УДК 539.32, 534.63

Determination of the shear constants of the cubic crystals

S.A. Muslov†, A.A. Korneev, N.V. Zaytseva

†muslov@mail.ru

A.I. Evdokimov Moscow State Medical Dental University, 20/1, Delegatskaya St., 127473 Moscow, Russia

As a result of the research, formulas for calculating shear elastic constants of cubic crystals, based on the resonant frequency of torsional vibrations of samples c_{44} and C' with square and rectangular cross-section in the method of the composite piezoelectric vibrator was obtained. Despite the fact that the resonance method does not need a large single crystals, the calculation formulas for the samples most simple to manufacture prismatic either incomplete or completely unknown. For example, there is data on the calculation of the c_{44} and C' of the natural frequencies of torsional vibrations of the rods only circular cross-section. An exception is the ultrasonic pulse method for measuring the elastic constants, but it requires to measure single-crystal samples of sufficiently large size. The calculation is reduced to finding the proper expressions for rotating mechanical torque, which is more or less complex function of the cross-section and the elastic constants of the sample material. At the same time it takes into account the amendment to the warping of the cross-section of anisotropic samples under torsion. Then calculates the natural frequencies of torsional vibration samples of square and rectangular cross-section and the corresponding shear elastic constants. As an example, the calculation of shear considered constant C' on the basis of the pitch frequency of torsional vibrations of square cross-section sample of nickel-titanium NiTi.

Keywords: elastic constants; cubic crystals; compound vibrator.

Определение сдвиговых постоянных кубических кристаллов

Муслов С.А.†, Корнеев А.А., Зайцева Н.В.

†muslov@mail.ru

Московский государственный медико-стоматологический университет им. А.И. Евдокимова, Делегатская ул. 20/1, 127473 Москва

В результате проведенных исследований получены формулы для вычисления сдвиговых упругих постоянных кубических кристаллов c_{44} и C' на основе резонансных частот крутильных колебаний образцов с квадратным и прямоугольным поперечным сечением в методе составного пьезоэлектрического вибратора. Несмотря на то, что резонансный метод не нуждается в крупных монокристаллах, расчетные формулы для образцов наиболее простой для изготовления призматической формы либо неполны, либо совсем неизвестны. Например, есть данные по вычислению c_{44} и C' из собственных частот крутильных колебаний стержней только кругового поперечного сечения. Исключение составляет импульсный ультразвуковой метод измерения упругих постоянных, но он требует для измерений монокристаллические образцы достаточно крупных размеров. Как известно, в теории упругости кристаллов упругая постоянная c_{44} определяет сопротивление кубических решеток сдвигу плоскости {100} в любом из возможных направлений <0*kl*>, а комбинация упругих постоянных C' контролирует сопротивление так называемому “зинеровскому” сдвигу {110}<110>. Расчет сводился к нахождению надлежащего выражения для вращающего механического момента, который является более или менее сложной функцией поперечного сечения и упругих констант материала образцов. При этом учитывалась поправка на депланацию поперечного сечения анизотропных образцов при кручении. Затем вычислялись собственные частоты крутильных колебаний образцов квадратного и прямоугольного поперечного сечения и соответствующие сдвиговые упругие постоянные. В качестве примера рассмотрели расчет сдвиговой постоянной C' на основе частоты основного тона крутильных колебаний образца квадратного поперечного сечения из никелида титана NiTi.

Ключевые слова: упругие постоянные, кубические кристаллы, составной вибратор.

1. Введение

В теории упругости кубических кристаллов упругая постоянная c_{44} определяет сопротивление решетки сдвигу плоскости {100} в любом из направлений <0*kl*>, а комбинация упругих постоянных $C' = (c_{11} - c_{12})/2$ контролирует сопротивление “зинеровскому” сдвигу {110}<110>. Как известно, “зинеровский” сдвиг лежит в основе одного из возможных механизмов потери устойчивости кубических кристаллов с ОЦК решеткой при фазовых переходах [1].

Несмотря на высокую информативность упругих модулей c_{44} и C', способы их определения недостаточно подробно описаны в литературе. Исключение составляет импульсный ультразвуковой метод измерения упругих постоянных, но он требует для измерений монокристаллические образцы достаточно крупных размеров. Есть данные по вычислению c_{44} и C' из собственных частот крутильных колебаний стержней кругового поперечного сечения [2]. Однако для многих материалов, например металлических, такие образцы технологически трудно изготовить. В данном сообщении дается алгоритм вычисления сдвиговых упругих постоянных c_{44} и C' путем измерения частот собственных крутильных колебаний кристаллических образцов прямоугольного и квадратного поперечного сечения.

2. Расчет и результаты

Для образцов в виде стержней некругового поперечного сечения необходимо учитывать поправку на депланацию поперечного сечения образцов при кручении. Поперечные сечения прямоугольной, а также любой другой некруговой формы при кручении не остаются плоскими, а искривляются по некоторой поверхности [3,4]. Основная частота крутильных колебаний стержней с длиной l

$$f_s = \frac{1}{2l}\sqrt{\frac{M}{I_p \rho \theta}}, \tag{1}$$

где M — статический вращающий момент, I_p — полярный момент инерции сечения, рассчитанный на единицу длины стержня, ρ — плотность материала стержня, θ — деформация (угол) кручения.

Расчет, в результате, сводится к нахождению надлежащего выражения для вращающего момента, который является более или менее сложной функцией поперечного сечения и упругих констант.

Можно показать, что для анизотропного стержня с ребрами $a < b$ $M(\theta) = \theta k c_{5'5'} a^3 b$, где $k = k\left(b/a \cdot \sqrt{c_{4'4'}/c_{5'5'}}\right)$ — коэффициент Сен-Венана [5], учитывающий, что точки поперечного сечения образца прямоугольного или квадратного поперечного сечения перемещаются вдоль продольной оси стержня. Таблицы для его определения приведены в ряде источников, например [3-7] и многих других. К сожалению, они, как правило, недостаточно подробные. Там же могут содержаться приближенные формулы для вычисления k. Момент инерции сечения на единицу длины стержня можно найти по формуле $I_p = ab(a^2 + b^2)/12$. Компоненты тензора c_{ij} — это упругие постоянные в системе координат, связанной с образцом. Ось X_3 направлена вдоль образца, оси X_1 и X_2 занимают любое из двух возможных направлений в плоскости, нормальной к X_3. Штрихи показывают, что данные компоненты тензора упругих постоянных отнесены не к кристаллографической, а к специальной декартовой системе координат, связанной с образцом и отличной, вообще говоря, от кристаллографической. Как и следует, штрихи помещены над индексами [8].

Из (1) с учетом выражений для M и I, следует, что для анизотропного стержня с ребрами $a < b$

$$f_s = \frac{1}{2l}\sqrt{\frac{12 k c_{5'5'} a^2}{\rho(a^2 + b^2)}}. \tag{2}$$

Для стержня квадратного сечения (с ребром $a = b$) $M(\theta) = \theta k c_{5'5'} a^4$, коэффициент $k = k\left(\sqrt{c_{4'4'}/c_{5'5'}}\right)$ уже не зависит от отношения b к a, $I = a^4/6$ и

$$f_s = \frac{1}{2l}\sqrt{\frac{6 k c_{5'5'}}{\rho}}. \tag{3}$$

Данную формулу можно рассматривать как устанавливающую для расчета упругих постоянных однородных монокристаллических образцов любой ориентации с поперечным сечением в виде квадрата. Она имеет важные следствия.

При повороте системы координат (от системы с нештрихованным базисом, связанным с кристаллографической системой координат, к системе со штрихованным базисом, связанным с лабораторной системой координат) симметричные матричные коэффициенты податливости c_{ij} преобразуются с помощью соответствующей несимметричной матрицы $\|q_{ij}\|$

$$c'_{ij} = q_{i\alpha} q_{j\beta} c_{\alpha\beta}. \tag{4}$$

с матричными коэффициентами, нелинейным образом связанными с коэффициентами l_{ij} [6]:

$$\|q_{ij}\| = \begin{pmatrix} l_{11}^2 & l_{12}^2 & l_{13}^2 & l_{12}l_{13} & l_{13}l_{11} & l_{12}l_{11} \\ l_{21}^2 & l_{22}^2 & l_{23}^2 & l_{23}l_{22} & l_{23}l_{21} & l_{22}l_{21} \\ l_{31}^2 & l_{32}^2 & l_{33}^2 & l_{33}l_{32} & l_{33}l_{31} & l_{32}l_{31} \\ 2l_{31}l_{21} & 2l_{32}l_{22} & 2l_{33}l_{23} & l_{33}l_{22}+l_{32}l_{23} & l_{33}l_{21}+l_{31}l_{23} & l_{31}l_{22}+l_{32}l_{21} \\ 2l_{31}l_{11} & 2l_{32}l_{12} & 2l_{33}l_{13} & l_{33}l_{12}+l_{32}l_{13} & l_{33}l_{11}+l_{31}l_{13} & l_{31}l_{12}+l_{32}l_{11} \\ 2l_{21}l_{11} & 2l_{12}l_{22} & 2l_{13}l_{23} & l_{13}l_{22}+l_{12}l_{23} & l_{13}l_{21}+l_{11}l_{23} & l_{11}l_{22}+l_{12}l_{21} \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Упругие постоянные $c_{4'4'}$ и $c_{5'5'}$ в системе координат, связанной с образцом, запишутся в виде

$$c_{4'4'} = c_{11}(q_{41}^2 + q_{42}^2 + q_{43}^2) + 2c_{12}(q_{41}q_{42} + q_{42}q_{43} + q_{43}q_{41}) + \\ + c_{44}(q_{44}^2 + q_{45}^2 + q_{46}^2), \tag{6}$$

$$c_{5'5'} = c_{11}(q_{51}^2 + q_{52}^2 + q_{53}^2) + 2c_{12}(q_{51}q_{52} + q_{52}q_{53} + q_{53}q_{51}) + \\ + c_{44}(q_{54}^2 + q_{55}^2 + q_{56}^2). \tag{7}$$

В случае совпадении кристаллографической оси 3 и лабораторной оси X_3, т.е. в случае поворота кристалла вокруг главной оси (оси 3) на угол α матрица поворота l_{ij} имеет вид

$$\|l_{ij}\| = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Проанализируем два варианта образцов призматической формы с ориентацией продольной оси относительно кристаллической структуры.

Для начала покажем, что для определения упругой постоянной c_{44} достаточно таблицы для определения k. Для образцов кубической системы, ориентированных вдоль оси куба <100>, $c_{4'4'} = c_{5'5'} = c_{44}$, и значение c_{44} может быть вычислено из выражения

$$f_{s,<100>} = \frac{1}{2l}\sqrt{\frac{6kc_{44}}{\rho}}, \quad (9)$$

где $k = k(\sqrt{c_{44}/c_{44}}) = k(1) = 0.1406$. Полученное соотношение (9), как нетрудно показать, эквивалентно формуле модуля сдвига поликристаллических образцов квадратного поперечного сечения $G = 4.77\rho l^2 f_s^2$, приведенной в [2], и формуле для монокристаллических образцов, также поперечного сечения в виде квадрата, хлористого натрия и хлористого серебра $G_{<100>} = 4.77\rho l^2 f_s^2$ [9].

В отличие от c_{44} "выделить" C' в "чистом виде" кручением нельзя. Для образцов с осью вдоль направления <110>, которое может служить для определения C', целесообразно использовать боковую огранку образца {100} и {110}. Учитывая матрицу поворота

$$\|l_{ij}\| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

и формулы (6) и (7), получим выражения для упругих констант $c_{4'4'}$ и $c_{5'5'}$ в лабораторной системой координат: $c_{4'4'} = c_{44}, c_{5'5'} = C'$, а также для коэффициента k: $k = k(\sqrt{c_{44}/C'})$. Отсюда

$$f_{s,<110>} = \frac{1}{2l}\sqrt{\frac{6kC'}{\rho}} \quad (11)$$

и

$$C' = \frac{2f_{s,<110>}^2 l^2 \rho}{3k}. \quad (12)$$

Заметим, что для кубических кристаллов отношение $A = c_{44}/C' = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12})$ является мерой упругой анизотропии, поскольку представляет собой отношение двух модулей сдвига – максимального и минимального. Поэтому можем считать, что для кристаллических образцов кубической сингонии, ориентированных вдоль кристаллографического направления <110> и имеющих поперечное сечение в виде квадрата, коэффициент k определяется только коэффициентом упругой анизотропии: $k = k(A)$. При уменьшении упругой анизотропии до теоретически минимального значения ($A \to 1$) основные частоты крутильных колебаний образцов (9) и (11) будут сближаться по величине (также как и соответствующие упругие модули c_{44} и C').

Далее величина C' может быть определена с помощью систем компьютерной алгебры, поскольку k является некоторой полуэмпирической функцией упругих констант (отношения $A = c_{44}/C'$). При использовании Mathcad и уравнений регрессии, в которых $k = k(\sqrt{c_{44}/C'})$ представлен полиномами, программа испытывала вычислительные трудности. Поэтому был применен неполиномиальный вид аппроксимации $k = 0.3214 - \exp(-2.665(\sqrt{c_{44}/C'})^{0.3221})$ [10]. В качестве примера рассмотрели расчет сдвиговой постоянной C' на основе частоты основного тона крутильных колебаний $f_{s,<100>} = 50717$ Гц образца квадратного поперечного сечения длиной 20 мм из никелида титана NiTi (плотность 6450 кг/м^3, $c_{44} = 40$ ГПа), измеренной резонансным методом составного пьезоэлектрического вибратора [11]. В результате расчета было получено: $C' = 25{,}65$ ГПа, что согласуется с данными, полученными для монокристалла NiTi импульсным методом [12].

Литература/References

1. C.M. Zener. "Elasticity and anelasticity of metals". Chicago, Illinois: University of Chicago Press, 1948. – 170 p.
2. S.P. Nikanorov, B.K. Kardashev. Elasticity and dislocation inelasticity of crystals. M.: Nauka, 1985. – 254 p. (in Russian) [С.П. Никаноров, Б.К. Кардашев. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М.: Наука, 1985. – 254 с.].
3. N.H. Arutjunjan, B.L. Abramjan. Torsion of elastic bodies. M.: Fizmatgiz, 1963. – 688 p. (in Russian) [Н.Х. Арутюнян, Б.Л. Абрамян. Кручение упругих тел. М.: Физматгиз, 1963. – 688 с.].
4. Ju.N. Rabotnov. Mechanics of deformable solids. M.: Nauka, 1988. – 712 p. (in Russian) [Ю.Н. Работнов. Механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1988. – 712 с.].
5. B. Saint-Venant. Memoire sur la torsion des prismes. Memoires presented par divers savants a l'academie des sciences. Sciences math. et phys. 14, Paris, 1856, 233-560 p.
6. S.G. Lekhnickii. Elasticity theory of an anisotropic solid. M.: Nauka, 1977. – 416 p. [С.Г. Лехницкий. Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука, 1977. – 416 с.].
7. Roark's formulas for stress and strain. Warren C. Young, Richard G. Budynas. Seventh Edition. New York: McGraw-Hill, 2002. – 852 p.
8. Ju.I. Sirotin, M.P. Shaskol'skaja. Fundamental of crystal physics. M.: Nauka, 1975. – 640 p. [Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. – 640 с.].
9. A.V. Stepanov, I.M. Jejdus. JETP, **29**(5), 669 (1955) (in Russian) [А.В. Степанов, И.М. Эйдус. ЖЭТФ, **29**(5), 669 (1955)].
10. S.A. Muslov, G.M. Stjureva, I.Ju. Sitanskaja, N.V. Zajceva. In: II International scientific-practical conference "Innovation development of the natural sciences", St. Peterburg, 24-25 october 2014. – 8 p. (in Russian) [С.А. Муслов, Г.М. Стюрева, И.Ю. Ситанская, Н.В. Зайцева. В сб.: II Международная научно-практическая конференция "Инновационное развитие естественных наук", Санкт-Петербург, 24-25 октября 2014 – 8 с.].
11. S.A. Muslov, V.N. Khachin, V.P. Sivokha, V.G. Pushin. Metallofizika, **9**(1), 29 (1987) (in Russian) [С.А. Муслов, В.Н. Хачин, В.П. Сивоха, В.Г. Пушин. Металлофизика, **9**(1), 29 (1987)].
12. O. Melton, K. Melton. J. Appl. Phys., **51**(3) 1883 (1980).