

УДК 529.21

И. П. БАЗАРОВ, ЕЖИ СМЕЛЯ

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ МОДУЛЯ СЖАТИЯ ИЗОТРОПНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Получена температурная зависимость модуля сжатия твердых тел, которая находится в хорошем согласии с экспериментом.

В развитии новой техники значительная роль принадлежит материалам, которые могут надежно применяться при высоких температурах, зачастую до 3000 К. К числу наиболее важных физико-механических свойств этих материалов относится упругость материала, которую определяют в основном по значениям модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сжатия. В этой работе приближенно (на основе модели Дебая) дается температурная зависимость модуля сжатия изотропных твердых тел, в частности для вольфрама и молибдена.

Из определения изотермического модуля сжатия

$$G = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T$$

видно, что для его вычисления надо знать уравнение состояния твердых тел.

Для того чтобы это уравнение получить в удобном для нас виде, воспользуемся уравнением состояния Ми-Грюнайзена [1, 2]:

$$p + \frac{du}{dv} = \gamma \frac{E_k}{V}, \quad (1)$$

где u — потенциальная энергия грамм-атома кристалла, p — внешнее давление, V — объем твердого тела, $v = \frac{V}{N}$, N — число элементарных ячеек, E_k — кинетическая энергия колебаний решетки, γ — постоянная Грюнайзена.

Поскольку нас интересуют величины объема и модуля сжатия при нормальных давлениях, то можно положить в уравнении состояния (1) $p=0$; при этом получаем

$$\frac{du}{dv} = \gamma \frac{E_k}{V}. \quad (2)$$

Умножая (1) на V и дифференцируя полученное уравнение по V при постоянной температуре, найдем

$$p + V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T + \frac{du}{dv} + v \frac{d^2u}{dv^2} = \gamma \left(\frac{\partial E_k}{\partial V} \right)_T. \quad (3)$$

Из (2) и (3) имеем

$$G = -v \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T = \frac{du}{dv} + v \frac{d^2u}{dv^2} - \frac{\gamma^2}{V} (TC_V - E_k).$$

Если статическую энергию $u(v)$ разложим в ряд Тейлора по $(v-v_0)$, где v_0 — статически равновесное значение v , то из малости для обычных температур $\frac{v-v_0}{v_0}$ следует [1]:

$$\frac{v-v_0}{v_0} = \gamma \frac{E_k}{VG_0},$$

$$G - G_0 = \left\{ 2 + \frac{v_0 \left(\frac{d^3u}{dv^3} \right)_0}{\left(\frac{d^2u}{dv^2} \right)_0} \right\} \frac{\gamma E_k}{V} - \frac{\gamma^2}{V} (TC_V - E_k), \quad (4)$$

где G_0 — модуль сжатия решетки в состоянии статического равновесия:

$$G_0 = v_0 \left(\frac{d^2u}{dv^2} \right)_0.$$

Вводя

$$W = \frac{v_0 \left(\frac{d^3u}{dv^3} \right)_0}{\left(\frac{d^2u}{dv^2} \right)_0} \quad (5)$$

и преобразуя выражение, (4), получаем

$$G = G_0 + (2 + \gamma + W) \frac{\gamma E_k}{V} - \frac{\gamma^2 C_V}{V} T. \quad (6)$$

Из (6) видно, что в целом задача (в этом приближении) сводится к определению четырех функций: $u(v)$, $\gamma(T)$, $E_k(T)$, $C_V(T)$. Легко заметить, что, если отбросим последний член в выражении (6), то оно совпадает с зависимостью Андерсона [3]

$$G = G_0 - \frac{3R\gamma\delta}{V_0} TD(x_0),$$

если принять так называемый параметр Андерсона δ [4] равным

$$\delta = -(2 + \gamma + W)$$

и

$$E_k = 3RTD(x_0), \quad (7)$$

где $D(x_0)$ — функция Дебая, $x_0 = \frac{\theta}{T}$, θ — характеристическая температура Дебая.

Зная статическую энергию в виде явной функции $u = u(v)$, легко можно вычислить ее вторую и третью производную при v_0 [5].

Поскольку, однако, статическая энергия определяется обычно полуэмпирическим выражением, содержащим несколько подгрупповых параметров [5, 6], то в нашем случае рациональнее не вычислять W по (5), а выбрать эту величину так, чтобы получить наилучшее согласие теоретических результатов с экспериментальными.

Что касается функции $E_k = E_k(T)$, то в нашем приближении примем зависимость (7). При малых x_0 можем воспользоваться разложением [7]:

$$D(x_0) = 1 - \frac{3}{8} x_0 + \frac{1}{20} x_0^2 - \frac{1}{1680} x_0^3 + \dots \quad (8)$$

Значения функции $C_V = C_V(T)$ берем из таблиц [8].

Очевидно, что постоянная Грюнайзена γ и температура Дебая θ являются функциями температуры, согласно [9] приближению

$$\frac{d \ln \theta}{dT} \approx -2\gamma\beta,$$

где β — коэффициент объемного расширения. Более точных выражений до сих пор найти не удалось. Имея это в виду, примем:

1) γ и θ — постоянные величины, не зависящие от температуры и известные из эксперимента [10, 11];

2) $V = V_0$, где V_0 объем γ -атома твердого тела при комнатной температуре;

3) G_0 — значение G для $T = 0$ К, известное по экспериментальным данным [12].

При этих упрощениях мы сравним зависимость

$$G = G_0 + (2 + \gamma + W) \frac{3\gamma RT}{V_0} \times \\ \times \left[1 - \frac{3}{8} x_0 + \frac{1}{20} x_0^2 - \frac{1}{1680} x_0^3 \right] - \frac{\gamma^2 C_V T}{V_0}$$

с экспериментальными результатами модуля сжатия [12] для вольфрама (для которого коэффициент Пуассона $\sigma = 0,31$) и молибдена ($\sigma = 0,34$) в интервале температур (273—1670 К). Следует заметить, что эти два металла обладают высокими температурами плавления и (что очень важно для нашего приближения) хорошей изотропностью (коэффициент упругой анизотропии [12] для вольфрама выносит 1,008, а для молибдена 0,906). В табл. 1 даны значения постоянных величин, входящих в правую часть (8).

Таблица 1

Вещество	V_0 $10^{-6} [m^3]$	γ	G_0 $10^8 \left[\frac{N}{m^2} \right]$	W	θ [К]
Вольфрам	9,53	1,2	414	-16,94	333
Молибден	9,41	1,3	291	-16,94	380

В табл. 2 приведены значения теоретические (G) и экспериментальные ($G_{\text{эксп}}$) модуля сжатия для вольфрама и молибдена. Экспериментальные значения [12] содержат ошибки не выше 2%, так что в рассматриваемом диапазоне температур согласие зависимости (8) с экспериментом хорошее.

Вольфрам				Молибден			
T [к]	$x_0 = \frac{\theta}{T}$	$10^6 \left[\frac{G}{m^2} \right]$	$10^6 \left[\frac{G_{\text{эксп}}}{m^2} \right]$	T [к]	$x_0 = \frac{\theta}{T}$	$10^6 \left[\frac{G}{m^2} \right]$	$10^6 \left[\frac{G_{\text{эксп}}}{m^2} \right]$
273	1,22	405,7	406,2	293	1,297	281,6	282,4
370	0,90	401,5	401,0	370	1,027	277,8	276,3
470	0,708	396,9	395,8	470	0,808	272,9	272,8
570	0,584	392,2	391,7	570	0,667	267,8	268,4
670	0,497	387,6	387,5	670	0,567	262,8	263,1
770	0,432	382,9	383,3	770	0,493	257,6	257,9
870	0,383	378,3	378,1	870	0,437	252,6	253,5
970	0,343	373,6	373,9	970	0,392	247,4	247,4
1070	0,311	378,9	368,8	1070	0,355	242,3	242,1
1170	0,284	364,2	364,6	1170	0,325	237,2	236,8
1270	0,262	359,5	359,4	1270	0,299	232,0	232,4
1370	0,243	354,9	355,2	1370	0,277	226,8	226,3
1470	0,226	350,1	350,0	1470	0,258	221,5	222,8
1570	0,212	345,4	344,8	1570	0,242	216,6	217,5
1670	0,199	340,8	338,5	1670	0,227	211,2	207,9

Для дальнейшего расширения предела температур (ближе к температуре плавления) надо ввести в зависимость (8) добавку a для учета агармонизма и вклада электронов проводимости [5]:

$$a = x (A_a'' + A_s'') T^2,$$

где $x = \frac{v}{v_0}$ — безразмерный объем твердого тела, A_a'' и A_s'' — постоянные, подлежащие определению. Вклад этой добавки в (8) в исследованном нами интервале температур пренебрежимо мал. Заметим, что можно воспользоваться изотермическим модулем сжатия вместо адиабатического [13]:

$$G_{\text{ад}} = \frac{G}{1 - \frac{GT \beta^2}{C_p}}$$

где C_p — теплоемкость твердого тела при $p = \text{const}$, так как разность этих модулей очень мала [13] в интересующем нас интервале температур в сравнении с G .

Авторы благодарят В. В. Котенка и Э. В. Геворкяна за обсуждение настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М., 1958.
2. Базаров И. П. Статистическая теория кристаллического состояния. Изд-во МГУ, 1972.
3. Anderson O. L. — «Phys. Rev.», 144, 2, 1966.
4. Misra K. D., Sharma M. N. — «Indian J. of Pure Appl. Phys.», 10, 1972.
5. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., 1968.
6. Давыдов Б. И. — «Изв. АН СССР. Сер. геофиз.», № 12, 1956.
7. Miscellaneous Physical Tables, Planck's radiation functions and electronic finxtions. MT, 17. Washington, 1941.
8. Beattie J. A. — «J. Math. Phys.», 6, 1—32, 1926.
9. Михайльченко В. — «Укр. физ. журн.», 8, 7, 1963.

10. Францевич И. Н. Вопросы порошковой металлургии и прочности материалов. Киев, 1956.
11. Zwikker C. Physical Properties of Solid Materials. London, 1954.
12. Кашталян Ю. А. Характеристики упругости материалов при высоких температурах. Киев, 1970.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М., 1965.

Поступила в редакцию
19.12 1975 г.

Кафедра
квантовой статистики