

Sanditov Damba Sangadievich, doctor of physics and mathematics, professor, department of general physics, Buryat State University. Ulan-Ude, Smolin str., 24a.

Munkueva Svetlana Badmaevna, postgraduate student, department of physical problems, Buryat Scientific Center SB RAS. 670047, Ulan-Ude, Sakhyanova str., 8.

Mashanov Alexey Alexeevich, candidate of engineering, senior lecturer, department of general physics, Buryat State University. Ulan-Ude, Smolin str., 24a.

УДК 534.22; 541.64

НОВЫЙ ПАРАМЕТР ТЕОРИИ УПРУГОСТИ

С.Ш. Сангадиев, Д.З. Батлаев, Д.С. Сандитов

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта БГУ «Лучшая научная школа».

По аналогии со среднеквадратичной скоростью волн деформации вводится новый параметр, который назван усредненным модулем объемного сжатия. Он может оказаться полезным при анализе ангармонизма колебаний решетки деформируемых тел. Обсуждается природа взаимосвязи между ангармонизмом и поперечной деформацией твердых тел.

Ключевые слова: упругие модули, коэффициент Пуассона.

NEW PARAMETER OF THE THEORY OF ELASTICITY

S.Sh. Sangadiev, D.Z. Batlaev, D.S. Sanditov

A new parameter, which was denoted as average module of volume compression, is entered analogously to root-mean-square velocity of deformation waves. It may be useful in the analysis of anharmonicity of lattice fluctuations of deformable bodies. The interrelation between anharmonicity and lateral deformation of solids is discussed.

Keywords: elastic moduli, Poisson's ratio.

Из теории упругости известно, что отношения упругих модулей для изотропных тел являются однозначными функциями коэффициента Пуассона μ

$$\frac{E}{G} = 2(1 + \mu), \quad \frac{B}{G} = \frac{2}{3} \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu} \right) \quad (1)$$

и, кроме того, модуль сдвига G выражается через плотность ρ и квадрат скорости распространения поперечной акустической волны v_s

$$G = \rho v_s^2 \quad (2),$$

где B – изотермический модуль объемного сжатия, E – модуль упругости при одноосной деформации.

В данном сообщении дается представление о возможности введения усредненного модуля упругости всестороннего сжатия M , который обладает такими же общими признаками типа (1) и (2), что и другие упругие модули.

Теоретическая часть

Обратимся к известному понятию о среднеквадратичной скорости волн деформации $\bar{v}$, которая не зависит от направления распространения волны [1, 2],

$$\bar{v} = \left(\frac{C_{11} + 2C_{44}}{3\rho} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

где C_{11} и C_{44} – упругие постоянные.

Из сравнения формулы теории упругости для модуля объемного сжатия

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (4)$$

с соотношением (3), представленным в виде

$$\rho \bar{v}^2 = \frac{C_{11} + 2C_{44}}{3} \quad (5),$$

следует, что при выполнении условий Коши $C_{12} = C_{44}$, когда между однородно деформированными областями кубической решетки действуют центральные силы, величина $\rho \bar{v}^2$ совпадает с модулем объемного сжатия $\rho \bar{v}^2 = B$. Во всех других случаях произведение $\rho \bar{v}^2$ отлично от B . Обозначим это произведение через M

$$M = \rho \bar{v}^{-2} \quad (6)$$

Таким образом, величина M , во-первых, как и упругий модуль сдвига, выражается через плотность и квадрат скорости звука и, во-вторых, при выполнении условий Коши она совпадает с модулем объемного сжатия B .

Убедимся, что отношение B/M так же, как и в случаях других упругих модулей (1), является однозначной функцией коэффициента Пуассона. С этой целью рассмотрим уравнение Леонтьева [2] для параметра Грюнаизена γ_D , характеризующего ангармонизм колебаний решетки и нелинейность силы межатомного взаимодействия,

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left(\frac{B_A}{\rho \bar{v}^2} \right) \quad (7)$$

где B_A – адиабатический модуль объемного сжатия, $\bar{v}$ – среднеквадратичная скорость звука (3), которую можно выразить через скорости продольной (v_L) и поперечной (v_S) звуковых волн [2]

$$\bar{v}^2 = \frac{v_L^2 + 2v_S^2}{3} \quad (8)$$

Преобразовав уравнение Леонтьева (7)

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left(\frac{B_A}{\rho v_S^2} \right) \frac{v_S^2}{\bar{v}^2} = \frac{3}{2} \left(\frac{B_A}{G} \right) \frac{3}{(v_L/v_S)^2 + 2}$$

и используя известные соотношения теории упругости [3]

$$\frac{B}{G} = \frac{2}{3} \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu} \right), \quad \left(\frac{v_L}{v_S} \right)^2 = \left(\frac{2 - 2\mu}{1 - 2\mu} \right)$$

в приближении $B_A \approx B$, приходим к следующей формуле

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left(\frac{1 + \mu}{2 - 3\mu} \right) \quad (9)$$

которая была получена Беломестных и Теслевой [4] из иных исходных посылок (исходя из уравнения Грюнаизена (11)).

Параметр Грюнаизена определяется изменением частоты колебаний решетки ω в зависимости от изменения объема системы

$$\gamma_D = - \frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln V} \quad (10)$$

и обычно вычисляется по уравнению Грюнаизена из экспериментальных данных о коэффициенте объемного теплового расширения β , модуле объемного сжатия B , молярном объеме V и молярной теплоемкости C_V

$$\gamma_D = \frac{\beta B V}{C_V} \quad (11)$$

Данное соотношение выводится из уравнения состояния, а формула Леонтьева (7) получена непосредственно из определения γ_D (10) путем усреднения частоты колебаний решетки и находится в удовлетворительном согласии с уравнением Грюнаизена (11) [2, 4, 5]. При ее выводе использованы известные положения теории упругости, молекулярной акустики и термодинамики [2].

Сравнение выражений (7) и (9) с учетом обозначения (6) приводит к равенству, согласно которому отношение B/M оказывается однозначной функцией коэффициента Пуассона

$$\frac{B}{M} = \frac{1 + \mu}{2 - 3\mu} \quad (12)$$

Обсуждение результатов

Как и следовало ожидать, и для кристаллов [6] (рис. 1), и для стекол [7] (рис. 2) зависимость отношения B/M от $(1+\mu)/(2-3\mu)$ является линейной, причем в соответствии с равенством (12) прямые проходят через начало координат с наклоном, равным единице. Для кристаллических твердых тел использованы данные из обзора Андерсона [6] о величинах B , ρ , v_L , v_S и μ . Модуль объемного сжатия B был вычислен из упругих постоянных C_{ij} , плотности и молярной массы кристаллов. Андерсоном [6] убедительно показано, что применение метода Хилла, основанного на обобщении двух классических

приближений – Фохта и Ройса, приводит к результатам расчета упругих модулей, хорошо согласующимся с экспериментальными данными.

Таким образом, величине $M = \rho v^{-2}$ присущи общие признаки (1) и (2), характерные для упругих модулей. Кроме того, при определенном условии она совпадает с модулем объемного сжатия B . Поэтому на основе полученных выше результатов предлагаем ее называть усредненным модулем объемного сжатия.

Как видно из формулы Леонтьева (7), усредненный модуль объемной упругости M является функцией параметра Грюнайзена и адиабатического модуля объемного сжатия

$$M = \left(\frac{3}{2\gamma_D} \right) B_A. \quad (13)$$

Для ансамбля частиц с центральными силами взаимодействия выполняется условие Коши $M=B_A$, откуда параметр Грюнайзена равен $\gamma_D=1.5$. Согласно уравнению Беломестных-Теслевой (9), данному значению γ_D соответствует коэффициент Пуассона $\mu=0.25$. Эти величины $\gamma_D=1.5$ и $\mu=0.25$ характерны для изотропных веществ с центральными силами взаимодействия частиц (в частности, для ряда квазиизотропных щелочногалоидных кристаллов и стекол).

В таблице 2 приведены данные для кварцевого стекла SiO_2 и натриевосиликатных стекол $\text{Na}_2\text{O-SiO}_2$ [7]. При увеличении содержания окиси натрия Na_2O от 0 до 35 мол.% в стеклах $\text{Na}_2\text{O-SiO}_2$ коэффициент Пуассона и параметр Грюнайзена возрастают соответственно от $\mu=0.17$ и $\gamma_D=1.2$ до значений $\mu=0.25$ и $\gamma_D=1.5$, присущих структурам с центральными силами взаимодействия частиц. Эти данные не противоречат представлению о том, что при увеличении содержания ионов щелочных металлов R^+ (содержания R_2O) в щелочносиликатных стеклах $\text{R}_2\text{O-SiO}_2$ возрастает степень ионности межатомных связей и происходит переход от сеточной структуры с направленными силами межатомного взаимодействия к преимущественно ионной изотропной разветвленной структуре с центральными силами взаимодействия ионов [7].

Поскольку усредненный модуль упругости M зависит от параметра Грюнайзена (13), представляет интерес роль ангармонизма в деформации материалов. Прежде всего в связи с формулой Беломестных-Теслевой (9) возникает вопрос «Почему коэффициент Пуассона (коэффициент поперечной деформации) оказывается однозначной функцией параметра Грюнайзена, который является сугубо нелинейной ангармонической величиной?». Казалось бы, что коэффициент Пуассона как параметр линейной теории упругости не должен быть связан каким-либо образом с нелинейными неупругими свойствами твердых тел. Тем не менее из экспериментальных данных следуют вполне определенные корреляции между величиной μ и пластической деформацией стекол [8], между μ и температурой их размягчения [9], а также между μ и хрупкостью – характеристикой вязкости вблизи температуры стеклования [10]. Взаимосвязь между γ_D и μ в виде (9) находится в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными [4, 5].

Поскольку коэффициент Пуассона определяется деформациями, происходящими во взаимно перпендикулярных направлениях, по-видимому, он выражает своеобразную зависимость μ от интенсивности развития процессов неупругости в реальном деформируемом теле [11].

По теории Кузьменко [12] коэффициент Пуассона характеризует долю энергии сдвига W_s в общей энергии деформирования W :

$$\frac{W_s}{W} = \frac{1 - 3\mu^2 - 3\mu^3}{1 + \mu} \quad (14)$$

Чем больше μ , тем меньше энергия сдвиговых деформаций, тем меньше сопротивление материала сдвигу, тем ближе он в этом отношении к жидкости. Отсюда следует, что коэффициент Пуассона должен быть связан, например, с такой характеристикой неупругости твердого тела, как предел текучести – напряжение σ_y , выше которого наблюдается пластическая деформация.

Материалы с небольшими пределами текучести, т.е. с повышенной мягкостью и пластичностью (золото, серебро, медь), имеют высокие значения μ , приближающиеся к 0.5, а хрупкие твердые тела (бериллий, стекла) характеризуются низкими коэффициентами Пуассона μ . В частности, у кварцевого стекла с высоким пределом текучести имеем $\mu=0.17$ [8].

Таким образом, в рамках теории Кузьменко можно, по крайней мере, качественно попытаться понять наличие определенной связи между коэффициентом Пуассона и пластичностью стекол.

Недавно Пинеда [13] в рамках простейшей модели исследовал влияние структурных изменений на коэффициент Пуассона металлических стекол. С помощью этой модели, на наш взгляд, можно обосновать взаимосвязь между коэффициентом Пуассона и параметром Грюнайзена. Кратко обсудим этот вопрос. Пинеда принимает, что потенциал межатомного взаимодействия состоит из гармонической и ангармонической частей

$$U(r) = a(r - r_0)^2 - b(r - r_0)^3, \quad (15)$$

где a – гармонический, а b – ангармонический коэффициенты, r_0 – межатомное расстояние, соответствующее минимуму потенциала.

Таблица 1

Усредненный модуль упругости и параметр Грюнайзена натриевоалюмосиликатных стекол (использованы данные [7])

№	Состав по синтезу, мол. %			$\rho \cdot 10^{-3}$, кг/м ³	v_L , м/с	v_S , м/с	$B \cdot 10^8$, Па	μ	γ_D	$M \cdot 10^8$, Па
	Na ₂ O	Al ₂ O ₃	SiO ₂							
1	15	0	85	2339	5430	3340	342	0.196	1.28	404
2	15	5	80	2358	5570	3390	370	0.206	1.31	425
3	15	10	75	2410	5697	3510	386	0.194	1.26	459
4	15	15	70	2465	5737	3469	416	0.212	1.34	468
5	15	20	65	2428	5850	3540	425	0.211	1.34	480
6	15	25	60	2472	6000	3568	470	0.226	1.40	506
7	25	0	75	2439	5280	3140	359	0.226	1.40	387
8	25	5	70	2455	5480	3240	394	0.231	1.41	418
9	25	10	65	2461	5610	3330	411	0.228	1.40	440
10	25	15	60	2480	5640	3350	418	0.227	1.39	449
11	25	20	55	2470	5680	3450	405	0.208	1.32	462
12	25	25	50	2499	5790	3490	432	0.215	1.35	482
13	25	30	45	2519	6026	3556	490	0.233	1.43	517
14	35	0	65	2497	5340	3070	398	0.253	1.52	394
15	30	5	65	2486	5500	3200	413	0.244	1.47	420
16	20	15	65	2450	5670	3490	390	0.195	1.28	461
17	17.5	17.5	65	2447	5746	3458	418	0.216	1.35	464

Таблица 2

Характеристики натриевосиликатных стекол (использованы данные [7])

Na ₂ O	SiO ₂	γ_D	$M \cdot 10^8$, Па	μ
0	100	1.20	–	0.170
15	85	1.28	404	0.196
25	75	1.40	387	0.226
35	65	1.52	394	0.253

Модель основана на предположении о Гауссовом распределении расстояний между ближайшими атомами в идеальном однокомпонентном металлическом стекле. Предполагается, что упругие свойства определяются непосредственным окружением атомов – первой координационной сферой.

В окончательные формулы мгновенных модулей объемного сжатия B и сдвига G входят безразмерные параметры

$$s = \frac{\delta}{r_0}, \quad \sigma = \frac{\sigma_1}{r_0}, \quad p = \frac{br_0}{a}, \quad (16)$$

где $\delta = (r_1 - r_0)$, r_1 и σ_1 – средний радиус и ширина первой координационной сферы. Величины s и σ характеризуют отклонения межатомного расстояния от его равновесного значения r_0 и среднюю дисперсию вблизи r_0 соответственно. Параметр p характеризует степень ангармоничности потенциала. Он пропорционален параметру Грюнайзена $\gamma_D = br_0/6a$ [14].

Модель была использована Пинеда для объяснения экспериментов по структурной релаксации и по всестороннему сжатию металлических стекол. В обоих процессах плотность стекла увеличивается,

что приводит к возрастанию упругих модулей. Однако коэффициент Пуассона в результате структурной релаксации уменьшается (снижение параметра σ оказывается сильнее), но увеличивается при сжатии под давлением (здесь эффект уменьшения σ является доминирующим). В целом модель правильно описывает изменения упругих характеристик в этих опытах.

Мы привлекли модель Пинеда для проверки зависимости отношения упругих модулей (B/G) и, следовательно, коэффициента Пуассона μ от параметра ангармоничности p . Из модели следует, что такая зависимость существует. В самом деле, в соответствии с формулами упругие модули B и G пропорциональны гармоническому коэффициенту a – параметру межатомного потенциала, а их отношение B/G (следовательно, и коэффициент Пуассона μ) практически не зависит от a и определяется главным образом параметром ангармоничности p . Отсюда следует зависимость коэффициента Пуассона μ от параметра Грюнайзена γ_D – меры ангармонизма колебаний решетки.

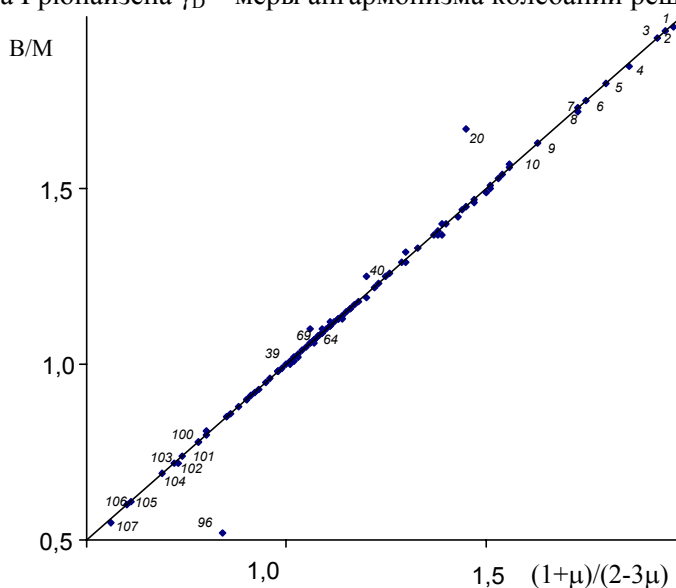


Рис. 1. Зависимость отношения (B/M) от функции коэффициента Пуассона $(1+\mu)/(2-3\mu)$ для кристаллических твердых тел. Использованы данные [6]. 1 – In, 2 – SrSO_4 , 3 – Au, 4 – AgCl, 5 – NaA тартрат, 6 – AgBr, 7 – Na тартрат, 8 – сегнетова соль, 9 – Pd, 10 – CdS, 20 – ZnO, 39 – CsBr, 40 – $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$, 69 – NaBr, 96 – Sr дигидрат, 100 – HIO_3 , 101 – турмалин, 102 – $(\text{CH}_2)_6\text{N}_4$, 103 – Fe_2O_3 , 104 – ZrSiO_4 , 105 – SiO_2 , 106 – алмаз, 107 – Be. Практически для всех 107 кристаллов [6] данные ложатся на одну прямую

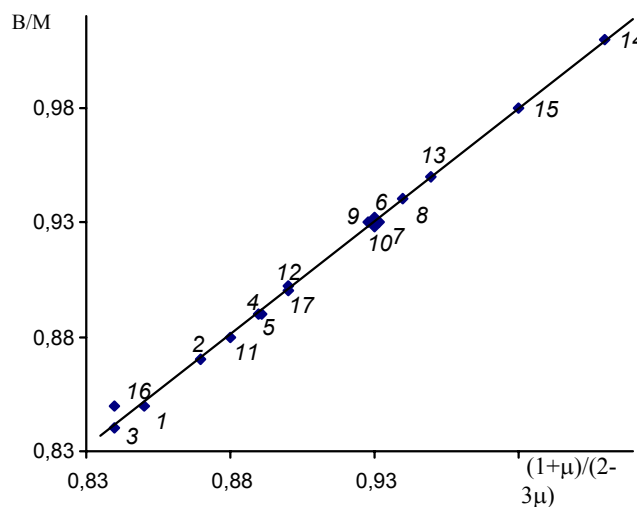


Рис. 2. Зависимость отношения (B/M) от функции коэффициента Пуассона $(1+\mu)/(2-3\mu)$ для натриевоалюмосиликатных стекол (номера точек соответствуют номерам стекол в табл. 1). Использованы данные [7]

Заключение

Произведение плотности на квадрат среднеквадратичной скорости волн деформации обладает свойствами, характерными для упругих модулей. Есть основания для названия этого произведения усредненным модулем объемного сжатия. У стекол существует определенная взаимосвязь между коэффициентом Пуассона и такой нелинейной величиной, как параметр Грюнайзена, что может быть качественно обосновано в рамках модели Пинеда [13]. Наличие у стекол корреляции между коэффициентом Пуассона и нелинейной неупругой величиной – пластической деформацией – можно качественно объяснить с помощью теории Кузьменко [11, 12].

Литература

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Физматгиз, 1962. – 270 с.
2. Леонтьев К.Л. О связи упругих и тепловых свойств веществ // Акуст. журн. – 1981. – Т.27, Вып.4. – С. 554-561.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. 3-е изд. – М.: Наука, 1965. – 204 с.
4. Беломестных В.Н., Теслева Е.П. Взаимосвязь ангармонизма и поперечной деформации квазиизотропных поликристаллических тел // ЖТФ. – 2004. – Т.74, Вып.8. – С. 140-142.
5. Сандитов Д.С., Мантатов В.В., Сандитов Б.Д. Ангармонизм колебаний решетки и поперечная деформация кристаллических и стеклообразных твердых тел // ФТТ. – 2009. – Т.51, Вып.5. – С. 947-951.
6. Anderson O. Determination and certain application isotropic elastic permanent polycrystalline systems, wich obtained from data for monocrystals // Ed. W.P. Mason. Physical Acoustics. V.III. Part B. Lattice Dynamics. – NY-L: Academic. – 1965. – P. 62-121.
7. Лившиц В.Я., Теннисон Д.Г., Гукасян С.Б., Костанян А.К. Акустические и упругие свойства стекол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ // Физика и химия стекла. – 1982. – Т.8, №6. – С. 688-696.
8. Сандитов Д.С., Мантатов В.В., Сандитов Б.Д. Коэффициент Пуассона и пластичность стекол // ЖТФ. – 2009. – Т.79, Вып.4. – С.150-152.
9. Сандитов Б.Д., Дармаев М.В., Сандитов Д.С., Мантатов В.В. Поперечная деформация и температура размягчения стеклообразных материалов // Деформация и разрушение материалов. – 2008. – №4. – С. 18-23.
10. Сандитов Д.С., Машанов А.А., Сандитов Б.Д., Мантатов В.В. Коэффициент поперечной деформации и хрупкость стеклообразных материалов // Деформация и разрушение материалов. – 2008. – №6. – С. 8-11.
11. Кузьменко В.А. Новые схемы деформирования твердых тел. – Киев: Наукова думка, 1973. – 200 с.
12. Кузьменко В.А. Развитие представлений о процессе деформирования материалов. – Киев: Укр. НИИТИ, 1968. – 50 с.
13. Pineda E. Theoretical approach to Poisson ratio behavior during structural changes in metallic glasses // Phys. Rev. – 2006. – V.B73. – P. 104109-1-104109-6.
14. Сандитов Д.С., Козлов Г.В. Ангармонизм межатомных и межмолекулярных связей и физико-механические свойства полимерных стекол // Физика и химия стекла. – 1995. – Т.21, №6. – С. 547-576.

Сангадиев Сергей Шойжинимаевич, кандидат физико-математических наук, доцент, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а, e-mail: sanser@mail.ru

Сандитов Дамба Сангадиевич, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а, e-mail: sanditov@bsu.ru

Батлаев Данзан, аспирант, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Sangadiev Sergey Shojzhinimaevich, candidate of physics and mathematics, associate professor, department of general physics, Buryat State University. Ulan-Ude, Smolin str., 24a.

Sanditov Damba Sangadievich, doctor of physics and mathematics, professor, department of general physics, Buryat State University. Ulan-Ude, Smolin str., 24a.

Batlaev Danzan, postgraduate student, Buryat State University. Ulan-Ude, Smolin str., 24a.

УДК 621.9.048.7:669.15'74

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ БОРИДОВ И КАРБИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ВАКУУМЕ

Т.Б. Ким, В.М. Халтанова, Н.Н. Смирнягина

Рассмотрены особенности образования карбидов хрома и вольфрама при высоких температурах и низком давлении. Термодинамически смоделированы фазовые равновесия, протекающие при восстановлении оксидов переходных металлов углеродом в вакууме.

Ключевые слова: карбиды хрома, синтез в вакууме, термодинамическое моделирование.