МЕХАНИКА
ЖИДКОСТИ И ГАЗА
№ 2 · 1987

УДК 532.2:539.311

О НЕУСТОЙЧИВОСТИ РАВНОВЕСИЯ НЕГИДРОСТАТИЧЕСКИ НАПРЯЖЕННОГО ТЕЛА И РАСПЛАВА

ГРИНФЕЛЬД М. А.

Примечательным обстоятельством указанной в [1] неустойчивости границы раздела между негидростатически напряженным упругим телом и расплавом является выражение условий нейтрального равновесия лишь через параметры, характеризующие твердую фазу. Это наводит на мысль, что в основе этой неустойчивости лежит способность упругого тела (при заданном внешнем воздействии) понизить полную энергию за счет перераспределения частиц вещества. В связи с этим здесь дается несколько иной анализ проблемы устойчивости равновесия негидростатически напряженного твердого тела и расплава, позволяющий, в частности, распространить некоторые из полученных ранее результатов на случай анизотропных тел. В основе анализа лежит вопрос о равновесной огранке деформируемого кристалла – это рассмотрение представляется тем более своевременным, что благодаря удивительным свойствам кристаллов гелия [2] обсуждаемые здесь эффекты могут быть предметом экспериментальной проверки.

Рассмотрим простое упругое тело с плотностью свободной энергии на единицу объема вещества в некоторой начальной однородной конфигурации $\varphi(u_{i|j}, \theta)$, используя лагранжево описание сплошной среды. Лагранжевы (материальные) координаты частиц вещества x^i введем с таким расчетом, чтобы в начальной конфигурации координатная система была аффинной. Введем обозначения: $u_i(x)$ — компоненты поля перемещений частиц по базису начальной конфигурации; $|j$ — символ (ковариантного) дифференцирования в начальном базисе; θ — абсолютная температура (в дальнейшем делается предположение о постоянстве температуры в системе и этот параметр не указывается).

Предположим, что на всех гранях кристалла s, кроме одной γ, заданы перемещения U_i° (это предположение делается лишь ради простоты и конкретности — результаты, аналогичные приведенным ниже, могут быть получены практически без изменения рассуждений при любых консервативных воздействиях, в частности, если поверхность s скользит без трения вдоль некоторой жесткой стенки либо часть границы свободна от напряжений и т. д.). Поверхность γ предположим свободной от внешних усилий и допустим возможность миграции частиц вещества вдоль нее.

В отсутствие внешних сил равновесная конфигурация тела может быть описана как стационарная точка функционала полной энергии при фиксированном полном объеме ареала ω рассматриваемого вещества в начальной конфигурации [3]

$$F=\int\limits_\omega d\omega\varphi+\int\limits_\gamma d\gamma\sigma,\qquad \int\limits_\omega d\omega=v^\circ=\mathrm{const}$$

Здесь γ — искомая граница кристалла в начальном ареале; σ — плотность поверхностной энергии на единицу площади границы γ. Согласно доминирующим в настоящее время представлениям (см., например, [4, 5]), поверхностное натяжение играет определяющую роль в формировании равновесной огранки монокристалла. В связи с этим, следуя классическим работам Кюри, Вульфа, Гиббса и др., проблема равновесной формы кристалла решалась на основе минимизации лишь поверхностной части энергии вещества при фиксированном объеме, тогда как роль упругой энергии игнорировалась. В этом вопросе существенное значение имеет анизотропный характер поверхностной энергии, т. е. ее зависимость от ориентации нормали к границе. Поскольку следствия этой зависимости хорошо известны, а основная задача заметки состоит в выявлении роли упругой энергии, в дальнейшем выбирается одна из простейших моделей поверхностного натяжения, когда величина $\sigma=\text{const}$. При этом влияние поверхностного натяжения по-прежнему принципиально, хотя аспекты этого влияния оказываются совершенно иными. Следует также сразу отметить, что выбранная модель поверхностного натяжения верно отражает энергетическую невыгодность интенсивного развития свободной границы, однако величина полной поверхностной энергии зависит лишь от площади в начальной (но не актуальной!) конфигурации — это ведет, в частности, к нарушению лапласовой формулы для избыточного давления под искривленной границей.

Обозначим через $u^i(x, \tau)$, $x^i(\xi^\alpha, \tau)$ однопараметрическое семейство полей перемещений частиц и положений границы γ в начальном ареале. Варьируя функционал $L=F-\Lambda\int\limits_\omega d\omega$ (где Λ — множитель Лагранжа, связанный с ограничением на полный объем), после интегрирования по частям получаем

$$\delta L=-\int\limits_\omega d\omega\varphi_{|j}{}^{ij}a_i+\int\limits_\gamma d\gamma\{\varphi^{ij}n_ja_i+c(\varphi-\sigma b_\alpha{}^\alpha-\Lambda)\}$$

где единичная нормаль n_i, вторая квадратичная форма $b_{\alpha\beta}$ и метрический тензор (с помощью которого осуществляется «жонглирование» поверхностными греческими индексами и определяется ковариантное дифференцирование на поверхности, обозначаемое греческим индексом после точки с запятой) относятся к образу границы γ в начальной конфигурации: $a_i(x)\equiv\partial u_i(x,\ 0)/\partial\tau$, $c(\xi)=n_i(\xi,\ 0)\partial x^i(\xi,\ 0)/\partial\tau$, $\varphi^{ij}\equiv\partial\varphi/\partial u_{i|j}$, $\varphi^{ijkl}\equiv\partial^2\varphi/\partial u_{i|j}\partial u_{k|l}$.

Из условия обращения первой вариации в нуль приходим к следующим уравнениям равновесия:

$$\varphi_{|j}{}^{ij}=0,\quad x\in\omega;\quad \varphi^{ij}n_j=0,\quad x\in\gamma;\quad u_i=U_i^\circ,\ x\in s \tag{1}$$

$$\varphi-\sigma b_\alpha{}^\alpha=\Lambda,\quad x\in\gamma \tag{2}$$

Дополнительное к стандартным уравнениям равновесия (1) условие (2) связано с наличием заранее неизвестной границы γ.

Дифференцируя L по τ дважды, получаем при $\tau=0$ в окрестности равновесной конфигурации следующую формулу второй вариации:

$$\delta^2L=\int\limits_{\omega^\circ}d\omega\varphi^{ijkl}a_{i|j}a_{k|l}+\int\limits_{\gamma^\circ}d\gamma\{-2\varphi^{ij\circ}x_{j\langle\cdot\rangle}^{\langle\cdot\rangle\alpha\circ}c_{;\alpha}a_i-\sigma c(c^{\alpha}_{;\langle\cdot\rangle\alpha}+cb_\beta{}^{\alpha\circ}b_\alpha{}^{\beta\circ})+$$
$$+2n^{k\circ}n_j{}^\circ\varphi_{|k}^{ij\circ}ca_i+c^2n^{j\circ}\varphi_{|j}{}^\circ\},\quad x^j_{\langle\cdot\rangle\alpha}=\partial x^j/\partial\xi^\alpha \tag{3}$$

Здесь индекс градус указывает на принадлежность объекта равновесной конфигурации. Согласно правилам вариационного исчисления [6], необходимым условием минимума энергии F является неотрицательная определенность δ^2L для вариаций положения частиц и границы c, удовлетворяющих условиям

$$a_i=0,\quad x\in s;\quad \int\limits_{\gamma^\circ}d\gamma c=0 \tag{4}$$

В остальном гладкие поля a_i, c произвольны.

Введем специальный класс вариаций. Для этого зададимся на поверхности γ° произвольным полем $c(\xi)$, удовлетворяющим (4), и рассмотрим поле $a_i(x)$, описываемое системой уравнений

$$(\varphi^{ijkl\circ}a_{k|l})_{|j}=0, \quad x\in\omega^\circ; \quad a_i=0, \quad x\in s; \quad \varphi^{ijkl\circ}a_{k|l}n_j^\circ+cn^{k\circ}n_j^\circ\varphi_{|k}^{ij\circ}-$$
$$-\varphi^{ij\circ}x_{j\langle\cdot\rangle}^{\langle\cdot\rangle\alpha\circ}c_{;\alpha}=0, \quad x\in\gamma^\circ \tag{5}$$

Физический смысл уравнений (5) очень прост: удовлетворяющее им поле $a_i(x)$ есть вариация поля упругих перемещений в теле при заданных внешних воздействиях на s, связанная с вариацией свободной границы на величину $c(\xi)$ вдоль нормали $n_i^\circ(\xi)$, другими словами, это уравнения в вариациях к системе (1).

Для полей a_i, c, связанных уравнениями (5), формулу для второй вариации энергии (3) интегрированием по частям приводим к виду

$$\delta^2L\equiv-\int\limits_{\omega^\circ} d\omega\varphi^{ijkl\circ}a_{i|j}a_{k|l}+\int\limits_{\gamma^\circ} d\gamma\{-\sigma c(c_{;\langle\cdot\rangle\alpha}^{\;\alpha}+cb_\beta^{\alpha\circ}b_\alpha^{\beta\circ})+c^2n^{j\circ}\varphi_{|j}^\circ\} \tag{6}$$

В случае, когда поверхностное натяжение обращается в нуль, а рассматриваемое основное равновесное состояние однородно, в соотношении (6) интеграл по свободной поверхности обращается в нуль. Если это однородное состояние к тому же негидростатично, то тензор $\varphi^{ij\circ}x_{j\langle\cdot\rangle}^{\langle\cdot\rangle\alpha\circ}$ не обращается в нуль и при всяком выборе переменного поля $c(\xi)$ соответствующее поле a_i оказывается нетривиальным. Но отсюда можно немедленно получить некоторые следствия, касающиеся неустойчивости указанной конфигурации в случае анизотропного линейно-упругого тела (и неустойчивости тела в этой конфигурации, находящегося в равновесии со своим расплавом, поддерживаемым при нулевом давлении).

Действительно, этим моделям соответствует упругий потенциал $\varphi={}^1/_2c^{ijkl}u_{i|j}u_{k|l}$, причем тензор c^{ijkl} симметричен по первой и второй парам индексов и относительно перестановки этих пар, а квадратичная форма $c^{ijkl}p_{ij}p_{kl}$ положительно определена на множестве симметричных тензоров p_{ij}. Заметим, что в отличие от условия сильной эллиптичности для наблюдаемых в природе веществ последнее условие не является логическим законом, однако выполняется, по-видимому, для всех известных в настоящее время материалов: для изотропных тел оно сводится к положительности модулей сдвига и объемного сжатия, тогда как условие сильной эллиптичности эквивалентно менее жесткому требованию неотрицательности квадратов скоростей продольных и поперечных волн. Но в этом случае выражение второй вариации (6) оказывается отрицательным, что доказывает возможность понижения упругой энергии анизотропного кристалла (и указанной системы кристалл — расплав) за счет перераспределения частиц твердого вещества и, следовательно, неустойчивость рассматриваемой равновесной конфигурации.

Приведенное выше рассуждение не имеет силы в случае однородной негидростатической конфигурации нелинейно-упругого тела, так как в этом случае тензор φ^{ijkl} несимметричен по первой и второй парам индексов и вполне реалистичное предположение о его неотрицательной определенности на множестве симметричных тензоров ничего не дает в смысле оценки знака объемного интеграла в формуле второй вариации (6). Если же основное однородное поле $\overset{\circ}{u}_{i|j}$ имеет порядок $\varepsilon\ll1$, то можно разыскивать решение системы (5) в виде рядов по ε и затем разлагать в ряд по ε вторую вариацию (6). Это разложение будет начинаться с квадратичного члена, отрицательность которого устанавливается аналогично случаю линейно-упругого тела.

При выяснении влияния поверхностного натяжения на устойчивость плоской грани негидростатически напряженного кристалла ограничимся простейшей моделью изотропного линейно-упругого тела, которому соответствует плотность упругой энергии

$$2\varphi=\lambda u^{i}_{\langle\cdot\rangle|i}u^{j}_{\langle\cdot\rangle|j}+2\mu u^{(i\,j)}_{\langle\cdot\rangle|\langle\cdot\rangle}u_{(i|j)}$$

Для рассматриваемой модели вторая вариация в окрестности однородной негидростатически напряженной конфигурации с плоской свободной поверхностью γ° принимает вид

$$\delta^2L=\int\limits_{\omega^{\circ}} d\omega\,(\lambda a^{i}_{\langle\cdot\rangle|i}a^{j}_{\langle\cdot\rangle|j}+2\mu a^{(i\,j)}_{\langle\cdot\rangle|\langle\cdot\rangle}a_{(i|j)})+2\int\limits_{\gamma^{\circ}} d\gamma\left(cp^{ij\circ}a_{i|j}-\frac{\sigma}{2}c^{\alpha}_{;\langle\cdot\rangle\alpha}c\right) \quad (7)$$

$$p^{ij\circ}=\lambda\delta^{ij}u^{k\circ}_{\langle\cdot\rangle|k}+2\mu u^{(i\,j)\circ}_{\langle\cdot\rangle|\langle\cdot\rangle}$$

где $p^{ij\circ}$ — тензор напряжений в равновесной конфигурации.

Найдем экстремальные значения функционала (7) при ограничениях (4) и условии нормировки

$$\int\limits_{\omega^{\circ}} d\omega a^{i}a_{i}=1$$

Варьируя функционал

$$\Pi=\delta^2L-\pi\int\limits_{\omega^{\circ}} d\omega a^{i}a_{i}-2\chi\int\limits_{\gamma^{\circ}} d\gamma c$$

где π, χ — множители Лагранжа, связанные с учетом соответствующих изопериметрических ограничений, приходим к следующим условиям стационарности последнего:

$$(\lambda a^{k}_{\langle\cdot\rangle|k}\delta^{ij}+2\mu a^{(i\,j)}_{\langle\cdot\rangle|\langle\cdot\rangle})_{|j}+\pi a^{i}=0, \qquad x\in\omega^{\circ}; \qquad a^{i}=0, \qquad x\in s \quad (8)$$

$$(\lambda a^{k}_{\langle\cdot\rangle|k}\delta^{ij}+2\mu a^{(i\,j)}_{\langle\cdot\rangle|\langle\cdot\rangle})\,n_j^{\circ}-p^{ik\circ}x^{\langle\cdot\rangle\alpha\circ}_{k\langle\cdot\rangle}\,c_{;\alpha}=0$$

$$p^{ij\circ}a_{i|j}-\sigma c^{\alpha}_{;\langle\cdot\rangle\alpha}=\chi, \qquad x\in\gamma^{\circ}$$

Значения π, при которых линейная однородная система (4), (8) имеет нетривиальные решения, назовем спектральными. Можно показать, что все спектральные значения вещественны и что при подстановке в (7) вещественных спектральных функций, принадлежащих спектральному значению π и удовлетворяющих условию нормировки, вторая вариация полной энергии принимает значение, равное π. Таким образом, наличие в указанном спектре отрицательных собственных значений доказывает неустойчивость системы.

В следующем ниже аналитическом расчете ради простоты рассматривается двумерная ситуация, причем кристалл берется в форме полосы. Ось x^1 направлена вдоль границы кристалла, а x^2 — перпендикулярно ей. Имея в виду проанализировать сконцентрированные вблизи свободной поверхности собственные функции с малой (по сравнению с характерными размерами кристалла) длиной волны $l=2\pi/k$, рассмотрим решения линейной однородной системы следующего вида:

$$a^1=-\left(B_1\frac{ik}{\xi_1}e^{\xi_1x^2}+B_2\frac{i\xi_2}{k}e^{\xi_2x^2}\right)e^{-ikx^1} \quad (9)$$

$$a^2=(B_1e^{\xi_1x^2}+B_2e^{\xi_2x^2})\,e^{-ikx^1}, \qquad c=De^{-ikx^1}$$

$$\xi_1=k^2-\frac{\pi}{\lambda+2\mu}, \qquad \xi_2=k^2-\frac{\pi}{\mu}$$

Функции $a^i(x)$, даваемые соотношениями (9), удовлетворяют уравнениям внутри полосы, а условия обращения в нуль на нижней границе заменяются естественным требованием экспоненциального затухания вглубь. Подставляя решения (9) в граничные условия на свободной поверхности, из условия существования нетривиального решения приходим к следующему безразмерному дисперсионному уравнению для определения π:

$$(2-\pi')^2-4\xi_1'\xi_2'+\Phi\xi_2'\pi'=0, \qquad \pi'\equiv\frac{\pi}{\mu k^2}, \qquad \Phi\equiv\frac{\tau^2}{\mu\sigma k} \tag{10}$$

$$\xi_1'=\frac{1}{k}\sqrt{1-\pi'\frac{\mu}{\lambda+2\mu}}, \qquad \xi_2'=\frac{1}{k}\sqrt{1-\pi'}$$

Здесь $\tau=p^{110}$ (в силу условия равновесия $p^{220}=0$) характеризует негидростатичность поля напряжений. Безразмерный параметр Φ, таким образом, характеризует баланс негидростатичности поля напряжений τ, жесткости тела μ, поверхностного натяжения σ и волнового числа k.

При $\Phi=0$ уравнение (10) переходит в уравнение Рэлея для поверхностной волны и, таким образом, не содержит отрицательных спектральных значений [7]. В случае сжимаемого изотропного тела, раскрывая в (10) неопределенность, приходим к следующей формуле для критического значения безразмерного параметра Φ, при котором вещественный корень π' меняет знак и наступает неустойчивость

$$\Phi_{\text{cr}}=\frac{2(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}.$$

Таким образом, поверхностное натяжение подавляет неустойчивость, порождаемую негидростатическими напряжениями в случае коротковолновых возмущений, однако не может подавить неустойчивость относительно возмущений плоской границы с достаточно большой длиной волны. Такими же обстоятельствами характеризуется неустойчивость плоской границы между негидростатическим твердым телом и его расплавом [1] (причем в последней работе использовалась иная модель поверхностного натяжения, которой соответствует энергия, пропорциональная площади границы в актуальной конфигурации). Использованный подход, основанный на определении знака второй вариации энергии, позволяет утверждать, что подобная неустойчивость имеет место в случае твердого тела любой симметрии.

Автор выражает искреннюю признательность А. Г. Куликовскому за конструктивное обсуждение затронутой здесь проблемы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Гринфельд М. А.* Неустойчивость границы раздела между негидростатически напряженным кристаллом и расплавом // Докл. АН СССР. 1986. Т. 290. № 6. С. 1358–1363.
2. Low temperature physics. M.: Mir Publishers, 1985. 296 p.
3. *Гринфельд М. А.* К построению континуальной теории перекристаллизации в гетерогенных системах // Докл. АН СССР. 1986. Т. 291. № 1. С. 63–67.
4. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1984. 567 с.
5. Современная кристаллография. Т. 3. М.: Наука, 1980. 407 с.
6. *Лаврентьев М., Люстерник Л.* Основы вариационного исчисления. Т. 1, ч. 2. М.–Л.: ОНТИ, 1935. 400 с.
7. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. Т. 2. М.: Наука, 1970. 568 с.

Москва

Поступила в редакцию
23.XII.1985