

ХРУПКО-ПЛАСТИЧНЫЙ ПЕРЕХОД И АНГАРМОНИЗМ МЕЖАТОМНЫХ КОЛЕБАНИЙ

Беломестных В. Н., Теслева Е. П.

Юргинский технологический институт Национального исследовательского Томского политехнического университета, г. Юрга, Кемеровская область, Россия
tesleva@mail.ru

Хрупкие и пластичные твердые тела находятся на противоположных полюсах шкалы механических свойств материалов. Переход между указанными свойствами является предметом многочисленных теоретических и экспериментальных исследований. В настоящем сообщении хрупко-пластичный переход анализируется с позиций ангармонизма межатомных (межмолекулярных) колебаний и нелинейности сил межатомного взаимодействия.

В работе [1] установлен эмпирический критерий, согласно которому материал является хрупким, если отношение его модуля всестороннего сжатия к модулю сдвига $B/G < 1,75$. Удивительным образом приведенное значение отношения модулей согласуется с теоретическим результатом, полученным еще самим Симеоном Дени Пуассоном двести лет назад: $B/G = 5/3$ [2]. Вывод Пуассоном отношения двух модулей не был связан с обсуждаемой здесь проблемой, а носит общий характер для однородно деформированного изотропного твердого тела, между частицами (атомами) которого действуют центральные силы. Следовательно, с учетом выше приведенного критерия твердые вещества с центральным межатомным взаимодействием должны располагаться между вполне хрупкими и вполне пластичными.

Из теории упругости известно, что отношение упругих модулей всестороннего сжатия и сдвига является однозначной функцией коэффициента Пуассона ν

$$\frac{B}{G} = \frac{2}{3} \left(\frac{1+\nu}{1-2\nu} \right). \quad (1)$$

При пуассоновском значении отношения модулей из (1) получается $\nu = 0,25$ и отклонения от этой величины коэффициента Пуассона (для кубических монокристаллов оно следует из соотношения Коши $c_{12} = c_{44}$) должны свидетельствовать о нарушении центральности сил межатомного взаимодействия и принадлежности материалов к категориям хрупких ($\nu < 0,25$) или пластичных ($\nu > 0,25$). Коэффициент Пуассона как параметр линейной теории упругости, в принципе, не должен зависеть от неупругих свойств твердых тел. Однако такая взаимосвязь прослеживается, например, в случае пластической деформации металлов при растяжении [3].

Ранее нами на основе представлений физики твердого тела, физической акустики и теории упругости получено соотношение между гармоническим параметром ν и существенно ангармонической нелинейной величиной – параметром Грюнайзена γ , являющимся экспериментальной мерой ангармонизма межатомных колебаний и нелинейности сил межатомного взаимодействия [4]:

$$\gamma = \frac{3}{2} \left(\frac{1+\nu}{2-3\nu} \right). \quad (2)$$

При подстановке в (1) зависимости $\nu = f(\gamma)$ из (2) получается интересное соотношение для отношения модулей как функции параметра Грюнайзена:

$$\frac{B}{G} = \frac{2}{3} \left(\frac{10\gamma}{9-2\gamma} \right). \quad (3)$$

Анализ (3) приводит, в частности, к следующим выводам:

1) При стремлении реального твердого тела к “гармоническому” ($\gamma \rightarrow 0$) отношение B/G уменьшается и в пределе должны выполняться условия: $B=0, \nu=-1$. Поскольку трудно себе представить такой твердый материал, его гармонический вариант – прекрасная иллюзия. “Абсолютно” хрупкие представители имеют $B/G < 1$ (алмаз – 0,829; кварц – 0,849) и их параметры Грюнайзена равны, соответственно, 0,64 и 0,65.

2) Для достижения коэффициентом Пуассона верхнего предельного значения ($\nu \rightarrow 0,5$), когда в процессе упругого деформирования объем тела сохраняется постоянным, отношение $B/G \rightarrow \infty$, а параметр Грюнайзена $\gamma \rightarrow \gamma_{\max} = 4,5$. Ожидать твердых материалов с $B=\infty$ или $G=0$ также бесперспективно. У сверхпластичного индия, например, $B/G=8,67$, $\nu=0,462$ и $\gamma=3,66$.

3) Если $B/G < 2/3$, то $\nu < 0$ (при $\nu=0$ изменение продольного размера образца не сопровождается поперечной деформацией) и твердое тело (ауксетик) обладает необычным механическим поведением – при растяжении (сжатии) в одном направлении материал соответственно расширяется (сужается) в перпендикулярном направлении. Для этого мера ангармонизма межатомных колебаний должна понизиться до величины $\gamma < 0,529$.

Зависимость (3) изображена на рис. 1 (кривая). Здесь же точками с цифрами приведены значения B/G для элементов и соединений из сведений по упругим свойствам в [5–7] при соответствующих параметрах Грюнайзена [8].

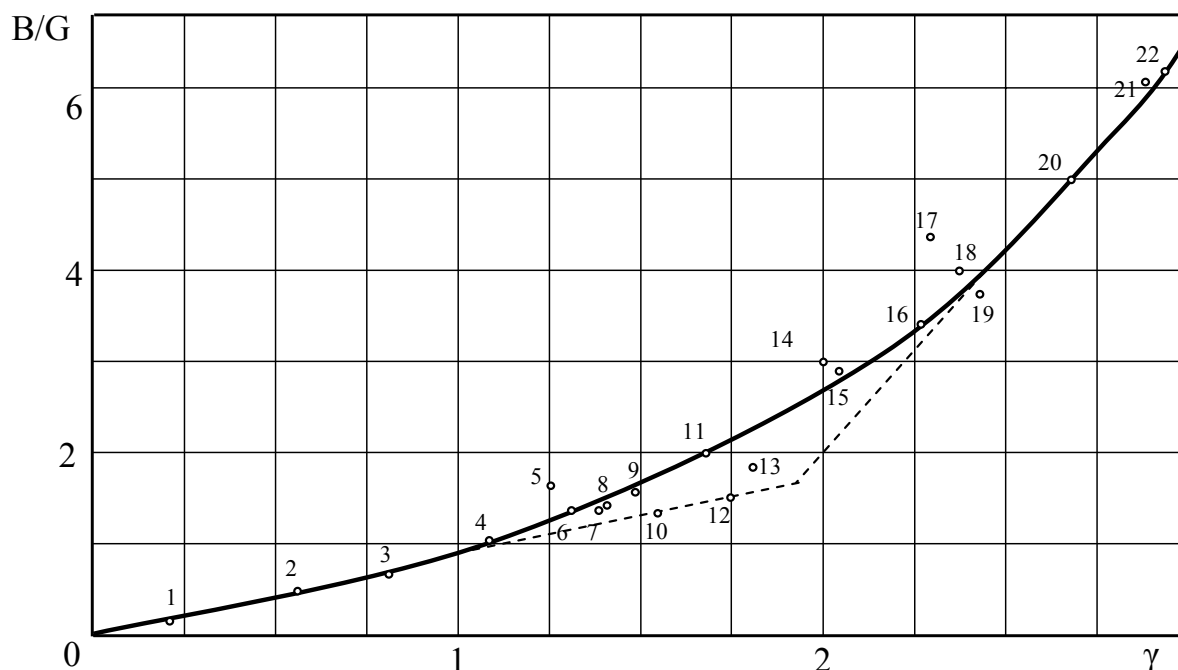


Рис. 1. Отношение упругих модулей как функция параметра Грюнайзена (кривая – зависимость (3), точки – экспериментальные данные)

1 – $\text{Sm}_{0,75}\text{Y}_{0,25}\text{S}$, 2 – $\text{Cd}_{0,40}\text{As}_{0,60}$, 3 – Be, 4 – $(\text{CH}_2)_6\text{N}_4$, 5 – Y, 6 – U, 7 – Ge, 8 – $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, 9 – GaAs, 10 – Al_2O_3 , 11 – Fe, 12 – NaCl, 13 – NH_4ClO_4 , 14 – Al, 15 – Cu, 16 – PbN_6 , 17 – AgBr, 18 – Pd, 19 – AgN_3 , 20 – Pb, 21 – Au, 22 – SrSO_4

В 22 объектах присутствуют твердые тела с металлической, ионной, ковалентной и молекулярной химическими связями, представляющими собой многофункциональные материалы – конструкционные (металлы, сплавы), полупроводники (Ge, GaAs), изоляторы (NaCl, SrSO₄), высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП “1-2-3” Y₁Ba₂Cu₃O₇), окислители твердых топлив (NH₄ClO₄), инициирующие взрывчатые вещества (ИВВ AgN₃, PbN₆), стекла (Cd_{0,40}As_{0,60}), ауксетики (Sm_{0,75}Y_{0,25}S). Видно, что предложенная зависимость (3) правильно отражает взаимосвязь между отношением модулей и параметром Грюнайзена. Линейные экстраполяции из участков кривой, соответствующих вполне хрупким и пластичным состояниям материалов (штриховые линии), дают в пересечении $B/G = 1,77$ и $\gamma \approx 2$. Переходная зона между указанными состояниями находится по значениям отношения модулей между $B/G = 0,9$ (по параметрам Грюнайзена $\gamma = 1,0$) и $B/G = 3,5$ ($\gamma = 2,4$). То обстоятельство, что кристаллические ауксетики находятся в области повышенной хрупкости и, следовательно, чрезвычайно склонны к трещинообразованию, делает исключительно важным для них учет возможного влияния микротрещин на уменьшение коэффициента Пуассона вплоть до принятия им отрицательных значений [9].

Список литературы

1. Pugh S.F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals // *Phil. Mag.* 1954. V.45. № 367. P. 833–843.
2. Ляв А. Математическая теория упругости М.–Л.: Гл. ред. общетехн. лит-ры и монографии. 1953. 674 с.
3. Черкасов И.И. О связи коэффициента Пуассона с пластическими свойствами материала // *ЖТФ.* 1952. Т.22. Вып.11. С. 1834 – 1837.
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. Андерсон О. Определение и некоторые применения изотропных упругих постоянных поликристаллических систем, полученных из данных для монокристаллов // В кн.: *Физическая акустика. Т.3. Ч.Б. Динамика решетки.* Под ред. У. Мэзона. М. Изд-во “Мир”. 1968. С. 62 – 121.
6. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. Киев: “Наукова думка”, 1982. 286 с.
7. Беломестных В.Н. Физико-химическая акустика кристаллов. Томск: Изд. ТРОЦа, 1998. 183 с.
8. Беломестных В.Н., Теслева Е.П. Ангармонические эффекты в твердых телах (акустические аспекты). Томск. Изд-во Томского политехн. ун-та, 2009. 151 с.
9. Назаров В.Е., Сутин А.М. О коэффициенте Пуассона трещиноватых сред // *Акустический журнал.* 1995. Т.41. № 6. С. 932 – 934.