

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХ МИКРОУРОВНЕВЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ МАТЕРИАЛОВ СО СТРУКТУРОЙ ГЦК РЕШЕТКИ

В данной работе рассматриваются две модели для описания материалов со структурой гранцентрированной кубической решетки (ГЦК) (рис. 1): 1) основанная на силовой (безмоментной) теории, и 2) основанная на моментной теории. В настоящей работе в исследование включены 8 элементов - Pb, Al, Cu, Ag, Au, Pd, Ni, Th.

Проблемы подобного рода рассматривались в ряде публикаций (например, [1, 2]). Так, в работе [1] в рамках моментной теории рассматривались структуры с решеткой типа алмаз (алмаз, германий и кремний) и графит. В [2] подробно рассматривались вопросы моментной теории на микроуровне, а также макроскопические соотношения упругости для сложных кристаллических решеток.

Будем считать, что каждый атом чисто силовым образом взаимодействует с атомами, лежащими в пределах его третьей координационной сферы. С атомами, лежащими за пределами третьей координационной сферы (четвертая координационная сфера и далее), прямого взаимодействия нет. Связи с ближайшими соседями характеризуются жесткостью A_1 . Связи с соседями, лежащими на второй координационной сфере характеризуются жесткостью A_2 , а с атомами, лежащими на третьей координационной сфере — жесткостью A_3 . Моментное взаимодействие отсутствует.

В моментной модели учитываются только связи атома с его ближайшими соседями (первая координационная сфера). При этом считают, что межатомное взаимодействие описывается с помощью двух величин: A — силовая микроскопическая характеристика межатомной связи; D — поперечная жесткость межатомной связи.

В ортонормированном базисе для силовой модели вычисления дают следующие величины для компонент тензора жесткости:

$$C_{qqqq} = \sqrt{2} a(A_1 + 4A_2 + 18A_3); \quad C_{qqnn} = \sqrt{2} a/2(A_1 + 18A_3). \quad (1)$$

где $q, n = 1, 2, 3, q \neq n$, и индексы q и n могут переставляться произвольным образом.

Как видно из формулы (1), силовая модель такого вида накладывает дополнительное ограничение на упругие постоянные: $C_{1122} = C_{1212}$

Согласно моментной теории [2] для моментной модели получим:

$$C_{1111} = \sqrt{2}a(A + D); \quad C_{1122} = \frac{\sqrt{2}}{2}a(A - D); \quad C_{1212} = \frac{\sqrt{2}}{2}a(A + D)$$

где A и D — продольная и поперечная жесткости связи; $a = |a_a|$ — длина связи.

Отсюда дополнительное условие для компонент тензора жесткости: $C_{1111} = 2C_{1212}$

Для каждой из моделей выше мы получили по одному дополнительному условию. В табл. 1 приведены экспериментальные значения упругих постоянных C_{ijkl} для некоторых материалов с ГЦК структурой, а также те величины, на которые накладываются условия модели.

Проанализировав полученные результаты, можно сделать вывод, что обе модели удовлетворяют реальным описаниям материалов лишь со значительной погрешностью. Однако, хотя отклонения от реальных данных присутствуют, все же учет моментного взаимодействия позволяет лучше описать ГЦК структуры.

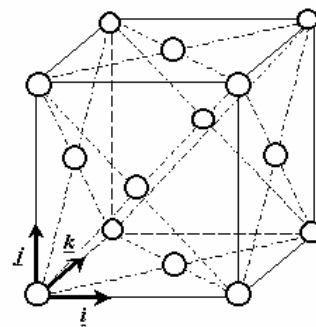


Рис. 1. ГЦК решетка

Таблица 1. Упругие постоянные C_{ijkl} , полученные из экспериментов (ед. ГПа). Направление 100. Данные взяты из [3], методика эксперимента — акустическая прецизионная. В двух правых крайних колонках таблицы приведены реальные значения частных $C_{1111}/(2 C_{1212})$ (согласно условию, накладываемому моделью моментной теории, это частное должно быть равно единице) и C_{1122}/C_{1212} (согласно условию, накладываемому моделью силовой теории, это частное должно быть равно единице).

Название элемента	Длина связи	C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}	$\frac{C_{1111}}{2C_{1212}}$	$\frac{C_{1122}}{C_{1212}}$
Pb	0.343	47	39	14	1.6	2.7
Al	0.286	107	62	29	1.9	2.2
Cu	0.255	168	121	75	1.1	1.6
Ag	0.289	122	89	45	1.4	2.0
Au	0.288	185	159	42	2.2	3.8
Ni	0.249	246	148	124	1.0	1.2
Pd	0.275	222	177	72	1.6	2.5
Th	0.359	75.2	49.4	47.6	0.79	1.0

Проанализировав полученные результаты, можно сделать вывод, что обе модели удовлетворяют реальным описаниям материалов лишь со значительной погрешностью. Однако, хотя отклонения от реальных данных присутствуют, все же учет моментного взаимодействия позволяет лучше описать ГЦК структуры.

Приложение. В табл. 2 представлены микроскопические жесткости связей для трех материалов (медь [Cu], никель [Ni], торий [Th]), для которых дополнительные условия обеих теорий выполнены с относительно небольшой погрешностью. В первой строке для каждого материала приводятся общие данные по каждой из теорий, во второй строке варьируемый параметр $A_3 a_3^2$ подобран таким образом, чтобы продольная жесткость связи для ближайших соседей силовой теории совпадала бы с продольной жесткостью связи для ближайших соседей моментной теории.

Таблица 2. Расчетные микроскопические жесткости связей для Cu, Ni, Th. Силовая и моментная теории.

Вещ-во	Дл.связи, Нм	Параметр	$A_1 a^2$	$A_2 a_2^2$	$A_3 a_3^2$	$A a^2$	$D a^2$
Медь	0.2556	C_{1122}	$43.78 - 6 A_3 a_3^2$	-6.673	—	37.107	-6.673
Медь	0.2556	$A_j = A a^2$	37.107	-6.673	1.779	37.107	-6.673
Никель	0.2492	C_{1122}	$52.053 - 6 A_3 a_3^2$	-4.335	—	47.718	-4.335
Никель	0.2492	$A_j = A a^2$	47.718	-4.335	0.722	47.718	-4.335
Торий	0.359	C_{1122}	$22.091 - 6 A_3 a_3^2$	-2.994	—	22.091	-2.994
Торий	0.359	$A_j = A a^2$	22.091	-2.994	0.499	22.091	-2.994

ЛИТЕРАТУРА:

1. О.С.Лобода. Влияние масштабного фактора на упругие характеристики кристаллических структур. Спб. 2006.
2. Е.А.Ivanova, А.М.Krivtsov, N.F.Morozov. J. of Applied Mathematics and Mechanics, 2006.
3. Физические величины. Справочник. Глава ``Акустические методы" Л.К.Зарембо.