

- поликристаллических металлов // Металлофизика. - 1990. - 12, №6. - С. 3-13.
3. Котречко С.А., МешковЮ.Я., Меттус Г.С., Никоненко Д.И. Механика и физика квазихрупкого разрушения металлов в условиях концентрации напряжений. Сообщение 3. Вязкость металлов и сплавов // Проблемы прочности. - 2000. - №1. - С. 72-92.
 4. Котречко С.А. Критическое напряжение скола и «хрупкая» прочность поликристаллических металлов // Металлофизика. - 1992. - 14, №5. - С. 37-41.
 5. Котречко С.А. Статистическая модель хрупкого разрушения поликристаллических металлов // Металлофизика и новейшие технологии. - 1994. - 16, №10. - С. 37-49.
 6. Котречко С.А., МешковЮ.Я. Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции. Киев. Наук. Думка, 2008, 295 с.

ОБ ОДНОМ УРАВНЕНИИ СОСТОЯНИЯ И ЗАКОНЕ ГУКА, СЖИМАЕМОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТЕ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ МЕТАЛЛОВ

Бертяев Б. И., Реут И. И.

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Россия
enterfax@mail.ru

Предложено уравнение состояния позволяющее представить в явном виде сжимаемость и объёмный коэффициент термического расширения. Установлена связь модуля всестороннего сжатия с симметрией кристаллической решётки. Выполнен расчёт величин внутреннего давления в металлах с ОЦК и ГЦК решётками.

Уравнение состояния допускает возможность рассчитать такие величины, как объёмный коэффициент термического расширения β и модуль всестороннего сжатия K согласно определению:

$$\beta = 3\alpha = \frac{1}{V} \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \quad (1)$$

где α – линейный коэффициент теплового расширения. Объёмная упругость или сжимаемость B :

$$B = \frac{1}{K} = -\frac{1}{V} \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T. \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует связь вида:

$$\beta \cdot K = \frac{\partial P}{\partial T}. \quad (3)$$

Отсутствие возможности адекватного описания кристаллических систем в рамках решеточной модели служит достаточным основанием разработки теоретической модели уравнения состояния.

1. Уравнение состояния кристаллической системы

В работе [1] предложено уравнение состояния вида:

$$\frac{\Delta v}{v_0} = \zeta = \left(\exp \frac{Pv}{kT} - 1 \right)^{-1}, \quad (4)$$

где v_0 – объём, занимаемый атомом при $T = 0$, $v = V/M$ – объём на атом при температуре T , ζ – относительная доля свободного объёма (ОДСО), k – постоянная Больцмана, P – внутреннее давление в системе. Из уравнения (4) можно получить сжимаемость B и объёмный коэффициент термического расширения β .

Если малое изменение относительной доли свободного объёма $d\zeta$, представить в виде:

$$d\zeta = \frac{\partial \zeta}{\partial P} dP + \frac{\partial \zeta}{\partial T} dT = BdP + \beta dT, \quad (5)$$

где

$$B = \frac{\nu}{kT} (\zeta + \zeta^2) = \frac{1}{P} (\zeta + \zeta^2) \ln \left(1 + \frac{1}{\zeta} \right) \quad (6)$$

– сжимаемость

и

$$3\alpha = \beta = \frac{1}{T} (\zeta + \zeta^2) \ln \left(1 + \frac{1}{\zeta} \right) \quad (7)$$

– объемный коэффициент термического расширения.

При $T = const$ из (5) следует:

$$d\zeta = BdP. \quad (8)$$

Полагая $d\zeta = \varepsilon$ и $dP = P'$, получим уравнение

$$\varepsilon = B \cdot P', \quad (9)$$

известное как закон Гука. Здесь ε – деформация, P' – внешнее давление.

Из (6) и (7) следует

$$\beta K = \frac{P}{T}. \quad (10)$$

Уравнение (10) позволяет непосредственно рассчитать величину внутреннего давления в кристаллической системе, а уравнение (6) позволяет рассчитать величину ν .

2. Применение модели к расчету объема ν

Так как объем ν для кристаллической решётки можно представить в виде:

$$\nu = Ad^3, \quad (11)$$

то задача состоит в том, чтобы рассчитать величину параметра A и сопоставить его значение с кристаллографическими данными. Здесь A – параметр, величину которого требуется определить, d – постоянная кристаллической решетки. Из кристаллографии известно, что для ОЦК решеток $A = 0,5$, для ГЦК – $A = 0,25$. По степени согласия величины A с кристаллографическими данными можно судить о достоверности предложенной модели.

Расчеты проводились для металлов с ОЦК и ГЦК решетками при температуре 300 К. Данные о величинах постоянной решетки d , модуле K и α для металлов с ОЦК и ГЦК решетками брались из справочников [2, 3].

Результаты расчета объёма ν , d^3 и A представлены в табл. 1.

Таблица 1. Рассчитанные значения d^3 , объема ν и параметра A в металлах с ОЦК и ГЦК решетками

Элемент ОЦК	$d^3 \cdot 10^{29} \text{ м}^3$	$\nu \cdot 10^{29} \text{ м}^3$	A_d	Элемент ГЦК	$d^3 \cdot 10^{29} \text{ м}^3$	$\nu \cdot 10^{29} \text{ м}^3$	A_d
Li	4,325	3,128	0,72	Al	6,643	1,593	0,24
Na	7,570	4,409	0,58	Ag	6,843	1,450	0,21
K	15,142	6,930	0,46	Au	6,793	1,280	0,19
α -Fe	2,364	1,180	0,50	Cu	4,700	1,250	0,26
Rb	17,770	8,155	0,47	Ni	4,474	1,176	0,26
Cs	22,140	11,780	0,53	Pd	5,886	1,400	0,24
Mo	3,126	2,076	0,66	Pt	6,023	1,310	0,22
W	3,155	2,500	0,79	Pb	12,130	1,900	0,17

Из табл. 1 следует, что совокупность значений параметра A в ОЦК металлах лежат в интервале значений от 0,46 до 0,79, что в среднем составляет около 0,59. Это с хорошей степенью точности соответствует кристаллографическому значению, равному 0,5. Аналогично, для ГЦК металлов совокупность значений параметра A лежит в интервале от 0,17 до 0,26 и в среднем составляет значение, равное 0,22, что также хорошо соответствует ожидаемому значению, равному 0,25.

Несколько завышенные значения A у вольфрама и молибдена, что возможно связано с неточностью в экспериментальной оценке значений модуля K и коэффициента линейного расширения α .

3. Расчёт внутреннего давления

Для расчёта внутреннего давления в металлах использовалось уравнение (10). Результаты расчёта представлены в табл. 2.

Таблица 2. Рассчитанные значения давления P в металлах с ОЦК и ГЦК решётками

Элемент ОЦК	$P, 10^3, \text{кг/см}^2$	Элемент ГЦК	$P, 10^3, \text{кг/см}^2$
Li	5,87	Al	14,80
Na	3,91	Ag	16,92
K	2,40	Au	20,43
Rb	1,96	Cu	15,20
Cs	1,39	Ni	21,71
α -Fe	18,24	Pd	18,64
Mo	13,92	Pt	21,02
W	12,26	Pb	10,72

Данные табл. 2 свидетельствуют о высоком уровне внутреннего давления в металлах. Самое низкое у Cs и самое высокое у Ni. Отметим, что для группы щелочных металлов давление снижается с ростом массы атома. Аналогичная тенденция наблюдается для Al, Cu, Ag и Au.

Заключение

Термодинамический анализ металлов позволил выявить связь симметрии кристаллической решётки с её тепловыми и механическими свойствами. Кристалл «растянут» внутренним давлением при любой температуре. Уровень давления при комнатной температуре оказывается значительным и колеблется от 10^3 кг/см^2 до 10^4 кг/см^2 . В этой связи встаёт вопрос о причинах механической устойчивости кристаллической системы. Чтобы «удержать» деформированный кристалл к нему необходимо приложить отрицательное Ван-дер-Ваальсовое давление. Эту роль может выполнять граница или поверхность кристалла.

Список литературы

1. Бертяев Б.И., Реут И.И. Об уравнении состояния, сжимаемости и внутреннем давлении в металлах с ОЦК, ГЦК и ГПУ решётками. // Вестник СамГТУ. Серия: Физико-математические науки. Вып. №2(17). 2008. с. 215-223.
2. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
3. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлизова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1231 с.