

РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВЕЩЕСТВОМ, ДЕФОРМИРОВАННЫМ ВНЕШНЕЙ НАГРУЗКОЙ

А.П.Кочкин

ИФВД РАН

Роберт Гук в секретной публикации 1676 г. сообщил об открытии им зависимости силы от растяжения в следующей формулировке: *seiiinossttuv* [1]. Причина такой закрытости состояла в том, что будучи весьма разносторонним ученым (он претендовал на авторство некоторых из законов Ньютона), Гук занимался также изготовлением пружинных часов и, как поясняет Дж.Ф.Белл опасался конкуренции со стороны часовщиков.

В открытой публикации 1678 г. было расшифровано: *ut ten sio sic vis* (какова сила таково растяжение). Там же Гук следующим образом заявил об универсальности открытой им линейной зависимости силы от растяжения: «Ее можно наблюдать не только в этих телах, но и в любых других упругих материалах, будь то металл, дере-во, камни, спекшаяся глина, волос, шелк, кость, сухожилия, стекло и тому подобное.»

Европа была скептичнее, и тех, кто исследовал органические вещества (например, с целью усовершенствования струн для смычковых инструментов), этот закон (уравнение состояния при одноосном растяжении) никак не мог удовлетворить. В господствовавшем тогда духе истинной науки считалось, что его можно получить только из эксперимента (Г.Лейбниц, Я.Бернулли-ст., Ж.Л.Ле-клерк де Бюффон, А.Л.Дюамель – XVII-XVIII вв.). Предлагалось несколько форм зависимости растягивающей силы от деформации.

Начало экспериментальной механики упругих деформаций было положено работами Шарля Огюстена Кулона 1777-1784 гг., который, прежде чем начать изучение зависимости электрических и магнитных сил от расстояния, предпринял скрупулезное изучение поведения различных материалов на предмет их использования в крутильных весах. После этого много людей в Европе и Англии занимались выяснением возможного вида зависимости силы от растяжения, предлагая варианты формул такой зависимости (повидимому, идея Мак-Лореновского разложения тогда еще не сделалась общим достоянием физической общественности)

Одним из последствий таких усилий стало то, что в 1849 г. Британская Королевская комиссия по железу на основании экспериментов И.Ходжкинсона, изучавшего изгиб балок из дерева, железа, камня и растяжение длинных стержней из железа, стали и чугуна, рекомендовала Британским инженерам заменить линейный закон на параболический:

$$\sigma = A\varepsilon + B\varepsilon^2$$

Мудрые Британские инженеры рекомендацию проигнорировали.

С увеличением точности эксперимента, к концу XIX в., стало ясно, что экзотикой скорее является закон Гука, чем отклонения от него. Например, было замечено различие между значениями модуля Юнга из статических (растяжение стержня) и динамических (скорости звука) экспериментов. Это привело к тому, что Грюнайзен, используя одно из предложенных нелинейных приближений - уравнение Хартига для модуля Юнга при малых деформациях

$$Y = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = Y_0 - b\sigma$$

откуда следует уравнение состояния

$$\sigma = \frac{Y_0}{b}(1 - e^{-b\varepsilon}) \approx Y_0\varepsilon - \frac{Y_0}{2}b\varepsilon^2 + \dots$$

нашел экстраполяцией значения Y_0 , совпавшие с динамическими (1907).

Длину растягиваемого стержня Грюнайзен измерял интерференционным методом, абсолютные величины деформаций $\varepsilon = \Delta L/L$ доводил до 10^{-5} при точности 10^{-7} . Это означало, что, если и существует линейная зависимость силы от растяжения, она заканчивается довольно быстро.

Этот факт не был осознан многими до 80 гг. XX в., т.к., по утверждению Дж.Ф.Белла[1], в большинстве ссылок на эту работу утверждается, что Грюнайзен блестяще подтвердил справедливость закона Гука.

Таким образом, закон Гука, как и линейное приближение теории упругости, вообще говоря, пригодны лишь при инфинитезимальных деформациях и адекватно могут описать только распространение звуковых волн небольшой интенсивности.

Обобщение закона Гука в начале XIX в. привело к созданию линейной теории упругости, где деформация описывалась тензором деформации Коши

$$u_{ij}^C = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Тем самым точность описания была принесена в жертву удобству вычислений, а теория загнана в тупик на сотню лет, поскольку тензор Коши – приближенное значение точного тензора деформации Лагранжа

$$u_{ij}^L = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right)$$

и потому замена u^L на u^C делает бессмысленными любые уточнения теории.

Однако виртуальная работа в линейной теории выглядит просто и привлекательно[2]:

$$\delta R = \int dV \sigma_{ij} \delta u_{ji}^C = \int dV \langle \sigma \delta u^C \rangle$$

где введено обозначение

$$\langle t \rangle = \text{Tr}(t) = t_{jj}$$

Итак, нужно уметь точно описывать деформацию. Но какой же мерой ее правильнее всего измерять? Возможные кандидаты:

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{L}{L_0} - 1 \quad \eta = \frac{\Delta L}{L} = 1 - \frac{L_0}{L}$$

принципиально не отличаются так как

$$1 + \varepsilon = \frac{1}{1 - \eta}$$

Для дальнейшего понадобится ввести некоторые определения. Обозначим через ξ_i начальное положение точки тела, в результате приложения нагрузки переходящей в точку x_i (u_i - вектор смещения)

$$x_i = \xi_i + u_i \quad \mu_{ij} = \partial \xi_i / \partial x_j = \delta_{ij} - \beta_{ji} \quad \beta_{ij} = \partial u_j / \partial x_i$$

Определения: μ - тензор смещения, γ - тензор Мурнагана, u^L - тензор деформации Лагранжа

$$\mu = E - \beta^T \quad \gamma = \mu^T \mu = E - 2u^L$$

$$u^L = (\beta + \beta^T - \beta\beta^T)/2$$

(знак минус имеет причиной использование эйлеровых переменных).

Мурнаган (1937) [3] показал, что:

$$\delta R = -\frac{1}{2} \int dV \langle \gamma^{-1} \sigma \delta \gamma \rangle$$

Так как свободная энергия есть $F = \int \rho dV f$, для ее плотности, т.е. свободной энергии на единицу массы f справедливо тождество

$$df = -\eta dT - \frac{1}{2\rho} \langle \sigma \gamma^{-1} d\gamma \rangle$$

откуда

$$\sigma = -2\rho\gamma \frac{\partial f}{\partial \gamma}$$

(термодинамическое тождество, которое можно назвать общим уравнением состояния Мурнагана).

Далее, Берч в (1938) провел следующее усовершенствование, подставив в это уравнение выражение для γ через u^L :

$$\sigma = \rho(E - 2u^L) \frac{\partial f}{\partial u^L}$$

Это уравнение удобно для определения (численным методом) поля смещений u_i .

Решение уравнения равновесия

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0$$

совместно с уравнением состояния, в принципе, позволяет найти распределение деформаций и напряжений в теле при заданных граничных условиях. На этом инженерно-математическая часть проблемы изотропного твердого тела заканчивается, рассыпаясь на множество задач.

Но еще в 1928 г. Н.Ненску[5] опубликовал статью, в которой излагалось следующее наблюдение: если для однородной нагрузки виртуальная деформация соосна тензору напряжений, то

$$\begin{aligned} \delta R &= \sigma_{xx} L_y L_z \delta L_x + \sigma_{yy} L_x L_z \delta L_y + \sigma_{zz} L_x L_y \delta L_z = \\ &= V \left(\sigma_{xx} \frac{\delta L_x}{L_x} + \sigma_{yy} \frac{\delta L_y}{L_y} + \sigma_{zz} \frac{\delta L_z}{L_z} \right) = V \sum \sigma_{ii} \delta s_i \end{aligned}$$

где $s_i = \ln \frac{L_i}{L_i^0}$

Т.о. получается, что деформацию правильно измерять логарифмом отношения размеров, она была названа натуральной деформацией и с тех пор использовалась экспериментаторами для описания результатов при больших пластических деформациях.

Ненску занимался пластическими деформациями, поэтому Мурнаган либо не знал, либо не счел нужным обращать внимания на его работу.

В предположении соосности σ и γ , т.е. для случая упругой деформации изотропного тела можно доказать справедливость выражения для виртуальной работы, подобного линейному приближению [6]:

$$\delta R = \int dV \langle \sigma \delta s \rangle$$

где

$$s = -\frac{1}{2} \ln \gamma$$

которую естественно назвать тензором натуральной деформации, т.к. выбрав линейные размеры вдоль главных его осей, мы приходим к формулам Генки.

Каковы свойства величины s ?

1. При малых деформациях

$$s \approx u_L + u_L^2 \rightarrow u_C$$

2. При наложении изотропного сжатия и последующей деформации

$$x_i = \frac{\xi_i}{\alpha} + u'_i \quad \text{откуда} \quad \xi_i = \alpha(x_i - u'_i)$$

получаем

$$\mu_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} = \alpha \left(\delta_{ij} - \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) = \alpha (\delta_{ij} - \beta'_{ji}) = \alpha \mu'_{ij}$$

так что

$$\gamma = \alpha^2 \mu'^T \mu' = \alpha^2 \gamma'$$

и потому эти вклады аддитивно разделяются:

$$s = -E \ln \alpha + s'$$

След I_1 оператора s , как показано в [6], есть

$$\langle s \rangle = I_1 = \ln \frac{\rho_0}{\rho}$$

а девиатор (бесследная часть) тензора s

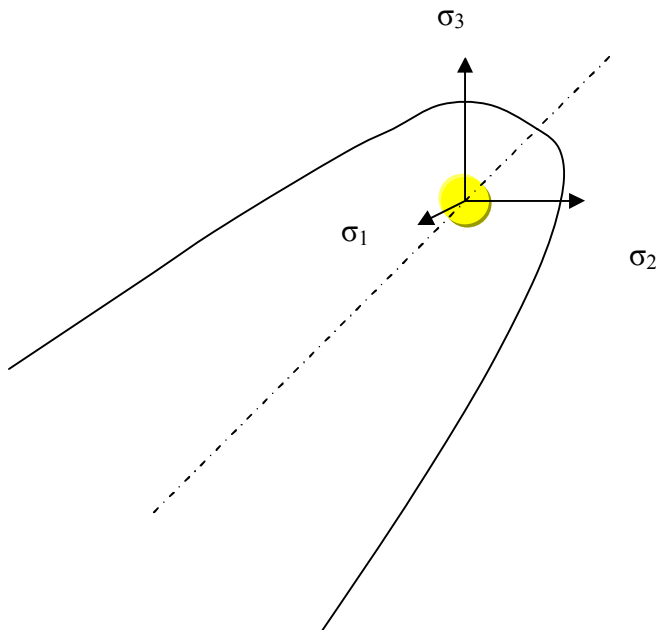
$$\Delta = s - \frac{\langle s \rangle}{3} E$$

есть мера сдвиговой деформации. Получается, что

$$I_1 = -3 \ln \alpha + I'_1 \quad \Delta = \Delta'$$

т.е. изотропное сжатие меняет только шаровую (изотропную) компоненту натуральной деформации, не влияя на сдвиговую.

В пространстве главных значений тензора напряжений область применимости линейного приближения может быть изображена внутренностью шара малого радиуса, а теории натуральной деформации – вся окрестность отрицательной трисекторной (гидростатической) оси $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -p$ (она ограничена началом текучести или хрупкого разрушения при больших отклонениях от этой оси). Это можно приблизительно изобразить так:



(желтым обозначено место, где пригодно линейное приближение). На самой трисектрисе справедливо гидростатическое уравнение состояния, считающееся известным из эксперимента, а отклонения от гидростатичности могут быть найдены, если известны локальные модули упругости.

Анизотропное тело.

В анизотропном случае формулу для виртуальной работы[7] можно привести к виду, столь же простому, как и в изотропном:

$$\delta R = \int dV \langle \tilde{\sigma} \delta \tilde{s} \rangle \quad \text{где} \quad \tilde{s} = -\frac{1}{2} \ln \tilde{\gamma} \quad \tilde{\gamma} = \mu \mu^T = E - 2\tilde{u}^L$$

$$\tilde{u}_{ij}^L = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad \tilde{s} \approx \tilde{u}_L + \tilde{u}_L^2 \rightarrow u_C$$

поэтому в линейном приближении отсутствует разница между «тильдованными» и «нетильдованными» переменными.

Полярное представление комплексного числа

$$z = \rho e^{i\varphi}, \rho^* = \rho, (e^{i\varphi})^* = e^{-i\varphi} = (e^{i\varphi})^{-1}$$

для неэрмитовой матрицы имеет аналог

$$Z = HU, H^+ = H, U^+ = U^{-1}$$

а для действительной несимметричной, для которой эрмитова матрица есть симметричная, а унитарная – ортогональная:

$$H \rightarrow S, S^T = S \quad U \rightarrow \omega, \omega^T = \omega^{-1}$$

полярное разложение приобретает вид

$$\mu = \omega S = \tilde{S} \tilde{\omega}$$

откуда $\gamma = S^2 \quad \tilde{\gamma} = \tilde{S}^2$
а так как

$$\tilde{\gamma} = \omega S^2 \omega^T = \omega \gamma \omega^T \quad \gamma = \tilde{\omega}^T \tilde{S}^2 \tilde{\omega} = \tilde{\omega}^T \tilde{\gamma} \tilde{\omega}$$

то понятно, что

$$\tilde{\omega} = \omega$$

Почему в анизотропном случае необходима замена γ на $\tilde{\gamma}$? Малый элемент $\delta \xi_i$ при деформации переходит в δx_i :

$$\delta x_i = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \delta \xi_j = (\mu^{-1})_{ij} \delta \xi_j$$

Отсюда получаем

$$\delta x_i = (S^{-1} \omega^T)_{ij} \delta \xi_j = (\omega^T \tilde{S}^{-1})_{ij} \delta \xi_j$$

Таким образом, использование «тильдованных» переменных означает сначала дилатацию \tilde{S}^{-1} и лишь затем поворот (от которого упругая энергия вообще не зависит) элемента, т.е. работа производится над элементом с известной ориентацией.

Из очевидного термодинамического тождества

$$df = -\eta dT + \frac{1}{\rho} \langle \tilde{\sigma} d\tilde{s} \rangle$$

следует выражение для т.наз. термодинамического тензора напряжений

$$\tilde{\sigma} = \rho \left(\frac{\partial f}{\partial \tilde{s}} \right)_T$$

Он связан с истинным (физическим) тензором напряжений σ (который не сводится к функции от s) соотношением [7]

$$\sigma = \Sigma(\mu)\tilde{\sigma}$$

где μ - тензор смещения под действием напряжений σ .

Оператор Σ оставляет единичный тензор неизменным:

$$\Sigma E = E$$

вследствие чего шаровые части σ и $\tilde{\sigma}$ совпадают

$$\sigma = -pE + \tau \quad \tilde{\sigma} = -pE + \tilde{\tau}$$

Если сдвиговая компонента Δ деформации s мала, справедливо разложение

$$\Sigma = (\omega^T \otimes \omega^T) + O(\Delta^2)$$

где кронекеровское произведение операторов определяется соотношением

$$(a \otimes b)c = acb^T$$

а поворот ω следующим образом выражается через тензор дисторсии β

$$\omega \approx E + \frac{1}{2}(\beta - \beta^T)$$

чему соответствует поворот на угол

$$\alpha_i = \frac{1}{2}e_{ijk}\beta_{jk}$$

Поэтому выражение для σ можно записать в виде

$$\sigma = \Sigma\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma} + \frac{1}{2}[(\beta - \beta^T), \tilde{\sigma}] + O(\Delta^2)$$

Стоит пояснить, что в гидростатических условиях в кристаллах сдвиг равен нулю только в сингонии O_h , а ненулевая ω возможна лишь в сингониях S_2 и C_{2h} .

Пусть в результате приложения внешней нагрузки базисные векторы элементарной ячейки изменились следующим образом:

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

Тогда вектор решетки $\mathbf{a} = n^i \mathbf{a}_i$ переходит в $\mathbf{a}' = n^i \mathbf{a}'_i = n^i T_i^j \mathbf{a}_j = n'^j \mathbf{a}_j$ откуда следует

$$\mu_{\cdot j}^i = \frac{\partial n^i}{\partial n'^j} = (T^{-1})_j^i$$

Из соотношений биортогональности

$$\mathbf{b}^i \mathbf{a}_j = \delta_j^i \quad \mathbf{b}'^i \mathbf{a}'_j = \delta_j^i$$

для обычно используемых векторов

$$\mathbf{g}^i = 2\pi \mathbf{b}^i$$

отсюда получается

$$\mathbf{g}'^i = \mu_{\cdot j}^i \mathbf{g}^j$$

Из представлений тензора μ в разных базисах (\mathbf{i}_k - k -ый вектор ортонормированного базиса кристаллографической системы координат)

$$\mu = \mu_{\cdot j}^i (\mathbf{a}_i \otimes \mathbf{b}^j) \equiv \hat{\mu}_{ij} (\mathbf{i}_i \otimes \mathbf{i}_j)$$

получаем соотношения для его координат

$$\mu_{\cdot j}^i = (\mathbf{b}^i \mu \mathbf{a}_j) = U_k^i \hat{\mu}_{kl} V_{lj}$$

где $U_k^i = (\mathbf{b}^i \mathbf{i}_k)$, $V_{lk} = (\mathbf{i}_l \mathbf{a}_k)$, $V = U^{-1}$

Для последовательной деформации $\xi^i \Rightarrow \bar{x}^i \Rightarrow x^i$ когда

$$\xi^i \rightarrow \bar{x}^i = \xi^i + \bar{u}^i \quad \bar{x}^i \rightarrow x^i = \bar{x}^i + u'^i$$

и потому полное смещение есть $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'$ получаем

$$\mu_{\cdot j}^i = \frac{\partial \xi^i}{\partial x^j} = \frac{\partial \xi^i}{\partial \bar{x}^k} \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^j} = \bar{\mu}_{\cdot k}^i \mu'^{k \cdot j} \Rightarrow \bar{\mu}_{ik} \hat{\mu}'_{kl}$$

и

$$\tilde{\gamma} = \bar{\mu} \hat{\mu}' \hat{\mu}'^T \bar{\mu}^T = \bar{\mu} \tilde{\gamma}' \bar{\mu}^T$$

Рефлекс на векторе обратной решетки

$$\mathbf{g} = m_i \mathbf{g}^i \quad \{m_i\} \Rightarrow \langle h, k, l \rangle$$

под внешней нагрузкой переходит в

$$\mathbf{g}' = m_i \mathbf{g}'^i = m_i \mu_{\cdot j}^i \mathbf{g}^j = \bar{m}_i \mu'_{ij} \mathbf{i}_j = \bar{m}_i \tilde{S}'_{ik} \omega'_{kj} \Omega_{ij}^L \mathbf{i}_l^L$$

и потому

$$\mathbf{g}'^2 = \bar{m}_i \bar{m}_j \gamma'_{ij}$$

где

$$\bar{m}_i = 2\pi m_k U_j^k \bar{\mu}_{ji} \quad \bar{\mu} = \bar{S} \bar{\omega} \quad \mu' = \tilde{S}' \omega'$$

Векторы кристаллографического базиса кристаллита связаны с базисом лабораторным (в котором заданы компоненты тензора напряжений) соотношениями

$$\mathbf{i}_k = \Omega^L \mathbf{i}_k^L = \Omega_{mk}^L \mathbf{i}_m^L$$

Так как

$$\omega'^L \Omega = \Omega \omega'$$

определим полный проворот элемента тела

$$O_{lk} = \omega'_{kj} \Omega_{ij}^L = (\Omega^L \omega'^T)_{lk} = ((\omega'^L)^T \Omega)_{lk}$$

Тогда, в силу соотношений

$$\tilde{\gamma} = e^{-2\tilde{s}} \quad \tilde{\gamma}' = e^{-2\tilde{s}'} \approx E - 2s' \quad \tilde{S} = e^{-\tilde{s}} \quad \tilde{S}' = e^{-\tilde{s}'} \approx E - \tilde{s}'$$

где

$$\tilde{s}' = C \tilde{\sigma}'$$

(C - тензор сжимаемости кристалла), получаем

$$\mathbf{g}' = O(\bar{m}_i \tilde{S}'_{ij} \mathbf{i}_j^L) = O(\bar{m}_i \mathbf{i}_i^L - \bar{m}_i C_{ijkl} \sigma'^L_{pq} \Omega_{pk} \Omega_{jl}^L)$$

и

$$\mathbf{g}' \approx \bar{\mathbf{g}} - T \quad T = \frac{\bar{m}_i s'_{ij} \bar{m}_j}{\bar{\mathbf{g}}} = \frac{\bar{m}_i \bar{m}_j}{\bar{\mathbf{g}}} \tilde{C}_{ijkl} O_{mk} O_{nl} \sigma'^L_{mn}$$

где в силу малости поправки T в ней положено $\Omega \approx O$. С учетом равенств

$$\bar{m}_k \mathbf{i}_k = \bar{\mathbf{g}} \quad \bar{m}_k \mathbf{i}_k^L = \bar{\mathbf{g}}^L \quad O \bar{\mathbf{g}}^L = \bar{\mathbf{g}}$$

мы имеем все для вычисления дифференциального сечения рассеяния

$$j = \frac{dJ}{do'} = A \sum_a \left| \int_{V_a} e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{g}'_a) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2,$$

где

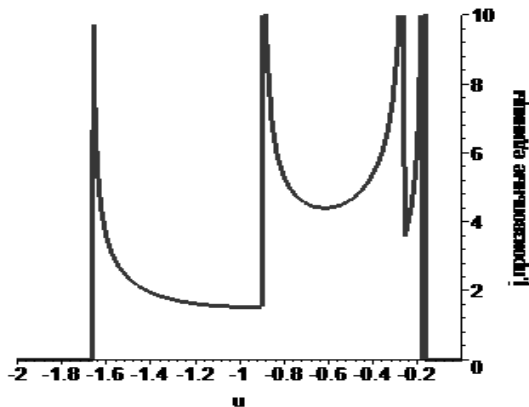
$$A = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} |n_g|^2$$

а индекс a означает номер рассеивающего кристаллита.

При простейшем предположении равномерного распределения ориентаций кристаллитов по углам в приближении геометрической оптики в поле дополнительного напряжения

$$\sigma'^L = \tau^L = \begin{bmatrix} \tau & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & -2\tau \end{bmatrix}$$

в продольной геометрии эксперимента (падающий луч параллелен оси нагружения z) для начальных (без давления) параметров поликристалла ZnF_2 (тетрагональная простая решетка) со значениями упругих модулей из [8] в модели Ройсса поликристалла получается [9]



Показана зависимость дифференциального сечения j от безразмерного параметра $u = (q/\bar{g} - 1)/(C_{44}\tau)$, $q = 2k \sin \theta$

Наблюдение такой тонкой структуры требует высокого (но не запредельного) разрешения аппаратуры [9], но достаточно информативно для выяснения величин модулей знание о положениях пиков на такой картинке.

Какие же модули можно получить из такого эксперимента?

Если известна зависимость свободной энергии от компонент тензора натуральной деформации $f(\tilde{s})$ то, обозначая пары индексов одной буквой в соответствии с пересчетом Фогхта:

$$\begin{bmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 6 & 2 & 4 \\ 5 & 4 & 3 \end{bmatrix}$$

можно ввести [7] такие определения модулей упругости анизотропного тела:

1. Обратная деформационная восприимчивость:

$$\tilde{Y}_{ab} = \frac{\partial \tilde{\sigma}_a}{\partial \tilde{s}_b}$$

2. Так называемые elastic constants (стандартное их определение содержит производные по тензору Лагранжа):

$$\tilde{K}_{ab} = \rho \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{s}_a \partial \tilde{s}_b} = \rho \frac{\partial}{\partial \tilde{s}_a} \frac{\tilde{\sigma}_b}{\rho} = \tilde{Y}_{ba} + \tilde{\sigma}_b \backslash E$$

Эти величины зависят от выбора начальной точки деформации, которая в действительности ничем не выделена.

Если фаза существует при нулевой нагрузке, выбор начальной точки очевиден, если не так, чтобы избавиться от случайностей такого выбора, есть два пути:

1. Предельным переходом приравнять начальную точку к текущей (отсюда получаются так называемые **локальные модули**),

2. Перейти к **динамическим модулям**, выражаемым через реальный (а не термодинамический) тензор напряжений

3. Динамические модули наиболее естественно появляются в уравнениях распространения звука и, как можно показать [7], не зависят от выбора начальной точки.

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{ml}} \frac{\partial \mu_{ml}}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{ml}} \mu_{mk}^p \frac{\partial \mu'_{kl}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{ml}} \mu_{mk}^p \frac{\partial^2 u'_k}{\partial x_j \partial x_l} = - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{ml}} \mu_{mn} \mu_{nk}' \frac{\partial^2 u'_k}{\partial x_j \partial x_l}$$

Сравнивая это выражение с результатом линейного приближения, когда $\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} u_{kl}^c$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \lambda_{ijkl} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_k} = \lambda_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}$$

и учтя, что $\mu' = E - \beta'^T \approx E$, получаем для динамического модуля выражение

$$N_{ijkl} = - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \mu_{ml}} \mu_{mk}$$

В формуле $\tilde{s}' = \tilde{C} \tilde{\sigma}'$ С есть, очевидно, величина, (матрично)обратная локальному дифференциальному модулю (что помечено индексом “с”)

$$\tilde{Y}_c = \frac{\partial \tilde{\sigma}'}{\partial \tilde{s}'}$$

Можно показать [7], что

$$N = \tilde{Y}_c + (\sigma \otimes E) - (E \otimes \sigma)$$

и тем самым, что, измерив C , мы находим динамический модуль N (напомним, что σ непосредственно нельзя дифференцировать по симметричному тензору деформации).

Если предварительная нагрузка происходила под гидростатическим давлением, $\sigma = \tilde{\sigma} = -pE$, то

$$N = \tilde{Y}_c = K_c + pE \langle E$$

или, в компонентах

$$K_{ijkl}^c = N_{ijkl} - p \delta_{ij} \delta_{kl}$$

А что могут дать эксперименты без сдвига, чисто гидростатические?

Пусть $\tilde{\sigma}' = -p'E$, тогда $\tilde{s}'_{ij} = -\tilde{C}_{ijkk} p'$ и

$$-\tilde{C}_{iikk} p' = \tilde{s}'_{ii} = \ln \frac{\rho_p}{\rho_{p+p'}} \approx -p' \frac{\partial \ln \rho}{\partial p}$$

и, введя величины (они понадобятся при микроскопическом рассмотрении; скобки означают отсутствие суммирования по повторяющимся индексам)

$$D_i = \tilde{C}_{(ii)kk}$$

получаем:

$$\sum_{i=1}^3 D_i = \frac{\partial \ln \rho}{\partial p} = \frac{1}{K}$$

Это – чисто макроскопические рассуждения в рамках теории натуральной деформации.

Посмотрим теперь на все это с точки зрения возникающей картины рентгеновского рассеяния. Имеем:

$$g'^2 = \widehat{m}_i \widehat{m}_i + 2 \widehat{m}_i \widehat{m}_j \tilde{C}_{ijkk} p'$$

причем для всех сингоний выше C_{2h} $\tilde{C}_{ijkk} = \delta_{ij} D_i$, поэтому

$$g_{p+p'}^2 = g_p^2 + 2p' \sum_{i=1}^3 (\hat{m}_i)^2 D_i$$

и при $p' \rightarrow 0$

$$\sum_{i=1}^3 (\hat{m}_i)^2 D_i = \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{g}^2}{\partial p} = \sum_{i=1}^3 (\hat{m}_i)^2 \frac{\partial \ln \hat{m}_i}{\partial p}$$

Поскольку такие соотношения справедливы для любого рефлекса (т.е. при произвольных величинах $\langle h, k, l \rangle$), отсюда можно заключить, что

$$D_i = \frac{\partial \ln \hat{m}_i}{\partial p}$$

В рассматриваемых сингониях тензор μ в гидростатических условиях диагонален:

$$\hat{\mu} = \begin{bmatrix} l_1^0 / l_1 & 0 & 0 \\ 0 & l_2^0 / l_2 & 0 \\ 0 & 0 & l_3^0 / l_3 \end{bmatrix}$$

поэтому, как следует из определения величин \hat{m}_i

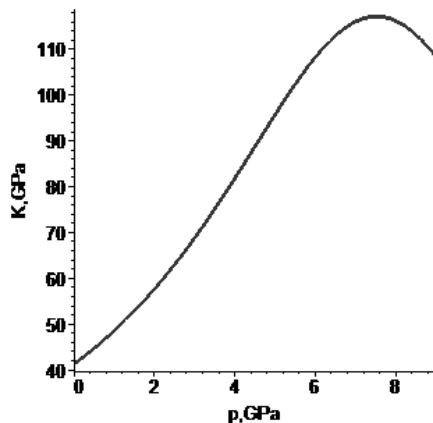
$$D_i = \frac{\partial \ln \hat{\mu}_i}{\partial p} = - \frac{\partial \ln l_i}{\partial p}$$

где l_i – любой линейный размер вдоль i -ой оси (хотя они для сингоний D_{3d} и D_{6h} могут строиться только в макроскопическом смысле, строгое, но более долгое, микроскопическое рассмотрение приводит к тем же выражениям). Поэтому

$$\sum_i D_i = - \frac{\partial \ln(l_1 l_2 l_3)}{\partial p} = - \frac{\partial \ln V}{\partial p} = \frac{1}{K}$$

что совпадает с вышеприведенным результатом.

Далее приводятся расчеты [9] модуля объемной упругости для графита из результатов измерений [10]. Расчетная область ограничена тем обстоятельством, что в окрестности фазового перехода (при $p=11.8$ ГПа) возрастают ошибки измерения. Начальное (при $p=0$) значение модуля оказалось $K \approx 41.2$ ГПа,



Хотелось бы особо отметить, что впервые падение модуля всестороннего сжатия задолго до фазового перехода наблюдалось при измерениях распространения звука на Се в работе [11], вызвавшей в те времена достаточно много нареканий.

Благодарю за внимание.

ЛИТЕРАТУРА

1. Белл Дж. Ф. Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел, ч.1. М.:Наука, 1984. 596 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости, М.:Наука, 1987. 246 с.
3. Murnaghan F.D. //Amer. J. Math. 1937. V.59. P.235.
4. Birch F.//J. Appl. Phys. 1938. V. 9. P.279,
5. Hencky H.//Zeitsch.fur techn.Physik. 1928. V.9. P.214,
6. Kochkin A.P.//Indian J. pure appl. Math. 1986. V.17(4). P.564.
7. Кочкин А.П. Рукопись №2120-В99, деп. в ВИНТИ 29.06.1999,
Кочкин А.П.//ЖЭТФ. 2000. Т.117(4). С.723.
8. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Киев:Наукова думка, 1982. 286 с.
9. Кочкин в печати
10. Zhao You Xiang, Spain Ian L.//Phys.Rev.B,1989 (40),993.
11. Воронов Ф.Ф., Верещагин Л.Ф., Гончарова В.А.//Докл.АН СССР. 1960. Т.135. С.1104.