

11,14,19

О выводе формулы Беломестных–Теслевой

© М.В. Дармаев^{1,2}, С.Ш. Сангадиев¹, А.А. Машанов¹, Т.Б. Ким¹

¹ Бурятский государственный университет им. Доржи Банзарова, Улан-Удэ, Россия

² Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Россия

E-mail: darmaev@bsu.ru

Поступила в Редакцию 1 апреля 2022 г.

В окончательной редакции 25 апреля 2022 г.

Принята к публикации 26 апреля 2022 г.

Формула Беломестных–Теслевой интересна тем, что устанавливает однозначную связь между коэффициентом Пуассона и параметром Грюнайзена. Обсуждается вывод данной формулы из общепринятого уравнения Грюнайзена. Формула Беломестных–Теслевой, полученная ранее из иных исходных посылок, выводится с привлечением теории упругости и уравнения Леонтьева. Для ряда силикатных стекол и стеклообразных метафосфатов щелочноземельных металлов предлагаемый подход находит в достаточной степени удовлетворительное согласие с экспериментальными данными.

Ключевые слова: уравнение Грюнайзена, параметр Грюнайзена, коэффициент Пуассона, модуль сдвига, изотермический модуль объемного сжатия, скорости акустических волн.

DOI: 10.21883/FTT.2022.08.52708.327

Общепринятым считается тот факт, что параметры теории упругости (модули упругости, коэффициент Пуассона) как гармонические линейные величины не должны быть связаны с ангармонизмом — с отклонением силы межатомного взаимодействия от линейной зависимости при смещении атома из равновесного положения. В то же время в научной литературе появляются работы, которые указывают на наличие вполне определенной связи между упругими свойствами и мерой ангармонизма γ [1]:

$$\gamma = \frac{\beta V B}{C_V}, \quad (1)$$

где β — коэффициент объемного теплового расширения, V — молярный объем, B — изотермический модуль объемного сжатия, C_V — молярная теплоемкость при постоянном объеме.

В работах Беломестных и Теслевой [2] установлено, что параметр Грюнайзена γ является однозначной функцией коэффициента Пуассона μ — параметра теории упругости

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

причем установлено достаточно строго с привлечением известных положений теории упругости, термодинамики и физической акустики. Ими показано, что параметр Грюнайзена определяется исключительно по скоростям продольной (v_L) и поперечной (v_s) акустических волн

$$\gamma = \frac{3}{2} \left[\frac{(v_L/v_s)^2 - 4}{(v_L/v_s)^2 + 2} \right]. \quad (3)$$

Беломестных и Теслева [2], используя в формуле (3) известные соотношения физической акустики [3]:

$$v_L = \sqrt{\frac{E(1 - \mu)}{\rho(1 + \mu)(1 - 2\mu)}}, \quad v_s = \sqrt{\frac{E}{2\rho(1 + \mu)}}$$

в 2004 г. получили уравнение (2), однозначно связывающее параметр Грюнайзена с коэффициентом Пуассона. Примечательно то обстоятельство, что такая сравнительно простая формула (2) находится в удовлетворительном согласии с уравнением Грюнайзена (1) [2].

В данном сообщении предлагается вывод формулы Беломестных–Теслевой (2) из уравнения Грюнайзена (1).

Умножив числитель и знаменатель уравнения Грюнайзена (1) на модуль сдвига G и принимая во внимание известную взаимосвязь упругих модулей G и B [1,4]:

$$\frac{B}{G} = \frac{2}{3} \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu} \right), \quad (4)$$

получаем следующую модификацию уравнения Грюнайзена (1)

$$\gamma = A \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu} \right), \quad (5)$$

где введено обозначение

$$A = \frac{2}{3} \left(\frac{\beta V G}{C_V} \right). \quad (6)$$

Используя соотношение Леонтьева [5]:

$$\frac{C_V}{\beta V} = \frac{2}{3} \rho v_k^2 \quad (7)$$

Таблица 1. Расчет множителя A по формулам (8) и (11) для силикатных стекол R_2O-SiO_2 ($R = Na, K$) [8] и стеклообразных метафосфатов щелочноземельных металлов [9]

№ п/п	Соединения	μ	$v_L, m/s$	$v_s, m/s$	$v_k, m/s$	A (8)	A (11)
Na₂O–SiO₂							
	Содержание Na ₂ O, mol.% по синтезу:						
1	13	0.205	5233	3378	4091	0.68	0.64
2	16	0.218	5115	3275	3984	0.68	0.63
3	17	0.225	5054	3222	3929	0.67	0.62
4	20	0.235	12133	7705	9415	0.67	0.61
5	26	0.245	4835	3070	3752	0.67	0.60
6	30	0.255	4844	3052	3746	0.66	0.60
7	33.3	0.255	4906	3103	3800	0.67	0.60
K₂O–SiO₂							
	Содержание K ₂ O, mol.% по синтезу:						
1	13	0.230	4820	3073	3747	0.67	0.62
2	15	0.225	4759	3035	3700	0.67	0.62
3	20	0.250	4550	2889	3531	0.67	0.60
4	25	0.270	4463	2801	3445	0.66	0.58
Стеклообразные метафосфаты щелочноземельных металлов							
1	0.51 MgO · 0.49 P ₂ O ₅	0.233	5267	3110	3962	0.62	0.62
2	0.50 MgO · 0.50 P ₂ O ₅	0.233	5264	3108	3959	0.62	0.62
3	0.49 MgO · 0.51 P ₂ O ₅	0.233	5289	3121	3977	0.62	0.62
4	0.51 CaO · 0.49 P ₂ O ₅	0.264	5051	2858	3735	0.59	0.59
5	0.50 CaO · 0.50 P ₂ O ₅	0.267	5086	2869	3756	0.58	0.58
6	0.49 CaO · 0.51 P ₂ O ₅	0.265	5051	2857	3734	0.59	0.59
7	0.51 SrO · 0.49 P ₂ O ₅	0.274	4603	2568	3385	0.58	0.58
8	0.50 SrO · 0.50 P ₂ O ₅	0.273	4610	2577	3393	0.58	0.58
9	0.49 SrO · 0.51 P ₂ O ₅	0.271	4612	2584	3397	0.58	0.58
10	0.50 BaO · 0.50 P ₂ O ₅	0.288	4178	2278	3046	0.56	0.56
11	0.49 BaO · 0.51 P ₂ O ₅	0.286	4186	2291	3056	0.56	0.56

и модуль сдвига $G = \rho v_s^2$, множитель A (6) представим в виде отношения скоростей звука

$$A = \frac{v_s^2}{v_k^2}, \tag{8}$$

где v_k^2 — квадрат среднеквадратичной скорости звука [5]:

$$v_k^2 = \frac{v_L^2 + 2v_s^2}{3}, \tag{9}$$

v_L и v_s — скорости продольной и поперечной упругих волн, соответственно, ρ — плотность.

Из равенства (8) с помощью выражения (9) и известной формулы теории упругости [1,6]:

$$\left(\frac{v_L}{v_s}\right)^2 = \frac{2 - 2\mu}{1 - 2\mu} \tag{10}$$

находим связь множителя A с коэффициентом Пуассона μ

$$A = \frac{3}{2} \left(\frac{1 - 2\mu}{2 - 3\mu}\right). \tag{11}$$

Расчет параметра A по формулам (8) и (11) показывает согласованные значения (табл. 1). Для силикатных стекол, приведенных в таблице значения, рассчитанные по разным формулам достаточно близки. Для стеклообразных метафосфатов щелочноземельных металлов значения коэффициента A по формулам (8) и (11) совпадают с точностью до сотой доли единиц, тангенс угла наклона графика $A(8)–A(11)$ равен единице.

Примечательно то обстоятельство, что с учетом данного соотношения (11) модифицированное уравнение Грюнайзена (5) переходит в формулу Беломестных–Теслевой (2)

$$\gamma = \left[\frac{3}{2} \left(\frac{1 - 2\mu}{2 - 3\mu}\right) \right] \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu}\right) = \frac{3}{2} \left(\frac{1 + \mu}{2 - 3\mu}\right).$$

Таким образом, с привлечением соотношения Леонтьева (7) и теории упругости из уравнения Грюнайзена (1) можно вывести формулу Беломестных–Теслевой (2), которая была получена из иных исходных посылок [2].

Обратим внимание на то обстоятельство, что коэффициент A в выражении (8) показывает, какую долю со-

Таблица 2. Сравнение результатов расчета параметра Грюнайзена γ по уравнениям (1) и (2) (использованы данные [2,10])

№	Элементы и соединения	μ	γ	
			Грюнайзен (1)	Беломестных–Теслева (2)
1	LiF	0.214	1.34	1.34
2	NaCl	0.243	1.46	1.47
3	Fe	0.292	1.68	1.72
4	Al	0.340	2.11	2.05
5	Ag	0.379	2.40	2.40
5	NaNO ₃	0.257	1.31	1.53
7	Pd	0.374	2.40	2.35
8	Au	0.420	2.80	2.88

ставляет упругая энергия $\Delta U = \rho v_s^2 V$, необходимая для деформации сдвига, от средней энергии межатомного взаимодействия $\bar{U} = \rho v_k^2 V$

$$A = \frac{v_s^2}{v_k^2} = \frac{\rho v_s^2 V}{\rho v_k^2 V} = \frac{GV}{\bar{U}} = \frac{\Delta U}{\bar{U}}. \quad (12)$$

Для стеклообразных твердых тел уравнение (5) было получено ранее со следующей интерпретацией множителя A [7]:

$$A = \frac{2}{9} \ln \left(\frac{1}{f_g} \right), \quad (13)$$

где f_g — объемная доля флуктуационного свободного объема, замороженная при температуре стеклования T_g . Величина f_g у стеклообразных систем одного класса является фактически универсальной величиной $f_g \approx \text{const}$ [7]. Логарифм данной величины тем более слабо зависит от состава аморфных веществ в рамках одного класса. Оценка A по этой формуле (13) дает фактически константные значения, по крайней мере, у стекол одного структурного типа и по порядку величины согласуется с результатами расчета по соотношениям (8) и (11). Для натриевосиликатных Na₂O–SiO₂ и калиевосиликатных K₂O–SiO₂ стекол значение объемной доли флуктуационного свободного объема $f_g \approx \text{const} \approx 0.028$, а величина A , рассчитанная по формуле (13), приблизительно равна 0.79.

Значения параметра Грюнайзена для металлов, рассчитанные по уравнению Грюнайзена (1) и Беломестных–Теслевой (2) также находятся в удовлетворительном согласии (табл. 2).

Некоторые отклонения значений для твердых тел, вероятно, обусловлены разбросом значений γ , полученных разными исследователями. Причина этих отклонений также возможно заключается в анизотропии рассматриваемых в табл. 2 систем, так как более согласованные данные наблюдаются для ряда квазиизотропных щелочногалоидных кристаллов с центральными силами межатомного взаимодействия.

Таким образом, предлагаемый вывод из уравнения Грюнайзена (1) формулы Беломестных–Теслевой (2), которая устанавливает связь параметра Грюнайзена с коэффициентом Пуассона, находит вполне удовлетворительное согласие с экспериментальными данными.

Благодарности

Авторы благодарны профессору Сандитову Д.С. за предложенную тему для настоящей статьи и консультацию.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. 3-е изд. Наука, М. (1965) 204 с.
- [2] В.Н. Беломестных, Е.П. Теслева. ЖТФ **74**, 140 (2004).
- [3] И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. Наук. думка, Киев (1982) 286 с.
- [4] Д.С. Сандитов. ФТТ **64**, 241 (2022).
- [5] К.Л. Леонтьев. Акуст. журн. **27**, 554 (1981).
- [6] Д.С. Сандитов, А.А. Машанов. ФТТ **63**, 292 (2021).
- [7] О.В. Мазурин, М.В. Стрельцина, Т.П. Швайко-Швайковская. Свойства стекол и стеклообразующих расплавов. Наука, Л. (1973). Т. 1. 444 с.
- [8] Е.А. Гурович, А.А. Ильин, А.А. Пронкин, М.Е. Стржалковский. Физика и химия стекла **5**, 383 (1979).
- [9] Д.С. Сандитов, Г.М. Баргенов. Физические свойства неупорядоченных структур. Наука, Новосибирск. (1982). 259 с.
- [10] В.Н. Беломестных. Письма в ЖТФ **30**, 15 (2004).

Редактор Д.В. Жуманов