

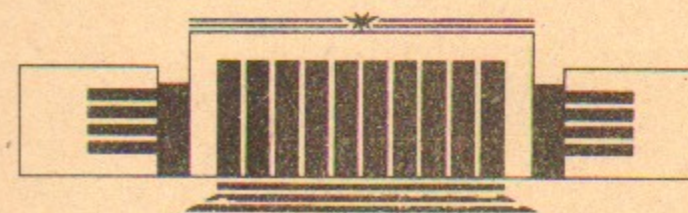


54  
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ  
им. Г.И. Будкера СО РАН

А.З. Паташинский, Л.Д. Сон

ЖЕСТКОСТЬ КОНДЕНСИРОВАННОГО  
ВЕЩЕСТВА  
ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

ИЯФ 92-64



НОВОСИБИРСК

## Жесткость конденсированного вещества при высоких температурах

*А.З. Паташинский*

Northwestern University Evanston II, 60208, USA

и

Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера  
630090, Новосибирск 90, Россия

*Л.Д. Сон*

Уральский Политехнический Институт  
620002 Екатеринбург, Россия

### АННОТАЦИЯ

В приближении экранированного взаимодействия изучена высокотемпературная фаза дислокационной модели плавления. Показано, что система может находиться в двух состояниях, характеризующихся экспоненциальным (жидкость) и степенным (промежуточная фаза) уменьшением жесткости на больших расстояниях.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Описание конденсированного вещества при высоких температурах— актуальная проблема теоретической физики. Различные этапы в понимании явлений, происходящих в веществе вблизи температуры плавления, отражены в книгах Френкеля [1], Фишера [2], Уббеллоде [3]. Понятие локального порядка, впервые использованное Френкелем без четкой конкретизации, способствует качественному пониманию свойств конденсированного вещества. Чтобы сделать этот подход более продуктивным, необходимо дать определение локального порядка и ввести параметры, его характеризующие. Объем, в котором предполагается наличие порядка, содержит много атомов, поэтому от описания системы в терминах полей параметров порядка следует ожидать универсальности и независимости от деталей межатомного взаимодействия. Экспериментальные данные поддерживают концепцию локального порядка, но не дают надежной информации о его природе и размере упорядоченного объема.

Локальный порядок существует на фоне тепловых флуктуаций атомных позиций. Эти флуктуации характеризуются параметром  $\Delta = \frac{\Delta'}{d}$ , где  $\Delta'$ —корень из среднеквадратичного смещения атомов от их предполагаемых идеальных позиций,  $d$ —межатомное расстояние. В точке плавления  $\Delta = \Delta_m = 0.07 \div 0.17$  (критерий Линдемана). В силу малости  $\Delta_m$  каждая конфигурация из  $N$  атомов может рассматриваться как небольшое отклонение от некоторой идеальной. В качестве последней разными исследователями выбирались различные геометрические фигуры. Например, в [4, 5, 6, 7] локальная структура расплава предполагалась эквивалентной локальной структуре исходного кристалла, авторы [8, 9] считали ее

икосаэдрической. Особой популярностью пользуются модели случайной плотной упаковки Бернала [10] и случайной сетки связей Захариазена [11].

Как правило, температура плавления настолько высока, что позволяет классическое описание системы (исключение составляют водород и гелий), т.е. использование классического распределения вероятности Гиббса:

$$dw = Z^{-1} \exp\left[-\frac{H[n]}{T}\right] dn, \quad (1)$$

$$Z = \int \exp\left[-\frac{H[n]}{T}\right] dn. \quad (2)$$

Набор параметров, задающих состояние системы, обозначен как  $[n]$ . Для классической системы импульсы распределены по универсальному максвелловскому закону, поэтому изучению подлежит только конфигурационная часть энергии  $H$ .

Физическая конфигурация  $N$  атомов есть набор точек с координатами  $\vec{r}^\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, N$ . Ее описание в терминах пространственного порядка означает, что конфигурация  $\tilde{\Gamma}(\vec{r}^\alpha)$  есть деформированное состояние некоторой идеальной фигуры  $\Gamma(\vec{r}_0^\alpha)$ , при этом

$$\vec{r}^\alpha = \vec{r}_0^\alpha + \delta\vec{r}^\alpha, \quad (3)$$

где  $\delta\vec{r}^\alpha$  — малые величины. Данное утверждение нужно рассматривать как определение локального порядка. Для заданной конфигурации задача построения идеальной фигуры может и не иметь единственного решения. Для системы взаимодействующих частиц из принципа минимума энергии взаимодействия можно построить набор идеальных фигур  $\Gamma_n$ , могущих претендовать на роль составляющих структуры. Например, для плотноупакованных систем с парным взаимодействием Леннард-Джонсовского типа такой набор состоит из кластеров ГЦК, ГПУ-решеток и икосаэдра. После того, как базис идеальных фигур сформирован, проблема сводится к выбору "наилучшей". Для этого нужно использовать численные характеристики реальной физической структуры, разбив фазовое пространство этих характеристик на области, соответствующие деформированным состояниям идеальных фигур  $\Gamma_n$ . Ясно, что подобное разбиение носит вероятностный характер. В общем случае вышеупомянутые области могут перекрываться.

Численные характеристики структуры введены в работах А.С. Митуся и А.З. Паташинского [5, 12, 19]. Кристаллическая структура большинства элементов вблизи точки плавления является плотноупакованной,

элементов вблизи точки плавления является плотноупакованной, поэтому в [12] в качестве  $\Gamma_n$  изучались кластеры ГЦК, ГПУ-решеток и икосаэдр. Численное моделирование, проведенное в [12], показало, что перекрытие распределений вероятности, соответствующих различным  $\Gamma_n$  мало вплоть до температур  $T < 2T_m$  ( $T_m$  — температура плавления). Это означает, что при этих температурах тепловые флуктуации не разрушают локального порядка. Неравенство  $T < 2T_m$  указывает область существования вещества с локальной структурой, но не дает ответа на вопрос, какова эта структура. Предположим, что локальный порядок кристаллоподобен. Такое предположение позволяет ввести единую для расплава и кристалла параметризацию состояний системы.

## 2. ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ СОСТОЯНИЙ

Упомянутая параметризация была проделана в работах [4, 19, 20], и в данном разделе мы будем придерживаться этих статей. Предположение о кристаллоподобности локального порядка означает, что в качестве идеальной составляющей структуры нужно выбрать фрагмент кристаллической решетки. При этом для физической конфигурации  $N$  точек определяется взаимнооднозначное отображение на узлы идеальной кристаллической решетки:  $\Gamma \rightarrow \Gamma_0 : (\vec{r}^\alpha \rightarrow \vec{r}_0^\alpha)$ . Это отображение сохраняет отношения соседства: образы ближайших соседей также являются ближайшими соседями. Определим касательную позицию решетки по отношению к конфигурации  $N$  атомов. Она достигается, если:

1. Образ центрального атома совмещается со своим оригиналом.
2. Вся решетка повернута относительно центрального атома так, чтобы несовпадение между образом и прообразом было минимальным.

Поясним второе требование. Минимальность несовпадения означает минимальность величины

$$\tilde{\Delta} = \sum_{\alpha} (\vec{r}^\alpha - \vec{r}_0^\alpha)^2. \quad (4)$$

Касательное положение решетки описывается матрицей вращения  $U$ , которое переводит решетку из начального положения в касательное. Отметим, что для отдельных атомов, выбранных в качестве центра, касательное положение может оказаться неосуществимым из-за нарушения локального порядка. Весь объем вещества оказывается разбитым на два сорта: "хорошую" и "плохую" материи. В идеальном кристалле все атомы принадлежат "хорошей" материи, и возможно отображение сразу всех атомов на узлы решетки. В этом случае  $U(\vec{r}) = const$ . Жидкость изотропна, и потому должна содержать "плохую" материю — дефекты

структуры, создающие изотропию. Важен вопрос о соотношении объемов "хорошей" и "плохой" материй и об их геометрических формах. Концепция локального порядка подразумевает, что "хорошая" материя занимает большую часть объема. Мы предполагаем, что область, занимаемая ею, является связной. Это предположение можно подкрепить следующими соображениями. Определение локального порядка, данное выше, годится и для двумерной системы. Минимальный беспорядок, который нужно внести в двумерную систему, чтобы сделать ее изотропной, описывается распределением точечных дефектов. Рассматривая произвольные двумерные сечения трехмерной системы, можно показать, что в этом случае минимальная порча порядка описывается распределением линейных дефектов. Отсюда следует законность нашего предположения.

Следующий шаг—отобразить всю "хорошую" материю на решетку. Выбираем кластер с центром в точке  $\vec{r}_1$  и находим для него  $U(\vec{r}_1)$ . Затем для кластера с центром в  $\vec{r}_2$  ( $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ —координаты ближайших соседей) находим минимальное изменение  $U(\vec{r})$ , необходимое для достижения нового касательного положения. Повторяя эту процедуру, мы построим  $U(\vec{r})$  вдоль некоторого пути. Повторяя ее для всех путей по связной области "хорошей" материи, мы определим поле  $U(\vec{r})$ . Отображение, однозначное для каждых двух последовательных шагов на пути, может оказаться неоднозначным для замкнутого контура. Процедура отображения вдоль пути известна как процедура Бюргерса—Франка [15, 14]. При этом контур вещества отображается на контур, образованный связями идеальной решетки. Невязка замкнутого контура не изменяется при его деформации, если контур при этом не пересекает линию "плохой" материи. Таким образом, проблема описания "плохой" материи свелась к рассмотрению невязок контуров вокруг отдельных дефектных линий. Локально дефекты эквивалентны дислокациям и дисклинациям. Отличие состоит в том, что в нашем случае вектора Бюргерса  $\vec{b}$  и Франка  $\vec{\Omega}$  могут изменяться вдоль линии дефекта:

$$\vec{\Omega}(\vec{r}') = U(\vec{r}')U^{-1}(\vec{r})\vec{\Omega}(\vec{r}), \quad (5)$$

$$\vec{b}(\vec{r}') = U(\vec{r}')U^{-1}(\vec{r})\vec{b}(\vec{r}). \quad (6)$$

Для более точного описания атомных координат для выбранного кластера "хорошей" материи нужно задать не только поворот, но и однородную на масштабе кластера деформацию, описываемую симметричным тензором  $u(\vec{r})$ .

Атомные конфигурации конденсированного вещества оказались параметризованными следующим образом:

1. "Хорошая" материя: поля тензора деформации  $u_{ij}(\vec{r})$  и матрицы поворота  $U_{ij}(\vec{r})$ .

2. Дефекты: поля плотности дислокаций  $\alpha_{ij}(\vec{r})$  и дисклинаций  $\tau_{ij}(\vec{r})$ . Для изолированных дефектов поля  $\alpha$  и  $\tau$  определяются стандартным образом:

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} &= \sum_D \delta_i(\vec{r} - \vec{r}_D) b_j, \\ \tau_{ij} &= \sum_D \delta_i(\vec{r} - \vec{r}_D) \Omega_j, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\delta_i(\vec{r})$ —компоненты дельта-функции на линии дефекта.

### 3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для описания системы в рамках предложенной параметризации необходимо записать гамильтониан в терминах полей  $\alpha, \tau, U, u$  и вычислить гиббсовскую статсумму. Первые шаги к осуществлению этой программы были сделаны в работе С.П.Обухова [16]. В ней поля  $\tau, U$  считались несущественными и были отброшены. В таком приближении было показано, что при температуре  $T_D = \frac{\epsilon}{\ln(n)}$  ( $\epsilon$ —средняя энергия единицы длины ядра дислокации,  $n$ —число ближайших соседей в кристаллической решетке) в кристалле образуется система дислокационных линий бесконечной длины, и этот фазовый переход отождествлялся с плавлением.

В работе [4] было отмечено, что основная черта плавления—потеря дальнего ориентационного порядка, и был произведен учет полей  $U_{ij}(\vec{r})$ . При этом полагалось, что дисклинации, требующие для своего создания больших упругих деформаций, не могут существовать как равновесные дефекты без механизма пластической релаксации этих деформаций, т.е. без дислокаций. Таким образом, дисклинации могут быть представлены как системы дислокаций и потому не требуют явного введения. Рассмотрение гиббсовской статистики полей  $\alpha, u, U$  показало, что фазовый переход, полученный в [16], не является, вообще говоря, плавлением. Ориентационное разупорядочение описывается эффективным гамильтонианом полей  $U$ , который оказался идентичным гамильтониану феноменологической теории [5]. Таким образом, согласно [4], между кристаллом и

жидкостью может существовать промежуточная фаза, которая характеризуется наличием дислокационной сети бесконечной длины, и в то же время сохранением ориентационного порядка.

В работе [17] было указано на то, что жидкость должна характеризоваться потерей жесткости на масштабах, превышающих некоторый характерный, и была предпринята попытка вычислить одну из характеристик жесткости—крупномасштабный эффективный модуль сдвига. Сделать это удалось только ниже  $T_D$ , где, как и ожидалось, он оказался отличным от нуля. Целью настоящей работы является определение жесткости системы выше дислокационного перехода. При этом, как и в [4] мы будем предполагать, что дисклинации не требуют явного введения. Тогда, если деформации малы, вместо поворота и деформации можно ввести одно поле дисторсии  $\beta(\vec{r})$ :

$$\beta_{ij} = u_{ij} + \frac{1}{2}(U_{ij} - U_{ji}). \quad (8)$$

Вычисление жесткости позволит ответить на вопрос, является ли высокотемпературная фаза [16] жидкостью, а также даст возможность охарактеризовать промежуточную фазу, предсказанную в [4], более детально.

Прежде всего конкретизируем вычисляемую величину. Жесткость системы определяется гиббсовским средним

$$B_{ijkl}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \beta_{ij}(\vec{r}) \beta_{kl}(\vec{r}') \rangle. \quad (9)$$

Как будет видно из дальнейшего, удобно пользоваться величиной

$$\Omega_{\alpha\beta} = \frac{1}{4} \epsilon_{\alpha ij} \epsilon_{\beta kl} B_{ijkl}, \quad (10)$$

где  $\epsilon_{ijk}$ —символы Леви-Чивиты. Величину  $\Omega$  естественно назвать поворотной жесткостью, поскольку

$$\Omega_{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \omega_{\alpha}(\vec{r}) \omega_{\beta}(\vec{r}') \rangle, \quad (11)$$

$$\omega_{\alpha} = \frac{1}{2} \epsilon_{\alpha ij} U_{ij}, \quad (12)$$

$\vec{\omega}$ —вектор поворота: его направление совпадает с осью, а модуль равен синусу угла поворота осей локальной анизотропии относительно глобальной системы координат. Как видно из (5), (6) величина  $\Omega$  характеризует и ориентационный порядок в системе.

#### 4. ГАМИЛЬТониан И УСЛОВИЕ СОВМЕСТИМОСТИ

Гамильтониан состоит из двух частей—энергии кора дислокаций и энергии их взаимодействия:

$$H = H_c + H_{int}. \quad (13)$$

Энергия кора записывается в виде:

$$H_c = \sum_D \int_D \epsilon dl, \quad (14)$$

$\epsilon$ —энергия ядра дислокации на единицу длины, интегрирование—вдоль дислокационной линии, суммирование—по всем дислокациям. Энергию взаимодействия можно записать исходя из следующих известных выражений [13, 18]:

$$H_{int} = \frac{1}{2} \int \beta_{ij}(\vec{r}) \beta_{kl}(\vec{r}') \Lambda_{ijkl} dv, \quad (15)$$

$$\beta_{mn} = \int \epsilon_{pmk} \Lambda_{ijkl} G_{jn,i}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha_{pl}(\vec{r}') dv', \quad (16)$$

где  $\Lambda$ —матрица упругих постоянных,  $G_{jn,i}(\vec{r}) = \frac{dG_{jn}(\vec{r})}{dx_i}$ ,  $G_{jn}$ —тензор Грина кристалла,  $\alpha$ —тензор плотности дислокаций. Для простоты мы будем полагать систему простой кубической и упруго-изотропной, так что

$$\Lambda_{ijkl} = \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda\delta_{ij}\delta_{kl},$$

$$G_{jn}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\mu} \left( \frac{\delta_{jn}}{r} - \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{d^2 r}{dx_j dx_n} \right), \quad (17)$$

где  $\nu$ —коэффициент Пуассона,  $\mu, \lambda$ —коэффициенты Ламэ. Вычисление по формулам (15)–(17) дает:

$$H_{int} = \frac{1}{2} \int \alpha_{li}(\vec{r}) D_{ij}^{ln}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha_{nj}(\vec{r}') dv dv', \quad (18)$$

где матрица  $D$  в импульсном представлении есть:

$$D_{ij}^{ln} = \frac{2\mu}{q^2} \left[ \frac{1+p}{1+2p} S_{ij} S_{ln} + \frac{p^2}{2(1+2p)^2} S_{ij} n_l n_n - \frac{1}{2} S_{il} S_{jn} + \frac{p}{1+2p} S_{in} S_{jl} \right]. \quad (19)$$

Здесь  $n_l = \frac{q_l}{q}$ ;  $S_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j$ ;  $p = -\frac{\nu}{1+\nu}$ . Выражение (19) совпадает с использованным в [16] с точностью до второго слагаемого. В [16] это

слагаемое отброшено, т.к. оно дает нуль для дислокационных конфигураций из замкнутых петель с постоянным вдоль петли вектором Бюргерса. Мы, однако, полагаем, что поворот не является малым и вектор Бюргерса может меняться вдоль линии дефекта:

$$\begin{aligned} \alpha_{li} &= \alpha_{ls}^0 U_{is} \\ &= \sum_D \delta_l(\vec{r} - \vec{r}_D) b_s^0 U_{is}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (20)$$

$b_s^0$  — компоненты вектора Бюргерса в системе координат, оси которой совпадают с осями локальной анизотропии. С учетом (20) энергия взаимодействия принимает вид:

$$H_{int} = \frac{1}{2} \int \alpha^0(r) U(r) D(r - r') \alpha^0(r') U(r') dv dv' \quad (21)$$

(индексы опущены для простоты записи.) При вычислении статсуммы с гамильтонианом (14), (21) по полям  $\alpha^0, U$  необходимо иметь в виду, что указанные поля не являются независимыми, а связаны условием совместности [4]. В нашем случае это условие легко получить из формулы (16):

$$\omega_\alpha = \frac{1}{2} \int \varepsilon_{\alpha mn} \varepsilon_{pmk} \Lambda_{ijkl} G_{jn,i}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha_{ps}^0(\vec{r}') U_{ls}(\vec{r}') dv'. \quad (22)$$

Матрица  $U$  восстанавливается по вектору  $\vec{\omega}$  следующим образом:

$$U_{ij} = \delta_{ij} \cos \phi + (1 - \sin \phi) \frac{\omega_i \omega_j}{\omega^2} + \varepsilon_{ijk} \omega_k, \quad (23)$$

где  $\sin \phi = \omega$

#### 4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЭКРАНИРОВАННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Учет условия (22), (23) при вычислении статсуммы требует введения нетривиального весового множителя в функциональный интеграл, т.к. данное условие не является линейным. Чтобы обойти эту трудность, мы будем использовать приближение, аналогичное приближению Дебая-Хюккеля в теории разреженной плазмы. Поступим следующим образом. Предположим, что нам удалось решить задачу и вычислить среднее:

$$A_{ijkl} = \langle U_{ij}(\vec{r}) U_{kl}(\vec{r}') \rangle. \quad (24)$$

Если в (21) заменить произведение матриц поворота на  $A$ , то полученное выражение будет служить аппроксимацией для эффективного гамильтониана дислокаций:

$$\begin{aligned} H_{eff}^D &= H_c + \frac{1}{2} \int \alpha^0(r) \tilde{D}(r - r') \alpha^0(r') dv dv', \\ \tilde{D}_{ij}^{ln}(r - r') &= D_{sk}^{ln}(r - r') A_{sikj}(r - r'). \end{aligned} \quad (25)$$

Выражение (25) можно интерпретировать как изменение тензора Грина по сравнению с идеальным кристаллом: если в идеальном кристалле с малой плотностью дислокаций  $\alpha^0 = \alpha$  и

$$\beta = \int \varepsilon \Lambda G(\vec{r} - \vec{r}') \alpha^0(\vec{r}') dv' \quad (26)$$

то после интегрирования по полям поворота формула (26) переходит в

$$\beta = \int \varepsilon \Lambda \tilde{G}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha^0(\vec{r}') dv'. \quad (27)$$

При этом  $\tilde{D}$  вычисляется через  $\tilde{G}$  так же, как  $D$  вычисляется через  $G$ :

$$\tilde{D}_{ll_1}^{pp_1} = \Lambda_{mnm_1n_1} \varepsilon_{pmk} \varepsilon_{p_1m_1k_1} \Lambda_{ijkl} \Lambda_{i_1j_1k_1l_1} \tilde{G}_{jn,i}(q) \tilde{G}_{j_1n_1,i_1}(q). \quad (28)$$

Условие совместности в приближении (25) есть

$$\omega_\alpha = \frac{1}{2} \int \varepsilon_{\alpha mn} \varepsilon_{pmk} \Lambda_{ijkl} \tilde{G}_{jn,i}(\vec{r} - \vec{r}') \alpha_{pl}^0(\vec{r}') dv'. \quad (29)$$

Его можно представить в ином, более удобном виде, если взять среднее от произведения  $\omega_\alpha(\vec{r}) \omega_\beta(\vec{r}')$  и перейти к импульсному представлению:

$$\begin{aligned} \Omega_{\alpha\beta} &= \frac{1}{4} \varepsilon_{\alpha mn} \varepsilon_{\beta m_1 n_1} \varepsilon_{pmk} \varepsilon_{p_1 m_1 k_1} \Lambda_{ijkl} \\ &\Lambda_{i_1 j_1 k_1 l_1} \tilde{G}_{jn,i}(\vec{q}) \tilde{G}_{j_1 n_1, i_1}(-\vec{q}) L_{ll_1}^{pp_1}(\vec{q}), \end{aligned} \quad (30)$$

где

$$L_{ij}^{ln}(r - r') = \sum_{\alpha^0} \alpha^0 \exp(-\frac{H_d}{T}) \alpha_{li}^0(r) \alpha_{nj}^0(r'). \quad (31)$$

Суммирование производится по конфигурациям дислокаций.

Очевидное соотношение

$$\Omega_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \frac{1}{4} \varepsilon_{\alpha ij} \varepsilon_{\beta kl} A_{ijkl}(\vec{r}) \quad (32)$$

вместе с выражениями (28), (30), (31) составляет систему уравнений на  $\Omega$ . Эта система довольно сложна, и мы воспользуемся упрощающими предположениями. Мы будем считать, что

$$\tilde{D}(q) = 2\mu f(q)[\dots], \quad (33)$$

где выражение в квадратных скобках идентично формуле (19). Это значит, что индексную форму взаимодействия мы полагаем такой же, как в идеальном кристалле, но степенная зависимость  $D \propto \frac{1}{r}$  заменяется на некоторую экранированную. Кроме того, мы будем полагать, что величина  $A(r - r')$  не зависит от выбора глобальной системы координат. Отсюда следует, что средняя матрица относительного поворота осей локальной анизотропии  $g_{jl}(\vec{r}) = A_{ijil}(\vec{r}) = A_{jili}(\vec{r})$  представляет собой изотропный тензор:

$$g_{jl}(\vec{r}) = g(r)\delta_{jl}. \quad (34)$$

Нетрудно так же показать, что в этом случае свертка  $A_{ijjl}$  равна нулю: она не зависит от ориентации глобальных координат, поэтому ее можно усреднить по этим ориентациям без каких-либо изменений. Меняя места ми это усреднение со статистическим, убеждаемся, что  $A_{ijjl} = 0$ . Исходя из этого, запишем выражение для  $\Omega_{\alpha\alpha}$ :

$$\begin{aligned} \Omega_{\alpha\alpha}(r) &= \frac{1}{4}\varepsilon_{aij}\varepsilon_{akl}A_{ijkl}, \\ &= \frac{1}{4}(A_{ijij} - A_{ijji}) = \frac{3}{4}g(r). \end{aligned} \quad (35)$$

Функция  $g(r)$  характеризует поворотную жесткость системы.

Рассмотрим соотношение:

$$\tilde{D}_{ii}^{ln} = D_{ij}^{ln} A_{ijs} = D_{ii}^{ln}(r)g(r). \quad (36)$$

Интегрируя это равенство по углам, что можно сделать и в импульсном представлении, и используя (33), получаем:

$$f(r) = -\frac{g(r)}{4\pi r}, \quad (37)$$

где  $f(r)$ —Фурье-оригинал для  $f(q)$  из (33). Свернув условие (30) по индексам  $\alpha, \beta$  и используя (28), (33), получим уравнение

$$\begin{aligned} F[-3\pi r f(r)] &= \frac{1}{4}\varepsilon_{amn}\varepsilon_{am_1n_1}\varepsilon_{pmk}\varepsilon_{p_1m_1k_1}\Lambda_{ijkl} \\ &\Lambda_{i_1j_1k_1l_1}G_{jn,i}(\vec{q})G_{j_1n_1,i_1}(-\vec{q})L_{l_1}^{pp_1}(\vec{q}), \end{aligned} \quad (38)$$

где через  $F[\dots]$  обозначена операция взятия пространственного Фурье-образа. Теперь необходимо вычислить коррелятор  $L$  по формулам (25), (31).

## 5. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯТОРА ДИСЛОКАЦИЙ

Нам нужно вычислить статсумму

$$Z_D = \sum_{\alpha^0} \exp\left[-\frac{H_{eff}^D}{T}\right], \quad (39)$$

где

$$H_{eff}^D = \sum_D \int_D \varepsilon dl + \frac{1}{2} \int \alpha_{li}^0 \tilde{D}_{ij}^{ln} \alpha_{nj}^0 dv dv' \quad (40)$$

$\tilde{D}$  дается выражением (33). Для простоты предположим, что  $\varepsilon$  не зависит от ориентации вектора Бюргерса и с заметной вероятностью реализуются дислокации только с минимальными  $b^0$ . Введем сопряженное поле:

$$\begin{aligned} Z_D &= \sum_{\alpha^0} \int D \phi_{ij} \exp\left[-\sum_D \int_D \frac{\varepsilon}{T} dl \right. \\ &\left. - \frac{T}{2} \int \phi_{li}(\vec{r})(\tilde{D}^{-1})_{ij}^{ln} \phi_{nj}(\vec{r}') dv dv' - i \int \phi_{ij}(\vec{r}) \alpha_{ij}^0(\vec{r}) dv\right]. \end{aligned} \quad (41)$$

При переходе от (39) к (41) возникает проблема: дело в том, что матрица  $\tilde{D}$ —поперечная, т.е. не имеет обратной. Чтобы обойти эту трудность, заметим, что в континуальном приближении энергию кора можно представить в виде:

$$H_c = \varepsilon \int (\alpha_{ij}^0)^2 dv. \quad (42)$$

Используя это соотношение, величины  $\tilde{D}, \varepsilon$  в (39) можно переопределить:

$$\begin{aligned} \varepsilon &\rightarrow \varepsilon - \beta \\ \tilde{D}_{ij}^{ln} &\rightarrow \tilde{D}_{ij}^{ln} + 2\beta\delta_{ij}\delta_{ln}\delta(\vec{r}). \end{aligned} \quad (43)$$

В конечных выражениях положим  $\beta \rightarrow 0$ . В статье [4] предложено преобразование, сводящее суммирование по конфигурациям дислокационных

петель к континуальному интегралу по трем комплексным локальным полям  $\psi^\nu$  ( $\nu = 1, 2, 3$ ):

$$\sum_{\alpha^0} \exp\left[-\frac{H_c}{T} + i \int \alpha_{ij}^0(\vec{r}) \phi_{ij}(\vec{r}) dv\right] = \int \Pi_\nu D\psi^\nu D\psi^{\nu*} \exp[-H_d], \quad (44)$$

$$H_d = \int \sum_\nu [(1 - nJ) |\psi^\nu|^2 + g |\psi^\nu|^4 + J |(d_k - i\phi_{kj} b_j^{0\nu}) \psi^\nu|^2] dv, \quad (45)$$

где  $n$ —число ближайших соседей в кристаллической решетке,  $J = \lambda(g) \exp(-\frac{\epsilon}{T})$ ;  $\lambda(g) = \frac{\int_0^\infty \exp(-x - gx^2) dx}{\int_0^\infty x \exp(-x - x^2) dx}$ ;  $g$ —модельная константа, учитывающая искажение дислокационного взаимодействия на малых расстояниях. Поскольку дислокации с минимальными векторами Бюргерса равновероятны, то для произвольного функционала  $R[\psi^\nu]$  среднее  $\langle R \rangle$  от индекса  $\nu$  не зависит. По полям  $\psi$  проинтегрируем в приближении среднего поля:

$$Z_D = \int D\phi_{ij} \exp\left[-\int \phi_{li} M_{ij}^{ln} \phi_{nj} dv dv'\right],$$

$$M_{ij}^{ln} = J \langle |\psi|^2 \rangle \delta_{ij} \delta_{ln} \delta(\vec{r}) + \frac{T}{2} (\tilde{D}^{-1})_{ij}^{ln}. \quad (46)$$

Добавляя в (41) член с источником, нетрудно видеть, что

$$L_{ij}^{ln} = -J^2 \langle |\psi|^2 \rangle^2 (M^{-1})_{ij}^{ln}. \quad (47)$$

Вычисление и подстановка в (38) дают следующее уравнение на  $f(r)$ :

$$F[3\pi r f(r)] = \frac{2\mu p^2 \tilde{J}^2}{T(1+2p)^2} \frac{f^2(q)}{[\frac{2(1+2p)^2}{p^2} + \frac{4\mu}{T} \tilde{J} f(q)]}, \quad (48)$$

где  $\tilde{J} = J \langle |\psi|^2 \rangle$ . Уравнение (48) допускает еще одно упрощение. Концепция кристаллоподобного локального порядка в конденсированном веществе предполагает, что "плохая" материя, т.е. ядра дислокаций, занимает малую часть всего объема. Поскольку  $\langle |\psi|^2 \rangle \propto$  концентрации дислокационных сегментов, то  $\tilde{J}$  можно считать малой величиной. Разложим правую часть (42) по  $\tilde{J}$  и удержим первый не исчезающий член:

$$F[r f(r)] = C f^2(q),$$

$$C = \frac{\mu \tilde{J}^2}{3\pi T} \left(\frac{p}{1+2p}\right)^4. \quad (49)$$

## 6. РЕШЕНИЯ (49) И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Прежде чем решать уравнение (49), определим границы его применимости. Основой для его вывода служит приближение (25), которое базируется на предположении, что  $l_U \gg l_\alpha$ .  $l_U, l_\alpha$ —характерные масштабы изменения полей  $U, \alpha$ . Таким образом, дислокационное взаимодействие на масштабах порядка  $l_\alpha$  в соотношении (25) искажено. Это искажение не сказывается при вычислении  $L_{ij}^{ln}$ , поскольку оно может быть скомпенсировано подходящим выбором константы  $g$ , но оно накладывает ограничение на применимость уравнения (49): его решения характеризуют жесткость системы только на масштабах  $r \gg l_\alpha$ .

Уравнение (49) имеет два решения:

$$f_1(r) = -\frac{1}{4\pi^3 C r^2},$$

$$f_2(r) = -\frac{a}{2\pi C r} e^{-ar}, \quad (50)$$

где  $a$  некоторая постоянная, которую определим ниже. Соответствующие этим решениям функции  $g(r)$  есть:

$$g_1(r) = \frac{1}{C \pi^2 r},$$

$$g_2(r) = \frac{2a}{C} e^{-ar}. \quad (51)$$

Одна из этих функций при  $\tilde{J} \rightarrow 0$  должна давать решение для жесткого кристалла  $g(r) = const$ . Видно, что эта функция— $g_2$ , причем должно быть

$$a = const \frac{C}{2}. \quad (52)$$

Состояние, в котором реализуется  $g_2$  есть, очевидно, жидкость. Соотношение (52) позволяет оценить масштаб, на котором жидкость не теряет жесткости по отношению к крутильным деформациям:  $r_l = const * 10^2$  межатомных расстояний, где  $const$ —порядка единицы.

Состояние с  $g_1$  представляет собой промежуточную фазу, существование которой предсказано в [4]. Как видно из (51), эта фаза характеризуется степенным падением поворотной жесткости на больших расстояниях:  $\Omega_{mn}(r) \propto \frac{1}{r}$  при  $r \rightarrow \infty$ .



Анализ термодинамической выгоды и устойчивости полученных решений в рамках приближений данной работы проблематичен: допущения (33), (34) позволяют говорить лишь о качественном виде  $\Omega$ .

Таким образом, соотношения (51) представляют собой возможные сценарии поведения жесткости системы выше  $T_D$ . Хотя решение вопроса о их реализации и стабильности в рамках данной работы невозможно, соотношения (51) дают шанс экспериментального исследования этой проблемы.

Отметим, что жидкостное решение скорее всего нестабильно: об этом сигнализирует нефизический рост  $r_l$  с температурой (см. соотношения (51), (52), (49)). В таком случае плавления в рамках рассмотренной модели не происходит—необходимо явное введение дисклинаций. Детальное рассмотрение этого вопроса представляет собой содержание отдельной работы.

### Приложение

Встречающиеся в тексте матрицы—ядра квадратичных форм в импульсном представлении имеют вид:

$$\begin{aligned} V_{ij}^{ln} = Q(q) & [\nu_1 S_{ij} S_{ln} + \nu_2 S_{ij} n_l n_n + \nu_3 S_{ln} n_i n_j \\ & + \nu_4 S_{il} S_{jn} + \nu_5 S_{il} n_j n_n + \nu_6 S_{jn} n_i n_l + \nu_7 S_{in} S_{jl} \\ & + \nu_8 S_{in} n_j n_l + \nu_9 S_{il} n_j n_n + \nu_{10} n_i n_j n_n n_l]. \end{aligned} \quad (53)$$

Коэффициенты  $\mu_i$  и множитель  $Q'$  для обратной матрицы вычисляются с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned} Q' &= \frac{1}{Q}; \mu_1 = \frac{\nu_1}{d_1}; \mu_2 = \frac{\nu_3}{d_2}; \mu_3 = \frac{\nu_2}{d_2}; \\ \mu_4 &= \frac{\nu_4 \nu_{10} - \nu_5 \nu_6}{(\nu_1 + \nu_7) d_3}; \mu_5 = \frac{\nu_5}{d_3}; \mu_6 = \frac{\nu_6}{d_3}; \\ \mu_7 &= -\frac{\nu_7}{d_1}; \mu_8 = -\frac{\nu_8}{d_2}; \mu_9 = -\frac{\nu_9}{d_2}; \mu_{10} = -\frac{\nu_1 + 2\nu_4 + \nu_7}{d_3}; \\ d_1 &= \nu_1^2 - \nu_7^2; d_2 = \nu_2 \nu_3 - \nu_8 \nu_9; d_3 = 2\nu_5 \nu_6 - \nu_{10}(\nu_1 + 2\nu_4 + \nu_7). \end{aligned} \quad (54)$$

Ниже приводятся коэффициенты и множители для встречающихся в тексте матриц.

$D_{ij}^{ln}$ :

$$Q = \frac{2\mu}{q^2}; \nu_1 = \frac{1+p}{1+2p}; \nu_2 = \frac{p^2}{2(1+2p)^2}; \nu_4 = -\frac{1}{2}; \nu_7 = \frac{p}{1+2p}. \quad (55)$$

$(\bar{D}^{-1})_{ij}^{ln}$ :

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2\mu f(q)}; \nu_1 = \frac{\tilde{\beta} + \frac{1+p}{1+2p}}{(\tilde{\beta} + 1)(\tilde{\beta} + \frac{1}{1+2p})}; \nu_2 = \frac{1}{\tilde{\beta} + \frac{p^2}{2(1+2p)^2}}; \nu_3 = \frac{1}{\tilde{\beta}}; \\ \nu_4 &= \frac{1}{2\tilde{\beta}(\tilde{\beta} + 1)}; \nu_7 = \frac{-p}{(1+2p)(\tilde{\beta} + 1)(\tilde{\beta} + \frac{1}{1+2p})}; \nu_{10} = \frac{1}{\tilde{\beta}}; \tilde{\beta} = \frac{\beta}{\mu f(q)}. \end{aligned} \quad (56)$$

$L_{ij}^{ln}$ :

$$\begin{aligned} Q &= -\frac{4\mu}{T} \tilde{j}^2 f(q); \nu_1 = \frac{b+1+p}{(b+1)(b+1+2p)}; \nu_2 = \frac{1}{b + \frac{2(1+2p)^2}{p^2}}; \\ \nu_4 &= -\frac{1}{2(b+1)}; \nu_7 = \frac{p}{(b+1)(b+1+2p)}; b = \frac{4\mu}{T} \tilde{j} f(q). \end{aligned} \quad (57)$$

В выражениях (55)–(57) указаны только отличные от нуля  $\nu_k$ . Матрица  $L_{ij}^{ln}$  выписана в пределе  $\tilde{\beta} \rightarrow 0$ .

### Список литературы

- [1] Я.И.Френкель. *Кинетическая теория жидкостей*, М., "Наука", 1976.
- [2] И.З.Фишер. *Статистическая теория жидкостей*, М., "Наука", 1968.
- [3] А.Р.Уббеллоде. *Плавление и кристаллическая структура*, М., "Мир", 1969.
- [4] А.З.Паташинский, Б.И.Шумило. *ЖЭТФ* т.89 вып.1 с.315 (1985), Препринт 84-160 ИЯФ СО АН СССР, Новосибирск (1984).
- [5] А.С.Митусь, А.З.Паташинский. *ЖЭТФ* т.80 вып.4 с.1551 (1981), *Phys.Lett.* v.87A p.179 (1982).
- [6] S.Z.Hess. *Naturforsch.* v.35A p.69 (1980).
- [7] D.R.Nelson, J.Toner. *Phys.Rev.* v.B24 p.363 (1981).
- [8] S.Sachdev, D.R.Nelson. *Phys.Rev.Lett.* v.53 p.1947 (1984), *Phys.Rev.* v.B32 p.4592 (1985).

- [9] J.Steinhardt, D.R.Nelson, M.Ronchetti. *Phys.Rev.* v.B28 p.784 (1983),  
*Phys.Rev.Lett.* v.47 p.1297 (1981).
- [10] J.D.Bernal. *Nature* v.185 p.68 (1960), *Proc.Roy.Soc.* v.A280 p.299 (1964)
- [11] W.H.J.Zachariasen. *Am.Chem.Soc.* v.54 p.3841 (1932).
- [12] A.C.Mitus, A.Z.Patashinski. *Physica* v.A150 p.383 (1988).
- [13] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. *Теория упругости*. М., "Наука", 1987.
- [14] E.Kroner. *Kontinuumtheorie der Versetzungen*. Springer, Berlin (1958).
- [15] F.R.N.Nabarro. *Theory of crystal dislocations*. Clarendon Press, Oxford (1979).
- [16] С.П.Обухов. *ЖЭТФ* т.83 вып.11 с.1978 (1982).
- [17] А.А.Корнеев, О.В.Тапинская, В.Н.Тронин. *ЖЭТФ* т.98 с.1424 (1990).
- [18] Р. де Вит. *Континуальная теория дисклинаций*. М., "Мир" (1978).
- [19] A.Z.Patashinski. *Liquid: Local and Global order*. Preprint INP 90-115, Novosibirsk (1990).
- [20] A.Z.Patashinski. *Defects and liquid structure by high temperatures*. Preprint INP 90-99, Novosibirsk (1990).

А.З. Паташинский, Л.Д. Сон

**Жесткость конденсированного вещества  
при высоких температурах**

ИЯФ 92-64

Ответственный за выпуск С.Г. Попов

---

Работа поступила 31 августа 1992 г.

Подписано в печать 1 09. 1992 г.

Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 1,1 печ.л., 0,9 уч.-изд.л.

Тираж 200 экз. Бесплатно. Заказ N 64

---

Обработано на IBM PC и отпечатано

на ротапринте ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН,

Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.