (H_{ph} + H_d + H_c) \right\} * \delta(A_{ij} - \int dV' D_{ij}^{ei}(\vec{r}-\vec{r}') \alpha_{nj}(\vec{r}')) \delta(\alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - \frac{1}{2} \epsilon_{ijkl} T^{kmnp} \partial_j T^{lmnp} - \epsilon_{ijkl} \partial_k u_{lj}) * D\varphi_i D A_{ij} D \hat{g} D \alpha_{ij} \quad (29)$$

В выражении (29) — функции обеспечивают выполнение условий (12, 24), причем тензор деформации, фигурирующий во втором условии, должен быть выражен через потенциалы  $\varphi_i$  и  $A_{ij}$ . Предэкспоненциальный фактор в формуле (29) есть элемент пространства конфигураций системы. Статистическая сумма есть сумма по всем пространственным конфигурациям дислокаций и значениям их векторов Бюргерса и континуальный интеграл по конфигурациям полей  $\varphi_i(\vec{r})$ ,  $A_{ij}(\vec{r})$ ,  $U_{ij}(\vec{r})$ :

$$Z = N \int D\varphi_i D A_{ij} D U_{ij} \sum_{\{ \alpha_{ij} \}} \exp \left\{ -\frac{1}{T} * (H_{ph} + H_d + H_c) \right\} \delta(A_{ij} - \dots) \delta(\alpha_{ij} - \dots) \quad (30)$$

Учет анизотропной части  $\Lambda_{ijkl}^{(un)}$  тензора упругих модулей приводит к появлению явного взаимодействия полей деформации и поворота. Тензор  $\Lambda_{ijkl}^{(un)}$ , как было отмечено выше, постоянен в системе отсчета, связанной с локальной решеткой. Обозначим это его значение символом  $\Lambda_{ijkl}^{o(un)}$  и получим:

$$\Lambda_{ijkl}^{(un)} = U_{i\alpha} U_{j\beta} U_{k\gamma} U_{l\delta} \Lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}^{o(un)} \quad (31)$$

Здесь греческие индексы нумеруют компоненты тензоров относительно локального базиса, а латинские — относительно базиса общего для всего тела;  $U_{j\alpha}(\vec{r})$  — компоненты матрицы поворота, переводящего в точке  $\vec{r}$  упомянутые базисы друг в друга. Дополнительный член гамильтониана:

$$\delta H_{el} = \int dV \frac{1}{2} \Lambda_{ijkl}^{(un)} u_{ij} u_{kl} \quad (32)$$



описывает взаимодействие полей поворота и деформации. Для вещества с локальной кубической симметрией:

$$\Lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}^{o(m)} = \sum_{n=1}^3 e_{\alpha}^{(n)} e_{\beta}^{(n)} e_{\gamma}^{(n)} e_{\delta}^{(n)} \quad (33)$$

где  $\vec{e}^{(n)}$  - векторы элементарных трансляций локальной кубической решетки. Оси локальной системы координат естественно выбрать совпадающими с осями анизотропии касательной решетки. В этом случае  $e_{\alpha}^{(n)} = \delta_{n\alpha}$ , и формула (32) имеет следующий вид:

$$\delta H_{el}^{cube} = \int dV \tilde{T}_{ijkl} u_{ij}(\vec{r}) u_{kl}(\vec{r}) \quad (34)$$

где  $T_{ijkl}(\vec{r})$  - кубический тензор:

$$T_{ijkl}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^3 U(\vec{r})^{in} U(\vec{r})^{jn} U(\vec{r})^{kn} U(\vec{r})^{ln} \quad (35)$$

Неприводимую часть  $\tilde{T}_{ijkl}$  тензора (35):

$$\tilde{T}_{ijkl} = T_{ijkl} - \frac{1}{5} (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (36)$$

можно рассматривать как параметр ориентационного порядка [5].

Приведенные выше формулы описывают энергию системы в главном приближении по параметру  $a/\lambda$  - отношению межатомного размера к характерному масштабу изменения поля деформации. В следующем по этому параметру приближении возникает добавка вида:

$$\int dV \partial_m u_{ij} \partial_n u_{kl} M_{ijkl}^{mn}(\vec{r}) \quad (37)$$

У тензора шестого ранга  $M_{ijkl}^{mn}(\vec{r})$ , характеризующего в кристаллической фазе дисперсию упругих модулей, можно выделить изотропную и анизотропную части. Последняя приводит к дополнительному взаимодействию вращений и деформаций. На масштабах порядка межатомного может происходить заметное изменение упругих характеристик вещества, связанное с взаимодействием (37), в частности, относительное увеличение модулей, связанных с неприводимой частью взаимодействия.

Как известно, в области температур порядка температуры плавления вещества тепловые смещения атомов  $\delta z$  имеют величину  $\delta z \sim 0,1 + 0,3 a$ . Эффекты ангармонизма в этой области уже нельзя считать пренебрежимо малыми, и необходимо дополнить выражение для энергии членами более высокой степени по полю деформации. Включение ангармонизмов в случае среды с конечной плотностью дефектов производится аналогично теории ангармонизмов в кристалле.

Приведенная выше статистическая теория конденсированной системы замкнута. Ее применимость определяется справедливостью гипотезы локального кристаллического упорядочения. При  $T \rightarrow 0$  равновесная концентрация дефектов исчезающе мала, имеется дальний ориентационный и трансляционный порядок, и вещество находится в кристаллической фазе. При высоких температурах концентрация дислокаций велика, и система в целом пространственно однородна и изотропна. Такое состояние отвечает жидкой фазе. Плавление как потеря дальних корреляций параметра ориентационного порядка  $\tilde{T}_{ijkl}(\vec{r})$  в рамках простой феноменологической модели изучалось в работах [5]. Подробный анализ статистических свойств системы составляет предмет отдельного исследования.

Модели дислокационного плавления кристаллов изучались в ряде работ (см. книгу Займана [10], в которой даны указания на оригинальные работы). В последнее время для исследования этой проблемы были использованы методы теории калибровочных полей (Кляйнерт [11], Обухов [12]). Дислокационная структура в исследуемых в этих работах моделях не связана с ориентационной структурой вещества, т.е. в них рассматривается система линейных дефектов в локально изотропной бесструктурной среде. Такое описание оправдано для кристаллического состояния системы при достаточно низких температурах. При высоких температурах и в



особенности в жидком и аморфном состояниях учет локальной структуры и взаимодействия ориентационных степеней свободы и дефектов необходим для адекватного описания системы.

## Л и т е р а т у р а

- I. Frenkel J., Kinetic theory of liquids, Oxford Univ. Press, London, (1946).
2. Bernal J.D., Nature, (1959), v. 183, p. 141.
3. Polk D.E., Boudreaux D.S. Phys.Rev.Lett., (1973), v. 31, p. 92.
4. Hosemann R., Bagchi S.N. Direct analysis of diffraction by matter, Amsterdam: North-Holland, (1962).
5. Митусь А.С., Паташинский А.З. ЖЭТФ, (1981), т. 80, вып.4, стр. 1551.  
Mitus A.S., Patashinskii A.Z. Phys.Lett., (1982), v. 87A, p. 179.
6. Большов Л.А., Напартович А.П., Наумовец А.Г. УФН, (1977), т. 122, вып. I, стр. 125.  
Pieranski P. Phys.Rev.Lett., (1980), v.45, No 7, p.569.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М., Наука, (1965).
8. Любарский Г.Я. Теория групп и ее применения в физике. М., (1958).
9. Косевич А.М. Дислокации в теории упругости, Киев, (1978).
10. Займан Дж. Модели беспорядка. М., Мир, (1982).
11. Kleinert H., Phys.Lett., (1982), v. 89A, No 6, p. 294.  
Kleinert H. Gauge theory of defect melting, Lecture at the EPS Conference on Condensed Matter Physics, Pen Haag, (1984).
12. Обухов С.П. ЖЭТФ, (1982), т. 83, вып. II, стр. 1978.



А.З.Паташинский, Б.И.Шумило

ДИСЛОКАЦИОННАЯ ТЕОРИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО  
СОСТОЯНИЯ

Препринт  
№ 84-103

Работа поступила 26 июля 1984г.

---

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов

Подписано к печати МН 04485 от 31.07.84г.

Формат бумаги 60x90 1/16 Усл.1,3 печ.л., 1,0 учетно-изд.л.

Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 103

---

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90