

К определению упругих характеристик кристаллической решетки алмаза при учете углового взаимодействия между частицами

С.С. Хакало, А.М. Кривцов, О.С. Лобода

В работе рассматривается модель решетки алмаза при угловом взаимодействии между частицами. Выводятся коэффициенты и модули тензора жесткости. Результаты сопоставляются с экспериментальными данными. Проводится сравнение с моделью решетки алмаза при моментном взаимодействии.

1 Описание модели. Вывод коэффициентов

Алмаз — одна из аллотропных форм углерода, минерал со сложной кристаллической структурой. Алмаз является ортотропным материалом, то есть он имеет 3 взаимно перпендикулярные плоскости симметрии. Это хорошо показано на рисунке 1, где в качестве плоскостей симметрии выступают грани куба.

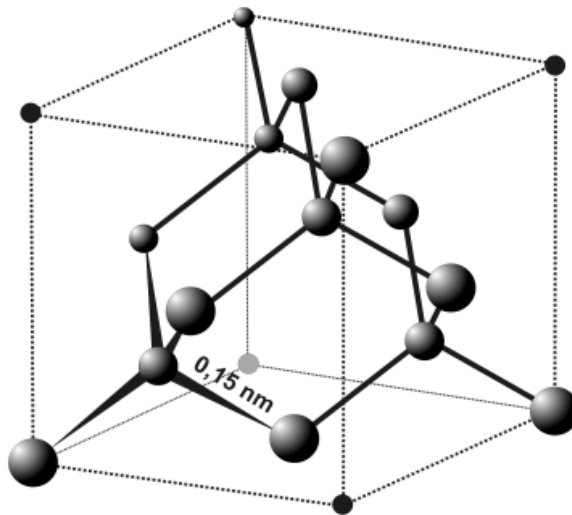


Рис. 1: Фрагмент кристаллической решетки алмаза

Рассмотрим модель решетки алмаза, представленную на рисунке 2. Она представляет собой идеальную двухатомную кристаллическую решетку, атомы которой в недеформированном состоянии расположены в центре и вершинах правильного тетраэдра.

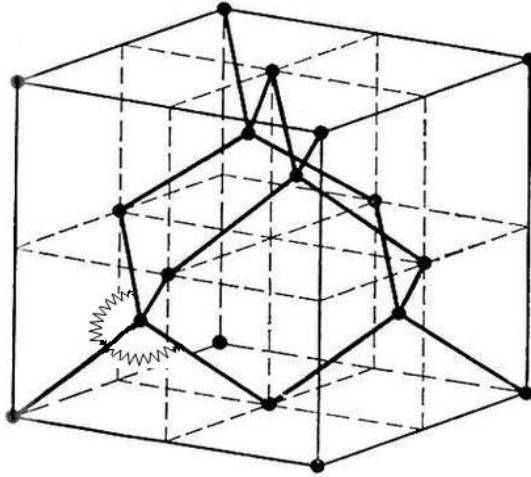


Рис. 2: Модель решетки алмаза

Связь между атомами будет осуществляться при помощи продольных пружин с жесткостью s и угловых пружин с жесткостью γ . Элементарная ячейка такой решетки содержит два атома. Будем условно называть их атомами первого и второго типа. Атомы каждого типа образуют простую кристаллическую решетку, причем эти решетки при наложении друг на друга совпадут. Выберем один из атомов первого типа и назовем его отсчетным. Будем считать, что каждый атом взаимодействует только с ближайшими. Из рисунка 2 видно, что каждый атом окружает только 4 соседних. Соответствующие связи пронумеруем от 1 до 4. Впишем базис так, чтобы его векторы были перпендикулярны плоскостям симметрии решетки. Тогда орты направлений связей между атомами будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}), & \mathbf{n}_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{n}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}), & \mathbf{n}_4 &= \frac{-1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (1)$$

В работе [1] были получены следующие формулы для ортотропного материала:

$${}^4\mathbf{C} = \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}, \quad (2)$$

где

$$\mathbf{J}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, \quad \mathbf{J}_{23} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n.$$

Здесь ${}^4\mathbf{C}$ – макроскопический тензор жесткости ортотропного материала; \mathbf{J}_1 и \mathbf{J}_{23} – изотропные тензоры 4-го ранга; κ , λ и μ – обобщенные коэффициенты Ляме; \mathbf{e}_k и \mathbf{e}_n – орты некоторого произвольного базиса.

Макроскопический тензор жесткости получается из выражения для энергии деформирования материала:

$$W = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \cdot \varepsilon, \quad {}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C}^T, \quad (3)$$

где

$${}^4\mathbf{C}^* = \frac{2}{V_0} \left(H_1 \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + H_2 \sum_{\alpha, \beta=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta + H_3 \sum_{\alpha, \beta=1}^4 (\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta) \right), \quad (4)$$

$${}^3\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} H_4 \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad {}^2\mathbf{C} = \frac{2}{V_0} H_5 \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad V_0 = \frac{16\sqrt{3}}{9} a^3.$$

Здесь W – энергия деформирования материала; ε – тензор деформации; ${}^4\mathbf{C}^*$, ${}^3\mathbf{C}$ и ${}^2\mathbf{C}$ – промежуточные тензоры жесткости; V_0 – объем элементарной ячейки кристалла; a – длина межатомной связи. Штрих у знака суммы означает, что суммирование ведется по смежным связям.

Коэффициенты H_k для алмаза принимают вид:

$$H_1 = \frac{1}{2} c a^2 - \frac{9}{8} c_\gamma a^2, \quad H_2 = \frac{1}{8} c_\gamma a^2, \quad H_3 = \frac{9}{8} c_\gamma a^2, \quad (5)$$

$$H_4 = c a^2 - 4 c_\gamma a^2, \quad H_5 = \frac{1}{2} c a^2 + 4 c_\gamma a^2,$$

где $c_\gamma = \frac{\gamma}{a^2}$ – приведенная жесткость углового взаимодействия.

Подставляем полученные коэффициенты H_k и значения векторов \mathbf{n}_k из выражения (1) в формулы для промежуточных тензоров жесткости (4). С помощью полученных формул находим макроскопический тензор жесткости (3) для алмаза. Приводя этот тензор к виду (2), получаем следующие выражения для обобщенных коэффициентов Ляме:

$$\kappa = \frac{3\sqrt{3}}{2a} c_\gamma \frac{8c_\gamma - c}{c + 8c_\gamma}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c - 6c_\gamma), \quad \mu = \frac{3\sqrt{3}}{2a} \frac{c c_\gamma}{c + 8c_\gamma}. \quad (6)$$

Воспользуемся формулами для компонентов тензора жесткости C_{11}, C_{12}, C_{66} ; модуля объемного сжатия K , модуля упругости E , коэффициента Пуассона ν и параметра анизотропии η , выраженными через обобщенные коэффициенты Ляме [3]:

$$C_{11} = \kappa + \lambda + 2\mu, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{66} = \mu, \quad K = \frac{\kappa + 3\lambda + 2\mu}{3}, \quad (7)$$

$$E = \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + 3\lambda + 2\mu)}{\kappa + 2\lambda + 2\mu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{\kappa + 2\lambda + 2\mu}, \quad \eta = \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu}.$$

Тогда подставляя соотношения для обобщенных коэффициентов Ляме (6) в формулы выше, получаем:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c + 12c_\gamma), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c - 6c_\gamma), \quad C_{66} = \frac{3\sqrt{3}}{2a} \frac{cc_\gamma}{c + 8c_\gamma} \quad (8)$$

$$K = \frac{\sqrt{3}}{12a}c, \quad E = \frac{9\sqrt{3}}{4a} \frac{cc_\gamma}{c + 3c_\gamma}, \quad \nu = \frac{1}{2} \frac{c - 6c_\gamma}{c + 3c_\gamma}, \quad \eta = \frac{2c}{c + 8c_\gamma}. \quad (9)$$

2 Сопоставление экспериментальных данных с полученными формулами

Эксперимент #	1	2	3	4	5
C_{11} , ГПа	1079	1076	1076	1100	950
C_{12} , ГПа	124	275	125	330	390
C_{66} , ГПа	578	519	576	440	430
расчетное C_{66} , ГПа	502	500	498	502	400
расхождение, %	13	4	14	14	7
c , Н/м	472	578.3	471.6	626	615.3
c_γ , Н/м	472	578	472	626	615
c_γ/c %	12	8.2	12	7.3	5.4

Табл. 1: Экспериментальные данные

В табл.1 приведены экспериментальные значения компонентов тензора жесткости [2]. Такой разброс данных обусловлен различными методиками проведения эксперимента.

Используя значения упругих постоянных алмаза C_{11} , C_{12} из табл.1 и зная длину межатомной связи a (для алмаза $a=0.154\text{нм}$), можно из формул (8) для компонент тензора жесткости получить значения жесткостей c и c_γ межатомных связей в кристалле алмаза. Подставляя полученные значения в формулу (8) для C_{66} , находим расчетное значение этого компонента. Из табл.1 видно, что максимальное расхождение расчетного значения C_{66} с экспериментальным составляет 14%, а минимальное – 4%.

Учитывая столь существенные отличия в экспериментальных данных, полученные расхождения можно считать приемлемыми. Таким образом, можно утверждать, что данный способ подсчета коэффициентов дает хорошее совпадение с экспериментальными значениями.

3 Сравнение моделей алмаза при моментном и угловом взаимодействиях между частицами

3.1 Моментное взаимодействие

В работе [3] были выведены следующие формулы для коэффициентов тензора жесткости C_{11} , C_{12} , C_{66} ; модуля объемного сжатия K ; модуля сдвига G и коэффициента Пуассона ν для модели алмаза при учете моментного взаимодействия между частицами:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c_A + 2c_D), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c_A - c_D), \quad C_{66} = \frac{3\sqrt{3}}{8a} \frac{c_{ACD}}{c_A + 2c_D}, \quad (10)$$

$$K = \frac{\sqrt{3}}{12a}c_A, \quad G = C_{66} = \frac{3\sqrt{3}}{8a} \frac{c_{ACD}}{c_A + 2c_D}, \quad \nu = \frac{(c_A - c_D)(c_A + 2c_D)}{2c_A^2 + 2c_D^2 + 5c_{ACD}},$$

где c_A и c_D – продольная и поперечная жесткости связей.

Условием макроскопической устойчивости материала является положительность модулей объемного сжатия K и модуля сдвига G :

$$K > 0, \quad G > 0 \quad \Rightarrow \quad c_A > 0, \quad \left| \begin{array}{l} c_D > 0 \\ c_D < -\frac{c_A}{2} \end{array} \right. \quad (11)$$

Это условие устойчивости допускает отрицательные значения для поперечной жесткости связей.

Условием микроскопической устойчивости, согласно формуле для промежуточного тензора жесткости 2-ого ранга, полученной в работе [3]

$${}^2\mathbf{C} = \frac{4}{3V_0}(c_A + 2c_D)\mathbf{E}, \quad (12)$$

является положительность коэффициента перед единичным тензором \mathbf{E}

$$c_A + 2c_D > 0 \quad (13)$$

↓

$$c_A > 0, \quad c_D > 0. \quad (14)$$

Представим коэффициент Пуассона в виде функции от $\frac{c_D}{c_A}$:

$$\nu = \frac{(c_A - c_D)(c_A + 2c_D)}{2c_A^2 + 2c_D^2 + 5c_Ac_D} = \frac{1 + \frac{c_D}{c_A} - 2\frac{c_D^2}{c_A^2}}{2 + 5\frac{c_D}{c_A} + 2\frac{c_D^2}{c_A^2}} \quad (15)$$

Рассмотрим предельные значения ν :

$$\begin{array}{lll} c_A \ll c_D & \Rightarrow & \nu \approx -1 \\ c_A = c_D & \Rightarrow & \nu = 0 \quad \Rightarrow \quad -1 < \nu < \frac{1}{2} \\ c_A \gg c_D & \Rightarrow & \nu \approx \frac{1}{2} \end{array} \quad (16)$$

Из полученных результатов видно, что данная модель дает достаточно широкую область допустимых значений коэффициента Пуассона, в которую попадает экспериментальное значение для алмаза [2]: $\nu = 0.07$.

3.2 Угловое взаимодействие

В первой части этой работы были получены следующие соотношения:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c + 12c_\gamma), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c - 6c_\gamma), \quad C_{66} = \frac{3\sqrt{3}}{2a} \frac{cc_\gamma}{c + 8c_\gamma},$$

$$K = \frac{\sqrt{3}}{12a}c, \quad G = C_{66} = \frac{3\sqrt{3}}{2a} \frac{cc_\gamma}{c + 8c_\gamma}, \quad \nu = \frac{1}{2} \frac{c - 6c_\gamma}{c + 3c_\gamma},$$
(17)

где c – продольная жесткость связи; c_γ – приведенная жесткость углового взаимодействия.

Отметим, что формулы C_{11} и C_{12} из (10) для моментного и из (17) для углового взаимодействия, очевидно, совпадут, если положить

$$c_A = c, \quad c_D = 6c_\gamma. \quad (18)$$

В то время как формулы для C_{66} из (10) и из (17) не удается связать между собой столь простым соотношением.

Используя условия макроскопической устойчивости $K > 0, G > 0$ и условия микроскопической устойчивости $H_5 > 0$, получаем следующие неравенства:

$$c > 0, \quad c_\gamma > 0. \quad (19)$$

Представляем коэффициент Пуассона в виде функции от $\frac{c_\gamma}{c}$:

$$\nu = \frac{1}{2} \frac{c - 6c_\gamma}{c + 3c_\gamma} = \frac{1}{2} \frac{1 - 6\frac{c_\gamma}{c}}{1 + 3\frac{c_\gamma}{c}} \quad (20)$$

Предельные значения ν будут иметь следующий вид:

$$c \ll c_\gamma \quad \Rightarrow \quad \nu \approx -1$$

$$c = c_\gamma \quad \Rightarrow \quad \nu = -\frac{5}{8} \quad \Rightarrow \quad -1 < \nu < \frac{1}{2}$$

$$c \gg c_\gamma \quad \Rightarrow \quad \nu \approx \frac{1}{2}$$
(21)

Таким образом, видно, что рассматриваемая модель решетки алмаза дает такую же область допустимых значений коэффициента Пуассона, что и модель решетки алмаза при учете моментного взаимодействия. Полученная область значений ν покрывает экспериментальное значение.

4 Заключение

В данной работе была рассмотрена модель кристаллической решетки алмаза при учете углового взаимодействия между частицами. Были получены формулы для коэффициентов C_{11} , C_{12} , C_{66} макроскопического тензора жесткости ортотропного материала, модуля объемного сжатия K , модуля упругости E , коэффициента Пуассона ν , а также параметра анизотропии η , выраженные через продольную жесткость связи s и приведенную жесткость углового взаимодействия c_γ . На основе экспериментальных данных и выведенных формул были получены значения жесткостей межатомных связей s и c_γ . Было проведено сравнение рассматриваемой модели и модели алмаза при учете моментном взаимодействии между частицами. Было показано, что данные модели дают одинаковые области значений для коэффициента Пуассона, которые покрывают экспериментальное значение.

Список литературы

- [1] *Кривцов А.М.* Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пос. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. - 124с.
- [2] *Novikov N. V.* Physical properties of diamond. Handbook. Kiev 1987.
- [3] *Беринский И.Е., Двас Н.Г., Кривцов А.М., Кударова А.М., Кузькин В.А., Ле-Захаров А.А., Лобода О.С., Нейгебауэр И.И., Подольская Е.А.* Упругие и тепловые свойства кристаллов: учеб. пос. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. - 135с.