

П.20

43

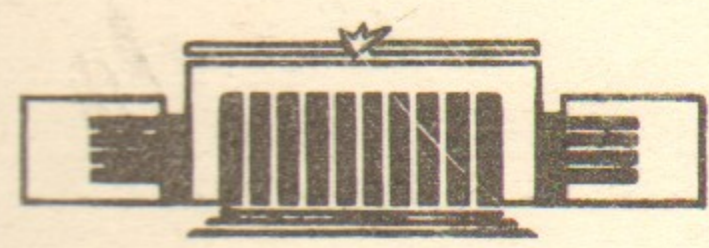
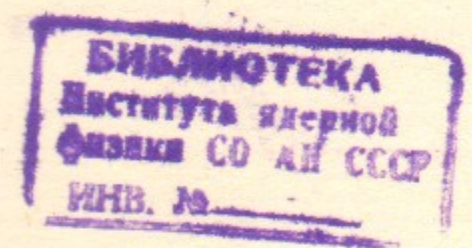


ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

А.З.Паташинский, Б.И.Шумило

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЕЩЕСТВА**

ПРЕПРИНТ 84-160



НОВОСИБИРСК

## СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЕЩЕСТВА

А.З.Паташинский, Б.И.Шумило

### А Н Н О Т А Ц И Я

Предложена статистическая теория конденсированного состояния вещества, основанная на гипотезе локального кристаллического порядка. Конфигурации системы описаны в терминах полей локальных поворотов, деформаций и дислокационной плотности. Найден гамильтониан системы как функционал этих полей в приближении малости упругих напряжений и концентрации дефектов. Для полей, параметризующих физические конфигурации, установлены связи (условия совместности). Суммирование в ансамбле Гиббса по распределению дислокаций сведено к интегрированию по вспомогательным полям — параметрам беспорядка. Найден фазовый состав вещества и фазовые переходы в системе. Низкотемпературная фаза по свойствам симметрии оказывается кристаллической, а высокотемпературная — изотропной (жидкой). Для упрощенной "модельной" системы найден эффективный гамильтониан поля параметра ориентационного порядка.

### И. В в е д е н и е

Для кристаллического и близких к нему по плотности аморфных состояний вещества, таких как стекло или расплав, характерны высокая плотность, малая сжимаемость и сильное взаимодействие частиц. Общей для упомянутых фаз конденсированной системы является сильная зависимость энергии элемента объема от взаимного расположения атомов (при неизменной плотности). Разность энергий различных локальных конфигураций велика по сравнению с характерной тепловой энергией. Последнее означает, что в достаточно малом элементе системы относительное положение атомов коррелировано. С заметной вероятностью реализуются не все, а лишь некоторые локальные конфигурации, т.е. существует определенная локальная структура.

Для идеальных кристаллов при достаточно низких температурах локальная структура определена типом кристаллической решетки. С точностью до малых тепловых флуктуаций относительное расположение атомов задается совокупностью векторов трансляций. При более высоких температурах, когда амплитуды смещений атомов из положений локального равновесия становятся заметными, понятие локальной структуры требует определения. Фактически речь идет о возможности рассматривать мгновенные расположения атомов в элементе вещества как результат, смещения из некоторых идеальных позиций.

В кристалле при низких температурах исходные положения, относительно которых рассматривается смещение атомов, — узлы идеальной решетки. Мы предполагаем, что во всех фазовых состояниях конденсированного вещества в большинстве элементов системы можно установить соответствие между положениями атомов и узлами некоторой решетки. Тип локальной решетки предполагается одинаковым для всех элементов системы, хотя он и не обязательно одинаков в различных фазах конденсированного вещества. После того, как в элементах системы установлено соответствие между атомами и узлами локальной (касательной) решетки, можно определить поворот  $\hat{g}(\vec{r})$  локальной решетки и ее деформацию  $\hat{u}(\vec{r})$ , которые позволяют наилучшим образом совместить узлы  $\vec{z}_a$  решетки с точками  $\vec{z}_a$  расположения атомов элемента системы. Для этого совместим узел локальной решетки с атомом в точке  $\vec{z}$  (центр элемента). Поворотом и однородной

деформацией минимизируем сумму  $\Delta(\vec{r})$  квадратов расстояний между узлами касательной решетки и соответствующими атомами:

$$\Delta(\vec{r}) = \sum_{\{a\}} (\vec{r}_a - \vec{r}'_a)^2$$

Здесь  $\vec{r}_a$  координаты атомов элемента с центром в точке  $\vec{r}$ ,  $\vec{r}'_a$  - координаты узлов касательной решетки после поворота и деформации. Такое построение определяет решетку, касательную к системе в точке  $\vec{r}$ , и вместе с ней поля поворота  $\hat{g}(\vec{r})$  и деформации  $\hat{u}(\vec{r})$ .

Начиная с некоторого элемента, построим отображение конденсированной системы на решетку вдоль всевозможных путей. Такое отображение, подробно рассмотренное в нашей работе [1], не является, вообще говоря, однозначным из-за существования в системе дефектов - вакансий, атомов внедрения и дислокаций. Точечные дефекты локальной решетки по своей структуре совпадают с хорошо известными изолированными точечными дефектами в кристалле. Имеется, однако, существенное отличие дислокации в конденсированном веществе по сравнению с одиночной дислокацией в кристалле. Возникающая при обходе вокруг линии дефекта невязка контура постоянна вдоль дислокации лишь относительно базиса, связанного с локальной решеткой. Этот базис в каждой точке  $\vec{r}$  повернут относительно общей для всего тела системы координат на угол, определяемый матрицей  $\hat{g}(\vec{r})$ . Если поворот  $\hat{g}(\vec{r})$  меняется в пространстве медленно, то (с точностью до малых по параметру  $\partial \hat{g} \ll 1$  членов) можно пренебречь изменением  $\hat{g}(\vec{r})$  для достаточно малого контура, охватывающего дислокацию, и определить вектор Бюргера  $\vec{b}(\vec{r})$  дефекта как невязку этого контура. Вдоль достаточно длинной дислокации относительный поворот локальной решетки может не быть малым. В этом случае ее вектор Бюргера, поворачиваясь вместе с локальной решеткой, существенно изменяется. Постоянен вектор

$$\hat{g}^{-1}(\vec{r}) \vec{b}(\vec{r}) = \text{const}$$

Если плотность дефектов невелика, то отображение на узлы решетки локально однозначно для основной части атомов в системе. Мы предполагаем, что конденсированное вещество удовлетво-

ряет этому условию. Иначе говоря, предполагается, что основная часть атомов конденсированной системы принадлежит многосвязной области с локальным кристаллическим порядком. Для этой части системы положение атомов определяется величиной деформации локальной идеальной решетки, ориентация которой относительно некоторой единой для всего тела системы координат задается матрицей поворота  $\hat{g}(\vec{r})$ . Остальные атомы принадлежат дефектам, из которых мы рассматриваем только дислокации. Атомы внедрения и вакансии, в принципе, можно считать дислокационными петлями малого размера. Это предположение и есть гипотеза локальной упорядоченности конденсированного вещества.

Согласно эмпирическому критерию Линдемана при температурах порядка температуры плавления средняя амплитуда смещения атомов  $\bar{\xi}$  составляет около четверти межатомного расстояния  $a$ . Предполагая гауссовский закон распределения вероятностей смещений, получим, что вероятность смещения  $\bar{\xi} \geq a/c$  составляет несколько процентов. В действительности для таких смещений оценка в гармоническом приближении неверна. Большие смещения атомов могут происходить лишь как коллективные движения в результате возбуждения наиболее мягких мод системы. Если флуктуации вдоль этих обобщенных координат приводят к смещениям атомов, сравнимым с межатомным расстоянием, то возникает неоднозначность в представлении конфигурации как совокупности дефектов и некоторой упругой деформации. Для оценки энергии этих конфигураций удобно такое представление, при котором деформации не слишком велики, а большие смещения части атомов описываются суперпозицией дефектов. При таком подходе даже в кристаллической фазе вблизи  $T_{пл}$  несколько процентов атомов принадлежат виртуальным дефектам, энергия образования которых сравнима с температурой.

Конфигурации атомов, удовлетворяющие требованиям гипотезы локальной упорядоченности, дают класс упаковок, обеспечивающих максимальную плотность при отсутствии дальнего порядка. Эти свойства соответствуют встречающемуся в литературе несколько неопределенному термину "случайная плотная упаковка", который, таким образом, получает конкретную реализацию. В отличие от идеальной плотной упаковки мы описываем широкий класс конфигураций, каждая из которых характеризуется, в частности, длинами корреляции трансляционных и ориентационных характеристик.

Идеальная плотная упаковка есть предельная упаковка этого класса, соответствующая минимуму случайности. Другим предельным случаем является очень плотный газ.

Представления о существовании локальной структуры не только в кристаллическом, но и в жидком и в аморфном состоянии вещества достаточно распространены, как, впрочем, и противоположные взгляды. Обзор этих представлений и ссылки на оригинальные работы можно найти в книгах [2]. В статьях [3] рассмотрены простейшие модели конденсированного вещества, в которых изучается ориентационный порядок в системе. Кляйнертом [4] и Обуховым [5] плавление бесструктурной среды рассматривалось как фазовый переход в системе дислокационных (дисклинационных) петель. Для адекватного описания конденсированного вещества нам представляется необходимым учет как локального порядка (структуры), так и беспорядка (распределения дефектов) и их взаимодействия. Цель настоящей работы — рассмотреть микроскопическую модель конденсированной системы. Основное предположение, на котором основана работа, — гипотеза о локальной упорядоченности конденсированного вещества.

Еще раз подчеркнем, что для описания класса состояний конденсированного вещества более широкого, чем состояние кристалла, необходимо описать не только локальный порядок, но и беспорядок в системе. Задание всех компонент упорядочения в теле (как порядка, так и беспорядка) позволяет параметризовать множество конфигураций статистически вероятных в конденсированном состоянии, и свести задачу к исследованию свойств системы с эффективным гамильтонианом, зависящим от полей, описывающих локальный порядок и беспорядок. Наше описание самосогласовано, если разупорядоченность в системе не слишком велика и может рассматриваться как нарушение некоторого вполне определенного порядка.

## 2. Эффективный гамильтониан конденсированного вещества

Физическая картина конденсированного состояния вещества, изложенная выше, основывается на принципиальном предположении о локальном соответствии элемента системы элементу упругодеформированного кристалла с некоторой плотностью дислокаций. Построим эффективный гамильтониан такой системы. Для опреде-

ленности мы рассмотрим случай, когда локальная решетка — простая кубическая с одним атомом в элементарной ячейке.

Энергия данной конфигурации конденсированного вещества включает энергию ядра дислокаций  $H_c$  и энергию упругой деформации вещества  $H_{el}$ . Согласно гипотезе локальной упорядоченности вещества для вероятных вариантов дислокационной структуры упругие напряжения и пространственные производные поля поворотов можно считать достаточно малыми. Гамильтониан  $H_{el}$  естественно строить в виде разложения по этим величинам. Для малых напряжений справедлив закон Гука:

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \Lambda_{ijkl}(\vec{r}) \epsilon_{kl}(\vec{r}) \quad (1)$$

Здесь  $\sigma_{ij}(\vec{r})$ ,  $\epsilon_{ij}(\vec{r})$ ,  $\Lambda_{ijkl}(\vec{r})$  — тензоры напряжения, деформаций и упругих модулей вещества, соответственно. Тензор упругих модулей в случае локальной кубической симметрии содержит три независимых параметра. Если пренебречь в младшем приближении относительным поворотом касательной решетки и воспользоваться соотношением (1), то энергия элемента вещества есть форма квадратичная по полю упругих напряжений. В локальной системе координат, оси которой ориентированы по осям анизотропии локального кристалла, это выражение имеет хорошо известный вид:

$$h_{el}(\vec{r}) = \frac{\sigma_{\alpha\beta}^2}{4\mu} + \frac{P\sigma_{\alpha\alpha}^2}{4\mu} + \lambda \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha\alpha} \epsilon_{\alpha\alpha}; \quad P = \frac{-\nu}{1+\nu} \quad (2)$$

Мы используем стандартные обозначения [6]:  $\mu$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\lambda$  — модуль кубической анизотропии.

В формуле (2) два первых члена, инвариантные относительно преобразований группы трехмерных вращений, описывают изотропную часть упругой энергии. Последний член обусловлен кубической анизотропией и инвариантен относительно преобразований группы куба. Выражение (2) необходимо записать в декартовой системе координат общей для всего тела. Такую систему будем называть глобальной. Переход к глобальной системе сводится к повороту базиса в каждом элементе вещества. Изотропная часть выражения (2) остается при этом без изменений. Кубический член преобразуется к виду:

$$\lambda T^{ijkl}(\vec{r}) \sigma_{ij}(\vec{r}) \epsilon_{kl}(\vec{r}) \quad (3)$$

где тензор

$$T^{ijkl}(\vec{r}) = \sum_{\alpha=1}^3 U^{i\alpha}(\vec{r}) U^{j\alpha}(\vec{r}) U^{k\alpha}(\vec{r}) U^{l\alpha}(\vec{r}) \quad (4)$$

Латинские индексы нумеруют компоненты тензоров относительно глобального базиса. Матрица поворота  $U^{ij}(\vec{r})$  переводит тройку базисных векторов локальной системы координат в глобальные реперы. Элементы этой матрицы суть направляющие косинусы локальных реперов относительно глобального базиса. Абсолютно симметричный тензор (4) определяет ориентацию осей анизотропии элемента вещества и может рассматриваться как параметр ориентационного порядка [3].

В рассматриваемом младшем приближении упругая энергия данной конфигурации полей напряжения и поворота согласно формулам (2,3) есть:

$$H_{el} = \int dV \left\{ \frac{\sigma_{ij}^2}{4\mu} + \frac{P\sigma_{ii}^2}{4\mu} + \lambda T^{ijkl} \sigma_{ij} \sigma_{kl} \right\} \quad (5)$$

Формула (5) обобщает известное выражение теории упругости на случай непостоянного направления осей локальной анизотропии. В следующем приближении гамильтониан  $H_{el}$  должен содержать члены, квадратичные по пространственным производным полей напряжения и поворота. При решении задач теории упругости этими членами пренебрегают, т.к. характерный размер, на котором происходит изменение поля напряжения, на несколько порядков больше межатомного. В конденсированном веществе вероятны конфигурации с заметным изменением полей напряжения и поворота на расстоянии в несколько межатомных расстояний, так что упомянутые поправки к упругой энергии (5) могут быть существенными. Мы ограничимся приближением (5): роль поправок к нему обсуждается отдельно [1]. В принципе, формулу (5) можно дополнить ангармоническими членами, которыми мы в этой работе пренебрегаем. Предполагается, что возникновение в каких-то элементах тела больших локальных напряжений приводит к неупругой деформации, т.е. к изменению дислокационной структуры.

Энергию ядра (кора) дислокационной структуры рассматриваемой конфигурации конденсированного вещества учитывает член эффективного гамильтониана:

$$H_c = \sum \oint \epsilon \vec{c} d\vec{r} \quad (6)$$

В формуле (6) параметр  $\epsilon$  — энергия единицы длины кора дислокации; единичный вектор  $\vec{c}(\vec{r})$ , касательный к линии дислокации, задает ее форму. В выражении (6) выполняется интегрирование вдоль дислокационной петли и суммирование по всем дислокациям данного состояния. Величина  $\epsilon$  зависит от значения вектора Бюргерса дислокации и от ее формы. Ниже мы рассматриваем лишь петли с минимальными векторами Бюргерса и считаем величину  $\epsilon$  заданным параметром, одинаковым для всех дислокаций.

Еще раз подчеркнем важный момент, касающийся понятия вектора Бюргерса дислокации. В кристалле, как известно [6], отсутствует заметный относительный поворот осей анизотропии элементов тела, и вектор Бюргерса дислокации постоянен по величине и направлению вдоль всей петли. В общем случае в конденсированном состоянии компоненты вектора Бюргерса петли неизменны относительно локального базиса. При движении вдоль петли вектор Бюргерса поворачивается вместе с локальной решеткой [1]. Будем рассматривать дислокации с векторами Бюргерса:

$$\vec{b}(\vec{r}) = \pm \vec{e}^{(\alpha)}(\vec{r}) \quad (7)$$

где  $\vec{e}^{(\alpha)}(\vec{r})$  — векторы элементарных трансляций локальной идеальной решетки. Компоненты вектора элементарной трансляции в глобальной системе координат есть соответствующие элементы матрицы поворота к глобальному базису:

$$e_i^{(\alpha)}(\vec{r}) = U^{i\alpha}(\vec{r}) \quad (8)$$

Напомним, что межатомный размер идеальной решетки считается единичным.

Дислокационная структура определяет конфигурацию конденсированного вещества с точностью до малой совместной деформа-

ции. Конфигурацию петель с данным распределением векторов Бюргера на них охарактеризуем тензором плотности дислокаций [7]:

$$\alpha_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\mathcal{D}} \tau_i(\vec{r}) \tau_j(\vec{r}) \quad (9)$$

В формуле (9) выполняется суммирование по всем дислокациям конфигурации. Выражение для эффективной энергии конденсированного вещества станет содержательным, если будет указана связь полей напряжения и поворота с тензором плотности дислокаций.

### 3. Связь тензора напряжений с полем плотности дислокаций

Поле плотности дислокаций является источником полей упругого напряжения и поворота. Установим связь между тензором упругих напряжений и тензором плотности дислокаций.

Воспользуемся известным приемом [8] и запишем поле  $\sigma_{ij}(\vec{r})$  через векторный  $\varphi_i(\vec{r})$  и тензорный  $A_{ij}(\vec{r})$  потенциалы:

$$\sigma_{ij} = \mu(\partial_i \varphi_j + \partial_j \varphi_i) - \frac{2\mu P}{1+3P} \delta_{ij} \partial_k \varphi_k - \epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} \quad (10)$$

Очевидно, поле напряжений инвариантно относительно калибровочного преобразования тензорного потенциала:

$$A'_{ij} = A_{ij} + \partial_i \chi_j \quad (11)$$

Для однозначности представления (10) фиксируем калибровку поля  $A_{ij}(\vec{r})$  условием:

$$\partial_i A_{ij} = 0 \quad (12)$$

Для любой физической конфигурации тензор  $\sigma_{ij}$  должен быть симметричным относительно перестановки индексов, поэтому потребуем, чтобы наряду с калибровочным (12) выполнялось условие:

$$\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} = \epsilon_{jkl} \partial_k A_{li} \quad (13)$$

Прежде всего рассмотрим случай, когда напряжение вещества обусловлено лишь наличием несовместности. Для такой конфигурации поле  $\sigma_{ij}(\vec{r})$  удовлетворяет уравнению [6]:

$$\partial_i \sigma_{ij} = 0 \quad (14)$$

Нетрудно видеть, что в этом случае поле напряжений есть ротор тензорного потенциала:

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = -\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} \quad (15)$$

После подстановки выражения (15) в формулу (5) квадратичная по полю  $A_{ij}$  часть гамильтониана  $H_{el,d}$  имеет следующий вид:

$$H_{el,d} = \int dV \left\{ \frac{1}{4\mu} (\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj})^2 + \frac{P}{4\mu} (\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj})^2 + \frac{1}{4\beta} (\epsilon_{ikl} \partial_k A_{lj} - \epsilon_{jkl} \partial_k A_{li})^2 + \frac{1}{2\alpha} (\partial_i A_{ij})^2 \right\} \quad (16)$$

Величины  $\alpha, \beta$  — некоторые параметры. Два последних члена включены в функционал (16) для того, чтобы (в пределе  $\alpha, \beta \rightarrow 0$ ) обеспечить выполнение условий (12,13) для конфигураций поля  $A_{ij}$  с конечной упругой энергией. В импульсном представлении квадратичная форма (16) есть:

$$H_{el,d}(A_{ij}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} A_{li}(\vec{q}) M_{ij}^{ln} A_{nj}(-\vec{q}) \quad (17)$$

$$M_{ij}^{ln}(\vec{q}) = q^2 \left\{ (a+b+c) \delta_{ij} \delta_{ln} + d \delta_{ij} n_l n_n + a \delta_{ln} n_i n_j - b \delta_{il} \delta_{jn} - c \delta_{in} \delta_{jl} + d n_i n_j n_n n_l \right\}$$

где использованы обозначения:

$$n_i = q_i / |\vec{q}|, \quad S_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j \quad (18)$$

$$a = \frac{1}{4\mu} + \frac{1}{\beta}, \quad b = \frac{1}{4\mu} - \frac{1}{\beta}, \quad c = \frac{P}{2\mu}, \quad d = \frac{1}{2}$$

В Приложении I выписан оператор  $D_{ij}^{ln}(\vec{q})$  (III.9) обратный оператору (17):

$$M_{ik}^{ln} D_{kj}^{mn} = \delta_{ln} \delta_{ij} \quad (19)$$

В пределе  $\alpha, \beta = 0$  оператор  $D_{ij}^{ln}(\vec{q})$  есть:

$$D_{ij}^{ln} |_{\alpha, \beta = 0} = \frac{2\mu}{q^2} \left\{ \frac{1+P}{1+2P} \delta_{ij} S_{en} - \frac{1}{2} S_{ie} S_{jn} + \frac{P}{1+2P} S_{in} S_{je} \right\} \quad (20)$$

Рассмотрим выражение:

$$H_{el,d} \{ \alpha_{ij} \} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \alpha_{ei}(\vec{q}) D_{ij}^{ln} \alpha_{nj}(-\vec{q}) \quad (21)$$

где оператор  $D_{ij}^{ln}$  определен формулой (20); тензор  $\alpha_{ei}(\vec{q})$  — фурье-образ введенного выше (9) поля плотности дислокаций. Для состояния, в котором отсутствует поворот осей анизотропии, выражение (21) совпадает с известной формулой Блина [9] для величины упругой энергии упруго-изотропного тела с заданной системой дислокаций. С другой стороны, выражение (17) также есть упругая энергия вещества с системой дислокации, но записанная через тензорный потенциал. Сравнение формул (17) и (21) дает искомую связь:

$$A_{ei}(\vec{q}) = D_{ij}^{ln}(\vec{q}) \alpha_{nj}(\vec{q}) \quad (22)$$

Соотношение (22) справедливо в младшем приближении для конфигураций дислокаций в кубическом кристалле, если модуль кубической анизотропии не слишком велик. Связь (22) естественно обобщить на конфигурации конденсированного вещества с непостоянной по объему тела ориентацией осей локальной анизотропии. Можно также придать соотношению форму явно инвариантную относительно калибровочных преобразований поля  $A_{ij}(\vec{r})$ . В координатном представлении соответствующее выражение есть:

$$\epsilon_{ikl} \partial_k \{ A_{lj}(\vec{r}) - \int D_{jn}^{ln}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha_{mi}(\vec{r}') d^3 r' \} \quad (23)$$

В общем случае связь тензора упругих напряжений с потенциалами определяется соотношением (10). Такие конфигурации поля  $A_{ij}(\vec{r})$  представляют собой суперпозицию напряжений, обусловленных как наличием несовместимости в теле, так и совместной упругой деформацией вещества. Подставим (10) в выражение (5)

и выделим квадратичную по потенциалам часть упругой энергии системы:

$$H_{el} \{ A, \varphi \} = \int \left\{ \frac{1}{2} A_{ei} M_{ij}^{ln} A_{nj} + \frac{1}{2} \varphi_i L_{ij} \varphi_j \right\} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \quad (24)$$

Оператор  $M_{ij}^{ln}(\vec{q})$  определен формулой (17).

$$L_{ij}(\vec{q}) = \mu q^2 \left( \delta_{ij} + \frac{1+P}{1+3P} n_i n_j \right) \quad (25)$$

При записи поля напряжений через потенциалы в формуле (10) изотропная часть гамильтониана (5) представляется в виде суммы упругой энергии системы дислокаций (17) и энергии малой совместной деформации вещества:

$$H_{el,ph} \{ \varphi_i \} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \varphi_i(\vec{q}) L_{ij} \varphi_j(-\vec{q}) \quad (26)$$

Как видно из формулы (10), в отсутствие дислокаций потенциал  $\varphi(\vec{r})$  совпадает с полем смещений, т.е. функционал (26) есть энергия фононов в конденсированном веществе. Член упругой энергии, обусловленный локальной кубической анизотропией вещества, рассматриваем как возмущение.

В этом приближении формулы (5), (10) и условие (23) дают упругую энергию конфигурации конденсированного вещества.

#### 4. Условие совместности

Как уже подчеркивалось, при описании заданной конфигурации конденсированного вещества поля напряжения, поворота и плотности дислокаций не могут задаваться независимо. Между ними существует локальная связь, которую будем называть условием совместности. В кристаллической фазе вероятны лишь конфигурации без заметного относительного поворота осей анизотропии элементов тела. Для таких конфигураций вид условия совместности известен. Ниже выводится условие совместности в общем случае, когда относительный поворот осей элементов не мал. Это соотношение имеет форму справедливую для произвольного фазового состояния конденсированного вещества.

Рассмотрим элемент конденсированного вещества такого размера, чтобы был мал относительно поворота осей анизотропии для любых двух принадлежащих ему точек. Построим касательную систему координат, выбрав за оси среднее по рассматриваемому элементу направление осей анизотропии. В этой системе координат для выделенной части вещества матрица поворота  $U_{ij}(\vec{r})$  близка к единичной. Относительный поворот можно описать полем инфинитезимальных вращений  $\vec{\omega}(\vec{r})$ , которое известным образом связано с матрицей конечных вращений:

$$U_{ij}(\vec{r}) = \exp\{-\omega_n(\vec{r}) \hat{T}_n\}_{ij} \quad (27)$$

Матрицы  $\hat{T}_n$  - генераторы инфинитезимальных поворотов группы  $O(3)$  в векторном представлении. Условие совместности обычно записывают именно для поля  $\vec{\omega}(\vec{r})$ . В одном из эквивалентных вариантов записи оно имеет следующий вид [7]:

$$\partial_j \omega_i = \alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - \epsilon_{ikl} \partial_k u_{lj} \quad (28)$$

$u_{lj}$  - тензор деформации.

Выражение (28) применимо для всего объема кристалла с малой плотностью дислокаций. В состоянии с глобальной изотропией формула (28) справедлива для любого достаточно малого элемента конденсированного вещества, если фигурирующие в ней величины записаны в касательной системе координат. В последнем случае относительный поворот необходимо выразить через матрицу  $U_{ij}(\vec{r})$  и преобразовать равенство (28) к глобальной системе координат. Для того, чтобы правильно выразить левую часть равенства (28) через матрицу конечных вращений необходимо учесть свойства локальной симметрии структуры вещества. Произвольный конечный поворот элемента вещества относительно соседних возможен лишь при наличии соответствующих упругих напряжений и плотности дефектов, на что и указывает условие совместности. Если, однако, этот поворот есть одно из преобразований группы симметрии локальной решетки, то нарушения структуры не возникает, напряжения и дефекты отсутствуют. Очевидно, для рассматриваемого случая в левой части равенства (28) матрицы поворота могут фигу-

рировать лишь в комбинациях инвариантных относительно преобразований группы куба. Соответствующая величина есть введенное выше (4) поле  $T_{ijkl}(\vec{r})$  - параметр ориентационного порядка. Имеем:

$$\frac{1}{2} \epsilon_{ikl} T^{krpq} \partial_j T^{lprq} = \alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - \epsilon_{ikl} \partial_k u_{lj} \quad (29)$$

Формула (29) обобщает условие совместности (28) на случай не постоянной по объему вещества ориентации осей анизотропии. Для конфигураций, вероятных в кристаллической фазе, соотношение (28) и (29) совпадают, в чем легко убедиться с помощью формул (4, 27).

Преобразуем соотношение (29). Воспользуемся формулой (I) и выразим тензор деформации через поле упругих напряжений. В пренебрежении членом, связанным с локальной кубической анизотропией, имеем:

$$u_{ij} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{ij} + \frac{P}{2\mu} \delta_{ij} \sigma_{kk} \quad (30)$$

Тензор напряжений, в свою очередь, выразим через потенциалы согласно формуле (IO). Условие совместности принимает следующий вид:

$$\alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - X_{ij} - \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \partial_k \partial_j \varphi_l + \frac{1}{2\mu} (\epsilon_{ikl} \epsilon_{lmn} \delta_{js} + P \epsilon_{ikj} \epsilon_{smn}) \partial_k \partial_m A_{ns} = 0 \quad (31)$$

где введено обозначение:

$$X_{ij} = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} T^{krpq} \partial_j T^{lprq} \quad (32)$$

Соотношение (31) дает локальную связь между полем параметра ориентационного порядка, потенциалами тензора упругих напряжений и полем плотности дислокаций, которая должна выполняться для каждой физической конфигурации этих полей.



### 5. Статистическая сумма конденсированного вещества

Гипотеза о локальном кристаллическом порядке позволила параметризовать вероятные конфигурации конденсированного вещества набором тензорных величин: полями поворота, упругого напряжения и плотности дислокаций. Статистические свойства системы этих полей определяются функциональным интегралом вида:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{N} \sum_{\{\alpha\}} \int \mathcal{D}\sigma_{ij} \mathcal{D}U_{ij} F\{\sigma_{ij}, U_{ij}, \alpha_{ij}\} \quad (33)$$

который будем называть статистической суммой конденсированного вещества.

Выражение (33) означает, что функционал  $F$  должен быть проинтегрирован по всем физически различным конфигурациям полей напряжения и поворота и просуммирован по всем возможным конфигурациям дислокационных петель. Функционал под знаком интеграла будем называть гиббсианом. В простых случаях гиббсиан

$$F\{\dots\} \sim \exp\left[-\frac{H\{\dots\}}{T}\right] \quad (34)$$

где  $H\{\dots\}$  - эффективный гамильтониан рассматриваемой системы полей. В нашем случае, однако, поля, по которым ведется интегрирование в статсумме, не являются независимыми. Выше были найдены связи (23) и (31), которые должны выполняться для любой физической конфигурации полей. Очевидно, гиббсиан наряду с множителем (34) должен содержать сомножителями функциональные  $\delta$ -функции, обеспечивающие выполнение этих условий. Соответствующее выражение есть:

$$F\{\varphi_i, A_{ij}, U_{ij}, \alpha_{ij}\} = \exp\left\{-\frac{H}{T}\right\} \prod_{\vec{r}} \{\delta(\lambda_{ij}^{(1)}) \delta(\lambda_{ij}^{(2)})\} \quad (35)$$

где гамильтониан системы полей:

$$H = \int dV \left[ \frac{1}{2} A_{ei} M_{ij}^{ln} A_{nj} + \frac{1}{2} \varphi_i L_{ij} \varphi_j \right] + \sum_{\vec{r}} \phi \in \vec{r} d\vec{x} \quad (36)$$

Функции  $\lambda_{ij}^{(n)}(\vec{r})$  описывают связи системы:

$$\lambda_{ij}^{(1)}(\vec{r}) = \epsilon_{ikl} \partial_k [A_{ej} - \int dV' \mathcal{D}_{jn}^{lm}(\vec{r}-\vec{r}') \alpha_{mn}(\vec{r}')] \quad (37)$$

$$\lambda_{ij}^{(2)}(\vec{r}) = \alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - X_{ij} - \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \partial_k \partial_j \varphi_l + \frac{1}{2\mu} (\epsilon_{ikl} \epsilon_{lmn} \delta_{js} + P \epsilon_{ikj} \epsilon_{lmn}) \partial_k \partial_m A_{ns}$$

согласно условиям (23,31). В выражении (35) произведение  $\delta$ -функций берется по всем точкам системы.

Выражение (35) - сложный функционал системы тензорных полей. Детальное исследование его свойств не может быть выполнено в рамках одной работы. Наша цель - получить эффективный гиббсиан для поля параметра ориентационного порядка  $T^{ijk}(\vec{r})$  и продемонстрировать существование фаз: низкотемпературной с глобальным ориентационным порядком и высокотемпературной - глобально изотропной. Для этого функционал (35) необходимо проинтегрировать по конфигурациям поля упругих напряжений и просуммировать по распределению дислокаций. Выше отмечалось взаимно однозначное соответствие конфигураций поля напряжений и конфигураций полей потенциалов при фиксированной калибровке тензорного потенциала. Интегрирование по конфигурациям поля  $\sigma_{ij}$  заменим интегрированием по конфигурациям полей  $\varphi_i$  и  $A_{ij}$ :

$$\int \mathcal{D}\sigma_{ij} \rightarrow \int \mathcal{D}\varphi_i \mathcal{D}A_{ij}$$

Якобиан перехода к новым переменным отнесем в нормирующий множитель  $\mathcal{N}$ .

Эффективный гиббсиан поля  $T^{ijk}(\vec{r})$  есть:

$$F\{T^{ijk}(\vec{r})\} = \mathcal{N} \sum_{\vec{r}} \int \mathcal{D}\varphi_i \mathcal{D}A_{ij} \exp\left\{-\frac{H}{T}\right\} \prod_{\vec{r}} \delta(\lambda^{(1)}) \delta(\lambda^{(2)}) \quad (38)$$

Представим  $\delta$ -функции в виде функциональных интегралов:

$$\prod_{\vec{r}} \delta(\lambda_{ij}(\vec{r})) = \int \mathcal{D}\eta_{ij} \exp\left\{-\int dV \eta_{ij} \lambda_{ij}\right\} \quad (39)$$

после чего выражение (38) примет следующий вид:

$$F\{T^{ijk}(\vec{r})\} = \mathcal{N} \sum_{\vec{r}} \int \mathcal{D}\varphi_i \mathcal{D}A_{ij} \mathcal{D}\eta_{ij} \mathcal{D}\lambda_{ij}^* \quad (40)$$

$$\cdot \exp \left\{ - \int \frac{\epsilon}{T} \vec{c} d\vec{x} - \int dV \Phi \right\}$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{c}) = & \frac{1}{2T} (A_{ei} M_{ij}^{ln} A_{nj} + \varphi_i L_{ij} \varphi_j) + i \eta_{ei} (A_{ei} - \\ & - \int \mathcal{D}_{ij}^{ln}(\vec{c} - \vec{c}') \alpha_{nj}(\vec{c}') dV') + i X_{ij} \left[ \alpha_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} - X_{ij} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \partial_k \partial_l \varphi_e + \frac{1}{2\mu} (\epsilon_{ikl} \epsilon_{lmn} \delta_{js} + \rho \epsilon_{ikj} \epsilon_{smn}) \partial_k \partial_m A_{ns} \right] \end{aligned} \quad (41)$$

Дальнейшие вычисления удобно проводить, записав поля в импульсном представлении. Во многих последующих соотношениях фигурируют операторы  $O_{ij}^{ln}(\vec{q})$ , аналогичные по своей структуре оператору  $M_{ij}^{ln}(\vec{q})$ , определенному формулой (17). При интегрировании гиббсиана возникает необходимость вычислять свертки операторов  $O_{ij}^{ln}(\vec{q})$  между собой, а также обратные операторы  $O_{ij}^{-1ln}(\vec{q})$ , удовлетворяющие соотношению:

$$O_{ij}^{-1ln}(\vec{q}) O_{jk}^{nm}(\vec{q}) = \delta_{em} \delta_{ik}$$

Эти простые, но несколько громоздкие вычисления вынесены в Приложение I, где описан метод расчета и приведены все встречающиеся в тексте операторы.

Функциональный интеграл по полю  $A_{ij}(\vec{q})$  - гауссов:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_A = & \int \mathcal{D}A_{ij} \exp \left\{ - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[ \frac{1}{2T} A_{ei} M_{ij}^{ln} A_{nj} + \right. \right. \\ & \left. \left. + i A_{ei} (\eta_{ei} + R_{ij}^{ln} X_{nj}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (42)$$

Оператор  $R_{ij}^{ln}(\vec{q})$  определен формулой (III.10). Значение интеграла (42) есть:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_A = & \exp \left\{ - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[ \frac{T}{2} \eta_{ei} \mathcal{D}_{ij}^{ln} \eta_{nj} + T \eta_{ei} \mathcal{D}_{ik}^{ln} \right. \right. \\ & \left. \left. * R_{kj}^{mn} X_{nj} + \frac{T}{2} X_{ei} R_{ik}^{ln} \mathcal{D}_{kp}^{mq} R_{pj}^{qn} X_{nj} \right] \right\} \end{aligned} \quad (43)$$

где  $\mathcal{D}_{ij}^{ln}(\vec{q})$  - оператор обратный  $M_{ij}^{ln}$  (III.9). Возникший при интегрировании постоянный множитель отнесен в нормировку. Совершенно аналогично вычисляется функциональный интеграл по полю  $\varphi_i$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_\varphi = & \int \mathcal{D}\varphi_i \exp \left\{ - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[ \frac{1}{2T} \varphi_i L_{ij} \varphi_j + \right. \right. \\ & \left. \left. + i X_{ij} \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} q_k q_l \varphi_e \right] \right\} \end{aligned} \quad (44)$$

Получим:

$$\mathcal{J}_\varphi = \exp \left\{ - \frac{T}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} X_{ei} \mathcal{N}_{ij}^{ln} X_{nj} \right\} \quad (45)$$

где оператор  $\mathcal{N}_{ij}^{ln}(\vec{q})$  определен формулой (III.11). Согласно формулам (42-45) гиббсиан системы (40) после интегрирования по конфигурациям полей  $\varphi_i(\vec{c})$  и  $A_{ij}(\vec{c})$  принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} F\{T_{ij}^{kl}(\vec{c})\} = & \mathcal{N} \sum_{\{\alpha\}} \exp \left\{ - \frac{\epsilon}{T} \int \frac{\epsilon}{T} \vec{c} d\vec{x} \right\} * \int \mathcal{D}\tilde{\eta}_{ij} \mathcal{D}X_{ij} * \\ & * \exp \left\{ - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[ \frac{T}{2} \tilde{\eta}_{ei} M_{ij}^{ln} \tilde{\eta}_{nj} + T \tilde{\eta}_{ei} R_{ij}^{ln} X_{nj} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{T}{2} X_{ei} (R_{ik}^{ln} \mathcal{D}_{kp}^{mq} R_{pj}^{qn} + \mathcal{N}_{ij}^{ln}) X_{nj} - i \alpha_{ij} (\tilde{\eta}_{ij} - X_{ij} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2} \delta_{ij} X_{kk}) - i X_{ij} X_{ij} \right] \right\} \end{aligned} \quad (46)$$

В выражении (46) использована новая функциональная переменная

$$\tilde{\eta}_{ei} = \mathcal{D}_{ij}^{ln} \eta_{nj}$$

Выполним еще одно преобразование переменных. Введем тензорное поле  $\Phi_{ij}(\vec{c})$  следующим образом:

$$\tilde{\eta}_{ei} = \Phi_{ei} + C_{ij}^{ln} X_{nj} \quad (47)$$

где оператор

$$C_{ij}^{ln} = \delta_{en} \delta_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ei} \delta_{nj} \quad (48)$$

После подстановки (47) выражение в показателе экспоненты в формуле (46) примет следующий вид:

$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[ \frac{T}{2} \phi_{ei} M_{ij}^{ln} \phi_{nj} + T \phi_{ei} S_{ij}^{ln} \chi_{nj} + \frac{T}{2} \chi_{ei} Q_{ij}^{ln} \chi_{nj} - i \alpha_{ij} \phi_{ij} - i \chi_{ij} \chi_{ij} \right] \quad (49)$$

Здесь введены обозначения:

$$Q_{ij}^{ln} = R_{ik}^{lm} D_{kr}^{mq} R_{rj}^{qn} + N_{ij}^{ln} + C_{ik}^{lm} M_{kr}^{mq} C_{rj}^{qn} + C_{ik}^{lm} R_{kj}^{mn} + R_{ik}^{lm} C_{kj}^{mn} \quad (50)$$

$$S_{ij}^{ln} = M_{ik}^{lm} C_{kj}^{mn} + R_{ij}^{ln}$$

Явный вид этих операторов дан в Приложении I (III.12, III.13). Проинтегрировав, наконец, гиббсиан по конфигурациям поля  $\chi_{ij}$ , получим:

$$F\{T_{ij}^{kl}(\vec{z})\} = N \int \mathcal{D}\phi_{ij} \exp[-\tilde{H}\{\phi_{ij}, \chi_{ij}\}] \mathcal{Z}_D \quad (51)$$

где

$$\tilde{H}\{\phi_{ij}, \chi_{ij}\} = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{T}{2} \phi_{ei} (M_{ij}^{ln} - S_{ik}^{lm} Q_{kj}^{-1mp} * S_{kj}^{qn}) \phi_{nj} + i \phi_{ei} S_{ik}^{lm} Q_{kj}^{-1mn} \chi_{nj} + \frac{1}{2T} \chi_{ei} Q_{ij}^{-1ln} \chi_{nj} \right\} \quad (52)$$

$$\mathcal{Z}_D = \sum_{\{\alpha\}} \exp \left\{ - \sum_{\alpha} \oint \frac{\epsilon}{T} \vec{c} d\vec{x} + i \int dV \phi_{ij} \alpha_{ij} \right\} \quad (53)$$

В выражении (51) выделен функционал  $\mathcal{Z}_D$  (53), который определяется распределением дислокаций в конденсированном веществе. Запишем второй член в показателе экспоненты в формуле (53) в виде суммы интегралов по дислокационным петлям. Воспользуемся формулой (9), в которой единичный вектор  $\vec{c}(\vec{z})$  (касательный

к линии данной дислокации в каждой ее точке) представим петлевым интегралом

$$\vec{c}_i = \oint \delta(\vec{z} - \vec{z}') d\vec{z}' \quad (54)$$

После подстановки выражений (9) и (54) в формулу (53) и интегрирования получим:

$$\mathcal{Z}_D = \sum_{\{\alpha\}} \exp \left\{ - \sum_{\alpha} \oint \left( \frac{\epsilon}{T} \vec{c}_i - i \phi_{ij} \vec{b}_j^{(\alpha)} \right) d\vec{z}_i \right\} \quad (55)$$

Напомним, что вектор  $\vec{b}(\vec{z})$  есть вектор Бюргерса дислокаций.

Для вычисления эффективного гиббсиана поля параметра ориентационного порядка (51) необходимо найти сумму (55). Эта задача решается в следующем разделе статьи, см. также Приложение 2.

#### 6. Модельная система. Суммирование по конфигурациям дислокаций

В эффективном гиббсиане параметра ориентационного порядка (51) выделен сомножителем функционал  $\mathcal{Z}_D$  (53), который представляет собой сумму величин:

$$\exp \left\{ - \sum_{\alpha} \oint \left( \frac{\epsilon}{T} \vec{c}_i - i \phi_{ij} \vec{b}_j^{(\alpha)} \right) d\vec{z}_i \right\} \quad (56)$$

вычисленных для всевозможных вариантов дислокационной структуры. В сумме учитываются различные пространственные конфигурации дислокаций и различные распределения значений их векторов Бюргерса. Форма (56) записи величины  $\mathcal{Z}_D$  неудобна для анализа, т.к. содержит линейные интегралы функций по замкнутым контурам. В Приложении 2 изложен метод, который позволяет представить сумму  $\mathcal{Z}_D$  в виде функционального интеграла:

$$\mathcal{Z}_D = N \int \prod_{\alpha} \mathcal{D}\psi^{(\alpha)} \mathcal{D}\psi^{*(\alpha)} \exp(-H_d\{\psi^{(\alpha)}\}) \quad (57)$$

где

$$H_d = \sum_{\{\alpha\}} \int dV \left\{ \psi^{(\alpha)} \psi^{(\alpha)*} + g(|\psi^{(\alpha)}|^2)^2 - \sum_{\vec{d}} \psi^{(\alpha)}(\vec{z}) \psi^{*(\alpha)}(\vec{z} + \vec{d}) * G^{(\alpha)}(\vec{z}, \vec{z} + \vec{d}) \right\} \quad (58)$$

Функция  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  и параметр  $\mathcal{J}$  определены формулами (П2.3) и (П2.4), соответственно. Сумма по распределению дислокаций величин (56) представлена в виде интеграла (57) по конфигурациям комплексных скалярных полей  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ). Этот математический прием известен в теории поля и статистической физике. Поля  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$ , описывающие распределение дефектов в конденсированном веществе, можно назвать параметрами беспорядка.

Эффективный гиббсиан параметра ориентационного порядка после описанного преобразования имеет следующий вид:

$$F\{T^{ij}(\vec{r})\} = \mathcal{N} \int \prod_{\alpha} \mathcal{D}\psi^{(\alpha)} \mathcal{D}\psi^{*(\alpha)} * \exp[-\tilde{H}\{\Phi_{ij}, X_{ij}\} - H_d\{\psi^{(\alpha)}, \Phi_{ij}\}] \quad (59)$$

где первый член в показателе экспоненты определен формулой (52), а второй — формулой (58). Функционал (59) достаточно сложен. Здесь мы рассмотрим более простую модельную систему. Гиббсиан модельной системы отличается от выражения (59) тем, что в последнем члене гамильтониана  $H_d$ :

$$-\sum_{\alpha} \int dV \mathcal{J} \psi^{(\alpha)}(\vec{r}) \psi^{*(\alpha)}(\vec{r}+\vec{d}) \exp\left\{i \int_{\vec{r}}^{\vec{r}+\vec{d}} \Phi_{ij} b_j^{(\alpha)} d r'_i\right\} \quad (60)$$

экспонента заменена несколькими членами ее разложения. Интеграл в показателе экспоненты представим в виде ряда:

$$\int_{\vec{r}}^{\vec{r}+\vec{d}} \Phi_{ij}(\vec{r}') b_j^{(\alpha)}(\vec{r}') d r'_i = \Phi_{ij}(\vec{r}) b_j^{(\alpha)} d_i + \partial_i(\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)}) \frac{d_i^2}{2} + \dots \quad (61)$$

В локально упорядоченном состоянии поля  $\Phi_{ij}(\vec{r})$  и  $b_j^{(\alpha)}(\vec{r})$  мало меняются на размере порядка межатомного. Использование разложения (61) для интеграла по отрезку, соединяющему соседние узлы решетки, представляется оправданным и в общем случае. Произведение амплитуд полей  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$  в соседних узлах заменим разложением:

$$\psi^{(\alpha)}(\vec{r}) \psi^{*(\alpha)}(\vec{r}+\vec{d}) = |\psi^{(\alpha)}|^2 + \psi^{(\alpha)} \partial_i \psi^{*(\alpha)} d_i + \psi^{(\alpha)} \partial_i^2 \psi^{*(\alpha)} \frac{d_i^2}{2} + \dots \quad (62)$$

Удерживая выписанные члены, подставим разложения (61, 62) в формулу (60). После суммирования по векторам  $\vec{d}$ , т.е. по соседним узлам локальной кубической решетки, получим:

$$-\int dV 2\mathcal{J} \sum_{i,\alpha} \left[ |\psi^{(\alpha)}|^2 \cos(\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)}) + i \psi^{(\alpha)} \partial_i \psi^{*(\alpha)} \sin(\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)}) + \frac{1}{2} \psi^{(\alpha)} \partial_i^2 \psi^{*(\alpha)} \cos(\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)}) \right] \exp\left[i \frac{1}{2} \partial_i(\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)})\right] \quad (63)$$

Представим тригонометрические функции в формуле (63) в виде ряда:

$$-\int dV \left\{ n\mathcal{J} |\psi^{(\alpha)}|^2 - |\psi^{(\alpha)}|^2 (\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)})^2 + 2i \psi^{(\alpha)} \partial_i \psi^{*(\alpha)} * \Phi_{ij} b_j^{(\alpha)} + i |\psi^{(\alpha)}|^2 \partial_i(\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)}) + \psi^{(\alpha)} \partial_i^2 \psi^{*(\alpha)} + \dots \right\} \quad (64)$$

$n$  — число ближайших соседей в локальной решетке; по повторяющимся индексам в формуле (64) подразумевается суммирование. В выражении (64) удержаны члены, в которых сумма степени поля  $\Phi_{ij}(\vec{r})$  и пространственной производной не превышает двух. Иначе говоря, разложение выписано с точностью до квадрата ковариантной по полю  $\Phi_{ij}(\vec{r})$  производной поля  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$ . После замены выражения (60) разложением (64) и интегрирования по частям эффективный гамильтониан  $H_d$  принимает следующий относительно простой вид:

$$\tilde{H}_d = \sum_{\alpha} \int dV \left\{ \mathcal{J} |\psi^{(\alpha)}|^2 + i \mathcal{J} (\psi^{(\alpha)} \partial_i \psi^{*(\alpha)} \psi^{(\alpha)} \psi^{*(\alpha)} * \Phi_{ij} b_j^{(\alpha)} + (1-n\mathcal{J}) |\psi^{(\alpha)}|^2 + g |\psi^{(\alpha)}|^2 + \mathcal{J} |\psi^{(\alpha)}|^2 (\Phi_{ij} b_j^{(\alpha)})^2 \right\} \quad (65)$$

Эффективный гиббсиан модельной системы определяется формулой (59), в которой гамильтониан  $H_d$  заменен выражением  $\tilde{H}_d$  (65).

Функционал  $\tilde{H}_d$  близок по форме к выражению, полученному Обуховым [5], который рассмотрел статистику дислокаций в бесструктурной среде. Существенное отличие состоит в том, что векторы Бургера являются, как было объяснено выше, функциями точки, а не фиксированными параметрами. В упомянутой работе в приближении эффективного поля было показано, что система по-

лей  $\psi^{(\alpha)} (\vec{b}^{(\alpha)} = \text{const})$  испытывает фазовый переход. При конечном модуле сдвига ( $\mu \neq 0$ ) это переход первого рода близкий ко второму; температура перехода определяется условием  $n \chi(T) \sim 1$ . При более строгом подходе для выяснения характера фазового превращения в такой системе необходимо учитывать всю совокупность вероятных конфигураций полей, флуктуации которых оказываются в области перехода сильно негауссовыми. При фазовом переходе возникает конденсат полей  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$ , что интерпретируется в работе [5] как переход в жидкую фазу с образованием сети дислокаций бесконечной длины.

Принципиальная черта плавления — разрушение дальнего ориентационного порядка в конденсированном веществе. Ориентационное разупорядочение невозможно без образования в системе конечной плотности дислокаций. Возможны, однако, состояния с конденсатом полей  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$  и медленным падением корреляций поля ориентационного порядка. (Подобную гексатическую фазу наблюдают при численном моделировании двумерных конденсированных систем [10]). Очевидно, фазовый переход, связанный с изменением дислокационной структуры, вообще говоря, не есть плавление вещества.

Выполним для модельной системы интегрирование гамильтониана по конфигурациям полей  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r})$ , предполагая параметр  $J$  достаточно малым ( $J \lesssim \chi_n$ ). В результате интегрирования в младшем приближении по параметру  $J$  возникает добавка к гамильтониану  $H\{\phi_{ij}, X_{ij}\}$  (52):

$$J \sum_{\alpha} \int dV \langle |\psi^{(\alpha)}|^2 \rangle (\phi_{ij} \cdot \vec{b}_j^{(\alpha)})^2 \quad (66)$$

Если в рассматриваемом фазовом состоянии дислокации с минимальными векторами Бюргера равновероятны, то величина  $\langle |\psi^{(\alpha)}|^2 \rangle$  не зависит от индекса  $\alpha$ . Воспользуемся формулой:

$$\sum_{\alpha} \vec{b}_i^{(\alpha)} \vec{b}_j^{(\alpha)} = \delta_{ij}$$

и приведем выражение (66) к виду:

$$\int dV \frac{m^2}{2} \phi_{ij}^2 \quad (67)$$

где  $m^2 = 2J \langle |\psi^{(\alpha)}|^2 \rangle$ . Вычислив гауссов интеграл

$$Z_{\phi_{ij}} = \int \mathcal{D}\phi_{ij} \exp \left\{ \frac{T}{2} (M_{ij}^{lm} - S_{ik}^{lm} Q_{kr}^{-1} S_{rj}^{lm} + \frac{m^2}{T} \delta_{lm} \delta_{ij}) * \right. \\ \left. * \phi_{nj} + i \phi_{ei} S_{ik}^{lm} Q_{kj}^{-1} X_{nj} \right\} \quad (68)$$

получим (в пределе  $\alpha, \beta = 0$ ) следующий эффективный гамильтониан параметра ориентационного порядка:

$$H\{T_{ij}^{lm}\} = \frac{1}{2} X_{ei} \Gamma_{ij}^{lm} X_{nj} \quad (69)$$

где оператор  $\Gamma_{ij}^{lm}$  определен формулой (III.15). Напомним, что величина  $X_{ij}$  связана с параметром  $T_{ij}^{lm}$  соотношением (32).

### 7. Модельная система. Фазовый переход кристалл-жидкость.

В предыдущем разделе для модельной системы получен эффективный гамильтониан поля параметра ориентационного порядка  $T_{ij}^{lm}$ . Ниже продемонстрировано, что система с таким гамильтонианом испытывает фазовый переход первого рода. При фазовом превращении разрушается дальний ориентационный порядок, что естественно интерпретировать как плавление вещества.

Рассмотрим эффективный гамильтониан (69) параметра ориентационного порядка:

$$H\{T_{ij}^{lm}\} = \int d\vec{z} d\vec{z}' \frac{1}{8} \epsilon_{lmk} \epsilon_{npq} T_{(\vec{z})}^{mkpq} \partial_i T_{(\vec{z})}^{klpq} * \\ * \Gamma_{ij}^{lm}(\vec{z} - \vec{z}') T_{(\vec{z}')}^{pqkl} \partial_j T_{(\vec{z}')}^{lm} \quad (70)$$

Фурье-образ оператора  $\Gamma_{ij}^{lm}(\vec{q})$  согласно формуле (III.15) есть:

$$\Gamma_{ij}^{lm}(\vec{q}) = \frac{1}{4m^2} S_{lm} \delta_{ij} + \frac{1}{m^2} S_{ij} n_l n_m + \frac{4\mu}{T(q^2 + \frac{4\mu m^2}{T})} S_{lm} n_i n_j \\ - \frac{1}{8m^2} S_{ei} S_{nj} + \frac{\mu}{2Tq^2} \left\{ \frac{1+P}{1+2P} S_{ei} S_{ij} - \frac{1}{2} S_{ei} S_{nj} + \frac{P}{1+2P} S_{ej} S_{ni} \right\} \quad (71)$$

Эффективный гамильтониан (71) значительно упрощается, если ограничиться младшими членами по пространственным производным поля поворотов и учесть поперечность операторов  $S_{\alpha\beta}$ . В элементе объема системы в окрестности точки  $\vec{z}$  с точностью до членов бо-

лее высокого порядка порядка малости по относительному повороту осей локальной анизотропии выполняется равенство:

$$\frac{1}{2} \epsilon_{lmk} T_{(\vec{r})}^{m\kappa\beta\gamma} \partial_i T_{(\vec{r})}^{k\alpha\beta\gamma} = \partial_i \omega_l + \dots \quad (72)$$

Нетрудно видеть, что в выражении для плотности энергии поля  $T^{ijkl}$  все члены, содержащие поперечные операторы  $S_{in}$ , обращаются в нуль. В этом приближении (медленного поворота осей локальной анизотропии) ядро эффективного гамильтониана (70) можно записать в следующем виде:

$$\tilde{\Gamma}_{ij}^{ln}(\vec{q}) = \frac{4\mu}{T(q^2 + \frac{4\mu m^2}{T})} \delta_{ij} S_{ln} \quad (73)$$

Выделим сферически симметричную часть потенциала взаимодействия (73), для чего оператор  $S_{ln}$  заменим его средним по углам значением:

$$S_{ln} \rightarrow \langle S_{ln} \rangle = \frac{2}{3} \delta_{ln} \quad (74)$$

Подставляя (73,74) в эффективный гамильтониан (70) и интегрируя по частям, найдем:

$$H\{T^{ijkl}\} = \int d^3r d^3r' T_{(\vec{r})}^{i\alpha\beta\gamma} T_{(\vec{r}')}^{j\alpha\beta\gamma} I(\vec{r}-\vec{r}') T_{(\vec{r})}^{lm\alpha\beta} T_{(\vec{r}')}^{lm\alpha\beta} \quad (75)$$

Функция  $I(\vec{r})$  есть фурье-образ величины:

$$I(\vec{q}) = \frac{2\mu}{3T(q^2 + \frac{4\mu m^2}{T})} \quad (76)$$

Обменный интеграл (76) экспоненциально падает на расстояниях:

$$\lambda > \left(\frac{4\mu m^2}{T}\right)^{-1/2}$$

поэтому для медленно меняющихся полей  $T^{ijkl}$  можно записать:

$$H\{T^{ijkl}\} = I \int d^3r T_{(\vec{r})}^{i\alpha\beta\gamma} \partial_\kappa T_{(\vec{r})}^{j\alpha\beta\gamma} \partial_\kappa T_{(\vec{r})}^{lm\alpha\beta} T_{(\vec{r})}^{lm\alpha\beta} \quad (77)$$

где

$$I = \int d^3r I(\vec{r}) \quad (78)$$

Для дальнейшего упрощения модели удобно от континуального описания перейти к решеточному. Заменим производную поля  $T^{ijkl}$  разностью значений тензора в соседних узлах решетки:

$$\partial_\kappa T^{ijkl} \rightarrow T_{(\vec{r}+d_\kappa)}^{ijkl} - T_{(\vec{r})}^{ijkl} \quad (79)$$

Напомним, что межатомный размер принят за единицу ( $|d| = 1$ ). Выполняя свертки найдем:

$$H\{T^{ijkl}\} = I \int d^3r \sum \left\{ 3 - 2 T_{(\vec{r})}^{ijkl} T_{(\vec{r}+d)}^{ijkl} + \frac{1}{3} (T_{(\vec{r})}^{ijkl} T_{(\vec{r}+d)}^{ijkl})^2 \right\} \quad (80)$$

С принятой точностью:

$$(T_{(\vec{r})}^{ijkl} T_{(\vec{r}+d)}^{ijkl})^2 \approx 3 T_{(\vec{r})}^{ijkl} T_{(\vec{r}+d)}^{ijkl} \quad (81)$$

Подставив (81) в (80), окончательно получим:

$$H\{T^{ijkl}\} = -I \int dV \sum_d T_{(\vec{r})}^{ijkl} T_{(\vec{r}+d)}^{ijkl} \quad (82)$$

Абсолютно симметричный тензор  $T^{ijkl}$  в выражении (82) можно считать неприводимым. Переход от приводимых тензоров к неприводимым меняет лишь величину постоянной.

Эффективный гамильтониан параметра ориентационного порядка сведен нами к простейшему виду. Статистические свойства системы с гамильтонианом (82) изучались в работах [3]. В этих работах показано, что при температуре

$$T_c = \alpha n I, \quad \alpha = \text{const} < 1.$$

(где  $n$  - число ближайших соседей) система испытывает фазовый переход первого рода. Среднее по объему системы значение модуля кубической анизотропии (нормированного на единицу при  $T \rightarrow 0$ ) скачком меняется от значения равного приблизительно  $1/2$  ( $T = -T_c$ ) до нуля ( $T = +T_c$ ). Переход естественно интерпретировать как плавление; низкотемпературная анизотропная фаза отвечает кри-

таллическому состоянию, а высокотемпературная глобально изотропная есть расплав. Несмотря на то, что скачек среднего значения ориентационного параметра порядка велик, область метастабильного существования кристалла очень узка, т.е. равновесный кристалл при  $T \rightarrow T_c$  близок к абсолютной неустойчивости. Это обстоятельство (при учете малости среднего квадрата смещения частиц относительно положения равновесия) указывает на то, что разрушение кристаллического порядка обусловлено коррелированным движением групп атомов. При температурах близких к  $T_c$  эта коллективная мода становится мягкой, так что уже в кристаллической фазе число дефектов (виртуальных дислокаций) оказывается заметным. Из сказанного следует, что приближение среднего поля, вообще говоря, недостаточно для описания высокотемпературного кристалла, необходим учет поправок к нему. Этот вопрос будет рассмотрен отдельно.

Таким образом, упрощенная модель конденсированной системы имеет ориентационно упорядоченную низкотемпературную фазу с экспоненциально малой (при  $T \rightarrow 0$ ) концентрацией дислокаций (кристалл), глобально-изотропную высокотемпературную фазу с конечной плотностью бесконечно-длинных дислокаций и возможно нестабильную дислокационную фазу с дальним ориентационным порядком.

### 8. Заключение

Статистическая теория конденсированного вещества, определенная формулами (38-41, 57, 58), математически сложнее упрощенной модели. Анализ этой теории составляет предмет отдельной работы. Некоторые ее свойства, однако, можно получить на основании проделанного анализа. Эти общие свойства системы обсуждаются ниже. Отметим, что имеется сходство между исследуемой нами моделью конденсированного вещества и моделью сильных взаимодействий [11].

Поведение конденсированного вещества определяется двумя параметрами  $\epsilon$  и  $\mu a^2$  (с точностью до поправок, обусловленных локальной анизотропией). Для большинства реальных веществ эти величины одного порядка. Их безразмерное отношение  $\rho = \epsilon / \mu a^2$  задает подобие свойств различных веществ. При одинаковых значениях параметра  $\rho$  свойства систем, как функции безразмерной температуры  $T^* = T / \mu a^2$  совпадают.

Рассмотрим на фазовой диаграмме область низких температур  $T^* \ll 1$ ,  $T^*/\rho \ll 1$ . В этой области параметр  $\mathcal{J} \sim \exp(-\rho/T^*)$  мал, и возможно разложение эффективного гамильтониана в ряд по малому параметру (низкотемпературное разложение). Нулевое по  $\mathcal{J}$  приближение соответствует бездислокационному кристаллу; следующие приближения описывают флуктуационное образование дислокаций, причем максимальная длина петли пропорциональна степени  $\mathcal{J}$  в приближении. Низкотемпературная ориентационно упорядоченная фаза есть, очевидно, кристалл.

В области высоких температур  $T^* \gtrsim 1$  в системе отсутствует дальний ориентационный порядок, и плотность дислокаций высока. Предел  $T^* \gg 1$  соответствует плотному газу, для которого понятие локального порядка теряет смысл. Для таких высоких температур изложенная выше теория неприменима. При более низких температурах длина  $\zeta_c(T)$ , на которой относительное положение атомов коррелировано, больше межатомного размера  $a$ , и при  $(\zeta_c/a)^3 \gg 1$  адекватность модели восстанавливается. Расплавы металлов имеют, повидимому,  $\zeta_c \sim 5-10a$ .

При достаточно высоких температурах амплитуда флуктуаций выражения в показателе экспоненты в формуле (60) падает, и описанное выше разложение эффективного гамильтониана становится самосогласованным. В этой области эффективный гамильтониан системы эквивалентен гамильтониану упрощенной модели, для которой, как было показано, при высоких температурах имеется фаза с конденсатом полей  $\psi^{(a)}$  и нулевым средним значением параметра ориентационного порядка  $T^{ijk}$ . Можно утверждать, что высокотемпературная фаза рассматриваемой модели есть жидкость. Дальний кристаллический порядок разрушен в ней системой дислокаций, с некоторой плотностью заполняющих объем системы.

Переход системы из макроскопически анизотропного трансляционно упорядоченного кристаллического состояния в жидкую фазу может происходить лишь скачком. Вообще говоря, потеря трансляционной структуры решетки может происходить без потери ориентационной анизотропии, так что между кристаллом и жидкостью может существовать промежуточная фаза. В этой фазе, как и в жидкости, дислокационная структура эквивалентна бесконечной сети, заполняющей с некоторой плотностью объем тела. Отличие промежуточной фазы от жидкости состоит в высокой степени корреляции дислокационной структуры при которой компенсируется

относительный поворот локально упорядоченных элементов вещества. Двумерный аналог промежуточной фазы - гексатическое состояние [12]. Отметим, что рассмотренный в работе [5] фазовый переход с появлением  $\langle \psi^{(k)} \rangle \neq 0$  соответствует в нашей теории переходу кристалл - промежуточная фаза.

В зависимости от существования ненулевых средних (или, точнее, квазисредних по Боголюбову [14]) параметра ориентационного порядка  $T^{ijkl}$  и полей  $\psi^{(\alpha)}$  получаем следующую классификацию фаз конденсированной системы:

1.  $\langle T^{ijkl} \rangle \neq 0, \langle \psi^{(\alpha)} \rangle = 0$  кристаллическая фаза (низкие температуры)
2.  $\langle T^{ijkl} \rangle = 0, \langle \psi^{(\alpha)} \rangle \neq 0$  жидкость (высокие температуры)
3.  $\langle T^{ijkl} \rangle \neq 0, \langle \psi^{(\alpha)} \rangle \neq 0$ ? промежуточная фаза (промежуточные температуры)

Промежуточная фаза может существовать по крайней мере как метастабильная. Состояние с  $\langle T^{ijkl} \rangle = 0, \langle \psi^{(\alpha)} \rangle = 0$ , очевидно, невозможно.

### Приложение I. Операторы $O_{ij}^{en}$ .

Конфигурации конденсированной системы параметризуются полями, большинство из которых - тензоры второго ранга. Ядро квадратичной формы такой функциональной переменной есть тензор четвертого ранга  $O_{ij}^{en}$ . При интегрировании по конфигурациям тензорных полей вычисляются свертки операторов  $O_{ij}^{en}$ , а также обратные операторы. В Приложении описан способ их вычисления и приведены операторы, встречающиеся в тексте работы.

В импульсном представлении все рассматриваемые операторы имеют следующий вид:

$$O_{ij}^{en} = (q^2)^S \{ a_1 \delta_{ij} \delta_{en} + a_2 \delta_{ij} n_e n_n + a_3 \delta_{en} n_i n_j + a_4 \delta_{il} \delta_{jn} + a_5 \delta_{il} n_j n_n + a_6 \delta_{jn} n_i n_e + a_7 \delta_{in} \delta_{jl} + a_8 \delta_{in} n_j n_e + a_9 \delta_{je} n_i n_n + a_{10} n_i n_j n_e n_n \} \quad (\text{III.1})$$

где  $\vec{n}$  - единичный вектор ( $\vec{n} = \vec{q}/|\vec{q}|$ ); параметр  $S$  принимает значения 0,  $\pm 1$ . При произвольных коэффициентах  $a_i$  формула (III.1) дает наиболее общий вид тензора четвертого ранга в случае, если он зависит от одного вектора  $\vec{n}$ . Удобно записать тензор (III.1) через поперечные операторы:

$$S_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j \quad (\text{III.2})$$

которые обладают следующими свойствами:

$$S_{ij} n_j = S_{ij} n_i = 0; \quad S_{ik} S_{kj} = S_{ij}$$

После подстановки операторов (III.2) выражение (III.1) принимает вид:

$$O_{ij}^{en} = (q^2)^S \{ v_1 S_{ij} S_{en} + v_2 S_{ij} n_e n_n + v_3 S_{en} n_i n_j + v_4 S_{il} S_{jn} + v_5 S_{il} n_j n_n + v_6 S_{jn} n_i n_e + v_7 S_{in} S_{je} + v_8 S_{in} n_j n_e + v_9 S_{je} n_i n_n + v_{10} n_i n_j n_e n_n \} \quad (\text{III.3})$$



Коэффициенты  $v_i$  связаны с параметрами  $a_i$  соотношениями:

$$v_1 = a_1, v_2 = a_1 + a_2, v_3 = a_1 + a_3,$$

$$v_4 = a_4, v_5 = a_4 + a_5, v_6 = a_5 + a_4, v_{10} = \sum_{i=1}^{10} a_i$$

$$v_7 = a_7, v_8 = a_7 + a_8, v_9 = a_7 + a_9$$

Найдем свертку двух операторов вида (III.3):

$$\prod_{ij}^{ln} = {}^{(1)}O_{ik}^{lm} {}^{(2)}O_{kj}^{mn} \quad (\text{III.4})$$

В общем случае оператор (III.4) также имеет структуру (III.3), т.е. его вычисление сводится к определению соответствующих коэффициентов. Обозначим символами  $v_i$  и  $\mu_i$  коэффициенты первого и второго из сворачиваемых операторов, соответственно. Коэффициенты оператора (III.4) есть:

$$p_1 = v_1 \mu_1 + v_7 \mu_7, p_2 = v_2 \mu_2 + v_8 \mu_8, p_3 = v_3 \mu_3 + v_9 \mu_9$$

$$p_4 = v_4 \mu_4 + v_5 \mu_5 + 2v_4 \mu_4 + v_7 \mu_4 + v_5 \mu_6 + v_7 \mu_7,$$

$$p_5 = v_5 \mu_5 + 2v_4 \mu_5 + v_7 \mu_5 + v_5 \mu_{10}, \quad (\text{III.5})$$

$$p_6 = v_6 \mu_6 + 2v_6 \mu_4 + v_{10} \mu_6 + v_6 \mu_7,$$

$$p_7 = v_7 \mu_7 + v_8 \mu_7, p_8 = v_8 \mu_8 + v_8 \mu_8, p_9 = v_9 \mu_9 + v_9 \mu_9,$$

$$p_{10} = 2v_6 \mu_5 + v_{10} \mu_{10}$$

Последовательное применение формул (III.5) позволяет найти свертку нескольких операторов.

Потребуем, чтобы операторы  ${}^{(1)}O$  и  ${}^{(2)}O$  были взаимно обратными, т.е.

$${}^{(1)}O_{ik}^{lm} {}^{(2)}O_{kj}^{mn} = \delta_{ij} \delta_{ln} = S_{ij} S_{ln} + S_{ij} \mu_c \mu_n + S_{ln} \mu_i \mu_j + \mu_i \mu_j \mu_c \mu_n \quad (\text{III.6})$$

Для симметричных операторов  $O_{ij}^{ln} = O_{ji}^{nl}$  соотношение (III.6) выполняется и при обратном порядке свертывания операторов. Согласно формуле (III.6) коэффициенты  $p_1, p_2, p_3$  и  $p_4$  в системе уравнений (III.5) следует положить равными единице, а остальные

параметры  $p_i$  — равными нулю. Разрешив уравнения, по заданным параметрам  $v_i$  находим коэффициенты обратного оператора  $\mu_i$ :

$$\mu_1 = v_1/d_1, \mu_2 = v_3/d_2, \mu_3 = v_2/d_2$$

$$\mu_4 = \frac{v_4 v_{10} - v_5 v_6}{(v_2 + v_7) d_3}, \mu_5 = v_5/d_3, \mu_6 = v_6/d_3$$

$$\mu_7 = -v_7/d_1, \mu_8 = -v_8/d_2, \mu_9 = -v_9/d_2 \quad (\text{III.7})$$

$$\mu_{10} = -(v_1 + 2v_4 + v_7)/d_3$$

где

$$d_1 = v_1^2 - v_7^2, d_2 = v_2 v_3 - v_8 v_9$$

$$d_3 = 2v_5 v_6 - v_{10} (v_1 + 2v_4 + v_7)$$

Ниже приведен список встречающихся в работе операторов  $O_{ij}^{ln}$  в представлении (III.3); выписаны ненулевые коэффициенты  $v_i$ , указан индекс  $S$ . Используются обозначения, приведенные в формуле (I8).

$$M_{ij}^{ln} \quad v_1 = a+b+c, v_2 = d, v_3 = a, v_4 = -b, v_7 = -c, v_{10} = d, S = 1 \quad (\text{III.8})$$

$$D_{ij}^{ln} \quad v_1 = \frac{a+b+c}{(a+b)(a+b+2c)}, v_2 = 1/d, v_3 = 1/a, v_4 = \frac{b}{a^2-b^2}, v_7 = \frac{c}{(a+b)(a+b+2c)}, v_{10} = 1/d, S = -1 \quad (\text{III.9})$$

$$R_{ij}^{ln} \quad v_1 = a+b+c, v_3 = a+b, v_7 = -c, S = 1 \quad (\text{III.10})$$

$$N_{ij}^{ln} \quad v_3 = (a+b)/2, S = 1 \quad (\text{III.11})$$

$$Q_{ij}^{ln} \quad v_1 = 4(a+b+c), v_2 = d, v_3 = 3a+2b + \frac{(a+b)^2}{a} + \frac{a+b}{2}, v_4 = \frac{d}{4} - \frac{3}{2}(a+b) + \frac{b(a+b)}{(a-b)}, v_5 = v_6 = -\left(\frac{d}{4} + \frac{a+b}{2}\right), v_7 = -4c, v_{10} = \frac{a-b}{2} + \frac{d}{4}, S = 1 \quad (\text{III.12})$$

$$S_{ij}^{ln} \quad \nu_1 = 2(a+b+c), \quad \nu_2 = d, \quad \nu_3 = 2a+b,$$

$$\nu_4 = -\frac{a+b}{2}, \quad \nu_5 = -\frac{a-b}{2}, \quad \nu_6 = -\frac{d}{2}$$

$$\nu_7 = -2c, \quad \nu_{10} = \frac{d}{2}, \quad S = 1 \quad (\text{III.13})$$

$$Q_{ij}^{-1ln} \quad \nu_1 = \frac{a+b+c}{4(a+b)(a+b+2c)}, \quad \nu_2 = \frac{1}{d}, \quad \nu_3 = 2a /$$

$$[2a^2 + (a+b)^2 + 5a(a+b)], \quad \nu_4 = \frac{(a-b)(\frac{d}{2} + a + b)}{8db(a+b)} -$$

$$-\frac{(\frac{d}{2} + a - b)(3b - 2a)}{8db^2}, \quad \nu_5 = \nu_6 = \frac{(a-b)(\frac{d}{2} + a + b)}{2db^2},$$

$$\nu_7 = \frac{c}{4(a+b)(a+b+2c)}, \quad \nu_{10} = \frac{a-b}{2b^2} + \frac{(a+b)^2}{db^2}, \quad (\text{III.14})$$

$$S = -1$$

$$\Gamma_{ij}^{ln} \quad \alpha, \beta = 0 \quad \nu_1 = \frac{q^2}{4m^2} + \frac{\mu}{2T} \frac{1+P}{1+2P},$$

$$\nu_2 = \frac{q^2}{m^2}, \quad \nu_3 = \frac{4\mu q^2}{T(q^2 + \frac{4\mu m^2}{T})}, \quad \nu_4 = -\frac{q^2}{8m^2} - \frac{\mu}{4T},$$

$$\nu_7 = \frac{\mu}{2T} \frac{P}{1+2P}, \quad S = -1 \quad (\text{III.15})$$

Приложение 2. Суммирование по распределению дислокационных петель.

В Приложении сформулирован метод, который позволяет представить сумму по конфигурациям дислокаций:

$$\mathcal{Z}_D = \sum_{\{D\}} \exp \left[ -\sum_D \phi \left( \frac{\epsilon}{T} \vec{r}_i \right) - i \phi_{ij}(\vec{r}) b_j(\vec{r}) dx_i \right] \quad (\text{II.1})$$

в виде функционального интеграла. Идея подобного преобразования хорошо известна (см. например, [13]). В работе [5] этот прием применен для суммирования по конфигурациям дислокаций. Однако, предложенный в ней вариант записи функционального интеграла, по-видимому, нельзя использовать до перехода к континуальному

пределу, т.к. квадратичная форма в показателе экспоненты не является положительно определенной. Ниже построен решеточный вариант интеграла, а затем записан континуальный предел выражения

В системе координат общей для всего тела зададим правильную кубическую решетку. Расстояние между ее соседними узлами равно среднему межатомному размеру в конденсированном веществе (принимаяемому за единицу). Произвольная дислокация может быть изображена петлей, образованной связями этой решетки. В каждом из узлов  $\vec{r}_n$  определим тройку скалярных комплексных полей  $\psi^{(\alpha)}$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ). Вычислим гауссов интеграл:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{N} \int \left\{ \prod_n \left[ \prod_{\alpha} \mathcal{D} \psi^{(\alpha)}(\vec{r}_n) \mathcal{D} \psi^{(\alpha)*}(\vec{r}_n) \right] \left[ 1 + \sum_{\alpha} \psi^{(\alpha)}(\vec{r}_n) \psi^{(\alpha)*}(\vec{r}_n + \vec{d}) * \right. \right.$$

$$\left. \left. G^{(\alpha)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d}) \right] \right\} \exp \left\{ -\sum_{n, \alpha} \left[ |\psi^{(\alpha)}(\vec{r}_n)|^2 + g \left( |\psi^{(\alpha)}(\vec{r}_n)|^2 \right)^2 \right] \right\} \quad (\text{II.2})$$

В  $n$ -ом сомножителе предэкспоненциального выражения производится суммирование по ближайшим соседям узла  $n$ , а также по типам скалярных полей. Величина

$$G^{(\alpha)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d}) = \int \exp \left\{ i \int_{\vec{r}_n}^{\vec{r}_n + \vec{d}} \phi_{ij}(\vec{r}) b_j(\vec{r}) d\vec{r}_i \right\} \quad (\text{II.3})$$

где

$$J = \lambda(g) \exp \left( -\frac{\epsilon}{T} \right); \quad \lambda(g) = \frac{\int_0^\infty \exp(-x - gx^2) dx}{\int_0^\infty x \exp(-x - gx^2) dx} \quad (\text{II.4})$$

Напомним, что параметр  $\epsilon$  есть энергия единицы длины ядра дислокации;  $b^{(\alpha)}$  - вектор Бюргера  $\alpha$ -го типа. Интеграл (II.2) нормирован условием:

$$\mathcal{Z}|_{g=0} = 1$$

Раскроем произведение в предэкспоненте выражения (II.2). Нетрудно заметить, что в любом из членов получаемой суммы амплитуда поля  $\psi^{(\alpha)}(\vec{r}_n)$  в данном узле  $\vec{r}_n$  может присутствовать в степени не выше первой. Следовательно, после интегрирования по фазам полей  $\psi^{(\alpha)}$  величина  $\mathcal{Z}$  будет представлять собой сумму членов, каждый из которых имеет следующий вид:

$$A |\psi_{(\vec{r}_{n_1})}^{(\alpha_1)}|^2 |\psi_{(\vec{r}_{n_2})}^{(\alpha_2)}|^2 \dots |\psi_{(\vec{r}_{n_k})}^{(\alpha_k)}|^2 \quad (\text{П2.5})$$

Здесь индексы  $n_1, \dots, n_k$  обозначают некоторую совокупность узлов решетки. Все такие члены возникают при перемножении сомножителей вида:

$$\psi_{(\vec{r}_n)}^{(\alpha)} \psi_{(\vec{r}_n + \vec{d})}^{*(\alpha)} \quad (\text{П2.6})$$

Сопоставим множителю (П2.6) стрелку, выходящую из узла  $\vec{r}_n$  и направленную в узел  $\vec{r}_n + \vec{d}$ . Каждому из фигурирующих в выражении (П2.5) узлов следует сопоставить одну входящую и одну выходящую стрелки. Очевидно, что ненулевые члены суммы изображаются совокупностью замкнутых петель без самопересечений. Вдоль каждой из петель сохраняется индекс  $\alpha$ , т.е. неизменен тип вектора Бюргерса. Каждая из образующих петлю связей вносит множитель (П2.3). Нетрудно видеть, что после интегрирования по  $|\psi^{(\alpha)}|$  данной петле сопоставляется фактор:

$$\exp \left\{ - \oint \left( \frac{\epsilon}{T} \vec{r}_i(\vec{r}) - i \phi_{ij}(\vec{r}) b_j^{(\alpha)}(\vec{r}) \right) dx_i \right\} \quad (\text{П2.7})$$

Каждая дислокационная петля учитывается в выражении (П2.2) дважды, т.к. может быть построена обходом контура в двух противоположных направлениях. Фактор (П2.7), сопоставляемый петле, инвариантен относительно одновременной замены направления обхода контура и знака вектора Бюргерса  $b^{(\alpha)}$ . Выберем одинаковое для всех петель направление обхода и поменяем, где необходимо, знаки векторов Бюргерса, так чтобы сохранить значение выражения (П2.1). После такого преобразования две петли отличавшиеся направлением обхода, будут отличаться знаком вектора Бюргерса. Если в качестве векторов  $b^{(\alpha)}$  выбрать тройку векторов элементарных трансляций локальной решетки, то в выражении (П2.2) будут учитываться дислокации со всеми возможными минимальными векторами Бюргерса  $\pm b^{(\alpha)}$ . Из сказанного ясно, что интеграл (П2.2) совпадает с выражением, в котором суммирование производится по всевозможным конфигурациям петель с минимальными векторами Бюргерса и без пересечений.

Для того, чтобы учесть в сумме (П2.1) более широкий класс конфигураций дислокаций, обобщим выражение (П2.2) посредством замены:

$$1 + \sum_{\alpha, d} \psi_{(\vec{r}_n)}^{(\alpha)} \psi_{(\vec{r}_n + \vec{d})}^{*(\alpha)} G^{(\alpha)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d}) \rightarrow \\ \rightarrow \exp \left\{ \sum_{\alpha, d} \psi_{(\vec{r}_n)}^{(\alpha)} \psi_{(\vec{r}_n + \vec{d})}^{*(\alpha)} G^{(\alpha)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d}) \right\} \quad (\text{П2.8})$$

Функциональный интеграл (П2.2) приобретает при этом следующий вид:

$$Z = N \int \prod_n \left\{ \prod_{\alpha} \mathcal{D} \psi^{(\alpha)} \mathcal{D} \psi^{*(\alpha)} \right\} \exp[-H_d \{ \psi^{(\alpha)} \}] \quad (\text{П2.9})$$

где

$$H_d \{ \psi^{(\alpha)} \} = \sum_{n, \alpha} \left\{ |\psi_{(\vec{r}_n)}^{(\alpha)}|^2 + g (|\psi_{(\vec{r}_n)}^{(\alpha)}|^2)^2 - \right. \\ \left. - \sum_{\alpha} \psi_{(\vec{r}_n)}^{(\alpha)} \psi_{(\vec{r}_n + \vec{d})}^{*(\alpha)} G^{(\alpha)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d}) \right\} \quad (\text{П2.10})$$

Выражение в левой части соотношения (П2.8) представляет собой два первых члена разложения в ряд функции, записанной в правой части. Очевидно, функционал (П2.9) суммирует с тем же весом все конфигурации дислокационных петель, которые учитываются интегралом (П2.2). Члены разложения экспоненты (П2.8) более высокого порядка порождают конфигурации петель с пересечениями, а также дислокации с векторами Бюргерса отличными от минимальных. Проиллюстрируем последнее утверждение простейшим примером. Квадратичные по  $b^{(\alpha)}$  члены разложения функции (П2.8) делают возможным двукратное прохождение данной связи. Ей в этом случае сопоставляется множитель:

$$G^{(\alpha)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d}) G^{(\beta)}(\vec{r}_n, \vec{r}_n + \vec{d})$$

который можно интерпретировать (см. формулу (П2.7)) как результат однократного прохождения связи дислокацией с вектором Бюргерса

$$\vec{b} = \vec{b}^{(\alpha)} + \vec{b}^{(\beta)}$$

и энергией единицы длины  $\epsilon \sim 2\epsilon$ . Отметим, что при любой температуре наиболее вероятны дислокационные петли с минимальными векторами Бюргерса.

Из сказанного следует, что функционал (П2.1), в котором суммирование производится по широкому классу конфигураций дислокаций с произвольными векторами Бюргера, представляется в виде функционального интеграла (П2.9). Мы ограничимся демонстрацией этого факта, детальное исследование свойств суммы по конфигурациям петель должно составить предмет отдельной работы.

Континуальный предел выражения (П2.9) очевиден (см. формулу (57)). Гамильтониан полей  $\psi^{(\alpha)}$  есть:

$$H_d\{\psi^{(\alpha)}\} = \sum_{\alpha} \int dV \{ |\psi^{(\alpha)}|^2 + g(|\psi^{(\alpha)}|^2)^2 - \int dV' \Lambda(\vec{r}-\vec{r}') \psi^{(\alpha)}(\vec{r}) \psi^{(\alpha)*}(\vec{r}') G^{(\alpha)}(\vec{r}, \vec{r}') \} \quad (\text{П2.11})$$

где

$$\Lambda(\vec{r}-\vec{r}') = \sum_{\alpha} \delta(\vec{r}' - \vec{r} - \vec{a}) \quad (\text{П2.12})$$

В принципе, выражение (П2.12) можно заменить подходящей гладкой функцией, которая должна быть нормирована условием:

$$\int \Lambda(\vec{r}) dV = n$$

где  $n$  — число ближайших соседей атома в рассматриваемой локальной решетке.

## ЛИТЕРАТУРА:

1. Паташинский А.З., Шумило Б.И. Дислокационная теория конденсированного состояния, препринт 84-103 ИЯФ СО АН СССР (1984).
2. Займан Дж. Модели беспорядка, М., Мир, (1982).  
Уббелоде А.Р. Плавление и кристаллическая структура, М., Мир, 1969.
3. Митусь А.С., Паташинский А.З. ЖЭТФ, (1981), т.80, вып.4, стр. 1551.  
Mitúš A.S., Patashinskii A.Z. Phys. Lett., (1982), v. 87A, p. 179.
4. Kleinert H. Phys. Lett., (1982), v. 89A, N 6, p. 294.  
Kleinert H. Gauge theory of defect melting.,  
Lecture at the EPS Conference on Condensed Matter Physics.,  
Pen Haag, (1984).
5. Обухов С.П., ЖЭТФ, (1982), т.83, вып.11, стр. 1978.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости, М., Наука, (1965).
7. Р. де Вит. Континуальная теория дисклинаций, М., Мир, (1977).
8. R. de Wit, Solid State Phys., (1960), v. 10, p. 249.
9. Косевич А.М. Дислокации в теории упругости. Киев, (1978).
10. Cotterill R.M.J., Pedersen L.B. Sol. St. Comm., (1972), v. 10, p. 439.  
Беданов В.М., Гадияк Г.В., Лозевик Ю.Е. ФТТ, (1982), т.24, № 3, стр. 925.
11. Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М., Наука, (1978).
12. Nelson D.R., Halperin B.I., - Phys. Rev. B, (1979), v.19, N 5, p. 2457.
13. П-Ж де Жен. Идеи скейлинга в физике полимеров, М., Мир, (1982).
14. Боголюбов Н.Н. Избранные труды по статистической физике, М., изд. МГУ, 1979.

А.З.Паташинский, Б.И.Шумило

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО  
ВЕЩЕСТВА

Препринт  
№ 84-160

Работа поступила - 4 декабря 1984 г.

---

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов

Подписано к печати 7.XII-1984 г. МН 06251

Формат бумаги 60x90 1/16 Усл.2,8 печ.л., 2,3 учетно-изд.л.

Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ №160.

---

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90