

© Д.С. Сандитов, Д.Н. Цыденова

Россия, Улан-Удэ, Бурятский научный центр СО РАН

© М.В. Дармаев, В.В. Мантатов

Россия, Улан-Удэ, Бурятский государственный университет

О взаимосвязи между упругими и тепловыми характеристиками твердых тел¹

Для твердых тел одного структурного типа термодинамический параметр Грюнайзена γ_D линейно зависит от величины $\gamma_3 = (1 + \mu)/(1 - 2\mu)$, являющейся функцией коэффициента Пуассона μ . По характеру зависимости γ_D от γ_3 можно провести определенную классификацию твердых тел. Показано, что параметр Грюнайзена γ_D является однозначной функцией отношения скоростей продольной и поперечной звуковых волн.

© D.S. Sanditov, M.V. Darmaev, V.V. Mantatov, Sydenova D.N.

On intercoupling between elastic and thermal features of the solids¹

For solids of one structure type thermodynamic Gryunizen's parameter depends linear on value $\gamma_3 = (2 + \mu)/(1 - 2\mu)$, which is a function of Poisson. We can possibly conduct certain categorization of solids on the nature of certain dependencies. It is shown that Gryunizen's parameter γ_D is an unambiguous function of a relation between dilatation and crosscut velocities of sound waves.

На основе представлений физики твердого тела и теории упругости нами показано, что термодинамический параметр Грюнайзена γ_D выражается через коэффициент поперечной деформации (коэффициент Пуассона) μ и скорости звука следующим образом

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

$$A = \frac{3v_l^2}{v_l^2 + 2v_t^2} \cong \text{const}, \quad (2)$$

где v_l и v_t – скорости продольных и поперечных акустических волн, соответственно. В соответствии с равенствами (1) и (2) по отношению к зависимости γ_D от величины $\gamma_3 = (1 + \mu)/(1 - 2\mu)$ кристаллические твердые тела группируются по типу структуры (табл.),

причем внутри каждой группы функция $\gamma_D(\gamma_3)$ является линейной, что подтверждает постоянство коэффициента A для твердых тел одного структурного типа. В качестве примера на рис. 1 приводится зависимость γ_D от γ_3 для веществ, относящихся к III группе (табл.); термодинамический параметр Грюнайзена γ_D рассчитан по уравнению Грюнайзена [1, 2]:

$$\gamma_D = \frac{\beta BV}{C_V}, \quad (3)$$

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

Таблица. Параметр Грюнайзена γ_D , коэффициент Пуассона μ , скорости звука v_l и v_t для ряда веществ (использованы данные из работы [1]. $T=298$ К, $P=10^5$ Па)

№	Группы	Элементы и соединения	γ_D	μ	γ_3	v_l , м/с	v_t , м/с	$A=\gamma_D/\gamma_3$	A (2)	γ_D (5)
1	I	AgCl	2,02	0,409	7,74	3145	1207	0,26	0,34	2,79
2		Au	2,8	0,42	8,88	3361	1239	0,32	0,32	2,88
3		AgBr	2,33	0,396	6,71	2845	1159	0,35	0,37	2,57
4	II	Pb	2,92	0,405	7,39	2158	860	0,4	0,36	2,68
5		Pt	2,54	0,39	6,32	3960	1670	0,4	0,39	2,57
6		CsF	1,49	0,318	3,62	-	-	0,41	-	-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код гранта 05-01-00071а) и гранта БГУ «Лучшая научная школа».

7		Ag	2,4	0,379	5,7	3686	1677	0,42	0,44	2,31
8		Ta	1,73	0,337	4,1	4147	2039	0,42	0,49	2,00

Продолжение таблицы.

№	Группы	Элементы и соединения	γ_0	μ	γ_3	v_l , м/с	v_t , м/с	$\Lambda = \gamma_0/\gamma_3$	A (2)	γ_0 (5)
9		Pd	2,4	0,374	5,45	4954	1977	0,44	0,36	2,68
10		Co	2,1	0,357	4,74	5827	3049	0,44	0,53	1,83
11		Cu	2,06	0,35	4,5	4726	2298	0,46	0,48	2,00
12	III	RbF	1,41	0,276	2,85	3948	2132	0,49	0,55	1,64
13		KNO ₃	1,95	0,331	3,94	-	-	0,49	-	-
14		NaClO ₃	1,37	0,27	2,76	4240	2380	0,5	0,58	1,83
15		CaF ₂	1,63	0,301	3,27	-	-	0,5	-	-
16		Al	2,11	0,34	4,19	6422	3235	0,5	0,5	2,00
17		RbI	1,73	0,309	3,43	2245	1198	0,5	0,54	1,83
18		NaNO ₃	1,31	0,257	2,59	4510	2580	0,51	0,59	1,43
19		Mg	1,41	0,27	2,76	5898	3276	0,51	0,57	1,64
20		Y	1,25	0,245	2,44	4106	2383	0,51	0,6	1,43
21		KClO ₄	1,64	0,296	3,18	-	-	0,52	-	-
22	IV	Fe	1,68	0,292	3,11	6064	3325	0,54	0,56	1,64
23		NaClO ₄	1,56	0,278	2,88	3970	-	0,54	-	-
24		Th	1,4	0,254	2,55	2900	1583	0,55	0,56	1,64
25		RbBr	1,5	0,267	2,72	2591	1403	0,55	0,55	1,64
26		RbCl	1,53	0,268	2,73	3077	1658	0,56	0,55	1,64
27		Ni	2,2	0,33	3,91	-	-	0,56	-	-
28		NaBr	1,56	0,27	2,76	3284	1885	0,57	0,6	1,43
29		KBr	1,68	0,283	2,96	3075	1695	0,57	0,57	1,64
30		W	1,7	0,283	2,96	5233	2860	0,57	0,56	1,64
31	V	NaCl	1,46	0,243	2,42	4666	2755	0,6	0,62	1,43
32		Ni	1,73	0,277	2,86	5894	3219	0,6	0,56	1,64
33		KI	1,63	0,265	2,69	2623	1469	0,61	0,58	1,64
34		Al ₂ O ₃	1,34	0,223	2,21	-	-	0,61	-	-
35		KCl	1,6	0,259	2,61	4090	2312	0,61	0,58	1,64
36		KF	1,73	0,274	2,82	4641	2587	0,61	0,57	1,64
37		LiCl	1,52	0,245	2,44	5260	3058	0,62	0,61	1,43
38		LiF	1,34	0,214	2,12	7323	4518	0,63	0,65	1,21
39	VI	NH ₄ ClO ₄	1,81	0,271	2,78	3800	2130	0,65	0,58	1,64
40		LiBr	1,7	0,256	2,57	3621	2072	0,66	0,59	1,43
41		NaI	1,9	0,274	2,82	2889	1639	0,67	0,59	1,64
42		NaF	1,57	0,234	2,32	-	-	0,68	-	-
43	VII	CaF ₂	1,55	0,224	2,22	-	-	0,7	-	-
44		CsBr	1,93	0,27	2,76	-	-	0,7	-	-
45		U	1,62	0,23	2,28	3422	2105	0,71	0,63	1,21
46		NaF	1,72	0,24	2,38	5666	3330	0,72	0,61	1,43

47		CsCl	1,98	0,264	2,68	-	-	0,74	-	-
48		CsI	2	0,265	2,69	-	-	0,74	-	-
49		Be	0,83	0,034	1,11	13003	8967	0,75	0,73	0,71
50		LiI	2,22	0,265	2,69	2846	1608	0,83	0,58	1,64

Скорости звука v_l и v_t относятся к линейным (гармоническим) величинам, поэтому коэффициент A не зависит от ангармонизма (нелинейности сил межатомного взаимодействия). В соответствии с равенством (1) это означает, что зависимость параметра Грюнайзена от ангармонизма определяется главным образом множителем γ_3 , который является однозначной функцией коэффициента поперечной деформации μ .

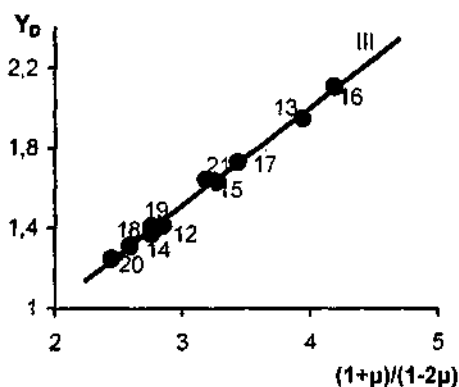


Рис.1

Рис. 1. Линейная корреляция между параметром Грюнайзена γ_D и величиной $(1+\mu)/(1-2\mu)$, где μ - коэффициент Пуассона. Номера точек соответствуют номерам веществ в таблице (группа III)

Аналогичные графики $\gamma_D - \gamma_3$ были построены для оптических стекол. Необходимые экспериментальные данные брали из справочника [2]. Величину γ_D рассчитывали по уравнению Грюнайзена (3). Термодинамический параметр Грюнайзена γ_D для неорганических оптических стекол слабо зависит от природы этих систем. Тем не менее, у стекол с высоким коэффициентом Пуассона, как правило, ангармонизм выражен сильнее, чем у стекол с низким коэффициентом поперечной деформации. Так, например, у сверхтяжелого крона СТК12 имеем $\mu=0,288$ и $\gamma_D=0,86$, а у легкого крона ЛК7 - $\mu=0,191$ и $\gamma_D=0,41$. Как и следовало ожидать, для ряда оптических стекол одного структурного типа зависимость γ_D от величины $\gamma_3=(1+\mu)/(1-2\mu)$ оказывается линейной (рис.2).

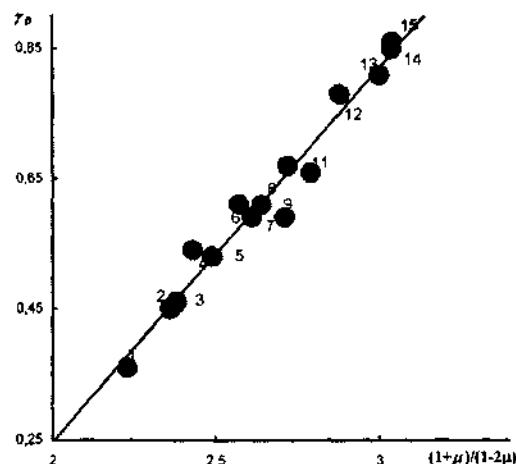


Рис. 2. Линейная корреляция между параметром Грюнайзена γ_D и величиной $(1+\mu)/(1-2\mu)$ для оптических стекол. ОФ1 (1), ТФ4 (2), БФ28 (3), ФК14 (4), ТФ7 (5), ФК14 (6), ТК4 (7), ТК23 (8), ТК8 (9), ТК16 (10), ТК20 (11), ТК17(12), ТК21 (13), СТК12 (14) и БФ16 (15) [9].

Известно, что коэффициент поперечной деформации μ однозначно определяется скоростями звука

$$\mu = \frac{2 - (v_l/v_t)^2}{2 + 2(v_l/v_t)^2}. \quad (4)$$

Подстановка μ из (4) в соотношение (1) с учетом (2) приводит к выводу о том, что и параметр Грюнайзена определяется скоростями звука

$$\gamma_D = \frac{3}{2} \left[\frac{3(v_l/v_t)^2 - 4}{(v_l/v_t)^2 + 2} \right]. \quad (5)$$

Расчет γ_D по этой формуле находится в удовлетворительном согласии с результатом, следующим из уравнения Грюнайзена (3) (табл.).

Литература

1. Беломестных В.Н. Акустический параметр Грюнайзена твердых тел // Письма в ЖТФ. – 2004. – Т. 30. – Вып. 3. – С. 15-19.
2. Стекло оптическое бесцветное. Физико-химические характеристики. – СПб.: Изв-во стандартов. – 1999. – 58 с.