Физика и техника высоких давлений 2021, том 31, № 1

PACS: 62.20.Dc, 62.30.+d, 63.20.Ry, 63.20.–e, 64.70.qj, 65.40.–b

В.В. Шелест, Д.А. Червинский, А.В. Христов

СВЯЗЬ ТЕРМОДИНАМИКИ УСТОЙЧИВОСТИ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ С АКУСТИКОЙ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 12 января 2021 года

Изучена связь между ангармоническими свойствами упруго деформированной среды и акустикой. В частности, выведены аналитические соотношения, демонстрирующие взаимное влияние комплексного ангармонизма и звуковых волн в континуальной среде. Определена связь детерминанта устойчивости с акустикой.

Ключевые слова: термодинамические коэффициенты, комплексный ангармонизм, параметр и соотношение Грюнайзена, детерминант термодинамической устойчивости, звуковые волны

Общеизвестно [1–12], что термодинамические, упругие и динамические свойства твердого тела влияют на устойчивость фазового состояния среды. Свойства последней описываются через термодинамические коэффициенты, а также через такие важные величины, характеризующие комплексный ангармонизм, как параметр Грюнайзена и изохорический коэффициент расширения, определяющие, в свою очередь, детерминант устойчивости.

Все указанные параметры связаны также со звуковыми колебаниями в среде.

Цель данной работы – аналитически выразить взаимозависимость между вышеуказанными явлениями и описывающими их параметрами. Кроме этого, авторы конкретизируют некоторые физические формулировки, характеризующие изотермические и адиабатические процессы, а также связь между ними.

1. Связь комплексного ангармонизма упруго деформированной среды с акустикой. Согласно теории упруго деформированного континуума [1–6] в среде могут распространяться продольные и поперечные звуковые волны. Скорости их распространения различны и выражаются через коэффициенты Ляме таким образом:

$$\rho v_{\perp}^{2} = \mu, \tag{1.1}$$

$$\rho v_{\parallel}^{2} = \lambda + 2\mu. \tag{1.2}$$

Здесь ρ – плотность; $v_\perp$, $v_\parallel$ – соответственно поперечная и продольная скорости звука в среде; λ, μ – коэффициенты Ляме. Из соотношений (1.1) и (1.2) следует очевидное равенство

$$\lambda = \rho v_\parallel^2 - 2\rho v_\perp^2 . \tag{1.3}$$

В то же время на базе теории упругости сплошной среды коэффициенты Ляме можно связать с модулями упругости такой среды:

$$\mu = G , \tag{1.4}$$

$$\lambda + \frac{2}{3}\mu = K , \tag{1.5}$$

где G, K – модули соответственно сдвига и упругого объемного сжатия. Заметим, что упругие волны в сплошной среде (и в твердом теле) распространяются без переноса тепла, т.е. адиабатически. Таким образом, деформация, связанная с упругими волнами, будет характеризоваться адиабатическими модулями упругости. Это значит, что в соотношениях (1.4) и (1.5) $G = G_S$ и $K = K_S$. Легко показать [1,6,7] (см. также прил. 1, 2), что в изотермическом случае модули упругости удовлетворяют условиям $G_T = G_S = G$, тогда как $K_S \neq K_T$. В этом контексте из соотношения (1.5) на основе (1.1) и (1.3) получаем связь

$$\frac{K_S}{\rho} = v_\parallel^2 - \frac{4}{3}v_\perp^2 . \tag{1.6}$$

Известно, что в кристаллах кубической симметрии (континуальный предел для которых есть сплошная среда) могут распространяться три типа волн разной поляризации (одна продольная и две поперечные). При этом квадрат средней скорости распространения звуковых волн в кристалле является величиной, не зависящей от направления и выражаемой формулой [3–6,12]:

$$\overline{v}^2 = \frac{v_\parallel^2 + 2v_\perp^2}{3} . \tag{1.7}$$

Следуя концепции [12] и сообразуясь с размерностями физических величин, средний квадрат скорости можно найти через термодинамические коэффициенты таким образом:

$$\rho\overline{v}^2 = \frac{3}{2}\cdot\frac{C_P}{\alpha_P}\cdot\frac{1}{V} . \tag{1.8}$$

Данная формула применяется для экспериментального определения среднего квадрата скорости [12]. Используя соотношение Грюнайзена [2,8–10], можно получить связь между параметром Грюнайзена γ_G и коэффициентом теплового расширения α_P, которые как раз и характеризуют комплексный ангармонизм системы:

$$\gamma_{\mathrm{G}} = V\alpha_P \frac{K_S}{C_P}. \tag{1.9}$$

Таким образом, опираясь на равенства (1.6)–(1.9), можно получить связь параметров комплексного ангармонизма с акустическими величинами в виде

$$\gamma_{\mathrm{G}} = \frac{9}{2} \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2}, \tag{1.10}$$

$$\alpha_P = \frac{9}{2} \cdot \frac{C_P}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2} \cdot \frac{1}{\rho V}. \tag{1.11}$$

В дальнейшем будем придерживаться постулата $\rho V = \mathrm{const}$. Если учесть, что теплоемкость при постоянном давлении сама связана с комплексным ангармонизмом [2,7–10] согласно формуле

$$C_P = C_V \left(1 + \gamma_{\mathrm{G}}\alpha_P T\right), \tag{1.12}$$

то из (1.11) следует соотношение

$$\alpha_P = \frac{3}{2} \cdot \frac{C_V}{\bar{v}^2 \rho V}\left(1 + \gamma_{\mathrm{G}}\alpha_P T\right). \tag{1.13}$$

Разрешая равенство (1.13) относительно параметра α_P и используя (1.10), для коэффициента теплового расширения получаем формулу

$$\alpha_P = \frac{3}{2} \cdot \frac{C_V}{\bar{v}^2 \rho V}\left[1 - \frac{27}{4}\frac{C_V T}{\rho V \bar{v}^4}\left(v_{\parallel}^2 - \frac{4}{3}v_{\perp}^2\right)\right]^{-1}. \tag{1.14}$$

2. Связь детерминанта устойчивости с акустикой. Детерминант устойчивости, выраженный через параметры комплексного ангармонизма, определяется как величина (см. прил. 1):

$$D_y = \frac{T}{V^2} \cdot \frac{\gamma_{\mathrm{G}}}{\alpha_P}. \tag{2.1}$$

Данное равенство согласно соотношению Грюнайзена перепишем в виде

$$D_y = \frac{T}{V} \cdot \frac{K_S}{C_P} = \frac{T\rho V}{V^2} \cdot \frac{K_S/\rho}{C_P}. \tag{2.2}$$

Опираясь на соотношения предыдущее подраздела, можно привести детерминант устойчивости к следующему виду:

$$D_y = \frac{T\rho V}{V^2} \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{C_P}. \tag{2.3}$$

Дальнейшая трансформация формулы (2.3) связана с учетом ангармонизма с помощью формулы $V = V_0\left(1 + \alpha_P T\right)$ для объема и подобной ей формулы

(1.12) для C_P при условии постоянства удельной массы вещества ρV. В результате простой подстановки получаем

$$D_y = \frac{T\rho V}{V_0^2 C_V \left(1+\alpha_P T\right)} \cdot \frac{v_\parallel^2 - (4/3)v_\perp^2}{1+\gamma_G \alpha_P T}. \tag{2.4}$$

Если использовать соотношения (1.10) и (1.14), то окончательно выражение, определяющее детерминант устойчивости, примет вид

$$D_y = \frac{T\rho V}{V_0^2 C_V \left\{1+\frac{3}{2}\cdot\frac{TC_V}{\overline{v}^2\rho V}\left[1-\frac{27}{4}\frac{C_V T}{\rho V\,\overline{v}^4}\left(v_\parallel^2-\frac{4}{3}v_\perp^2\right)\right]^{-1}\right\}} \times$$
$$\times \frac{v_\parallel^2-(4/3)v_\perp^2}{1+\frac{3}{2}T\cdot\frac{v_\parallel^2-(4/3)v_\perp^2}{\overline{v}^2}\left\{1+\frac{3}{2}\cdot\frac{TC_V}{\overline{v}^2\rho V}\left[1-\frac{27}{4}\frac{C_V T}{\rho V\,\overline{v}^4}\left(v_\parallel^2-\frac{4}{3}v_\perp^2\right)\right]^{-1}\right\}}. \tag{2.5}$$

С другой стороны, если учесть, что $D_y = (T/V)(K_S/\ C_P) = (T/V)(K_T/C_V)$, то можно получить термический модуль упругости

$$K_T = \frac{V}{T} D_y C_V, \tag{2.6}$$

который, в принципе, можно выразить, опираясь на использованные выше равенства, в форме, подобной (2.5).

3. Замечания. Проверкой соотношений (2.5) и (2.6) может служить связь между модулями упругости вида $K_S = K_T(1+\gamma_G\alpha_P T)$.

Во избежание недоразумений заметим, что среднее квадратическое скоростей распространения волн совпадает со средним арифметическим их квадратов.

Если рассматривать случай изотропного твердого тела, то из равенства скоростей распространения поперечных волн в направлении [1;1;0] (см. прил. 3) следует соотношение между упругими модулями $C_{11} - C_{12} = 2C_{44}$. То есть в изотропной среде могут распространяться продольные и поперечные упругие волны соответственно с частотами

$$\omega_\parallel = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}k, \quad \omega_\perp = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}k$$

и скоростями

$$v_\parallel = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}, \quad v_\perp = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}.$$

Для характеристики степени изотропности среды вводится такое понятие, как константа анизотропии:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}},$$

которая в случае изотропной среды равна единице. Опираясь на известные соотношения, связывающие коэффициенты Ляме, упругие модули K_S и G_S, а также скорости распространения упругих волн (см. выше и прил. 1–3), можно записать константу анизотропии, например, в виде А = C_{44}/ G_S и т.п.

К этому добавим, что в случае центрального короткодействия сил в кристалле, когда выполняется условие $C_{12} = C_{44}$, мы можем получить еще более простые соотношения. В определенном смысле константа анизотропии связана и с условием центральности взаимодействия. Подчеркнем, что как центральность короткодействия, так и анизотропия связаны с условием термодинамической устойчивости фазового состояния системы.

Отметим и конкретизируем некоторые положения, используемые в статье. Из теории упругости известно, что скорости продольной и поперечной звуковых волн связаны с упругими постоянными изотропной среды соотношениями

$$v_\perp = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}, \quad v_\parallel = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}.$$

В то же время сами скорости выражаются через адиабатические константы упругой жесткости как

$$v_\perp = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}, \quad v_\parallel = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}.$$

Поскольку при распространении звука в твердом теле перенос тепла не наблюдается, то коэффициенты Ляме являются адиабатическими величинами, т.е. $\lambda = \lambda_S$, $\mu = \mu_S$. В этом контексте адиабатические термодинамические упругие модули сплошной среды могут быть представлены в виде

$$K_S = \lambda_S + \frac{2}{3}\mu_S, \quad G_S = \mu_S.$$

Поэтому и скорости должны быть записаны как

$$v_\perp = \sqrt{\frac{G_S}{\rho}}, \quad v_\parallel = \sqrt{\frac{K_S + (4/3)G_S}{\rho}}.$$

А поскольку, с другой стороны, термодинамические упругие модули выражаются через коэффициенты жесткости в виде

$$K_S = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}, \quad G_S = \frac{C_{11} - C_{12}}{2},$$

именно для изотропной среды выполняются соотношения

$$v_\perp = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}},$$

$$v_{\parallel} = \sqrt{\frac{K_S + (4/3)G_S}{\rho}} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}\,.$$

Иными словами, в этом случае параметр анизотропии

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = 1\,.$$

В свете вышеизложенного средняя квадратическая скорость распространения упругих волн в твердом теле выражается через термодинамические упругие модули следующим образом:

$$\overline{v}^2 = \frac{K_S + (10/3)G_S}{3\rho}\,,$$

а в терминах констант упругой жесткости – как

$$\overline{v}^2 = \frac{2C_{11} - C_{12}}{3} = \frac{C_{11} + 2C_{44}}{3}\,.$$

Кроме этого, отметим, что приближение центрального взаимодействия между структурными элементами кристалла условно выполняется только для щелочно-галоидных соединений. Даже для металлов $C_{12} \neq C_{44}$.

Интересно было бы сравнить константы анизотропии, а также отклонения отношений C_{11}/C_{44} и $1/A$ от единицы для различных кристаллов кубической симметрии с целью выявить связанные с этим особенности термодинамической устойчивости фазы.

Выводы. Определена связь между параметрами комплексного ангармонизма системы и скоростями распространения звука в твердом теле. Показано влияние звуковых волн на термодинамическую устойчивость фазового состояния системы.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1

Связь детерминанта устойчивости с термодинамическими коэффициентами, выраженными через параметры комплексного ангармонизма

Следуя авторам [8–10], детерминант устойчивости фазового состояния изотропной среды в терминах ангармонизма и термодинамики можно записать как

$$D_y = \frac{1}{V^2} \cdot \frac{\gamma_G}{\alpha_P} = \frac{T}{V} \cdot \frac{K_S}{C_P}\,. \tag{П1.1}$$

Взаимосвязь параметров, входящих в (П1.1), имеет вид [9,10]:

$$C_P = C_V\left(1 + T\gamma_G\alpha_P\right),$$
$$K_S = K_T\left(1 + T\gamma_G\alpha_P\right),$$
$$K_S = \frac{C_P}{V}\cdot\frac{\gamma_G}{\alpha_P}, \tag{П1.2}$$
$$C_V = TV\frac{\alpha_P^2 K_T^2}{K_S - K_T},$$
$$C_P = TV\frac{\alpha_P^2 K_T K_S}{K_S - K_T}.$$

Согласно теории упругости [1–6] в силу анизотропии среды в ней могут распространяться продольные и поперечные волны, характеризующиеся разными групповыми скоростями, которые могут быть выражены как через коэффициенты Ляме, так и через соответствующие модули упругости, а именно:

$$\rho v_\perp^2 = G = \mu, \tag{П1.3}$$

$$\rho v_\parallel^2 = k_S + \frac{4}{3}G = \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right) + \frac{4}{3}\mu = \lambda + 2\mu. \tag{П1.4}$$

Здесь $\rho = N/V$ – концентрация; $k_S = -\left(\partial P/\partial V\right)_S$ – адиабатический модуль упругости; G – сдвиговая компонента упругих сил; λ, μ – коэффициенты Ляме.

Из (П1.3) и (П1.4) определяем удельный адиабатический модуль всестороннего сжатия в виде

$$K_S = v_\parallel^2 - \frac{4}{3}v_\perp^2. \tag{П1.5}$$

Заметим, что в приближении изотропной среды

$$v_\parallel = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}, \quad v_\perp = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}. \tag{П1.6}$$

Средняя скорость звуковой волны в изотропной среде может быть определена как [12]:

$$\bar{v}^2 = \frac{3}{2}\cdot\frac{C_P}{\alpha_P}. \tag{П1.7}$$

В то же время в физической акустике кристаллов кубической симметрии так же, как и в изотропном случае, выполняется соотношение (см. прил. 3):

$$\bar{v}^2 = \frac{v_\parallel^2 + 2v_\perp^2}{3}. \tag{П1.8}$$

Исходя из соотношения Грюнайзена

$$\gamma_G = V\alpha_P\frac{K_T}{C_V} = V\alpha_P\frac{K_S}{C_P} \tag{П1.9}$$

и равенств (П1.5)–(П1.8), получаем связь параметров комплексного ангармонизма с акустическими величинами:

$$\alpha_P = \frac{9}{2}\cdot\frac{C_P}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2}, \tag{П1.10}$$

$$\gamma_{\mathrm{G}} = \frac{9}{2}V\,\frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2}. \tag{П1.11}$$

При выводе детерминанта устойчивости из вышеприведенных формул, даже несмотря на учет анизотропии, применима формула (П1.1) для изотропной среды. В результате будем иметь

$$D_y = \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{VC_P}. \tag{П1.12}$$

Отметим, что для кристаллов кубической симметрии параметров Грюнайзена в принципе должно быть не менее двух, поскольку скорости продольных и поперечных звуковых волн различны (см. (П1.6), а также [1–6]).

В этом контексте можно определить константу анизотропии [3–6] в виде

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{12} - C_{11}}. \tag{П1.13}$$

Данная константа может быть выражена и другими способами (см. прил. 3).

Наконец, величины в знаменателе формулы (П1.12) могут быть выражены через параметры ангармонизма

$$V = V_0\left(1 + \alpha_P T\right),$$

$$C_P = C_V\left(1 + \gamma_{\mathrm{G}}\alpha_P T\right),$$

что позволяет преобразовать (П1.12) к виду

$$D_y = \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{V_0 C_V (1 + \alpha_P T)(1 + \gamma_{\mathrm{G}}\alpha_P T)}. \tag{П1.14}$$

Данное выражение можно преобразовать к форме, в которую будут входить цепные дроби.

В частном случае выражения (П1.14), когда параметр Грюнайзена зависит только от квадратов скоростей продольных и поперечных волн по формуле (1.11), а коэффициент расширения – по формуле (1.14) при условии постоянства удельной массы вещества, получаем равенство (2.5).

Приложение 2

Аспекты теории упруго деформированного состояния конденсированной среды

Элементы теории упруго деформированного состояния континуума. Основываясь на постулатах описания механических и термодинамических свойств сплошной среды, теории упругости твердого тела, динамики кристаллической решетки в длинноволновом приближении, локальную деформацию среды (смещения ее точек) и силы, вызывающие такую деформацию, в обобщенной форме описывают посредством взаимных тензоров деформации и напряжения [1,4–6]:

$$\varepsilon_{ik} = S_{iklm}\sigma_{lm}, \tag{П2.1}$$

$$\sigma_{ik} = C_{iklm}\varepsilon_{lm}. \tag{П2.2}$$

Динамические свойства сплошной среды, упругие колебания, являющиеся предельным случаем теории колебаний кристаллической решетки твердого тела (когда учитывается ее атомная структура), т.е. приближением длинных волн, можно описать посредством уравнения

$$\frac{\partial\sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = \rho\ddot{x}_i. \tag{П2.3}$$

Такая форма записи является координатным представлением, где второй член характеризует объемные силы, а правая часть – ускорение. Очевидно что уравнение статики следует из (П2.3), когда правая часть равна нулю.

В равенстве (П2.1) фигурирует тензор деформации

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial x_k} + \frac{\partial\varepsilon_k}{\partial x_i} + \frac{\partial\varepsilon_l}{\partial x_i}\frac{\partial\varepsilon_l}{\partial x_k}\right), \tag{П2.4}$$

который в линейном приближении (при выполнении закона Гука) принимает вид

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial x_k} + \frac{\partial\varepsilon_k}{\partial x_i}\right). \tag{П2.5}$$

Во избежание недоразумений отметим, что зачастую в литературе используются более традиционные обозначения: смещения ε_i обозначаются как u_i, а тензор деформации – как u_{ik}.

Можно показать, что изменение элементарного объема $\mathrm{d}V = \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3 \equiv \equiv \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ в результате деформации, когда координаты точки пространства изменяются соответственно как

$$x' = x + u_x(x, y, z) \equiv x_1 + u_1(x_1, x_2, x_3) = x_1',$$

$$y' = y + u_y(x, y, z) \equiv x_2 + u_2(x_1, x_2, x_3) = x_2',$$

$$z' = z + u_z(x, y, z) \equiv x_3 + u_3(x_1, x_2, x_3) = x_3',$$

определяется по формуле

$$\mathrm{d}V'(x', y', z') = \frac{\partial(x', y', z')}{\partial(x, y, z)} \mathrm{d}V(x, y, z),$$

в которой якобиан перехода в линейном приближении по производным вектора смещения имеет вид

$$1 + \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 1 + \mathrm{div}(\mathbf{u}).$$

Иными словами, в таком приближении якобиан будет равен следу матрицы преобразований от одних координат к другим.

Таким образом, мы показали, что физически бесконечно малые объемы среды до и после деформации связаны соотношением

$$\mathrm{d}V' = \left(1 + \mathrm{div}(\mathbf{u})\right)\mathrm{d}V.$$

В равенстве (П2.1) присутствует величина S_{iklm} – тензор податливости среды, имеющий в общем случае 81 компоненту. Число независимых компонент такого тензора определяется симметрией задачи.

Следовательно, если к единице объема сплошной упругой среды (или твердого тела) приложены произвольные однородные напряжения (т.е. силы) σ_{ik}, то движение такого объема описывается уравнением (П2.2). Это означает, что связь упомянутого тензора с тензором деформации определяется тензором упругих констант среды (кристалла) C_{iklm}, симметрия которого такая же, как и у тензора податливости. Из симметрии $\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ki}$ и $\sigma_{lm} = \sigma_{ml}$ следует $S_{iklm} = S_{kilm}$, $S_{iklm} = S_{ikml}$, $C_{iklm} = C_{kilm}$, $C_{iklm} = C_{ikml}$, и, значит, число независимых компонент тензоров S и C уменьшается до 36.

Компактность записи уравнений деформации сплошной среды достигается путем введения следующих обозначений для компонент тензоров упругости: $\sigma_1 \equiv \sigma_{11}$, $\sigma_2 \equiv \sigma_{22}$, $\sigma_3 \equiv \sigma_{33}$, $\sigma_4 \equiv \sigma_{23} \equiv \sigma_{32}$, $\sigma_5 \equiv \sigma_{13} \equiv \sigma_{31}$, $\sigma_6 \equiv \sigma_{12} \equiv \sigma_{21}$. Для компонент тензоров деформации компактность записи достигается аналогично.

Таким образом, после обозначения пар индексов как $(i, k) = p$, $(l, m) = q$ соответствующие уравнения будут содержать меньшее число индексов с учетом того, что каждый индекс пары (p, q) будет пробегать значения 1, …, 6. Следовательно, равенства (П2.1) и (П2.2) примут вид

$$\varepsilon_p = S_{pq}\sigma_q, \tag{П2.6}$$

$$\sigma_p = C_{pq}\varepsilon_q. \tag{П2.7}$$

Очевидно, взаимно обратные матрицы S_{pq} и C_{pq} удовлетворяют условию

$$S_{pq}C_{qr} = C_{pq}S_{qr} = \delta_{pr}. \tag{П2.8}$$

Кроме того, выполняются условия симметрии

$$S_{pq} = S_{qp}, \quad C_{pq} = C_{qp}, \tag{П2.9}$$

которые уменьшают число независимых компонент в этих тензорах до 21.

Рассмотрим наиболее простые деформации однородного и изотропного типа. В случае равномерного простого сжатия/растяжения выделенного объема тела (или стержня) связь между компонентами тензоров деформации и напряжения сводится к соотношениям [1]:

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = -\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2G} - \frac{1}{3K_T}\right)\sigma_{33}, \tag{П2.10}$$

$$\varepsilon_{33} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{3K_T} + \frac{1}{G}\right)\sigma_{33}. \tag{П2.11}$$

Компоненты ε_{11} и ε_{22} определяют относительное сжатие стержня в поперечном направлении вдоль осей x и y соответственно. В то же время компонента ε_{33} характеризует относительное удлинение стержня вдоль оси z.

Обратную величину коэффициента при σ_{33} в (П2.11) называют модулем нормальной упругости или модулем Юнга при изотермическом процессе E_T вещества:

$$\sigma_{33} = E_T\varepsilon_{33}, \tag{П2.12}$$

где

$$E_T = \frac{9K_TG}{G + 3K_T}. \tag{П2.13}$$

Отношение поперечного сжатия к продольному растяжению, называемое коэффициентом Пуассона, есть величина

$$v = -\frac{\varepsilon_{11}}{\varepsilon_{33}} = \frac{1}{2}\cdot\frac{3K_T - 2G}{3K_T + G}. \tag{П2.14}$$

Поскольку модули $K_T > 0$ и $G \geq 0$, то коэффициент Пуассона может изменяться в пределах $-1 \leq v \leq 1/2$ ($v \to -1$ при $K_T \to 0$ и $v \to 1/2$ при $G = 0$). Фактически для известных веществ $0 \leq v \leq 1/2$. Вещества с отрицательными значениями коэффициента Пуассона, т.е. тела, испытывающие увеличение поперечных размеров при продольном растяжении, пока не обнаружены.

Обращая формулы (П2.13) и (П2.14), получаем соотношения, выражающие упругие модули K_T и G через модуль Юнга и коэффициент Пуасссона:

$$G = \frac{E_T}{2(1+\nu)}, \quad K_T = \frac{E_T}{3(1-2\nu)}. \tag{П2.15}$$

Простейший случай применения вышеприведенных формул относится к рассмотрению изменения объема стержня при его растяжении. Тогда сумма диагональных компонент (след) тензора деформации, отражающая относительное изменение удельного объема, записывается как

$$\varepsilon_{ii} = \frac{\mathrm{d}V' - \mathrm{d}V}{\mathrm{d}V} = \frac{\sigma_{33}}{3K_T}. \tag{П2.16}$$

Кроме этого, имеет место равенство (П2.12).

Некоторые аспекты термодинамики упруго деформированного тела. Процессы деформирования с термодинамических позиций разобьем на два случая: изотермические (независимыми термодинамическими переменными являются T и V) и адиабатические (независимые переменные S и V). При этом в изотермическом варианте постоянство температуры подразумевается не локальным, а по всему объему тела.

В то же время, рассматривая деформации, которые сопровождаются изменением температуры, следует учитывать, что такое изменение может происходить и в результате самого процесса деформации, и по другим причинам (например, вследствие внешних факторов).

Подчеркнем, что адиабатическими являются такие деформации, при которых не происходит теплового обмена как между различными участками самого тела, так и между телом и окружающей средой.

В общем случае тензор напряжений σ_{ij} в термодинамике сплошной среды [1,3] определяется исходя из положения, что компоненты силы, действующей на элемент поверхности $\mathrm{d}S$ выделенного кубического элементарного объема, пропорциональна $n_i\mathrm{d}S$, и таким образом сила (после суммирования по компонентам) равна $\sigma_{ij}n_i\mathrm{d}S$. При этом сила, действующая, например, на грань $\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ строго в направлении оси x элемента объема $\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$, будет равна $\sigma_{11}\mathrm{d}y\mathrm{d}z$. В то же время сила, действующая на такую же площадку, но по касательной к ней вдоль оси y, будет иметь вид $\sigma_{12}\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ и т.д. Легко показать, что на элемент объема $\mathrm{d}\Omega$ действует сила $(\partial\sigma_{ij}/\partial x_i)\mathrm{d}\Omega$. Таким образом, согласно закону Гука, связывающему напряжения с деформациями, можно записать

$$\sigma_{ij} = \lambda\varepsilon_{ll}\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij}. \tag{П2.17}$$

Здесь λ и μ – это коэффициенты Ляме, характеризующие физические свойства среды. Они определяют модуль сдвига среды $G = \mu$ и модуль всестороннего сжатия $K = \lambda + 2\mu/3$. Подчеркнем, что в зависимости от типа процесса как коэффициенты Ляме, так и упругие модули имеют разный физический смысл.

Любую деформацию твердого тела можно представить в виде комбинации чистого сдвига и всестороннего сжатия, тем самым представив тензор деформации в виде

$$\varepsilon_{ik} = \left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\varepsilon_{ll}\right) + \frac{1}{3}\delta_{ik}\varepsilon_{ll}. \tag{П2.18}$$

Известно, что свободную энергию, отнесенную к единице объема, разложенную в ряд по степеням тензора деформации, с точностью до членов второго порядка малости можно записать, с одной стороны, опираясь на коэффициенты Ляме

$$F(T) = F_0(T) + \frac{\lambda}{2}\varepsilon_{ii}^2 + \mu\varepsilon_{ik}^2, \tag{П2.19}$$

а с другой – через модули упругости непрерывной среды

$$F(T) = F_0(T) + \frac{K_T}{2}\varepsilon_{ii}^2 + G_T\left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\varepsilon_{ll}\right)^2. \tag{П2.20}$$

Таким образом, коэффициенты Ляме и модули упругости связаны соотношениями

$$G_T = \mu, \quad K_T = \lambda + \frac{2}{3}\mu. \tag{П2.21}$$

Поскольку при изучении деформаций среды следует различать изотермический и адиабатический случаи, то, как и в термодинамике, должны существовать соответствующие коэффициенты Ляме (аналогично модулям упругости).

В контексте вышесказанного обычно считается, что в адиабатическом случае при отсутствии внешних сил тело при определенной температуре T_0 рассматривается как недеформированное. В последующем при нагревании наблюдается изменение объема тела, т.е. деформация. Таким образом, даже в отсутствии внешних сил тело может деформироваться. Поэтому в разложение свободной энергии в общем случае должны входить не только квадратичные, но и линейные деформационные члены. Отсюда следует, что в адиабатическом случае для свободной энергии нужно использовать такие формулы:

$$F(T) = F_0(T) - K_S\alpha_P(T - T_0)\varepsilon_{ii} + \frac{K_S}{2}\varepsilon_{ii}^2 + G_S\left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\varepsilon_{ll}\right)^2. \tag{П2.22}$$

Здесь присутствует очевидная связь

$$S(T) = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = S(T_0) + K_S\alpha_P\varepsilon_{ll}. \tag{П2.23}$$

Используя формулы, определяющие тензор напряжений

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial\varepsilon_{ik}}\right)_T = \left(\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_{ik}}\right)_S, \tag{П2.24}$$

где, с одной стороны, внутренняя энергия $U = F + TS = F - T(\partial F / \partial T)_V$, а с другой –

$$U = \frac{K_S}{2}\varepsilon_{ll}^2 + G_S\left(\varepsilon_{ik} - \frac{1}{3}\varepsilon_{ll}\delta_{ik}\right)^2, \tag{П2.25}$$

приходим к выводу, что упругие модули удовлетворяют условиям

$$G_S = G_T, \quad K_S \neq K_T. \tag{П2.26}$$

В этом контексте должны различаться и коэффициенты Ляме:

$$\mu_S = \mu_T, \quad \lambda_S \neq \lambda_T. \tag{П2.27}$$

Свяжем коэффициенты Ляме с параметрами комплексного ангармонизма. Учитывая, что

$$K_S = K_T\left(1 + \gamma_{\mathrm{G}}\alpha_P T\right),$$

а, кроме того,

$$K_T = \lambda_T + \frac{2}{3}\mu_T, \quad K_S = \lambda_S + \frac{2}{3}\mu_S,$$

после несложных преобразований получаем связь

$$\lambda_S = \lambda_T\left(1 + \gamma_G\alpha_P T\right) + \frac{2}{3}\mu_T\left(\frac{1}{3} + \gamma_G\alpha_P T\right), \tag{П2.28}$$

или, выражая λ_S через упругие модули,

$$\lambda_S = \lambda_T\frac{K_S}{K_T} + \frac{2}{3}\mu_T\left(-\frac{2}{3} + \frac{K_S}{K_T}\right). \tag{П2.29}$$

Таким образом, из анализа описания однородной деформации мы видим, что изотермический и адиабатический случаи существенно отличаются. При этом параметры, характеризующие сдвиговую и изотропную деформации, удовлетворяют первому из соотношений (П2.26), в то время как коэффициенты Пуассона и Юнга для этих случаев различны.

В частности, согласно [1] имеется следующая связь:

$$E_S = E_T \Big/ \left(1 - E_T\frac{T\alpha_P^2}{9C_P}\right), \tag{П2.30}$$

$$\nu_S = \left(\nu_T + E_T\frac{T\alpha_P^2}{9C_P}\right) \Big/ \left(1 - E_T\frac{T\alpha_P^2}{9C_P}\right). \tag{П2.31}$$

С другой стороны, модули Юнга и соответствующие коэффициенты Пуассона, исходя из определений (П2.13) и (П2.14), а также (П2.21), могут быть выражены друг через друга. Так, если из соотношения

$$E_{S(T)} = \frac{9K_{S(T)}G_{S(T)}}{G_{S(T)} + 3K_{S(T)}}$$

выразить $G_{T(S)}$ и подставить ее в равенство

$$\nu_{S(T)} = \frac{1}{2}\cdot\frac{3K_{S(T)} - 2G_{S(T)}}{G_{S(T)} + 3K_{S(T)}},$$

то получим следующую связь:

$$\nu_{S(T)} = \frac{1}{2} \cdot \frac{3K_{S(T)} - E_{S(T)}}{3K_{S(T)}} . \qquad (П2.32)$$

Здесь индексы принимают значения *S* или *T*.

Обратив равенство (П2.32), получим связь

$$E_{S(T)} = \frac{3K_{S(T)}}{1 + 6K_{S(T)}\nu_{S(T)}} . \qquad (П2.33)$$

Заметим, что эти же параметры могут быть выражены и через коэффициенты Ляме:

$$E_{S(T)} = \frac{3\mu_{S(T)}\left\{\lambda_{S(T)} + (2/3)\mu_{S(T)}\right\}}{\lambda_{S(T)} + \mu_{S(T)}}, \qquad (П2.34)$$

$$\nu_{S(T)} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\lambda_{S(T)}}{\lambda_{S(T)} + \mu_{S(T)}} . \qquad (П2.35)$$

Кроме того, модули Юнга и коэффициенты Пуассона можно выразить через параметры комплексного ангармонизма и через соответствующие компоненты скорости звуковой волны в твердом теле. Например, поскольку для коэффициентов Ляме выполняются равенства $\mu_S = v_\perp^2\rho$ и $\lambda_S + 2\mu_S = v_\parallel^2\rho$, то согласно (П2.35)

$$\nu_S = \frac{1}{2} \cdot \frac{v_\parallel^2 - 2v_\perp^2}{v_\parallel^2 - v_\perp^2} . \qquad (П2.36)$$

Также соответствующие скорости в (П2.36) можно выразить (используя соотношения (1.9) и (1.10)) через параметры ангармонизма, а именно через отношения C_P/α_P и γ_G/V .

Приложение 3

Аспекты распространения упругих волн в твердом теле

Распространение упругих волн в континууме. Согласно закону Гука, связь между напряжениями и деформациями является линейной (с использованием коэффициентов Ляме) [1,3]:

$$\sigma_{ij} = \lambda\varepsilon_{ii}\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij} , \qquad (П3.1)$$

где тензор деформаций выражается через компоненты вектора смещений следующим образом:

$$\varepsilon_{ij} \equiv u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right). \qquad (П3.2)$$

Подставляя равенство (П3.1) в уравнение движения элемента объема упругой среды

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i}, \quad (\text{П}3.3)$$

после определенных преобразований получаем волновое уравнение

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = (\lambda + \mu)\nabla \mathrm{div}(\mathbf{u}) + \mu \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{П}3.4)$$

которое при учете связи (верной для произвольного вектора **a**)

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla \times [\nabla \times \mathbf{a}] = \Delta \mathbf{a}$$

приобретает вид

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = (\lambda + 2\mu)\mathrm{graddiv}(\mathbf{u}) - \mu \mathrm{rotrot}(\mathbf{u}). \quad (\text{П}3.5)$$

Выясним характер упругих волн. Пусть векторное поле смещений имеет вид

$$\mathbf{u} = \mathrm{grad}(\varphi).$$

Тогда из равенства (П3.5) получаем уравнение вида

$$\rho \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = (\lambda + 2\mu)\Delta\varphi. \quad (\text{П}3.6)$$

Данное соотношение представляет собой не что иное, как волновое уравнение, характеризующее распространение продольной волны

$$\Delta\varphi = \frac{1}{v_{\parallel}^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}, \quad (\text{П}3.7)$$

распространяющейся со скоростью, квадрат которой равен

$$v_{\perp}^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho}. \quad (\text{П}3.8)$$

Если положить $\mathbf{u} = \mathrm{rot}\mathbf{A}$, то из (П3.5) получим соотношение

$$-\mathrm{rotrot}\mathbf{A} = \frac{1}{v_{\perp}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2},$$

из которого при выборе калибровки $\mathrm{div}\mathbf{A} = 0$ следует уравнение для поперечных волн вида

$$\Delta\mathbf{A} = \frac{1}{v_{\perp}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2}, \quad (\text{П}3.9)$$

где

$$v_{\perp}^2 = \frac{\mu}{\rho}. \quad (\text{П}3.10)$$

Развернутое представление о характеристиках упругих волн в сплошной среде получим, подставляя в линейное дифференциальное уравнение (П3.4) вектор смещения в виде плоской волны:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \mathrm{e}^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}. \tag{П3.11}$$

Здесь $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, k_z) \equiv (k_1, k_2, k_3)$ – волновой вектор, ω – частота, а $\mathbf{u}^{(0)} \equiv \equiv (u_{0x}, u_{0y}, u_{0z}) \equiv (u_{0,1}, u_{0,2}, u_{0,3})$ – амплитуда такой волны. При этом дисперсионное соотношение, связывающее частоту ω, фазовую скорость v и модуль волнового вектора $k = |\mathbf{k}| = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ (где λ – длина волны), имеет вид

$$\omega = kv. \tag{П3.12}$$

Учитывая очевидные равенства

$$\begin{aligned}
&\partial\mathbf{u} / \partial t = -i\omega\mathbf{u},\\
&\partial^2\mathbf{u} / \partial t^2 = -\omega^2\mathbf{u},\\
&\mathrm{div}(\mathbf{u}) \equiv \partial u_x / \partial x + \partial u_y / \partial y + \partial u_z / \partial z = i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}),\\
&\mathrm{grad}(\mathrm{div}(\mathbf{u})) = -\mathbf{u}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}),\\
&\Delta\mathbf{u} = -k^2\mathbf{u},\\
&\mathrm{rot}(\mathbf{u}) = i[\mathbf{k}\times\mathbf{u}],
\end{aligned} \tag{П3.13}$$

после подстановки (П3.11) в (П3.4) находим уравнение для определения компонент вектора смещения

$$\begin{aligned}
\rho\omega^2 u_x^{(0)} &= (\lambda+\mu) k_x \left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}^{(0)}\right) + \mu k^2 u_x^{(0)},\\
\rho\omega^2 u_y^{(0)} &= (\lambda+\mu) k_y \left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}^{(0)}\right) + \mu k^2 u_y^{(0)},\\
\rho\omega^2 u_z^{(0)} &= (\lambda+\mu) k_z \left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}^{(0)}\right) + \mu k^2 u_z^{(0)}.
\end{aligned} \tag{П3.14}$$

Для упрощения задачи выберем ось Z в направлении распространения волны (т.е. $\mathbf{k} \parallel OZ$). Другими словами, $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$ и $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k_z^2$. В этом варианте система уравнений (П3.14) принимает вид

$$\begin{aligned}
\rho\omega^2 u_x^{(0)} &= \mu k^2 u_x^{(0)},\\
\rho\omega^2 u_y^{(0)} &= \mu k^2 u_y^{(0)},\\
\rho\omega^2 u_z^{(0)} &= (\lambda+2\mu) k^2 u_z^{(0)}.
\end{aligned} \tag{П3.15}$$

Из (П3.15) можно сделать вывод, что в упругой непрерывной среде возможно распространение трех волн:

1) $u_x^{(0)} \neq 0$, $u_y^{(0)} = 0$, $u_z^{(0)} = 0$ с дисперсионным соотношением $\omega^2 = (\mu/\rho)k^2$ и соответственно скоростью распространения волны (поперечной, см. ниже):

$$v_{\perp}^{(1)} = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}\,; \tag{П3.16}$$

2) $u_x^{(0)} = 0$, $u_y^{(0)} \neq 0$, $u_z^{(0)} = 0$ с таким же дисперсионным соотношением $\omega^2 = (\mu/\rho)k^2$ и такой же скоростью распространения волны (также поперечной, см. ниже):

$$v_{\perp}^{(2)} = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}\,; \tag{П3.17}$$

3) $u_x^{(0)} = 0$, $u_y^{(0)} = 0$, $u_z^{(0)} \neq 0$ с другим дисперсионным соотношением $\omega^2 = (\lambda + 2\mu/\rho)k^2$ и соответственно иной скоростью распространения волны (продольной, см. ниже):

$$v_{\parallel}^{(3)} = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}\,. \tag{П3.18}$$

Поскольку

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}) = i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^{(0)})\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)},$$

если $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$, то как при $\mathbf{u}^{(0)} = (u_x^{(0)}, 0, 0)$, так и при $\mathbf{u}^{(0)} = (0, u_y^{(0)}, 0)$ имеем $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}) = 0$ или $\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$, что говорит об отсутствии изменения объема среды. Тем самым показано, что типы волн 1 и 2 являются поперечными.

В то же время для продольной волны (когда $\mathbf{k} \parallel \mathbf{u}^{(0)}$, $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$, $\mathbf{u}^{(0)} = (0, 0, u_z^{(0)})$) $\operatorname{div}(\mathbf{u}) \neq 0$, что соответствует изменению объема среды. Это означает, что распространение таких волн сопровождается сжатием/расширением среды. Следовательно, в изотропном континууме возможно распространение трех типов волн с различной поляризацией, две из которых вырождены.

Упругие волны в кристаллах. Уравнение движения под действием напряжений имеет вид

$$\rho \ddot{u}_i = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad i = 1, 2, 3\,. \tag{П3.19}$$

При условии (см. прил. 1)

$$\sigma_{ij} = \sum_{l,m} C_{ijlm} u_{lm} \tag{П3.20}$$

(где u_{lm} – тензор бесконечно малых деформаций) и с учетом того, что индексы l, m немые, уравнение движения (П3.20) можно переписать в форме

$$\rho \ddot{u}_i = \sum_{j,l,m} C_{ijlm} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_m}\,. \tag{П3.21}$$

Это основополагающее уравнение колебательных процессов в упругой среде.

Поскольку реальные скорости распространения упругих волн таковы, что тепловым обменом можно пренебречь, считается, что коэффициенты данного уравнения (упругие константы C_{ijlm}) – это адиабатические упругие модули. Традиционно решение уравнения будем искать в виде плоской волны $u_i = u_i^{(0)} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr})}$, где, как было обозначено ранее, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ – это волновой вектор упругой волны, нормальный к плоскости постоянной фазы, являющийся аргументом дисперсионного соотношения $\omega = kv$. В данном случае фазовая ω / k и групповая $\partial\omega / \partial k$ скорости совпадают. Учитывая, что $u_i = \sum_l \delta_{il} u_l$, систему уравнений (П3.21) можно переписать в виде

$$\sum_{l=1}^{3} \left\{ \sum_{j,m=1}^{3} C_{ijml} k_j k_m - \rho\omega^2 \delta_{il} \right\} u_l = 0 . \qquad \text{(П3.22)}$$

Вводя обозначение $\sum_{j,m=1}^{3} C_{ijml} k_j k_m \equiv L_{il}$ и учитывая симметрию $L_{il} = L_{li}$, из (П3.22) получаем систему уравнений, определяющую компоненты смещений волны:

$$\begin{cases} \left(L_{11} - \rho\omega^2\right) u_1 + L_{12} u_2 + L_{13} u_3 = 0, \\ L_{12} u_1 + \left(L_{22} - \rho\omega^2\right) u_2 + L_{23} u_3 = 0, \\ L_{13} u_1 + L_{23} u_2 + \left(L_{33} - \rho\omega^2\right) u_3 = 0. \end{cases} \qquad \text{(П3.23)}$$

Поскольку компоненты смещений u_1, u_2, u_3 независимы, нетривиальному решению системы (П3.23) соответствует обращение в нуль детерминанта

$$\begin{vmatrix} L_{11} - \rho\omega^2 & L_{12} & L_{13} \\ L_{12} & L_{22} - \rho\omega^2 & L_{23} \\ L_{13} & L_{23} & L_{33} - \rho\omega^2 \end{vmatrix} = 0 . \qquad \text{(П3.24)}$$

Выражение (П3.24) приводит к кубическому уравнению относительно квадрата частоты соответствующего колебательного процесса.

В общем случае шесть коэффициентов L_{il} имеют вид:

$$\begin{aligned} L_{11} &= C_{11}k_1^2 + C_{66}k_2^2 + C_{55}k_3^2 + 2\left(C_{16}k_1k_2 + C_{15}k_1k_3 + C_{56}k_2k_3\right), \\ L_{22} &= C_{66}k_1^2 + C_{22}k_2^2 + C_{44}k_3^2 + 2\left(C_{26}k_1k_2 + C_{46}k_1k_3 + C_{24}k_2k_3\right), \\ L_{33} &= C_{55}k_1^2 + C_{44}k_2^2 + C_{33}k_3^2 + 2\left(C_{45}k_1k_2 + C_{35}k_1k_3 + C_{34}k_2k_3\right), \\ L_{12} &= C_{16}k_1^2 + C_{26}k_2^2 + C_{46}k_3^2 + \left(C_{12} + C_{66}\right)k_1k_2 + \left(C_{14} + C_{56}\right)k_1k_3 + \left(C_{46} + C_{25}\right)k_2k_3, \\ L_{13} &= C_{15}k_1^2 + C_{46}k_2^2 + C_{35}k_3^2 + \left(C_{14} + C_{56}\right)k_1k_2 + \left(C_{13} + C_{55}\right)k_1k_3 + \left(C_{36} + C_{45}\right)k_2k_3, \\ L_{23} &= C_{56}k_1^2 + C_{24}k_2^2 + C_{34}k_3^2 + \left(C_{46} + C_{25}\right)k_1k_2 + \left(C_{36} + C_{45}\right)k_1k_3 + \left(C_{23} + C_{44}\right)k_2k_3. \end{aligned} \qquad \text{(П3.25)}$$

Применим вышеизложенную теорию к рассмотрению упругих волн в кристаллах кубической симметрии, когда число независимых коэффициентов упругой жесткости сокращается до 3 (см. прил. 1). Тогда из (П3.25) получаем следующие зависимости:

$$\begin{aligned}
&L_{11} = C_{11}k_1^2 + C_{44}k_2^2 + C_{44}k_3^2 \equiv ak_1^2 + C_{44}k^2,\\
&L_{22} = ak_2^2 + C_{44}k^2,\\
&L_{22} = ak_3^2 + C_{44}k^2,\\
&L_{12} = bk_1k_2,\\
&L_{13} = bk_1k_3,\\
&L_{23} = bk_2k_3.
\end{aligned} \tag{П3.26}$$

В (П3.26) введены обозначения

$$\begin{aligned}
a &= C_{11} - C_{44},\\
b &= C_{12} + C_{44}.
\end{aligned} \tag{П3.27}$$

Таким образом, детерминант (П3.24) приобретает вид

$$\begin{vmatrix}
(ak_1^2 + C_{44}k^2) - \rho\omega^2 & bk_1k_2 & bk_1k_3\\
bk_1k_2 & (ak_2^2 + C_{44}k^2) - \rho\omega^2 & bk_2k_3\\
bk_1k_3 & bk_2k_3 & (ak_3^2 + C_{44}k^2) - \rho\omega^2
\end{vmatrix} = 0. \tag{П3.28}$$

Обозначая

$$P = k_1^2k_2^2 + k_1^2k_3^2 + k_2^2k_3^2,$$

$$Q = k_1^2k_2^2k_3^2,$$

$$\Gamma = C_{44}k^2 - \rho\omega^2$$

и используя детерминант (П3.28), приходим к кубическому уравнению

$$\Gamma^3 + ak^2\Gamma^2 + (a^2 - b^2)P\Gamma + (a - b)^2(a + 2b)Q = 0. \tag{П3.29}$$

Рассмотрим характеристики упругих волн для заданных направлений в кристалле. Пусть волновой вектор $\mathbf{k} \parallel [1;0;0]$, т.е. $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3) = (k, 0, 0)$. В этом случае $P = Q = 0$, и уравнение (П3.29) принимает вид

$$\Gamma^2\left(\Gamma + ak^2\right) = 0. \tag{П3.30}$$

Таким образом, согласно (П3.30) определяются 3 решения:

$$\begin{aligned}
&\omega^{(1)} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}k,\\
&\omega^{(2)} = \omega^{(3)} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}k.
\end{aligned} \tag{П3.31}$$

Следовательно, фазовые скорости соответствующих волн равны

$$v^{(1)} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}},$$
$$v^{(2)} = v^{(3)} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}. \tag{П3.32}$$

Подставив частоту $\omega = \omega^{(1)}$ в систему уравнений (П3.23), определим поляризацию волны, удовлетворяющую условию $u_1 = u \neq 0$, $u_2 = u_2 = 0$, что является характеристикой продольной волны, т.е. $v^{(1)} \equiv v_{||}$. Аналогично для волн с частотами $\omega^{(2)}$, $\omega^{(3)}$ убеждаемся, что в этом случае выполняется условие $u_1 = 0$, $u_2 = u_3 \neq 0$, а значит, такая волна будет поперечной, т.е. $v^{(2)} = v^{(3)} = v_{\perp}$. Другими словами, в исследуемом направлении наблюдается вырождение поперечных волн.

Квадрат среднего квадратического этих скоростей есть величина

$$\overline{v}^2 = \frac{(v^{(1)})^2 + (v^{(2)})^2 + (v^{(3)})^2}{3} = \frac{C_{11} + 2C_{44}}{3\rho}. \tag{П3.33}$$

Рассмотрим упругую волну в направлении **k** || [1;0;0], т.е. k = (k_1; k_2, k_3) = $= \left(\frac{k}{\sqrt{2}}, \frac{k}{\sqrt{2}}, 0\right)$. В этом варианте уравнение (П3.29) переходит в

$$\Gamma\left(\Gamma^2 + ak^2\Gamma + \frac{a^2 - b^2}{4}k^2\right) = 0. \tag{П3.34}$$

Решая уравнение (П3.34), находим частоты

$$\omega^{(1)} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}k,$$
$$\omega^{(2)} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}k, \tag{П3.35}$$
$$\omega^{(3)} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}k.$$

Таким образом, в данном направлении в кристалле могут распространяться волны с фазовыми скоростями

$$v^{(1)} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}},$$
$$v^{(2)} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}, \tag{П3.36}$$
$$v^{(3)} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}.$$

Легко показать, что из этих волн одна продольная ($v^{(1)} = v_{\parallel}$) и две поперечные ($v^{(2)} = v_{\perp}^{(1)}$, $v^{(3)} = v_{\perp}^{(2)}$). Легко убедиться, что квадрат среднего квадратического фазовых скоростей в данном случае равен той же величине, что и в предыдущем случае.

Рассмотрение варианта, когда **k** || [1;0;0], т.е. $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3) = \left(\frac{k}{\sqrt{3}}, \frac{k}{\sqrt{3}}, \frac{k}{\sqrt{3}}\right)$, приводит нас к случаю распространения одной продольной волны с частотой

$$\omega^{(1)} = \sqrt{\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho}}k\,, \tag{П3.37}$$

распространяющейся со скоростью

$$v^{(1)} = v_{\parallel} = \sqrt{\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho}}\,, \tag{П3.38}$$

и двух поперечных (вырожденных) волн с частотами

$$\omega^{(2)} = \omega^{(3)} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}}k \tag{П3.39}$$

и скоростями

$$v^{(2)} = v^{(3)} = v_{\perp} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}}\,. \tag{П3.40}$$

Наконец, убеждаемся, что квадрат среднего квадратического указанных скоростей оказывается таким же, как и в предыдущих случаях.

Следовательно, в кристалле кубической симметрии в указанных направлениях могут распространяться три упругие волны, причем в направлениях [1;0;0] и [1;1;1] наблюдается вырождение поперечных волн. При этом квадрат среднего квадратического для данных направлений одинаков. В работе [6] подчеркивается, что независимо от направления распространения волны в кристаллах кубической симметрии квадрат среднего квадратического скорости распространения волн есть величина постоянная.

1. *В.С. Постников*, Физика и химия твердого состояния, Металлургия, Москва (1978).
2. *Л. Жирифалько*, Статистическая физика твердого тела, Мир, Москва (1975).
3. *А. Анималу*, Квантовая теория кристаллических твердых тел, Мир, Москва (1981).
4. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Теория упругости, Наука, Москва (1987).
5. *А.А. Кацнельсон*, Введение в физику твердого тела, Изд-во Моск. ун-та, Москва (1984).
6. *Ч. Киттель*, Введение в физику твердого тела, Наука, Москва (1978).
7. *И.П. Базаров*, Термодинамика, Высшая школа, Москва (1991).
8. *В.В. Шелест, А.В. Христов*, ФТВД **29**, № 4, 73 (2019).
9. *В.В. Шелест, А.В. Христов, Д.А. Червинский*, ФТВД **30**, № 4, 18 (2020).

10. *Д.А. Червинский, А.В. Христов, В.В. Шелест*, V Всероссийская научно-практическая конференция «Информационные и инновационные технологии в науке и образовании» (с международным участием), Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) ФГБОУ ВО «РГЭУ (РИНХ)», 2020.
11. *В.Б. Баскакова, А.В. Головин, М.М. Мартынюк, В.К. Семенченко*, Акустический журнал **11**, 30 (1965).
12. *В.Н. Беломестных*, Письма в ЖЭТФ **30**, вып. 3, 14 (2004).

V.V. Shelest, D.A. Chervinskii, A.V. Hristov

RELATION OF CONDENSED MATTER PHASE STATE STABILITY AND ACOUSTICS

The relation between anharmonical properties of elastically deformed medium and acoustics has been studied. Particularly, analytic relations have been derived that demonstrate interdependence of complex anharmonicity and sound waves in a continuum medium. The relation of the stability determinant and acoustics is found.

Keywords: thermodynamic coefficients, complex anharmonicity, Gruneisen relation and parameter, determinant of thermodynamic stability, sound waves