http://pti-nt.ru
2019, №2

УПРУГИЕ ПОСТОЯННЫЕ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

О.М. Красильников, А.В. Луговской, Ю.Х. Векилов

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
Ленинский просп. 4, 119049 Москва, Российская Федерация,
e-mail: omkras@mail.ru

FOURTH ORDER ELASTIC CONSTANTS OF POLYCRYSTALS

O.M. Krasilnikov, A.V. Lugovskoy, Yu.Kh. Vekilov

National Research Technological University ‘MISiS’,
4 Leninskiy ave., Moscow, 119049 Russian Federation,
e-mail: omkras@mail.ru

Дано определение констант Ламе четвертого порядка (КЛЧП). Для изотропного агрегата монокристаллических зерен с кубической структурой КЛЧП выражены через упругие постоянные четвертого порядка монокристалла. Численные результаты получены для поликристаллического вольфрама в интервале давлений 0 - 600 ГПа.

The definition of the fourth order Lame constants (FOLCs) is given. FOLCs for the isotropic aggregate of monocrystalline grains with the cubical structure are expressed via the fourth order elastic constants of single crystal. The numerical results are obtained for the polycrystalline tungsten in the pressure interval of 0 - 600 GPa.

Упругие постоянные высшего порядка играют важную роль в физике твердого тела, поскольку непосредственно определяются ангармонизмом кристаллической решетки. В первую очередь это относится к упругим постоянным третьего (УПТП) и четвертого (УПЧП) порядка. Упругие постоянные второго порядка (УПВП) определяют линейный отклик, а УПТП и УПЧП характеризуют нелинейный отклик монокристаллического образца на конечные деформации. Они определяют зависимость скорости звука от температуры и давления, генерацию высших гармоник, искажение формы волны при распространении в твердом теле ультразвуковых волн конечной амплитуды и т.д.

Изучение поликристаллических материалов более интересно с точки зрения практического применения. Упругие модули поликристалла (константы Ламе) можно получить усреднением упругих постоянных различного порядка по всем ориентациям монокристаллических зерен, из которых состоит поликристалл [1-4]. В работах [2-4] приведены соотношения между константами Ламе второго порядка (КЛВП), константами Ламе третьего порядка (КЛТП) и упругими постоянными монокристалла (УПВП и УПТП, соответственно) при атмосферном давлении. Обобщение этих соотношений на случай поликристалла при произвольном гидростатическом давлении P сделано в [5]. Соответствующие соотношения для констант Ламе четвертого порядка (КЛЧП) в литературе отсутствуют.

Экспериментальное определение упругих свойств высшего порядка как для моно-, так и для поликристаллов трудная задача даже при атмосферном давлении. Поэтому важным является использование теоретического моделирования для расчета нелинейных упругих модулей при произвольном давлении. Теория функционала плотности (DFT) позволяет вычислить из «первых принципов» энергию кристалла при различных объемах элементарной ячейки (т.е. различных давлениях). Это дает возможность рассчитать упругие постоянные различного порядка монокристалла при заданном давлении [6]. Использование соотношений между константами Ламе и упругими постоянными монокристалла различного порядка позволяет оценить нелинейные упругие свойства поликристалла при конкретном P.

В настоящей работе получены соотношения между константами Ламе четвертого порядка и УПЧП монокристалла. Рассмотрен случай поликристалла, представляющего собой изотропный агрегат монокристаллических зерен с кубической решеткой при произвольном давлении.

Рассмотрим изотропное твердое тело, находящееся в равновесном состоянии при давлении P и температуре T, которое подвергнуто дополнительной малой, но конечной деформации η_{ij}. При заданных P и T для описания состояния системы используем свободную энергию Гиббса G. Величина G деформированного изотропного тела не должна зависеть от выбора системы координат. Она инвариантна относительно вращения и перемещения тела как целого. Это возможно только в том случае, когда энергия Гиббса является функцией инвариантов тензора деформации. Тензор деформации имеет три инварианта: первой, второй и третьей степени по η_{ij} (I_1, I_2 и I_3, соответственно) [7]. Поскольку деформации считаются конечными, но малыми, G можно разложить в ряд вблизи недеформированного состояния. Так как энергия Гиббса в равновесном состоянии имеет минимум, то разложение начинается с квадратичных по деформации членов. Выражение для свободной энергии Гиббса при заданных P и T на единицу объема в недеформированном состоянии V_0 с учетом членов четвертого порядка по компонентам тензора конечных деформаций Лагранжа η_{ij} можно представить в виде:

$$\frac{\Delta G}{V_0}=\frac{\lambda+\mu}{2}I_1^2-2\mu I_2+\frac{\nu_1+6\nu_2+8\nu_3}{6}I_1^3-2(\nu_2+2\nu_3)I_1I_2+4\nu_3I_3+$$
$$+\frac{1}{24}\xi_1I_1^4-\left(\frac{\xi_1-\xi_2}{8}+\frac{\xi_4}{3}\right)I_1^2I_2+\left(\frac{\xi_1-\xi_2}{8}+\frac{\xi_4}{3}-\xi_3\right)I_1I_3+\frac{2}{3}\xi_4I_2^2 \qquad (1)$$

Здесь $\Delta G = G(P,T,\eta)-G(P,T,0)$, λ и μ – КЛВП, ν_i – КЛТП и ξ_i – КЛЧП. При таком определении констант Ламе 2 и 3 порядка все они совпадают с упругими модулями соответствующего порядка изотропного твердого тела [2-5].

$$\lambda=C^*_{12},\ \mu=C^*_{44},\ \nu_1=C^*_{123},\ \ \nu_2=C^*_{144},\ \nu_3=C^*_{456} \qquad (2)$$

Что касается определения КЛЧП, использованного нами в (1), то как будет показано ниже:

$$\xi_1=C^*_{1111},\ \xi_2=C^*_{1122},\ \xi_3=C^*_{1144},\ \xi_4=C^*_{4444} \qquad (3)$$

Здесь $C^*_{\alpha\beta..}$ даны в обозначениях Фойгта (11 – 1, 22 – 2, 33 – 3, 23 – 4, 13 – 5, 12 – 6).

Поликристалл можно рассматривать как изотропный агрегат монокристаллических зерен. Для расчета изотропных упругих модулей (констант Ламе) такой системы обычно используют метод усреднения, предложенный Фойгтом [3,4]. Полагают, что микроскопическая деформация в отдельных монокристаллических зернах равна макроскопической или средней деформации. Тогда, согласно Фойгту, упругие модули поликристалла равны усредненному по всем направлениям тензору упругих постоянных монокристалла. В работах [2-5] приведены соотношения, связывающие КЛВП и КЛТП с УПВП и УПТП кубических и гексагональных кристаллов как при $P=0$, так и при произвольном P.

Чтобы рассчитать средние значения упругих постоянных четвертого порядка по Фойгту УПЧП монокристалла должны быть усреднены по всем ориентациям отдельных зерен. При повороте декартовой системы координат компоненты тензора восьмого ранга преобразуются по закону:

$$C'_{ijklmnop}=a_{iq}a_{jr}a_{ks}a_{lt}a_{mu}a_{nv}a_{ow}a_{px}C_{qrstuvwx}, \qquad (4)$$

где $a_{iq},\ldots$ матрицы направляющих косинусов между соответствующими координатными осями. Проблема получения среднего по всем углам значения $C'_{ijklmnop}$ сводится к нахождению среднего произведения матриц поворота $a_{iq},\ldots$. В случае тензоров высокого ранга удобно использовать метод, использованный в целом ряде работ (см. [3,8,9]) для определения средних значений УПТП.

При случайной ориентации такие линейные средние могут быть вычислены из условия, что линейные инварианты двух тензоров, представляющих монокристалл и поликристалл, должны быть равны. Тензор УПЧП имеет четыре линейных инварианта, которые остаются неизменными при любом ортогональном преобразовании векторного базиса. Для получения этих инвариантов нужно матрицы поворота в (4) сгруппировать по парам и их индексы изменить таким образом, чтобы каждая пара становилась дельта символом Кронекера [10]. Например, если взять *i=j, k=l, m=n* и *o=p,* то найдем, что

$$L_1 = C'_{iikkmmpp} = (a_{iq}a_{ir})(a_{ks}a_{kt})(a_{mu}a_{mv})(a_{pw}a_{px})C_{qrstuvwx}$$
$$= \delta_{qr}\delta_{st}\delta_{uv}\delta_{wx}C_{qrstuvwx} \quad (5a)$$

Полагая *i=m, j=n, k=o* и *l=p*, получим второй инвариант:

$$L_2 = C'_{ijklijkl} = \delta_{qu}\delta_{rv}\delta_{sw}\delta_{tx}C_{qrstuvwx} \quad (5b)$$

Точно также, взяв *i=k, j=m, l=o, n=p*, найдем:

$$L_3 = C'_{ijiljn\ln} = \delta_{qs}\delta_{ru}\delta_{tw}\delta_{vx}C_{qrstuvwx} \quad (5c)$$

и при *i=l, j=n, k=m, 0=p* получим:

$$L_4 = C'_{ijkikjoo} = \delta_{qt}\delta_{rv}\delta_{su}\delta_{wx}C_{qrstuvwx} \quad (5d)$$

Как обычно, по повторяющимся индексам идет суммирование от 1 до 3. В случае кубической симметрии (точечные группы $\bar{4}32, 432, \frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$, одиннадцать УПЧП [7]) выражения для линейных инвариантов (5) принимают вид:

$$L_1^c = 3C_{1111} + 24C_{1112} + 18C_{1122} + 36C_{1123} \quad (6a)$$

$$L_2^c = 3C_{1111} + 6C_{1122} + 12C_{1144} + 24C_{1155} + 12C_{4444} + 24C_{4455} \quad (6b)$$

$$L_3^c = 3C_{1111} + 24C_{1155} + 12C_{1266} + 24C_{1456} + 6C_{4444} + 12C_{4455} \quad (6c)$$

$$L_4^c = 3C_{1111} + 6C_{1112} + 18(C_{1155} + C_{1255} + C_{1266} + C_{1456}) \quad (6d)$$

Запишем слагаемое четвертого порядка в разложении $\Delta G / V_0$ (1) по компонентам тензора деформации, используя связь I_1 ,I_2 and I_3 с η_{ij}. Из сравнения полученного выражения с соответствующим разложением для кубического кристалла (см. [6]) найдем связь между упругими константами изотропного материала $C^*_{\alpha\beta\gamma\delta}$ и КЛЧП.

$$C^*_{1111} = \xi_1;\ C^*_{1122} = \xi_2;\ C^*_{1144} = \xi_3;\ C^*_{4444} = \xi_4;\ C^*_{1112} = \frac{\xi_1 + 3\xi_2 - 8\xi_4}{4};$$

$$C^*_{1123} = \xi_2 - 2\xi_3;\ C^*_{1155} = \frac{3(\xi_1 - \xi_2) + 8\xi_4}{24};\ C^*_{1255} = \frac{\xi_1 - \xi_2 + 8(\xi_3 - \xi_4)}{16};$$

$$C^*_{1266} = \frac{3(\xi_1 - \xi_2) - 8\xi_4}{24};\ C^*_{1456} = \frac{3(\xi_1 - \xi_2 - 8\xi_3) + 8\xi_4}{96};\ C^*_{4455} = \frac{\xi_4}{3} \quad (7)$$

Линейные инварианты поликристалла, соответствующие усреднению по Фойгту, выраженные через константы Ламе, могут быть получены из (6) и (7). В результате:

$$L_1^{is} = 3(3\xi_1 + 24\xi_2 - 24\xi_3 - 16\xi_4) \quad (8a)$$

$$L_2^{is} = 6\xi_1 + 3\xi_2 + 12\xi_3 + 28\xi_4 \quad (8b)$$

$$L_3^{is} = (33\xi_1 - 21\xi_2 - 24\xi_3 + 64\xi_4)/4 \quad (8c)$$

$$L_4^{is} = 3(57\xi_1 - 9\xi_2 + 24\xi_3 - 104\xi_4)/16 \quad (8d)$$

Приравнивая инварианты (6) и (8) и решая полученную систему уравнений относительно ξ_i, найдем:

$$\xi_1 = \frac{1}{105}(35C_{1111} + 40C_{1112} + 18C_{1122} + 12C_{1123} + 24C_{1144} + 240C_{1155} +$$
$$+96C_{1255} + 144C_{1266} + 192C_{1456} + 48C_{4444} + 96C_{4455}) \quad (9a)$$

$$\xi_2 = \frac{1}{35}(C_{1111} + 8C_{1112} + 14C_{1122} + 12C_{1123} + 16C_{1144} - 16C_{1266} -$$
$$-32C_{1456} + 8C_{4444} + 16C_{4455}) \tag{9b}$$
$$\xi_3 = \frac{1}{105}(C_{1111} + 2C_{1112} + 12C_{1122} - 15C_{1123} + 39C_{1144} + 6C_{1155} -$$
$$-18C_{1266} + 36C_{1255} - 72C_{1456} + 12C_{4444} + 24C_{4455}) \tag{9c}$$
$$\xi_4 = \frac{1}{35}(C_{1111} - 4C_{1112} + 3C_{1122} + 6C_{1144} + 12C_{1155} - 12C_{1255} -$$
$$-6C_{1266} + 9C_{4444} + 8C_{4455}) \tag{9d}$$

В качестве примера, вычислим КЛЧП вольфрама, для которого имеется полный набор УПЧП. В работе [6] упругие постоянные ОЦК W получены методом DFT в интервале давлений 0-600 ГПа (*T=0K*). Результаты вычислений с использованием соотношений (9) приведены на рис. 1 и 2:

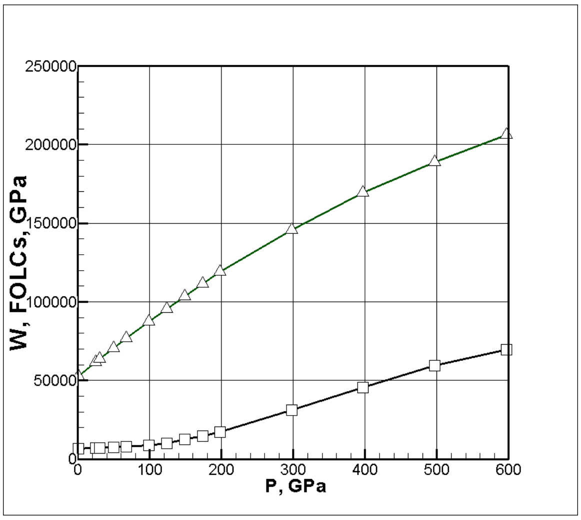

Рис.1 - Зависимость от давления КЛЧП (FOLCs) ξ_1 и ξ_2: треугольник - ξ_1, квадрат - ξ_2

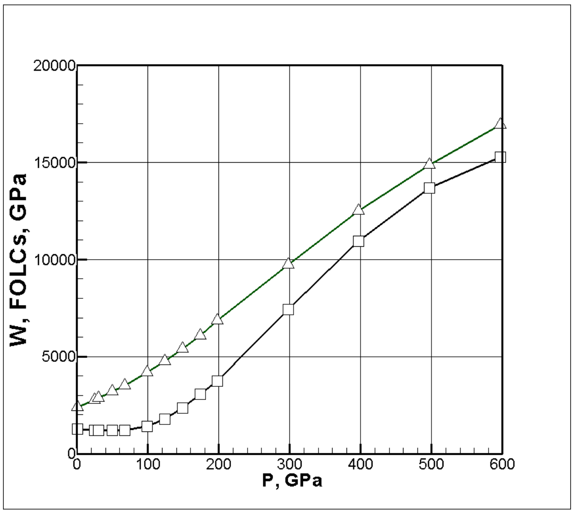

Рис.2 - Зависимость от давления КЛЧП (FOLCs) ξ_3 и ξ_4: треугольник - ξ_3, квадрат - ξ_4

Видно, что все четыре КЛЧП положительны и монотонно увеличиваются с ростом давления. Как следует из [5] аналогичное поведение с давлением демонстрируют КЛВП и КЛТП. Константа Ламе ξ_1 значительно превосходит по величине остальные, т.к. она связана с самой большой упругой постоянной C^*_{1111}.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 16-02-00699, грант 16-02-01027) и Министерства образования и науки (грант No 14.Y26.31.0005).

Список использованных источников:

1. *Toupin R.A, Bernstein B.*// J. Acoust. Soc. Am., 1961. – V. 33. – P. 216.

2. *Chang R.//* Appl. Phys. Lett., 1967. – V.11. – P. 305.

3. *Barsch G.R. //* J. Appl. Phys., 1968. – V. 39.- P.3780.

4. *Lubarda V.A*. // J. Mech. Phys. Solids, 1997. – 45. – P. 471.

5. *Krasilnikov O.M., Lugovskoy A.V., Vekilov Yu.Kh., Lozovik Yu.E. //* Mat. Des., 2018. – 139, 1.

6 *Vekilov Yu.Kh., Krasilnikov O.M., Lugovskoy A.V., Lozovik Yu.E.,* // Phys. Rev., 2016. - B 94. – P. 104114.

7. *Wallace D.C.,* in *Solid State Physics*, edited by F.S. Henry Ehrenreich and D. Turnbull (Academic Press, New York, 1970), p.301.

8 *Chang R., Graham L.J.//* Mat. Res. Bull., 1968. – V. 3. – P. 745.

9. *Wasserbach W.* // Phys. Stat. Sol. (b), 1990. – V.159. _P. 689.

10. *Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П.*, Основы кристаллофизики М.: «Наука», 1979.