

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ОБЪЕМОЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Целью данной работы является исследование устойчивости материала с объемноцентрированной кубической (ОЦК) решеткой, состоящей из частиц, взаимодействующих посредством потенциала Морзе. Данная задача исследовалась в [1-3], однако результаты, полученные в данных работах, не были интерпретированы в терминах физически измеряемых величин.

ОЦК решетка представляет собой совокупность частиц, находящихся в узлах кубической решетки, а также в центре симметрии каждого куба решетки. Такую решетку имеют многие металлы, в частности, железо. В качестве потенциала межатомного взаимодействия был выбран потенциал Морзе:

$$\Pi = D \left[\exp \left(-2\alpha \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \right) - \exp \left(-\alpha \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \right) \right].$$

Характерным параметром данного потенциала является величина α , определяющая ширину потенциальной ямы. Исследовалась зависимость устойчивости решетки от величины α .

Если выбрать отсчетную частицу и соединить ее векторами \mathbf{a}_β со всеми остальными,

тензор напряжений запишется в виде, данном в [4]: $\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{l^3} \sum_{\beta} \frac{\Pi'(a_\beta)}{a_\beta} \mathbf{a}_\beta \mathbf{a}_\beta$, где l — длина

ребра куба, образующего решетку. Условие равновесия решетки — равенство нулю тензора напряжений. При этом условии тензор жесткости имеет вид [4]:

$${}^4\mathbf{C} = \frac{1}{l^3} \sum_{\beta} \left(\frac{\Pi''(a_\beta)}{a_\beta^2} - \frac{\Pi'(a_\beta)}{a_\beta^3} \right) \mathbf{a}_\beta \mathbf{a}_\beta \mathbf{a}_\beta \mathbf{a}_\beta$$

В качестве критерия устойчивости выбран критерий положительной определенности тензора жесткости. Показано, что в данном случае это условие эквивалентно неравенству $C_1 > C_2 > 0$ (1), где C_1 и C_2 — компоненты тензора жесткости:

$$C_1 = \frac{1}{l^3} \sum_{\beta} \left(\frac{\Pi''(a_\beta)}{a_\beta^2} - \frac{\Pi'(a_\beta)}{a_\beta^3} \right) (\mathbf{a}_\beta \cdot \mathbf{e}_1)^4$$

$$C_2 = \frac{1}{l^3} \sum_{\beta} \left(\frac{\Pi''(a_\beta)}{a_\beta^2} - \frac{\Pi'(a_\beta)}{a_\beta^3} \right) (\mathbf{a}_\beta \cdot \mathbf{e}_1)^2 (\mathbf{a}_\beta \cdot \mathbf{e}_2)^2,$$

где векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 — орты сторон куба, составляющего решетку.

Зависимости $C_1(\alpha)$ и $C_2(\alpha)$ могут быть определены численно. При этом критерий устойчивости (1) принимает вид $\alpha < \alpha_* \cong 4.5176$ (2).

Соотношение (2), в принципе, является критерием устойчивости, однако его выполнение не может быть проверено экспериментально. Для получения верифицируемого критерия устойчивости воспользуемся следующими соображениями.

В [5] было показано, что для данной решетки можно вычислить коэффициент Грюнайзена по формуле $\Gamma = -\frac{\sum_{\beta} ((d+2)\Phi'(a_{\beta}^2)a_{\beta}^2 + 2\Phi''(a_{\beta}^2)a_{\beta}^4)}{d\sum_{\beta} (d\Phi(a_{\beta}^2) + 2\Phi'(a_{\beta}^2)a_{\beta}^2)}$, где $\Phi(a_{\beta}^2) = -\frac{\Pi'(a_{\beta})}{a_{\beta}}$. Это

позволяет получить зависимость коэффициента Грюнайзена от параметра α . Графики такой зависимости для двух типов решеток (для ГЦК — прямая линия, для ОЦК — выпуклая вверх) приведены на рис. 1.

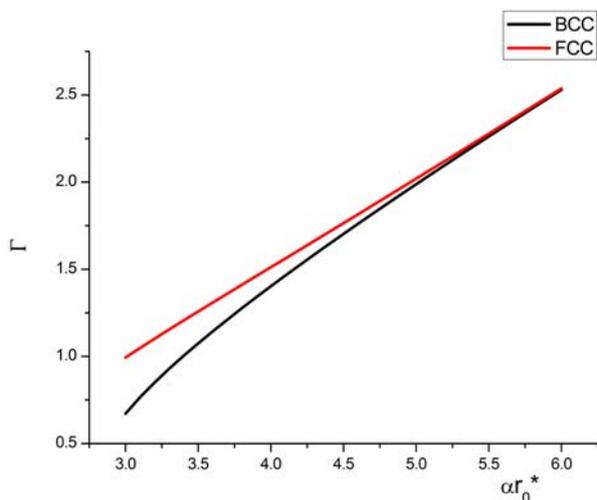


Рис. 1

Как видно, для ОЦК решетки зависимость является монотонной и, следовательно, может быть обращена. Это позволяет получить зависимость $\alpha(\Gamma)$ и, таким образом, установить критерий устойчивости в терминах коэффициента Грюнайзена. Этот критерий имеет вид $\Gamma < \Gamma_* \cong 1.713$ (3). Данный критерий может быть проверен экспериментально. В табл. 1 приведены значения коэффициентов Грюнайзена для металлов с разными типами кристаллической решетки.

Таблица 1.

Металл	Γ	Тип решетки
Тантал	1.69	ОЦК
Ниобий	1.68	ОЦК
Железо	1.68	ОЦК
Молибден	1.58	ОЦК
Никель	1.91	ГЦК
Медь	2.04	ГЦК

По табл. 1 можно заметить, что критерий (3) выполняется для металлов с ОЦК решеткой и не выполняется для металлов, имеющих другую (в частности, ГЦК) решетку. Выше была показана только необходимость условия (3). Доводом же в пользу его достаточности (по крайней мере для металлов, у которых возможны только ОЦК и ГЦК решетки — к таким металлам относится, например, железо) может служить то, что согласно проведенным расчетам энергия ОЦК решетки в области устойчивости всегда меньше, чем у ГЦК.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Milstein, Frederic. Phys. Rev. B, 1971, 4, vol. 3, 1130-1141.
2. Milstein, Frederic. Phys. Rev. B, 1970, 2, vol. 2, 512-518.
3. Girifalco, L. A., Weizer V. G. Phys. Rev. B, 1959, 3, vol. 114, 687-690.
4. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение тел с микроструктурой. М., Физматлит, 2007.
5. Кузькин В. А. Получение уравнения состояния простого кристалла. Сб. конференции «Гагаринские чтения», 2007.