

Б.С. Сыдыков, аспирант
М.А. Цыренова, студентка
Д.С. Сандитов, д-р физ.-мат. наук, проф., e-mail: sanditov@bsu.ru
Бурятский государственный университет, г. Улан-Удэ

УДК 539.213; 534.22; 541.64

О ВЗАИМОСВЯЗИ МЕХАНИЧЕСКИХ И ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ СТЕКЛООБРАЗНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Для неорганических стекол установлено постоянство произведения квадрата коэффициента теплового расширения α^2 и модуля упругости при одноосной деформации E . Наблюдается линейная корреляция между E и $1/\alpha^2$ для большинства исследованных стекол. Обсуждается природа связи между гармоническими и ангармоническими свойствами твердых тел.

Ключевые слова: *стекла, модуль упругости, коэффициент теплового расширения, гармонические и ангармонические величины.*

B.S. Sydykov, P.G.
M.A. Tsyrenova, Student
D.S. Sanditov, D.Sc. Physics and Maths, Prof.

RELATIONSHIP BETWEEN MECHANICAL AND THERMAL PROPERTIES OF VITREOUS SOLIDS

Constancy of the square product of the thermal expansion coefficient α^2 and elastic modulus in uniaxial strain E for inorganic glasses is determined. A linear correlation between E and $1/\alpha^2$ is observed for the most of the studied glasses. The nature of the relationship between harmonic and anharmonic properties of solids is discussed.

Key words: *glass, elastic modulus, thermal expansion coefficient, harmonic and anharmonic values.*

Введение

Р. Баркер (R. Barker) [1] для 68 различных твердых тел (в основном для металлов и аморфных полимеров) установил, что произведение модуля упругости при одноосной деформации E на квадрат коэффициента теплового линейного расширения (КТР) α^2 есть величина постоянная.

$$\alpha^2 E = 150 (\text{дин} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-2}). \quad (1)$$

Данная статья посвящена применению этого правила к двухкомпонентным силикатным, германатным, боратным, фосфатным и халькогенидным стеклам. Необходимые экспериментальные данные взяты из базы данных SciGlass [2] и справочника [3].

Результаты обработки экспериментальных данных

У большинства исследованных нами стеклообразных систем данное правило выполняется вполне удовлетворительно. Например, у бескислородных халькогенидных стекол P-Se в достаточно широком интервале содержания P (от 2 до 21 мол. %) указанное произведение постоянно (табл.): $\alpha^2 E = 160 (\text{дин} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-2})$, и между E и $1/\alpha^2$ наблюдается линейная корреляция (рис. 1). Вместе с тем у ряда стекол произведение $\alpha^2 E$ постоянно, однако численное значение существенно отличается от правила Баркера (1), в частности, у свинцовоборатных стекол (табл., рис. 2).

Обсуждение полученных результатов

Особенность правила Баркера заключается в том, что равенство (1) однозначно связывает линейную (гармоническую) E и нелинейную (ангармоническую) α величины. Встречаются другие подобные корреляции [4-9], например, соотношение Беломестных-Теслевой [7], выражающее связь параметра Грюнайзена γ с функцией коэффициента Пуассона μ ,

$$\gamma = \frac{3}{2} \left(\frac{1 + \mu}{2 - 3\mu} \right), \quad (2)$$

где μ – гармоническая; γ – ангармоническая величины.

Таблица

Коэффициент теплового линейного расширения α и модуль упругости при одноосной деформации E для ряда стекол

№	Состав стекла, мол.%		$E \cdot 10^{-9}$, дин·см ⁻²	$\alpha \cdot 10^7$, К ⁻¹	$\alpha^2 E$, дин·см ⁻² ·К ⁻²
	P	Se			
1	2,02	97,98	101	400	162
2	4,18	95,82	104	392	161
3	8,93	91,07	120	370	164
4	8,93	91,07	116	375	164
5	13,58	86,42	115	370	158
6	20,73	79,27	113	383	166
7	PbO	B ₂ O ₃			
	12,8	87,2	311	94	28
8	15,2	84,8	364	83	25
9	16,2	83,8	407	79	25
10	17,7	82,3	449	74	24
11	18,5	81,5	497	71	25

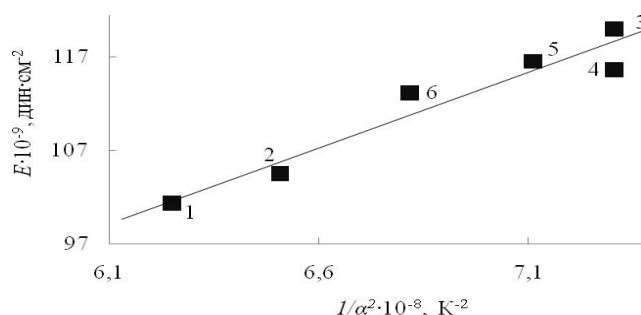


Рис. 1. Линейная корреляция между модулем упругости E и обратной величиной квадрата коэффициента теплового расширения α стекол P-Se. Номера точек соответствуют номерам стекол в таблице

Вместе с тем в настоящее время природа этого явления остается во многом неясной. Часто встречается представление о том, что гармонические и ангармонические характеристики являются независимыми друг от друга свойствами твердых тел. Представляет интерес работа Т.А. Конторовой [4], где на основе приближенного подхода сделана попытка качественно объяснить данный факт.

В рамках одномерной модели твердого тела потенциальная энергия межатомного взаимодействия двух смежных частиц записывается в виде

$$U \cong \frac{ax^2}{2} - \frac{bx^3}{6},$$

где $a = (d^2U/dr^2)_{r=r_0}$ – гармонический; $b = -(1/2)(d^3U/dr^3)_{r=r_0}$ – ангармонический коэффициенты в разложении $U(x)$ в ряд по смещениям частиц из равновесного положения $x = (r - r_0)$. Используя в указанных производных уравнение Т.А. Конторова [4]

$$U = -Ar^{-m} + Br^{-n}, \quad (3)$$

получаем следующую связь между гармоническим и ангармоническим коэффициентами:

$$b = \left(\frac{m+n+3}{2r_0} \right) a. \quad (4)$$

Она установила функциональную зависимость коэффициента теплового расширения и модуля упругости (и других подобных свойств) от этих коэффициентов a и b . Отсюда объясняется обсуждаемое явление наличием связи между a и b типа (4) и зависимостью от них линейных и нелинейных свойств твердых тел.

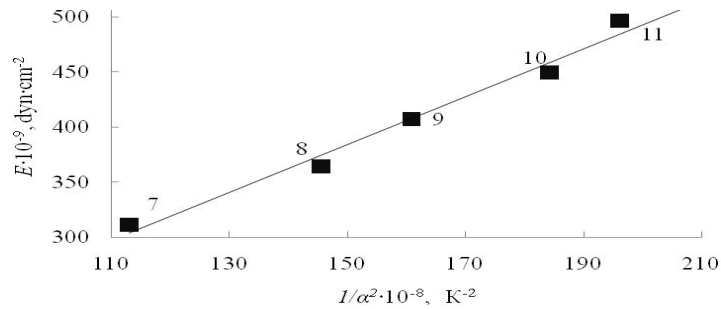


Рис. 2. Линейная корреляция между модулем упругости E и обратной величиной квадрата коэффициента теплового расширения α стекол $\text{PbO-B}_2\text{O}_3$. Номера точек соответствуют номерам стекол в таблице

Таким образом, подход Конторовой указывает на принципиальную возможность реализации корреляций между, казалось бы, совершенно различными по своей природе физическими свойствами твердых тел, в том числе гармоническими и ангармоническими величинами. Причиной существования этих связей является общность закона взаимодействия между частицами для данной группы твердых тел [4].

Полный ответ на данный вопрос можно получить только при условии знания функции $U(x)$ и наличия микроскопических теорий гармонических и ангармонических свойств. К сожалению, в настоящее время нет таких общепризнанных микроскопических теорий и строго установленной функции $U(x)$.

Элементарная молекулярная теория теплового расширения твердых тел по Френкелю [5] приводит к выводу о том, что у твердых тел, у которых молярные объемы близки $V \approx const$, произведение КТР на модуль упругости есть величина постоянная [10]:

$$\alpha E \approx \frac{R}{2V} \approx const, \quad (5)$$

где R – универсальная газовая постоянная.

Р. Баркер [1] показал, что у однородных изотропных твердых тел разность теплоемкостей

$$C_p - C_v = 9\alpha^2 B_T V T$$

с привлечением формулы теории упругости

$$B_T = \frac{E}{3(1-2\mu)}$$

может быть выражена через произведение $\alpha^2 E$. Он приходит к заключению, что постоянство произведения $\alpha^2 E$ означает постоянство отношения $(C_p - C_v)/V$. Из правила Баркера, устанавливающего взаимосвязь между гармонической и ангармонической величинами, следует, что глубина потенциальной ямы влияет на форму кривой потенциала $U(x)$ [1].

Заключение

У двухкомпонентных неорганических стекол разных классов при определенных изменениях содержания компонентов произведение квадрата коэффициента линейного теплового расширения на модуль упругости остается постоянной величиной: $\alpha^2 E \approx const$. В соответствии с этим правилом между E и $1/\alpha^2$ наблюдается линейная корреляция. Причиной существования определенной связи между гармоническими и ангармоническими величинами является общность закона взаимодействия между атомами (молекулами) для данного класса стекол.

Библиография

1. *Barker R.E.* An approximate relation between elastic moduli and thermal expansivities // *J. Appl. Phys.* – 1963. – Vol. 34, N 1. – P. 107–116.
2. *SciGlass 6.6.* 2006 Institute of Theoretical Chemistry, Shrewsbury, MA (www.sciglass.info).
3. *Мазурин О.В., Стрельцина М.В., Швайко-Швайковская Т.Н.* Свойства стекол и стеклообразующих расплавов: справочник. Т.1. – Л.: Наука, 1973. – 444 с.
4. *Конторова Т.А.* О связи между механическими и тепловыми характеристиками кристаллов // *Некоторые проблемы прочности твердых тел / под. ред. С.Н. Журкова.* – М.: Изд-во АН СССР, 1959. – С. 99–107.
5. *Френкель Я.И.* Введение в теорию металлов. – Л.; М.: ОГИЗ, 1948. – 291 с.
6. *Сандитов Д.С., Беломестных В.Н.* Взаимосвязь параметров теории упругости и эффективный модуль упругости // *Журн. техн. физики.* – 2011. – Т. 81, вып. 11. – С. 77–81.
7. *Беломестных В.Н., Теслева Е.П.* Взаимосвязь ангармонизма и поперечной деформации квазиизотропных поликристаллических тел // *Журн. техн. физики.* – 2004. – Т. 74, вып. 8. – С. 140–142.
8. *Сандитов Д.С., Козлов Г.В.* Ангармонизм межатомных и межмолекулярных связей и физико-механические свойства полимерных систем // *Физика и химия стекла.* – 1995. – Т. 21, № 5. – С. 549–578.
9. *Сандитов Д.С., Цыдыпов Ш.Б.* Взаимосвязь между параметром Грюнаизена и коэффициентом Пуассона стеклообразных систем // *Акустический журнал.* – 2007. – Т. 53, № 4. – С. 613–618.
10. *Жуковский В.К., Гохман А.Р.* Связь коэффициента линейного теплового расширения с остаточными напряжениями // *Журн. техн. физики.* – 2009. – Т. 79, вып. 4. – С. 90–96.

Bibliography

1. *Barker R.E.* An approximate relation between elastic moduli and thermal expansivities // *J. Appl. Phys.* – 1963. – Vol. 34, N 1. – P. 107–116.
2. *SciGlass 6.6.* 2006 Institute of Theoretical Chemistry, Shrewsbury, MA (www.sciglass.info).
3. *Mazurin O.V., Streltsina M.V., Shvayko-Shvaykovskaya T.N.* Properties of glasses and vitreous melt. Handbook. Vol. 1. – L.: Nauka, 1973. – 444 p.
4. *Kontorova T.A.* The relationship between mechanical and thermal properties of crystals // *Some problems of strength of solids / edited by S.N. Zhurkova.* – M.: Publishing House of the USSR Academy of Sciences, 1959. – P. 99–107.
5. *Frenkel Ya.I.* Introduction to the theory of metals. – L.; M.: OGIZ, 1948. – 291 p.
6. *Sanditov D.S., Belomestnykh V.N.* The relationship between parameters of the theory of elasticity and the effective elastic modulus // *Zhurnal tehknicheskoy fiziki.* – 2011. – Vol. 81, Issue. 11. – P. 77–81.
7. *Belomestnykh V.N., Tesleva E.P.* The relationship between the anharmonicity and transverse deformation of quasi-isotropic polycrystalline solids // *Zhurnal tehknicheskoy fiziki.* – 2004. – Vol. 74, Issue. 8. – P. 140–142.
8. *Sanditov D.S., Kozlov G.V.* Anharmonicity of the interatomic and intermolecular bonds and physical mechanical properties of polymer systems // *Fizika i Khimiya Stekla.* – 1995. – Vol. 21, N 5. – P. 549–578.
9. *Sanditov D.S., Tsydyпов Sh.B.* The relationship between the Gruneisen parameter and a Poisson coefficient of glassy systems // *Akusticheskij Zhurnal.* – 2007. – Vol. 53, N 4. – P. 613–618.
10. *Zhukovsky V.K., Gokhman A.R.* Relationship of the coefficient of linear expansion with the residual stress // *Zhurnal tehknicheskoy fiziki.* – 2009. – Vol. 79, Issue. 4. – P. 90–96.