ЖЭТФ, 2000, том 117, вып. 4, стр. 723–734

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ МОДУЛИ УПРУГОСТИ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

*А. П. Кочкин**

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук
142430, Троицк, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 30 июня 1998 г.,
после переработки 26 сентября 1999 г.

В теории натуральной деформации дано определение тензора дифференциальных модулей упругости при деформациях произвольной величины, найдена его связь с величинами, измеряемыми как в акустических, так и механостатических экспериментах, производимых посредством приложения дополнительной малой нагрузки. Как иллюстрация приведено выражение этого тензора для тела, изотропного до приложения нагрузки, а для анизотропного тела под давлением вычислены с точностью до второго порядка по сдвигу, возникающему в результате его гидростатического сжатия, формулы, позволяющие находить этот тензор из результатов измерений.

PACS: 05.70.Ce, 62.20.Dc, 62.50.+p

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] развит метод рассмотрения конечных упругих деформаций изотропной среды с помощью тензора натуральных деформаций, главные значения которого были введены в рассмотрение в [2] при вычислении виртуальной работы деформации в случае, когда приращение тензора деформации соосно самой деформации. В [3] обсуждена задача об одноосном растяжении изотропного тела, подвергнутого предварительному сжатию произвольной величины в камере высокого давления, причем в терминах нелинейной теории натуральной деформации удалось корректно ввести понятия модуля Юнга и коэффициента Пуассона под давлением. Это оказалось возможным в силу простоты уравнения состояния, когда тензор напряжений соосен с тензором деформаций, так что все особенности поведения вещества определяются лишь зависимостями от инвариантов тензора деформации скалярных коэффициентов при направляющих тензорах (первых трех степенях тензора деформации).

При рассмотрении дополнительных малых деформаций предварительно нагруженного тела имеет смысл выражать результаты через дифференциальные модули упругости, а в анизотропном случае это зачастую становится самым разумным путем, поскольку уравнение состояния для кристаллов низкой симметрии может оказаться достаточно громоздким.

В работе [4] метод теории натуральной деформации распространен на анизотропные среды. Описанный там математический аппарат делает возможным вычисление дифференциальных модулей упругости произвольной однородной среды, что и является целью настоящей работы. Используемые здесь обозначения полностью совпадают с введенными в [4]; там же выяснен и ряд упоминаемых здесь фактов, что мы не будем каждый раз специально оговаривать в целях экономии места. Ссылки на [4], например формулы (12b), (C.12b) и Приложение C будут выглядеть соответственно, как [4 (12b)], [4 (C.12b)] и [4, C].

К этому добавим, что вследствие аддитивности и коммутируемости в теории натуральной деформации объемной и сдвиговой деформаций при любой их величине оказалось возможным построение разложений по степеням сдвига, т. е. расстояния до гидростатической кривой (а не начала координат, как во всех известных ранее формулировках нелинейной теории деформаций).

*E-mail: kochkin@hppi.troitsk.ru

2. ОСНОВНЫЕ ВЕЛИЧИНЫ ТЕОРИИ ДЕФОРМАЦИИ АНИЗОТРОПНОГО ТЕЛА

Пусть деформация переводит произвольную точку ξ_i ненапряженного тела в точку x_i в результате смещения на вектор u_i: $x_i = \xi_i + u_i$. Исходными величинами, описывающими деформацию, в [1, 3] являются матрицы μ и обратная ей λ, причем их элементы определяются следующим образом (β — тензор дисторсии):

$$\mu_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j}, \quad \lambda_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}, \qquad \mu = E - \beta^{\mathrm{T}}, \quad \beta_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \tag{1}$$

Далее, вводится тензор натуральной деформации

$$s = -\frac{1}{2}\ln\gamma, \quad \gamma = \mu\mu^{\mathrm{T}}. \tag{2}$$

Так введенная величина γ отличается от использовавшейся в [1, 3] величины $\gamma = \mu^{\mathrm{T}}\mu$, но, как объяснено в [4], обе они ортогонально-подобны: если γ из (2) обозначить как γ_0 и ввести аналогичные обозначения для s, то

$$\gamma = O\gamma_0 O^{\mathrm{T}}, \quad s = O s_0 O^{\mathrm{T}}, \tag{2а}$$

где

$$\mu = O^{\mathrm{T}} S = S_0 O^{\mathrm{T}}, \quad \gamma = S^2, \quad \gamma_0 = S_0^2, \tag{2б}$$

причем S, S_0 — симметричные, а O — ортогональная матрицы [5].

Так как термодинамическими переменными анизотропного случая являются s_0, γ_0, S_0, величины s, γ, S в этой работе появляться не могут. Поэтому в дальнейшем (как и в (2)) для краткости в деформационных переменных индекс «0» опускается (кроме разд. 9, где снова придется вспомнить о различии соответствующих величин с индексом «0» и без).

3. ИЗМЕРЕНИЕ ДЕФОРМАЦИИ ПО ДИФРАКЦИОННОЙ КАРТИНЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НА МОНОКРИСТАЛЛЕ

Векторы аффинного (вообще говоря) базиса решетки Браве кристалла в соответствии с принятой традицией обозначим через $\mathbf{a}_i$, а контравариантные векторы — как $\mathbf{b}^i$ (векторы обратной решетки).

Введем матрицы ν перехода от декартова базиса $\{\mathbf{i}_k\}$ к аффинному базису $\{\mathbf{a}_i\}$:

$$\mathbf{a}_i = \nu_i^k \mathbf{i}_k, \quad \nu_i^k = \mathbf{i}_k \cdot \mathbf{a}_i, \tag{3}$$

($\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ — скалярное произведение в $E(3)$) и обратные им матрицы ζ, с помощью которых определяется контравариантный (и биортогональный к $\{\mathbf{a}_i\}$) базис $\{\mathbf{b}^i\}$ по формуле

$$\mathbf{b}^i = \zeta_k^i \mathbf{i}_k, \quad \zeta_k^i = \mathbf{b}^i \cdot \mathbf{i}_k.$$

Метрический тензор в аффинном базисе есть

$$g_{ij} = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = \nu_i^k \nu_j^k = (\nu^{\mathrm{T}}\nu)_{ij}, \tag{4}$$

а обратный к нему (контравариантный) —

$$g^{ij} = \mathbf{b}^i \cdot \mathbf{b}^j = \zeta_k^i \zeta_k^j = (\zeta\zeta^{\mathrm{T}})_{ij} \tag{4а}$$

с обычными правилами подъема и опускания индексов, так что, если обозначить (но только в этом разделе) координаты тензоров в декартовом базисе буквами ($\hat{c}_i$, $\hat{\mu}_{ij}$):

$$\begin{aligned} &\mathbf{c} = \hat{c}_k \mathbf{i}_k = c_i \mathbf{b}^i = c^i \mathbf{a}_i, \\ &\mu = \hat{\mu}_{kl}(\mathbf{i}_k \otimes \mathbf{i}_l) = \mu^{i\cdot}_{\cdot j}(\mathbf{a}_i \otimes \mathbf{b}^j) = \\ &= \mu^{ij}(\mathbf{a}_i \otimes \mathbf{a}_j) = \ldots, \end{aligned} \tag{5}$$

то из (3), (4), (4а) сразу же следует связь компонент в различных базисах, например

$$\hat{\mu}_{ij} = \nu_k^i \zeta_j^l \mu^{k\cdot}_{\cdot l}, \quad \mu^{i\cdot}_{\cdot j} = \zeta_k^i \nu_j^l \hat{\mu}_{kl} \tag{5а}$$

(в (5) символ $\otimes$ означает кронекеровское произведение векторов из $E(3)$, определяющее базис в пространстве $E(3) \otimes E(3)$ тензоров второго ранга).

Предположим, что в результате непрерывной (т. е. не сопровождающейся фазовым превращением) деформации векторы $\mathbf{a}_i$ переходят в

$$\mathbf{a}'_i = T_i^j \mathbf{a}_j. \tag{6}$$

Тогда точка

$$\boldsymbol{\xi} = \xi^i \mathbf{a}_i$$

переходит после деформации в точку

$$\mathbf{r} = \xi^i \mathbf{a}'_i = \xi^i T_i^j \mathbf{a}_j,$$

т. е.

$$x^i = T_j^i \xi^j.$$

Как показано в [4], в криволинейных координатах компоненты $\mu^{i\cdot}_{\cdot j}$ тензора μ являются абсолютными производными от координат ξ_i точки до деформации по ее координатам x_j после деформации, а поскольку в аффинных координатах символы Кристоффеля равны нулю, эти производные сводятся к обыкновенным частным производным (см. [6] или [7]):

$$\mu^{i\cdot}_{\cdot j} = \partial \xi^i / \partial x^j = (T^{-1})^i_j. \tag{7}$$

Теперь очевидно, поскольку $\mathbf{b}'^i \cdot \mathbf{a}'_j = \mathbf{b}^i \cdot \mathbf{a}_j = \delta^i_j$, что

$$\mathbf{b}'^i = \mu^{i\cdot}_{\cdot j}\mathbf{b}^j \tag{8}$$

или, вводя не менее традиционные векторы $\mathbf{g}^i = 2\pi\mathbf{b}^i$,

$$\mathbf{g}'^i = \mu^{i\cdot}_{\cdot j}\mathbf{g}^j.$$

Векторы $\mathbf{g}^i$ измеряются непосредственно в структурном эксперименте по методу Лауэ (после того как определены их абсолютные величины по методу Брэгга, или сразу, если имеется спектральный анализатор). Именно, для выбранного рефлекса (с вектором $\mathbf{g}$ до деформации и $\mathbf{g}'$ после) можно написать (m_i — целые числа, $\mathbf{k}$ — волновой вектор падающей волны)

$$\mathbf{g} = k\{\cos\varphi\sin\vartheta,\ \sin\varphi\sin\vartheta,\ \cos\vartheta - 1\} = m_i\mathbf{g}^i, \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{g}' = k\{\cos\varphi'\sin\vartheta',\ \sin\varphi'\sin\vartheta',\ \cos\vartheta' - 1\} = \\ = m_i\mathbf{g}'^i = m'_i\mathbf{g}^i,\end{aligned} \tag{9а}$$

где

$$m'_i = m_j\mu^{j\cdot}_{\cdot i} = \frac{1}{2\pi}\mathbf{g}'\cdot\mathbf{a}_i. \tag{9б}$$

Поэтому три независимых рефлекса ($\alpha = 1, 2, 3$)

$$\mathbf{g}_\alpha = m_{\alpha i}\mathbf{g}^i, \quad \mathbf{g}'_\alpha = m'_{\alpha i}\mathbf{g}^i \tag{10}$$

вполне определяют матрицу μ:

$$\mu^{i\cdot}_{\cdot j} = (m^{-1})^{i\alpha}m'_{\alpha j}. \tag{11}$$

Теперь, если известна первоначальная ориентация кристалла, т. е. матрицы ν (или ζ), по формулам (5), (5а) вычисляются компоненты матрицы μ в декартовом базисе:

$$\hat{\mu}_{ij} = \nu^i_k\zeta^l_j\mu^{k\cdot}_{\cdot l}\ ,$$

после чего (см. (2б)) находятся матрица S, а затем и матрица поворота O:

$$S = \sqrt{\hat{\mu}\hat{\mu}^{\mathrm{T}}}, \quad O = \hat{\mu}S^{-1} = S^{-1}\hat{\mu}. \tag{12}$$

Точность определения деформации таким методом зависит от размеров дифракционных пятен, т. е. для идеального кристалла она определяется свойствами решеточной суммы для трехмерной дифракционной решетки (хотя и может быть также оценена из выражений для полного сечения рассеяния в пятне, σ, и максимальной величины дифференциального сечения $(d\sigma/do)_{max}$ в методе Лауэ, см. [8]), т. е., поскольку $\delta o \sim (a/L)^2$, из (9), (9а), (11) следует

$$\Delta s{\sim}\Delta m{\sim}\Delta\varphi{\gg}\delta\varphi{\sim}\sqrt{\delta o}{\sim}a/L \sim 10^{-8}\text{–}10^{-7} \tag{13}$$

(здесь символ Δ относится к измеряемому изменению наблюдаемой величины, a — постоянная решетки, L — размер образца).

Эта же оценка справедлива и в динамической теории рассеяния [9] (разумеется, для асимптотических значений амплитуды рассеяния, т. е. при измерениях интенсивности на расстояниях от образца $r \gg L$).

К уширению дифракционного пятна приводит [10] наличие в образце дефектов, протяженность которых сравнима с его размерами (например, дислокационные линии или хаотически распределенные по кристаллу ошибки наложения), что в свою очередь вызывает потерю точности измерений деформации. Конечные же дефекты, увеличивая диффузный фон и ослабляя интенсивность главного максимума, оставляют ширину линии неизменной, хотя и могут приводить к искажению средней (по кристаллу) элементарной ячейки [10]. Если деформация в этом последнем случае не вызывает перераспределения дефектов, влияющего на такое искажение ячейки, приведенная оценка точности сохраняется. Экспериментальные ошибки, проистекающие в основном от неточного определения величины k, значительно превышают (13), так что приведенная оценка точности является предельно возможной.

4. ИЗОТЕРМИЧЕСКИЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ ТЕНЗОР ЭФФЕКТИВНЫХ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИОННАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАГРУЖЕННОГО ТЕЛА

1. Как показано в [4], тензор напряжений σ анизотропной среды, удовлетворяющий условиям равновесия

$$\partial\sigma_{ij}/\partial x_j + f_i = 0, \tag{14}$$

есть функция от несимметричного тензора μ и потому

$$\delta\sigma_{ij} = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\mu_{kl}}\delta\mu_{kl}. \tag{15}$$

Однако бессмысленно вводить тензор дифференциальных модулей упругости как производную от σ по μ, потому что деформация поворота, увеличивая число его различных компонент (для этой производной оно равно 54), не вносит новой информации о физических свойствах среды. Кроме того, так определенный тензор зависит от выбора начала отсчета деформации.

Именно, если считать, что рассматриваемая деформация складывается из предварительной, переводящей ξ_i в $\bar{x}_i$, и последующего смещения на u'_i:

$$\bar{x}_i = \xi_i + \bar{u}_i, \quad x_i = \bar{x}_i + u'_i, \tag{16}$$

то, учитывая, что $\bar{\mu}_{ij} = \partial\xi_i/\partial\bar{x}_j$, и определив по аналогии с (1)

$$\mu'_{ij} = \frac{\partial\bar{x}_i}{\partial x_j} = \delta_{ij} - \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}, \tag{17}$$

очевидным образом получаем

$$\mu_{ij} = \bar{\mu}_{ik}\mu'_{kj}. \tag{17a}$$

Отсюда понятно, что

$$\mu_{qi}\frac{\partial}{\partial\mu_{qj}} = \mu'_{qi}\frac{\partial}{\partial\mu'_{qj}}, \tag{18}$$

а это означает, что применение такого оператора к величине, не зависящей от выбора начала отсчета деформации, снова дает величину, от этого выбора не зависящую. В частности, если за новое начало отсчета выбрать точку текущей деформации (что мы будем отмечать значком «c»), где $\mu' = E$, получается

$$\mu_{qi}\frac{\partial}{\partial\mu_{qj}} = \left.\frac{\partial}{\partial\mu'_{qj}}\right|_c .$$

Поэтому вместо упоминавшихся компонент производных из (15) естественнее рассматривать величины

$$N_{ijkl} = -\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\mu_{qk}}\mu_{ql} \equiv -\left.\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\mu'_{lk}}\right|_c, \tag{19}$$

через которые эти компоненты легко вычисляются:

$$\partial\sigma_{ij}/\partial\mu_{lk} = -N_{ijkm}\lambda_{ml}. \tag{20}$$

Введенный таким образом тензор $\mathcal{N}$ назовем дифференциальным тензором эффективных модулей упругости (изотермическим). С помощью его компонент уравнения равновесия (14) при произвольных деформациях записываются в виде

$$N_{ijkm}\lambda_{ml}\frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j\partial x_k} + f_i = 0. \tag{21}$$

Этих уравнений для компонент векторов смещения ровно три, так что не требуется привлечения дополнительных условий равенства нулю тензора кривизны евклидова пространства, являющихся обобщением условий Сен-Венана (как в [1]).

2. Перейдем к вычислению тензора $\mathcal{N}$, выражая его компоненты через компоненты введенного в [4] тензора $\mathcal{Y}$, который будем называть термодинамической деформационной восприимчивостью:

$$Y_{ijkl} = \left(\partial\sigma_{0ij}/\partial s_{kl}\right)_T. \tag{22}$$

Здесь σ_0 — «термодинамический» тензор напряжений, находимый из уравнения состояния (p — давление, ρ — плотность, τ_0 — сдвиговое напряжение):

$$\sigma_0 = \rho(\partial f/\partial s)_T = -pE + \tau_0, \tag{23}$$

f — свободная энергия единицы массы вещества, тензор натуральной деформации анизотропной среды, s, определен в (2), а σ_0 и σ связаны соотношениями

$$\begin{gathered} \sigma = \Sigma\sigma_0, \quad \Sigma = -2\mathcal{M}^{\mathrm{T}}\mathcal{D}, \\ \mathcal{M} = (\mu\otimes\mu), \quad \mathcal{D} \equiv \mathcal{D}^s_\gamma = \partial s/\partial\gamma \end{gathered} \tag{24}$$

(здесь $\otimes$ — знак кронекеровского произведения операторов из $E(3)$).

Использованием этих величин исключается, очевидно, деформационный поворот, но они, вообще говоря, несимметричны по перестановке пар $(ij) \leftrightarrow (kl)$, поэтому $\mathcal{Y}$ имеет в общем случае 36 различных компонент. Учтя, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial\gamma_{ij}}{\partial\mu_{kl}} &= \frac{\partial(\mu_{im}\mu_{jm})}{\partial\mu_{kl}} = \delta_{ik}\delta_{ml}\mu_{jm} + \mu_{im}\delta_{jk}\delta_{ml} = \\ &= \delta_{ik}\mu_{jl} + \mu_{il}\delta_{jk}, \end{aligned} \tag{25}$$

и обозначив вторую производную от s по γ через $\mathcal{D}^{(2)}$ (см. Приложение), с учетом (24), [4 (A.3a)] и симметричности γ получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\mu_{qk}} &= -2\delta_{ik}(D\sigma_0)_{qn}\mu_{nj} - 2\mu_{mi}(D\sigma_0)_{mq}\delta_{jk} - \\ &- 4\mu_{mi}\frac{\partial(D\sigma_0)_{mn}}{\partial\gamma_{uq}}\mu_{nj}\mu_{uk}, \end{aligned} \tag{26}$$

причем

$$\begin{aligned} \frac{\partial(D\sigma_0)_{mn}}{\partial\gamma_{uq}} &\equiv \frac{\partial(D_{mnrs}\sigma^0_{rs})}{\partial\gamma_{uq}} = \\ &= D^{(2)}_{mnrsuq}\sigma^0_{rs} + D_{mnrs}Y_{rstv}D_{tvuq}. \end{aligned}$$

Снова вспоминая (24) и [4 (A.3a)], получаем

$$\begin{aligned} N_{ijkl} &= -\delta_{ik}\sigma_{jl} - \delta_{jk}\sigma_{il} + 4\mu_{mi}\mu_{nj}D^{(2)}_{mnrsuq}\sigma^0_{rs}\mu_{uk}\mu_{ql} + \\ &+ 4\mu_{mi}\mu_{nj}D_{mnrs}Y_{rstv}D_{tvuq}\mu_{uk}\mu_{ql}. \end{aligned} \tag{27}$$

Учтя также [4 (A.7)], запишем это выражение в виде

$$\mathcal{N} = -2\Pi_+(E\otimes\sigma) + 4\mathcal{M}^{\mathrm{T}}\{\mathcal{D}^{(2)}[\sigma_0] + \mathcal{D}\mathcal{Y}\mathcal{D}\}\mathcal{M} \tag{27a}$$

(последнее слагаемое здесь, очевидно, можно записать в виде $\Sigma\mathcal{Y}\Sigma^{\mathrm{T}}$).

Посмотрим, как можно измерить $\mathcal{N}$ в эксперименте по статическому нагружению. Представим себе предварительно нагруженный (в частности, гидростатически сжатый в камере давления) образец монокристалла, к которому для измерения модулей в точке предварительного нагружения прикладывается дополнительная нагрузка, вызывающая изменение тензора напряжений $\delta\sigma_{ij}$, после чего изучается смещение рентгеновских рефлексов, вызываемое дополнительной деформацией. Из (15), (17а) и (20) следует

$$\delta\sigma_{ij} = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\bar{\mu}_{nk}}(\mu_{nk} - \bar{\mu}_{nk}) = \\ = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\bar{\mu}_{nk}}\bar{\mu}_{nl}(\mu'_{lk} - \delta_{lk}) = -N_{ijkl}\delta\mu'_{lk}. \qquad (28)$$

Если помечать величины, относящиеся к ненагруженному состоянию, индексом «0», а к предварительно нагруженному — чертой сверху, то из (10), (9б) для произвольной тройки рефлексов ($m^0_{\alpha i}$ — целые числа) имеем

$$\mathbf{g}_{\alpha 0} = m^0_{\alpha i}\mathbf{g}^i_0, \quad \bar{\mathbf{g}}_\alpha = \overline{m}_{\alpha i}\mathbf{g}^i_0, \quad \mathbf{g}_\alpha = m_{\alpha i}\mathbf{g}^i_0, \qquad (29)$$

где

$$\begin{aligned} \overline{m}_{\alpha i} &= \frac{1}{2\pi}\bar{\mathbf{g}}_\alpha \cdot \mathbf{a}^0_i = m^0_{\alpha j}\overline{\mu}^{j\cdot}_{\cdot i}, \\ m_{\alpha i} &= \frac{1}{2\pi}\mathbf{g}_\alpha \cdot \mathbf{a}^0_i = m^0_{\alpha j}\mu^{j\cdot}_{\cdot i}. \end{aligned} \qquad (30)$$

Определив обратную к $\overline{m}_{\alpha i}$ матрицу (см. (11)),

$$(\overline{m^{-1}})^{i\alpha} = \bar{\lambda}^{i\cdot}_{\cdot j}(m_0^{-1})^{j\alpha}, \qquad (31)$$

получим

$$(\overline{m^{-1}})^{i\alpha}m_{\alpha j} = \bar{\lambda}^{i\cdot}_{\cdot k}\mu^{k\cdot}_{\cdot j} = \mu'^{i\cdot}_{\cdot j}.$$

Таким образом, из структурных данных можно получить тензор μ', а измерение тензора σ (при различных ориентациях образца) дает возможность определения $\mathcal{N}$ в кристаллографической системе координат.

Например, при одноосной деформации произвольно ориентированного предварительно нагруженного образца, полагая, что ω_{ij} есть матрица оператора поворота образца от лабораторных осей к кристаллографическим при его реальной ориентации, записанная в лабораторном базисе:

$$e^{(cr)}_i = \omega e_i = \omega_{ji}e_j, \qquad (32)$$

имеем

$$N_{ijkl} = \omega_{ii'}\omega_{jj'}\omega_{kk'}\omega_{ll'}N^{(cr)}_{i'j'k'm'}. \qquad (33)$$

Предполагая, что одноосное растяжение производится вдоль оси z лабораторной системы:

$$\delta\sigma = tb^{33}, \quad (b^{pq})_{ij} = \delta_{ip}\delta_{jq}, \qquad (34)$$

получаем из (28)

$$t\omega_{3i}\omega_{3j} = N^{(cr)}_{ijkl}\delta\mu'^{(cr)}_{lk}, \qquad (35)$$

где

$$\delta\mu'^{(cr)}_{lk} = \omega_{ml}\omega_{nk}\delta\mu'_{mn}. \qquad (35а)$$

Так как число компонент тензора $\mathcal{N}$ слишком велико, чтобы не проводить лишних измерений, надо иметь ввиду, что их целью является определение симметричного тензора $\mathcal{K}$ (см. следующий раздел, формулы (37), (37а) и (35б)), который выражается через $\mathcal{N}$ с помощью (39), (39а). О конкретных вычислениях по этим формулам см. ниже в разд. 8.

5. ПОЛНОСИММЕТРИЧНЫЙ ПО ИНДЕКСАМ ТЕНЗОР ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ $\mathcal{K}$

1. Полносимметричными будем называть тензоры, обладающие перестановочной симметрией как внутри первой и второй пар индексов, так и по перестановке этих пар. Такой симметрией, очевидно, обладают величины (значок T означает при постоянной температуре)

$$H^T_{ijkl} = \rho\left(\frac{\partial^2 f}{\partial s_{ij}\partial s_{kl}}\right)_T = \rho\left(\frac{\partial(\sigma^0_{ij}/\rho)}{\partial s_{kl}}\right)_T = \\ = Y^T_{ijkl} + \sigma^0_{ij}\delta_{kl}. \qquad (36)$$

Подобное же построение выполняется для адиабатических тензоров $\mathcal{Y}^\eta$, $\mathcal{H}^\eta$ (η — энтропия) с заменой f на энергию ε единицы массы. Только в этом месте проявляется разница в вычисляемых величинах, все же прочие преобразования носят геометрический характер и одинаковы как для адиабатических, так и для изотермических модулей. Поэтому в дальнейших формулах (там, где нет необходимости) мы будет говорить просто о модулях, опуская значки «T» или «η».

Выбор в качестве модуля упругости величины $\mathcal{H}$ не был бы удачным, поскольку, как видно из (36), в нем имеется линейное по напряжению слагаемое, явно не относящееся к состоянию тела. Наиболее близкий к восприимчивости изотермический симметричный тензор можно ввести по формуле

$$K^T_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(Y_{ijkl} + Y_{klij}\right) = = H^T_{ijkl} - \frac{1}{2}\left(\sigma^0_{ij}\delta_{kl} + \sigma^0_{kl}\delta_{ij}\right), \quad (37)$$

или, более кратко

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} - \frac{1}{2}\left(\sigma_0\rangle\langle E + E\rangle\langle\sigma_0\right) \quad (37а)$$

(здесь $(a\rangle\langle b)_{ijkl} = a_{ij}b_{kl}$), после чего (36) дает

$$\mathcal{Y} = \mathcal{H} - \sigma_0\rangle\langle E = \mathcal{K} + \frac{1}{2}\left(E\rangle\langle\tau_0 - \tau_0\rangle\langle E\right). \quad (38)$$

Видно, что для гидростатически сжатого тела модули $\mathcal{Y}$ и $\mathcal{K}$ совпадают, вследствие чего тензор $\mathcal{Y}$ в этом случае симметричен по перестановке первой и второй пар координат.

Подставляя (38) в (27а), получим

$$\mathcal{N} = \mathcal{N}' + \mathcal{R}, \quad (39)$$

где

$$\mathcal{N}' = -2\Pi_+(E\otimes\sigma) + \frac{1}{2}\left(E\rangle\langle\tau - \tau\rangle\langle E\right) + + 4\mathcal{M}^{\mathrm{T}}\mathcal{D}^{(2)}[\sigma_0]\mathcal{M}, \quad \mathcal{R} = \Sigma\mathcal{K}\Sigma^{\mathrm{T}} \quad (39а)$$

(вид слагаемого, содержащего τ, понятен из (24) и [4 (36а)]). Компоненты тензора $\mathcal{N}'$ известны, коль скоро известны тензоры напряжений и деформаций, причем последнее слагаемое в $\mathcal{N}'$ есть вычисляемая величина, как и Σ (см. разд. 8), а от свойств материала зависит только $\mathcal{K}$.

Поскольку в отличие от $\mathcal{N}$ тензор $\mathcal{K}$ (а потому и $\mathcal{R}$) обладает той же перестановочной симметрией по индексам, что и тензор упругости линейной теории, он имеет максимум 21 различную компоненту. А так как свободная энергия f инвариантна относительно собственных поворотов группы симметрии недеформированного кристалла, истинное число различных компонент тензора $\mathcal{K}$ в кристалле с любой конкретной группой симметрии совпадает с приводимым в [11] для линейной теории.

Уравнение (35) может быть записано в виде

$$R^{(cr)}_{ijkl}\delta\mu'^{(cr)}_{lk} = t\omega_{3i}\omega_{3j} - N'^{(cr)}_{ijkl}\delta\mu'^{(cr)}_{lk}, \quad (35б)$$

позволяющем уменьшить число различных ориентаций кристалла в экспериментах в случае самой общей (триклинной) симметрии до шести (большее их количество могло бы быть использовано для увеличения точности измерений). Из этих экспериментов находится $\mathcal{R}^{(cr)}$, а затем и $\mathcal{K}^{(cr)}$ по формулам (39), (39а).

2. Для иллюстрации вычислим по (37) тензор модулей упругости изотропного тела. В этом случае [1, 3]

$$\sigma_0 = -pE + 2\mu\Delta + \nu\Delta_2, \quad (40)$$

откуда

$$\mathcal{K} = \frac{\partial\sigma_0}{\partial s} + \frac{1}{2}\Big((2\mu\Delta+\nu\Delta_2)\rangle\langle E - E\rangle\langle(2\mu\Delta+\nu\Delta_2)\Big) = = K^{ab}\mathcal{P}_{ab} + 2\mu\Pi_+ + 2\nu\mathcal{X}_{12}, \quad (41)$$

где симметричная матрица K^{ab} имеет элементы

$$K^{11} = K - \frac{2\mu}{3}, \quad K^{12} = \mu + 2\frac{\partial\mu}{\partial I_{1s}} - \frac{2\nu}{3}, \quad K^{13} = \frac{\nu}{2} + \frac{\partial\nu}{\partial I_{1s}}, \quad K^{22} = 2\frac{\partial\mu}{\partial k_2}, \quad K^{23} = 2\frac{\partial\nu}{\partial k_2}, \quad K^{33} = \frac{\partial\nu}{\partial k_3}, \quad (41а)$$

причем

$$K = -\frac{\partial p}{\partial I_{1s}} = -V\frac{\partial p}{\partial V}, \quad (41б)$$

$I_{1s} = \mathrm{Sp}\, s = \ln(\rho_0/\rho)$, ρ_0 — плотность недеформированного вещества [4 (10)].

Оператор Π_+ (см. [4, A]) является единицей пространства симметричных тензоров второго ранга $T_+(2)$ (и проектором на него). Здесь фигурируют операторы

$$\mathcal{P}_{ab} = e_a\rangle\langle e_b, \quad \mathcal{X}_{ab} = (e_a\otimes e_b)_+, \quad (41в)$$

где $[(a\otimes b)_+]_{ijkl} = (a_{ik}b_{jl} + b_{il}a_{jk} + b_{ik}a_{jl} + a_{il}b_{jk})/4$, e_a — векторы базиса $\mathbf{B}_2(s) = \{E,\ \Delta,\ \Delta_2\}$ [4 (B.7а)].

На гидростатической оси (при $\Delta = \Delta_2 = 0$) получается

$$\mathcal{K} = K^{11}\mathcal{P}_{11} + 2\mu\Pi_+ = = \left(K - \frac{2\mu}{3}\right)E\rangle\langle E + 2\mu\Pi_+, \quad (41г)$$

или, в индексных обозначениях (см. [4 (A.3а), (A.7)])

$$K_{ijkl} = K\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}\right), \quad (41д)$$

откуда видно, что это полностью совпадает с обычным выражением в [11], но с модулями всестороннего сжатия K и сдвига μ, определенными под давлением, как соответственно в [12] и [3].

6. АДИАБАТИЧЕСКИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ МОДУЛИ УПРУГОСТИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАГРУЖЕННОГО ТЕЛА

Чтобы уметь вычислять адиабатические модули из результатов ультразвуковых экспериментов, рассмотрим процесс распространения звука в однородно нагруженной упругой среде. Отсчитывая деформацию в поле звуковой волны от равновесного значения $\bar{x}_i$ при данных σ_0, T и обозначая смещение в поле звуковой волны через u'_i, получим, вспомнив (16)–(17а):

$$\frac{\partial \mu_{kl}}{\partial x_j} = \bar{\mu}_{kp}\frac{\partial \mu'_{pl}}{\partial x_j} = -\bar{\mu}_{kp}\frac{\partial^2 u'_p}{\partial x_l \partial x_j}. \qquad (42)$$

Разумеется, мы тем самым предполагаем малое выделение тепла вследствие диссипации звуковой энергии. При малых u'_i можно писать $dv_i/dt \approx \partial^2 u'/\partial t^2$, поэтому уравнение распространения звука имеет вид

$$\bar{\rho}\frac{\partial^2 u'_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{qk}}\,\frac{\partial \mu_{qk}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{qk}}\bar{\mu}_{ql}\frac{\partial^2 u'_l}{\partial x_j \partial x_k}. \qquad (43)$$

Таким образом, в это уравнение входит уже рассмотренный нами (но адиабатический) тензор $\mathcal{N}$, играющий здесь ту же роль, что и тензор линейной теории λ_{ijkl} в формуле (23.1) из [11]):

$$\bar{\rho}\frac{\partial^2 u'_i}{\partial t^2} = \overline{N}_{ijkl}\frac{\partial^2 u'_l}{\partial x_j \partial x_k}. \qquad (43а)$$

После подстановки сюда $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_0 \exp i(\mathbf{kr} - \omega t)$ и деления получившегося уравнения на k^2 уравнение для определения собственных мод и скоростей звука принимает вид

$$\rho c^2 u_i = N_{ij}(\mathbf{n}) u_j, \quad \mathbf{n} = \mathbf{k}/k, \qquad (44)$$

где оператор $N(\mathbf{n})$, действующий в $E(3)$, с матричными элементами

$$N_{ij}(\mathbf{n}) = N_{iklj} n_k n_l \qquad (44а)$$

(и аналогично для операторов $T(\mathbf{n})$, $R(\mathbf{n})$) суть (см. (39), (39а), [4 (A.7)])

$$N_{ij}(\mathbf{n}) = p\delta_{ij} + p n_i n_j - \frac{1}{2}\big(n_i \tau_{jk} n_k + \tau_{ik} n_k n_j\big) - \\ - \tau_{ij} + R'_{ij}(\sigma_0, \mathbf{n}), \qquad (44б)$$

где $\mathcal{R}' = \mathcal{R} + \mathcal{T}$,

$$\mathcal{T}[\sigma_0] = 4\mathcal{M}^{\mathrm{T}}\mathcal{D}^{(2)}[\sigma_0]\mathcal{M} \qquad (44в)$$

и, соответственно,

$$R'_{ij}(\sigma_0, \mathbf{n}) = T_{ij}(\sigma_0, \mathbf{n}) + R_{ij}(\mathbf{n}). \qquad (44г)$$

Поскольку число различных компонент оператора $\mathcal{R}'$, действующего в $E(3)\otimes E(3)$ то же, что и в линейной теории, становится ясно, что нахождение из эксперимента величины $\mathcal{R}'$, а затем и $\mathcal{R}$ (а значит, и $\mathcal{K}$) с матричными элементами R_{iklj} при известном тензоре напряжений σ не многим сложнее (если отбросить специфику экспериментов с напряженным телом), чем нахождение обычного тензора модулей упругости λ из [11]. Для определения модулей в общем случае триклинной сингонии требуются, очевидно, измерения скоростей распространения всех трех акустических мод не менее чем на семи различно ориентированных образцах.

7. ЛОКАЛЬНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ МОДУЛИ УПРУГОСТИ

Как отмечено в разд. 4, некоторые величины (а среди них $\mathcal{K}$) оказываются зависящими от выбора начала отсчета деформации (см. также [13]), что имеет своей причиной неперестановочность элементов $T(2) = E(3) \otimes E(3)$. Поэтому, как и в [4], мы выделим два варианта такого выбора: естественный, или абсолютный, когда за начало выбирается точка, в которой $\sigma = 0$, и касательный, при котором началом отсчета является точка текущей деформации $\bar{s}$, причем в этом случае вычисляемые величины помечаются индексом «c». Разумеется, выбор начала отсчета деформации не оказывает никакого влияния на наблюдаемые величины ($\mathcal{N}$ или, как следует из (39), $\mathcal{R}$).

В результате достаточно продолжительных вычислений, использующих выражения для матричных производных от матрично-значной функции $\ln\gamma$ [4, F] с преобразованием от базиса $\mathbf{B}_2(\gamma)$ к $\mathbf{B}_1(\gamma) = \{E,\ \gamma,\ \gamma^2\}$ [4, B] с предельным переходом $\mu' \to 0$ (см. (17а)), из (39а) получаем

$$\mathcal{N}' = 2\Pi_+(\tau \otimes E)\Pi_- + \frac{1}{2}(E\rangle\langle\tau - \tau\rangle\langle E), \qquad (45)$$

и, поскольку $\mathcal{R} = \mathcal{K}^c$, выражение $\mathcal{N}$ через $\mathcal{K}^c$ из (39) принимает вид

$$\mathcal{N} = 2\Pi_+(\tau \otimes E)\Pi_- + \frac{1}{2}(E\rangle\langle\tau - \tau\rangle\langle E) + \mathcal{K}^c, \qquad (46)$$

или в компонентах

$$N_{ijkl} = \frac{1}{2}(\tau_{ik}\delta_{jl} - \delta_{ik}\tau_{jl} + \delta_{il}\tau_{jk} - \tau_{il}\delta_{jk}) + \\ + \frac{1}{2}(\delta_{ij}\tau_{kl} - \tau_{ij}\delta_{kl}) + \mathcal{K}^c_{ijkl}.$$

Число различных компонент тензоров $\mathcal{K}$ и $\mathcal{K}^c$ может оказаться различным: первый соотнесен с исходной симметрией кристалла (до деформации), а второй — с симметрией искаженной деформацией решетки.

Видно, что величины $\mathcal{N}$ и $\mathcal{K}^c$ в гидростатически нагруженном даже анизотропном теле связаны между собой особенно просто:

$$\mathcal{N} = \mathcal{K}^c.$$

8. ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЫРАЖЕНИЙ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ТЕЛА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

1. Интересуясь в дальнейшем измерениями под гидростатическим давлением, положим [4]

$$\begin{gathered}\sigma = \sigma_0 = -pE, \quad \mathcal{D}^{(2)}[-pE] = -p\mathcal{D}^{(2)}[E], \\ \mathcal{N}' = 2p\Pi_+ - p\mathcal{T}[E].\end{gathered} \tag{47}$$

Тогда формула (44б), с помощью которой из экспериментальных данных извлекаются R_{ijkl}, переходит в

$$N_{ij}(\mathbf{n}) = p\delta_{ij} + pn_in_j + R'_{ij}(\mathbf{n}), \tag{47а}$$

где (см. (44в), (44г))

$$R'_{ij}(\mathbf{n}) = -pT_{ij}(E,\mathbf{n}) + R_{ij}(\mathbf{n}). \tag{47б}$$

Тензор модулей упругости $\mathcal{K}$ вычисляется из (39), (39а) после экспериментального определения тензора $\mathcal{R}$: в статическом случае (изотермические модули) — из соотношений (35б), в динамическом (адиабатические модули) — из (47а). Поэтому нам предстоит рассмотреть все фигурирующие в соотношении (39) величины.

Из (24), (2б) и [4 (A.6a)] видно, что возможна запись

$$\mathcal{M} = (S \otimes S)\Omega^{\mathrm{T}}, \quad \Sigma = \Omega\mathcal{B}, \tag{48}$$

где

$$\Omega = (O \otimes O), \quad \mathcal{B} = -2(S \otimes S)\mathcal{D}. \tag{48а}$$

Тогда, как нетрудно видеть из (39а),

$$\begin{aligned}\mathcal{K} = \Sigma^{-1}\mathcal{R}(\Sigma^{\mathrm{T}})^{-1} \equiv \mathcal{B}^{-1}\tilde{\mathcal{R}}\mathcal{B}^{-1} = \\ = \mathcal{B}^{-1}\tilde{\mathcal{N}}\mathcal{B}^{-1} - \Sigma^{-1}\mathcal{N}'(\Sigma^{\mathrm{T}})^{-1},\end{aligned} \tag{49}$$

где

$$\tilde{\mathcal{R}} = \Omega^{\mathrm{T}}\mathcal{R}\Omega, \quad \tilde{\mathcal{N}} = \Omega^{\mathrm{T}}\mathcal{N}\Omega, \tag{49а}$$

причем

$$\Sigma^{-1}\mathcal{N}'(\Sigma^{\mathrm{T}})^{-1} = 2p(\mathcal{B}^{-1})^2 - p\mathcal{D}^{-1}\mathcal{D}^{(2)}[E]\mathcal{D}^{-1}. \tag{49б}$$

Оператор $\mathcal{B}^{-1}$, как ясно из (48а), может быть записан как

$$\mathcal{B}^{-1} = -\frac{1}{2}\mathcal{D}^{-1}(S^{-1} \otimes S^{-1}), \tag{50}$$

где $\mathcal{D}^{-1}$ есть матричная производная от γ по s, функция $\gamma = \exp(-2s)$ является частным случаем функции

$$\begin{gathered}\exp(-ts) = E_t^a e_a = z^{t/2}\tilde{E}_t^a e_a, \\ z = \exp(-2I_{1s}/3) = (\rho/\rho_0)^{2/3}\end{gathered} \tag{51}$$

(см. [4 (10)]), а соответствие этих обозначений обозначениям работы [3] (формулы (C.6)–(C.6b)) задается соотношениями

$$\tilde{E}_t^1 = a_t/3, \quad \tilde{E}_t^2 = b_t, \quad \tilde{E}_t^3 = c_t. \tag{51а}$$

Вычисление $\mathcal{D}^{-1}$ в базисе $\mathbf{B}_2(s)$ (см. (41в)) дает (суммирование по a фактически проводится от 1 до 2):

$$\mathcal{D}^{-1} = -2(\gamma \otimes E)_+\mathcal{P} + aE_2^{a+1}\mathcal{Z}_{1a}. \tag{52}$$

Здесь введены величины (см. (41в), [4 (A.2), (A.3)])

$$\begin{gathered}\mathcal{P} = \mathcal{P}_{ab}g^{ab} = e_a\rangle\langle e^a, \\ \mathcal{Q} = \mathcal{I} - \mathcal{P}, \quad \mathcal{Z}_{ab} = \mathcal{X}_{ab}\mathcal{Q},\end{gathered} \tag{52а}$$

где $\mathcal{P}$ проекция на подпространство L_s (образованное всеми степенями s), $g^{ab} = \langle e^a e^b\rangle$ — контравариантный метрический тензор в L_s, $\mathcal{Q}$ — проекция на ортогональное дополнение $L_\perp$ к L_s до $T_+(2)$, $\mathcal{I}$ — единичный оператор в $T(2)$ [4 (A.4)], величины $\mathcal{X}_{ab}$ определены в (41в), а все $\mathcal{Z}$ вычисляются, как [4 (A.3), (A.6), (B.15)–(B.17)]

$$\begin{gathered}\mathcal{Z}_{ab} = \mathcal{X}_{ab} - \mathcal{Y}_{ab}, \\ \mathcal{Y}_{ab} = \mathcal{X}_{ab}\mathcal{P} = q_{ab}^c q_c^{df}\mathcal{P}_{df}, \quad q_{ab}^c = \langle e^c e_a e_b\rangle.\end{gathered} \tag{52б}$$

Выражение для $\mathcal{D}^{(2)}[E]$ в базисе $\mathbf{B}_1(\gamma)$ (см. (45)) проще всего получить по формуле [4 (C.12)]. Полагая в ней $f(\gamma) \equiv S(\gamma) = -(1/2)\ln\gamma$ и вспомнив формулу (A.7) из [3], заключаем, поскольку $S'(\gamma) = -\gamma^{-1}/2$, что

$$(S')^2 = \frac{J_1^\gamma}{2I_3^\gamma}, \quad (S')^3 = -\frac{1}{2I_3^\gamma}, \tag{53}$$

причем, как ясно из (51) и [4 (B.7a)],

$$J_p^\gamma = 3E_{2p}^1. \tag{54}$$

Далее, вспоминая определение инвариантов в [1, 3] и их выражение друг через друга, получим

$$I_3^\gamma = \frac{1}{3}J_3^\gamma - \frac{1}{2}J_1^\gamma J_2^\gamma + \frac{1}{6}(J_1^\gamma)^3 = \\ = E_6^1 - \frac{9}{2}E_2^1 E_4^1 + \frac{9}{2}(E_2^1)^3. \tag{54a}$$

Теперь легко заключить, что

$$\mathcal{D}^{(2)}[E] = \frac{1}{2}(\gamma^{-2}\otimes E)_+\mathcal{P} + C^a \mathcal{Z}_{1a}, \\ C^a = \delta_1^a (S')^2 + 2(S')^3 E_2^a. \tag{55}$$

Перемножая (52) и (55) с учетом коммутируемости $\mathcal{X}_{ab}$ с $\mathcal{P}$ [4], приведенных там же правил перемножения операторов $\mathcal{Z}_{ab}$ [4 (34a)] и тождеств

$$(\gamma^n \otimes \gamma^{-n})_+\mathcal{P} = E_{2n}^a E_{-2n}^b (e_a \otimes e_b)_+ \mathcal{P} = \\ = E_{2n}^a E_{-2n}^b e_a e_b e_c \rangle\langle e^c = E_0^a q_{ac}^b e_b \rangle\langle e^c = e_c \rangle\langle e^c = \mathcal{P}, \tag{56}$$

получаемых, в свою очередь, из соотношений

$$E_{t+t'}^a = E_t^b E_{t'}^c q_{bc}^a, \tag{56a}$$

выводимых перемножением соответствующих экспонент, и заметив, что действующая в L_s часть искомого оператора состоит из слагаемых, имеющих вид (56) с $n = 0, 1, 2$, после несложных вычислений имеем:

$$\mathcal{D}^{-1}\mathcal{D}^{(2)}[E]\mathcal{D}^{-1} = 2\mathcal{P} + T^{ab}\mathcal{Z}_{ab}, \tag{57}$$

где

$$T^{ab} = \frac{1}{4}cdE_2^{c+1}E_2^{d+1} \times \\ \times C^f(\delta_1^a q_{cd}^g q_{gf}^b + \delta_c^a q_{df}^b + \delta_d^a q_{cf}^b + \delta_f^a q_{cd}^b). \tag{57a}$$

Окончательный результат имеет вид

$$\mathcal{K} = \mathcal{B}^{-1}\tilde{\mathcal{N}}\mathcal{B}^{-1} + p\big[T^{ab} - 2U^{ab}\big]\mathcal{Z}_{ab}, \\ \tilde{\mathcal{N}} = \Omega^{\mathrm{T}}\mathcal{N}\Omega, \tag{58}$$

где, как можно убедиться из (50), (52) и [4 (A.6)–(A.6b)],

$$\mathcal{B}^{-1} = \mathcal{P} - B^{ab}\mathcal{Z}_{ab}, \quad B^{ab} = \frac{1}{2}cE_2^{c+1}E_{-1}^a E_{-1}^d q_{cd}^b,$$

$$U^{ab} = B_+^{cd}B_+^{fg}q_{cf}^a q_{dg}^b, \quad B_+^{ab} = \frac{1}{2}(B^{ab} + B^{ba}).$$

Вращение Ω при гидростатическом нагружении анизотропного образца выражается через дисторсию с помощью (12), причем оно зависит от выбора начальной кристаллографической плоскости, неподвижной при нагружении, т. е. ориентации и способа крепления образца в камере давления.

Приведенные значения модулей становятся функциями давления, как только в (58) величины сдвигов $e_2 = \Delta(p)$ и $e_3 = \Delta_2(p)$ выражаются через давление с помощью уравнения состояния (23).

2. Полученные до сих пор формулы являются точными и могут применяться, например, при рассмотрении деформаций в анизотропных резинах, а для вычислений $\mathcal{K}$ требуют (кроме, разумеется, получаемых из эксперимента величин Ω и $\mathcal{R}$) значений E_b^a, которые определяются (в виде, параметризованном собственными значениями тензора сдвига) по формулам (C.7)–(C.7b) из [3].

Проведем теперь вычисления с точностью до второго порядка по сдвигу, т. е. пренебрегая членами $\sim |\Delta|^3$ и выше, где

$$|\Delta| = \sqrt{\langle\Delta^2\rangle} = \sqrt{2k_2},$$

но считая сжатие (как и давление) величинами произвольными (т. е. имея в виду прежде всего твердое тело). Из разложений (C.8), (C.8a) из [3] и (51), (51a) получаем

$$E_t^1 = z^{t/2}\left(1 + \frac{t^2}{3}k_2\right), \\ E_t^2 = z^{t/2}\left(-t - \frac{t^3}{6}k_2\right), \\ E_t^3 = z^{t/2}\left(\frac{t^2}{2} + \frac{t^4}{4!}k_2\right), \tag{59}$$

а (54a) дает

$$I_3^\gamma = z^3, \tag{60}$$

откуда

$$(S')^2 = \frac{1}{z^2}\left(\frac{3}{2} + 2k_2\right), \quad (S')^3 = -\frac{1}{2z^3} \tag{61}$$

и далее, для коэффициентов в (55)

$$C^1 = \frac{1}{2z^2}\left(1 + \frac{4}{3}k_2\right), \quad C^2 = \frac{2}{z^2}\left(1 + \frac{2}{3}k_2\right), \\ C^3 = -\frac{2}{z^2}\left(1 + \frac{k_2}{3}\right). \tag{62}$$

Теперь из (57), (57a) с помощью одного из доказанных в [4] соотношений для величин $\mathcal{Z}$ [4 (35a)] из (49) получаем

$$\mathcal{K} = \tilde{\mathcal{N}} + \frac{k_2}{3}\{\tilde{\mathcal{N}}, \mathcal{Q}\}_+ + \{\tilde{\mathcal{N}}, \mathcal{Z}_{13}\}_+ = \left(1 + \frac{2}{3}k_2\right)\tilde{\mathcal{N}} - \\ - \frac{k_2}{3}\{\tilde{\mathcal{N}}, \mathcal{P}\}_+ + \{\tilde{\mathcal{N}}, \mathcal{X}_{13}\}_+ - \{\tilde{\mathcal{N}}, \mathcal{Y}_{13}\}_+, \tag{63}$$

где $\{a, b\}_+ = ab + ba$ (поскольку $\mathcal{X}_{11} = \mathcal{I}$, понятно, что $\mathcal{Y}_{11} = \mathcal{P}$ и $\mathcal{Z}_{11} = \mathcal{Q}$).

Величины $\mathcal{Z}_{ab}$ вычисляются, как упоминалось, с помощью (52б), причем для $\mathcal{Y}_{13}$ имеем представления

$$\mathcal{Y}_{13} = \frac{1}{3}(\mathcal{P}_{13} + \mathcal{P}_{31}) + a\mathcal{P}_{22} + b(\mathcal{P}_{23} + \mathcal{P}_{32}) - c\mathcal{P}_{33} = \\ = \frac{k_2}{3}(\hat{\mathcal{P}}_{22} - \hat{\mathcal{P}}_{33}). \tag{63а}$$

Здесь

$$a = \frac{1}{3}\left(1 - \frac{1}{2}\operatorname{cosec}^2\varphi\right), \\ b = \frac{3k_2k_3}{|g|}, \quad c = \frac{2k_2^2}{|g|}, \tag{63б}$$

а определения величин $|g|$, φ см. в [4 (B.8a)]. Величины $\hat{\mathcal{P}}_{ab}$ представляют собой соответствующие проекционные операторы (41в), построенные на векторах ортонормированного базиса [4 (B.20)], вследствие чего последнее выражение в (63а) не содержит, как объясняется в [4.B], никаких особенностей; напротив, коэффициенты при $\mathcal{P}_{ab}$ в (63а) необходимо вычислять точно, какое бы приближение по $|\Delta|$ нас ни интересовало.

Представление $\mathcal{Y}_{13}$ в ортонормированном базисе оказывается полезным при машинных расчетах вблизи особенностей $|g|$.

Из (52а) и [4 (B.8a)] видно, что

$$\mathcal{P} = \hat{\mathcal{P}}_{11} + \hat{\mathcal{P}}_{22} + \hat{\mathcal{P}}_{33} = \frac{1}{3}\mathcal{P}_{11} + \\ + \frac{1}{|g|}\Big(2k_2^2\mathcal{P}_{22} - 9k_3(\mathcal{P}_{23} + \mathcal{P}_{32}) + 6k_2\mathcal{P}_{33}\Big), \tag{64}$$

причем, как уже упоминалось, в последнем выражении нельзя пренебрегать ни одним слагаемым.

3. Гидростатическое сжатие приводит к объемной и сдвиговой деформациям образца [1, 3]:

$$x_i = \xi_i/\alpha + u_i', \quad \mu = \alpha\mu', \quad \mu' = E - \beta', \tag{65}$$

и, если $\det\mu' = 1$, т. е. $\alpha^2 = z$ (51), вращение O, как можно увидеть из (12), следующим образом выражается через «девиаторный» вклад в дисторсию β':

$$O = E + \frac{1}{2}(\beta'^{\mathrm{T}} - \beta') + \\ + \frac{1}{8}(3\beta'^{\mathrm{T}2} - \beta'^{q} - \beta'\beta'^{\mathrm{T}} - \beta'^{\mathrm{T}}\beta'), \tag{66}$$

что нужно подставить в (49а), (63) для вычисления $\tilde{\mathcal{N}}$. Мы не будем выписывать соответствующие выражения ввиду их громоздкости и отсутствия принципиальных трудностей.

4. Имеющаяся в распоряжении экспериментаторов аппаратура обычно позволяет определять или изотермические, или адиабатические тензоры модулей упругости. Если же, например, из ультразвуковых измерений найден адиабатический тензор модулей упругости $\mathcal{K}^\eta$, можно, действуя стандартным образом [12], с помощью термодинамических тождеств получить и изотермический тензор, который, как легко видеть, записывается в одной из форм:

$$\mathcal{K}^T = \mathcal{K}^\eta - \frac{\rho c_s}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_\eta\Big\rangle\Big\langle\left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_\eta = \\ = \mathcal{K}^\eta - \frac{T}{\rho c_s}\left(\frac{\partial \sigma_0}{\partial T}\right)_s\Big\rangle\Big\langle\left(\frac{\partial \sigma_0}{\partial T}\right)_s, \tag{67}$$

где c_s — теплоемкость единицы массы вещества при фиксированной деформации, а

$$\left(\frac{\partial \sigma_0}{\partial T}\right)_s = -\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_s E + \left(\frac{\partial \tau_0}{\partial T}\right)_s. \tag{67а}$$

Выражение для $\mathcal{N}$ легко получить в изотропном (до деформации) произвольно деформированном теле из (41), что может представить интерес для прикидочной ориентировки при проведении эксперимента.

9. КАК ПРЕДЛАГАЕМАЯ ФОРМУЛИРОВКА ТЕОРИИ СООТНОСИТСЯ С РАНЕЕ ИЗВЕСТНЫМИ?

Уместно сделать несколько замечаний по поводу соответствия полученных результатов ранее полученным и широко обсуждаемым (см., например, [14] и цитируемые там работы).

1. Прежде всего мы считаем эйлеровы переменные единственно адекватными задаче по деформации, поскольку только в них (и только с использованием понятия натуральной деформации) происходит разделение на независимые величины всестороннего сжатия и сдвига (подробности см. в [1, 3]).

2. Далее, как объяснено в [4], термодинамической переменной в анизотропном случае, аналогичной тензору Лагранжа для изотропной среды, является тензор u_0, определяемый из

$$\gamma_0 = E - 2u_0 \tag{68}$$

с компонентами

$$u_{ij}^0 = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\frac{\partial u_j}{\partial x_k}\right) \tag{68а}$$

(подобное построение для изотропной среды, т. е. для тензора $\gamma = \mu^{\mathrm{T}}\mu$ (см. (2а)) приводит к обычному тензору Лагранжа [11], в котором квадратичный по смещению $\mathbf{u}$ член имеет вид $-(\partial u_k/\partial x_i)(\partial u_k/\partial x_j)$; знак минус объясняется использованием эйлеровых переменных). Именно по величине u_0 должна браться производная от термодинамического потенциала в уравнении Мурнагана—Берча для нахождения тензора напряжений в анизотропном теле (процедура нахождения σ для этого варианта теории описана в [4]).

3. Определяемый в [14] адиабатический тензор упругих модулей $\mathcal{C}$ связан с вычисляемым в настоящей работе соотношением (мы очевидным образом упрощаем индексную запись и опускаем в дальнейшем индекс «0» при тензоре u; u и u' обозначают различные компоненты тензора u):

$$C^{\eta}_{uu'} = \rho\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial u\,\partial u'} = D^s_u H^{\eta}_{ss'} D^{s'}_{u'} + D^{(2)s}_{uu'}[\sigma_0], \tag{69}$$

и, поскольку, как легко понять из (68),

$$\mathcal{D}^s_u = -2\mathcal{D}, \quad \mathcal{D}^{(2)s}_{uu'} = 4\mathcal{D}^{(2)}, \tag{70}$$

где $\mathcal{D}$ и $\mathcal{D}^{(2)}$ — использовавшиеся ранее величины, связь этого тензора с $\mathcal{R}$, как нетрудно увидеть из (39а), (24), (48) и (50) после учета вытекающего из [4 (С.5)] равенства $\mathcal{D}E = -.5\gamma^{-1}$, есть

$$\mathcal{C}^{\eta} = (S^{-1}\otimes S^{-1})\tilde{\mathcal{R}}(S^{-1}\otimes S^{-1}) - \\ - \Big(\mathcal{D}\sigma_0\rangle\langle\gamma^{-1}+\gamma^{-1}\rangle\langle\sigma_0\mathcal{D}\Big), \tag{69a}$$

что после подстановки сюда всех уже известных нам величин может быть далее разложено обычным образом по степеням девиатора натуральной деформации. После этого нужно выразить тензор s через u, как $-0.5\ln(E-2u)$ по формулам из [4,F], причем, как видно из (65), $E-2u = \alpha^2(E-2u')$. Однако, не прибегая к натуральной деформации, пришлось бы выражать результат как функцию величины $u = 0.5(1-\alpha^2)E + \alpha^2 u'$, и, если u' считать чисто девиаторным вкладом, что определяется условием $\det(E-2u') = 1$, становится видно, что девиаторная составляющая масштабируется гидростатическим сжатием $\alpha^2 = (\rho/\rho_0)^{2/3}$, вследствие чего становится невозможным независимое разложение по гидростатической и девиаторной составляющим деформации, что мы считаем основным достижением теории натуральной деформации.

4. Теперь рассмотрим флуктуации деформации под давлением. Подобно [12], коэффициенты $C'_{uu'}$ квадратичной формы по отклонениям от равновесных значений δu_0 найдем из [4 (64)] — выражения для потенциала Гиббса анизотропного тела под давлением, $\varphi = f + p/\rho$:

$$C'_{uu'} = \rho\frac{\partial^2\varphi}{\partial u\partial u'} = \\ = \rho\left(D^s_u\frac{\partial^2\varphi}{\partial s\partial s'}D^{s'}_{u'} + \frac{\partial\varphi}{\partial s}D^{(2)s}_{uu'}\right), \tag{71}$$

откуда получаем

$$C'_{uu'} = D^s_u(H_{ss'} + pE\rangle\langle E)D^{s'}_{u'} + (\sigma + pE)D^{(2)s}_{uu'}. \tag{71a}$$

Таким образом, поскольку в равновесии $\sigma + pE = 0$, оказывается, что $\mathcal{C}'$ и $\mathcal{K} = \mathcal{H} + pE\rangle\langle E$ подобны, так что флуктуации величин s так же связаны с матрицей $\mathcal{K}$, как флуктуации u_0 с $\mathcal{C}'$, и потому для гидростатически сжатого образца можно пользоваться критериями устойчивости, сформулированными в [14], заменив там матрицу $\mathcal{C}'$ (которую нужно определять через производные по u_0, а не u) на $\mathcal{K}$.

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что из всех возможных вариантов определения тензора модулей упругости анизотропного тела в нелинейной макроскопической теории только полносимметричный тензор $\mathcal{K}$ одновременно обладает следующими свойствами: во-первых, при малых деформациях переходит в тензор модулей упругости линейной теории, во-вторых, при любых деформациях обладает минимальным числом различных компонент (совпадающим с числом компонент тензора модулей упругости линейной теории для каждой сингонии недеформированного кристалла [11]) и, в-третьих, поддается расчету, если известна зависимость свободной энергии (или, для его адиабатического значения, энергии) от деформации.

Все прочие модули (которые возникают при рассмотрении частных задач): тензор эффективных упругих модулей $\mathcal{N}$, тензор термодинамической восприимчивости $\mathcal{Y}$, локальная модификация $\mathcal{K}^c$ полносимметричного тензора $\mathcal{K}$ выражаются через тензор $\mathcal{K}$, который, в свою очередь, вычисляется через тензор $\mathcal{H}$ вторых производных по деформации от свободной энергии единицы массы тела f (или, для адиабатических коэффициентов, энергии единицы массы ε).

Показано, что на линии гидростатической деформации все эти величины обладают полной перестановочной симметрией по индексам и имеют максимум 21 различную компоненту, причем $\mathcal{Y} = \mathcal{K}$, $\mathcal{N} = \mathcal{K}^c$, а отличие $\mathcal{K}$ от $\mathcal{N}$ (см. (63)) проявляется в случае произвольного крепления образца в первом порядке по девиаторной части дисторсии (вследствие возникающего под давлением поворота анизотропного образца), а при его симметричном креплении, исключающем поворот, во втором порядке по девиатору деформации, ненулевому в анизотропном теле даже в гидростатическом случае.

В окрестности линии гидростатической деформации различие между $\mathcal{Y}$ и $\mathcal{K}$ (см. (38)), равно как и между $\mathcal{N}$ и $\mathcal{K}^c$ (см. (46)), определяется уже величиной сдвигового напряжения, т. е. проявляется в первом порядке по возникающей дополнительной сдвиговой деформации, увеличивая, хотя и тривиальным образом, число различных компонент тензоров $\mathcal{Y}$ и $\mathcal{N}$.

Исходя из всего этого, мы находим разумным считать тензором модулей упругости нелинейной теории именно величину $\mathcal{K}$, определяемую выражениями (36)–(37а) и связанную с другими обсуждавшимися здесь величинами соотношениями (38), (39).

Автор благодарен дирекции Института за предоставленную возможность вести эту работу в столь непростое для нашей науки время. Автор также признателен С. М. Стишову за нелицеприятную критику первоначального текста статьи, ставшую фактически причиной написания данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. P. Kochkin, Indian J. Pure Appl. Math. **17**, 564 (1986).

2. H. Hencky, Z. Techn. Phys. **9**, 215 (1928).

3. А. П. Кочкин, ЖЭТФ **109**, 1823 (1996).

4. А. П. Кочкин, Рукопись №2120-В99, депонированная в ВИНИТИ 29.06.99.

5. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Гостехиздат, Москва (1953).

6. С. П. Демидов, *Теория упругости*, Высшая школа, Москва (1979).

7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1973).

8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).

9. З. Г. Пинскер, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах*, Наука, Москва (1974).

10. М. А. Кривоглаз, *Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами*, Наука, Москва (1967).

11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).

12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).

13. Kwang Yul Kim, Phys. Rev. B **54**, 6245 (1996).

14. Z. Zhou and B. Joos, Phys. Rev. B **54**, 3841 (1996).