

Научная статья
УДК 541.64:539.199
DOI 10.18101/2306-2363-2022-1-18-23

ВЫВОД ФОРМУЛЫ БЕЛОМЕСТНЫХ–ТЕСЛЕВОЙ ИЗ УРАВНЕНИЯ ГРЮНАЙЗЕНА

© **Дармаев М. В.**

кандидат физико-математических наук, доцент,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
Институт физического материаловедения СО РАН
670047, Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6
darmaev@bsu.ru

© **Сангадиев С. Ш.**

доктор физико-математических наук,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
sanser@mail.ru

© **Мантатов В. В.**

доктор физико-математических наук,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
manv999@ramber.ru

Аннотация. Предлагается вывод формулы Беломестных–Теслевой, устанавливающей однозначную связь между коэффициентом Пуассона и параметром Грюнайзена, из известного уравнения Грюнайзена. Формула Беломестных–Теслевой, полученная ранее из иных исходных посылок, выводится с привлечением теории упругости и уравнения Леонтьева. Предлагаемый подход находит вполне удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для ряда силикатных стекол и стеклообразных метафосфатов щелочноземельных металлов.

Ключевые слова: уравнение Грюнайзена, упругие свойства, скорости акустических волн, параметр Грюнайзена, коэффициент Пуассона, модуль сдвига, изотермический модуль объемного сжатия.

Благодарности

Авторы выражают благодарность профессору Д. С. Сандитову за предложенную тему для данной статьи и консультацию.

Для цитирования: Дармаев М. В., Сангадиев С. Ш., Мантатов В. В. Вывод формулы Беломестных-Теслевой из уравнения Грюнайзена // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2022. Вып. 1. С. 18–23.

Принято считать, что параметры теории упругости (модули упругости, коэффициент Пуассона) как гармонические линейные величины не должны быть связаны с ангармонизмом — с отклонением силы межатомного взаимодействия от линейной зависимости при смещении атома из равновесного положения. Тем не менее время от времени появляются работы, указывающие на наличие вполне

определенной связи между упругими свойствами и параметром Грюнайзена γ — мерой ангармонизма [1]

$$\gamma = \frac{\beta V B}{C_V}, \quad (1)$$

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

Так, например, Беломестных и Теслевой [2] установлено, что параметр Грюнайзена γ является однозначной функцией коэффициента Пуассона μ — параметра теории упругости

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

причем установлено достаточно строго с привлечением известных положений теории упругости, термодинамики и физической акустики. Они показали, что параметр Грюнайзена определяется исключительно по скоростям продольной (v_L) и поперечной (v_S) акустических волн:

$$\gamma = \frac{3}{2} \left[\frac{(v_L/v_S)^2 - 4}{(v_L/v_S)^2 + 2} \right]. \quad (3)$$

Беломестных и Теслева [2], используя в формуле (3) известные соотношения физической акустики [3]

$$v_L = \sqrt{\frac{E(1-\mu)}{\rho(1+\mu)(1-2\mu)}}, \quad v_S = \sqrt{\frac{E}{2\rho(1+\mu)}}$$

в 2004 г. получили уравнение (2), однозначно связывающее параметр Грюнайзена с коэффициентом Пуассона. Примечательно то обстоятельство, что такая сравнительно простая формула (2) находится в удовлетворительном согласии с уравнением Грюнайзена (1) [2].

Вывод формулы Беломестных–Теслевой (2) из уравнения Грюнайзена (1). Умножив числитель и знаменатель уравнения Грюнайзена (1) на модуль сдвига G и принимая во внимание известную взаимосвязь упругих модулей G и B [1]

$$\frac{B}{G} = \frac{2}{3} \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu} \right), \quad (4)$$

получаем следующую модификацию уравнения Грюнайзена (1)

$$\gamma = A \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu} \right), \quad (5)$$

где введено обозначение

$$A = \frac{2}{3} \left(\frac{\beta V G}{C_V} \right). \quad (6)$$

Используя соотношение Леонтьевна [4]

$$\frac{C_V}{\beta V} = \frac{2}{3} \rho v_k^2 \quad (7)$$

и модуль сдвига $G = \rho v_s^2$, множитель A (6) представим в виде отношения скоростей звука

$$A = \frac{v_s^2}{v_k^2}, \quad (8)$$

где v_k^2 — квадрат среднеквадратичной скорости звука [4]

$$v_k^2 = \frac{v_L^2 + 2v_s^2}{3}, \quad (9)$$

v_L и v_s — скорости продольной и поперечной упругих волн, соответственно, ρ — плотность.

Из равенства (8) с помощью выражения (9) и известной формулы теории упругости [1]

$$\left(\frac{v_L}{v_s}\right)^2 = \frac{2 - 2\mu}{1 - 2\mu} \quad (10)$$

находим связь множителя A с коэффициентом Пуассона μ

$$A = \frac{3}{2} \left(\frac{1 - 2\mu}{2 - 3\mu}\right). \quad (11)$$

Расчет параметра A по формулам (8) и (11) показывает согласованные значения (табл. 1). Для силикатных стекол, приведенных в таблице значения, рассчитанные по разным формулам достаточно близки. Для стеклообразных метафосфатов щелочноземельных металлов значения коэффициента A по формулам (8) и (11) совпадают с точностью до сотой доли единицы, тангенс угла наклона графика $A(8) - A(11)$ равен единице.

Примечательно то обстоятельство, что с учетом данного соотношения (11) модифицированное уравнение Грюнайзена (5) переходит в формулу Беломестных–Теслевой (2)

$$\gamma = \left[\frac{3}{2} \left(\frac{1 - 2\mu}{2 - 3\mu}\right)\right] \left(\frac{1 + \mu}{1 - 2\mu}\right) = \frac{3}{2} \left(\frac{1 + \mu}{2 - 3\mu}\right).$$

Таблица 1

Расчет множителя A по формулам (8) и (11) для силикатных стекол R_2O-SiO_2 ($R = Na, K$) [5] и стеклообразных метафосфатов щелочноземельных металлов [6]

№		μ	v_L , м/с	v_s , м/с	v_k , м/с	A (8)	A (11)
Na ₂ O — SiO ₂							
	Содержание Na ₂ O, мол.% по синтезу:						
1	13	0,205	5233	3378	4091	0,68	0,64
2	16	0,218	5115	3275	3984	0,68	0,63
3	17	0,225	5054	3222	3929	0,67	0,62
4	20	0,235	12133	7705	9415	0,67	0,61
5	26	0,245	4835	3070	3752	0,67	0,60
6	30	0,255	4844	3052	3746	0,66	0,60
7	33,3	0,255	4906	3103	3800	0,67	0,60

М. В. Дармаев, С. Ш. Сангадиев, В. В. Мантатов. Вывод формулы Беломестных-Теслевой из уравнения Грюнайзена

		K ₂ O — SiO ₂					
	Содержание K ₂ O, мол.% по синтезу:						
1	13	0,230	4820	3073	3747	0,67	0,62
2	15	0,225	4759	3035	3700	0,67	0,62
3	20	0,250	4550	2889	3531	0,67	0,60
4	25	0,270	4463	2801	3445	0,66	0,58
Стеклообразные метафосфаты щелочноземельных металлов							
1	0,51MgO·0,49P ₂ O ₅	0,233	5267	3110	3962	0,62	0,62
2	0,50MgO·0,50P ₂ O ₅	0,233	5264	3108	3959	0,62	0,62
3	0,49MgO·0,51P ₂ O ₅	0,233	5289	3121	3977	0,62	0,62
4	0,51CaO·0,49P ₂ O ₅	0,264	5051	2858	3735	0,59	0,59
5	0,50CaO·0,50P ₂ O ₅	0,267	5086	2869	3756	0,58	0,58
6	0,49CaO·0,51P ₂ O ₅	0,265	5051	2857	3734	0,59	0,59
7	0,51SrO·0,49P ₂ O ₅	0,274	4603	2568	3385	0,58	0,58
8	0,50SrO·0,50P ₂ O ₅	0,273	4610	2577	3393	0,58	0,58
9	0,49SrO·0,51P ₂ O ₅	0,271	4612	2584	3397	0,58	0,58
10	0,50BaO·0,50P ₂ O ₅	0,288	4178	2278	3046	0,56	0,56
11	0,49BaO·0,51P ₂ O ₅	0,286	4186	2291	3056	0,56	0,56

Таким образом, с привлечением соотношения Леонтьева (7) и теории упругости из уравнения Грюнайзена (1) можно вывести формулу Беломестных–Теслевой (2), которая была получена из иных исходных посылок [2].

Обратим внимание на то обстоятельство, что коэффициент A в выражении (8) показывает, какую долю составляет упругая энергия $\Delta U = \rho v_s^2 V$, необходимая для деформации сдвига, от средней энергии межатомного взаимодействия $\bar{U} = \rho v_k^2 V$

$$A = \frac{v_s^2}{v_k^2} = \frac{\rho v_s^2 V}{\rho v_k^2 V} = \frac{GV}{\bar{U}} = \frac{\Delta U}{\bar{U}}. \quad (12)$$

Для стеклообразных твердых тел уравнение (5) было получено ранее со следующей интерпретацией множителя A [7]

$$A = \frac{2}{9} \ln \left(\frac{1}{f_g} \right), \quad (13)$$

где f_g — объемная доля флуктуационного свободного объема, замороженная при температуре стеклования T_g . Величина f_g у стеклообразных систем одного класса является фактически универсальной величиной $f_g \approx const$ [7]. Логарифм данной величины тем более слабо зависит от состава аморфных веществ в рамках одного класса. Оценка A по этой формуле (13) дает фактически константные значения, по крайней мере, у стекол одного структурного типа и по порядку величины согласуется с результатами расчета по соотношениям (8) и (11). Для натриевосиликатных Na₂O–SiO₂ и калиевосиликатных K₂O–SiO₂ стекол значение объемной доли флуктуационного свободного объема $f_g \approx const \approx 0,028$, а величина A , рассчитанная по формуле (13), приблизительно равна 0,79.

Значения параметра Грюнайзена для металлов, рассчитанные по уравнению Грюнайзена (1) и Беломестных-Теслевой (2) также находятся в удовлетворительном согласии (табл. 2).

Некоторые отклонения значений для твердых тел, вероятно, обусловлены разбросом значений γ , полученных разными исследователями. Причина этих отклонений также возможно заключается в анизотропии рассматриваемых в табл. 2 систем, так как более согласованные данные наблюдаются для ряда квазиизотропных щелочногалоидных кристаллов с центральными силами межатомного взаимодействия.

Таким образом, предлагаемый вывод из уравнения Грюнайзена (1) формулы Беломестных-Теслевой (2), которая устанавливает связь параметра Грюнайзена с коэффициентом Пуассона, находит вполне удовлетворительное согласие с экспериментальными данными.

Таблица 2

Сравнение результатов расчета параметра Грюнайзена γ по уравнениям (1) и (2) (использованы данные [2, 8]).

№	Элементы и соединения	μ	γ	
			Грюнайзен (1)	Беломестных–Теслева (2)
1	LiF	0.214	1.34	1.34
2	NaCl	0.243	1.46	1.47
3	Fe	0.292	1.68	1.72
4	Al	0.340	2.11	2.05
5	Ag	0.379	2.40	2.40
6	NaNO ₃	0.257	1.31	1.53
7	Pd	0.374	2.40	2.35
8	Au	0.420	2.80	2.88

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. 3-е изд. Москва: Наука, 1965. 204 с. Текст: непосредственный.
2. Беломестных В. Н., Теслева Е. П. Взаимосвязь ангармонизма и поперечной деформации квазиизотропных поликристаллических тел // ЖТФ. 2004. Т. 74, № 8. С. 140–142. Текст: непосредственный.
3. Францевич И. Н., Воронов Ф. Ф., Бакута С. А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. Киев: Наукова думка, 1982. 286 с. Текст: непосредственный.
4. Леонтьев К. Л. О связи упругостных и тепловых свойств веществ // Акуст. журн. 1981. Т. 27, вып. 4. С. 554–561. Текст: непосредственный.
5. Мазурин О. В., Стрельцина М. В., Швайко-Швайковская Т. П. Свойства стекол и стеклообразующих расплавов: справочник. Ленинград: Наука, 1973. Т. 1. 444 с. Текст: непосредственный.
6. Скорость ультразвука в стеклообразных метафосфатах щелочноземельных металлов / Е. А. Гурович, А. А. Ильин, А. А. Пронкин, М. Е. Стржалковский // Физика и химия стекла. 1979. Т. 5, № 3. С. 383–384. Текст: непосредственный.
7. Сандитов Д. С., Бартенев Г. М. Физические свойства неупорядоченных структур. Новосибирск: Наука, 1982. 259 с. Текст: непосредственный.
8. Беломестных В. Н. Акустический параметр Грюнайзена твердых тел // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30б, вып. 3. С. 15–19. Текст: непосредственный.

Статья поступила в редакцию 15.01.2022; одобрена после рецензирования 17.03.2022; принята к публикации 11.05.2022.

DETERMINATION OF THE BELOMESTNYH–TESLEVA’S FORMULA FROM
THE GRÜNEISEN’S EQUATION

Darmaev M. V.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences
Banzarov Buryat State University
670000, Ulan-Ude, st. Smolina, 24a
Institute of Physical Materials Science SB RAS
670047, Ulan-Ude, st. Sakhyanova, 6
darmaev@bsu.ru

Sangadiev S. Sh.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences
Banzarov Buryat State University
670000, Ulan-Ude, st. Smolina, 24a
sanser@mail.ru

Mantatov V. V.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences
Banzarov Buryat State University
670000, Ulan-Ude, st. Smolina, 24a
manv999@ramber.ru

Abstract. From the well-known Grüneisen equation the derivation of the Belomestnykh–Tesleva’s formula, which establishes an unambiguous connection between Poisson’s ratio and the Grüneisen’s parameter, is proposed. The Belomestnykh–Tesleva formula, obtained earlier from other initial premises, using the theory of elasticity and the Leontiev equation is derived. The proposed approach finds quite satisfactory agreement with experimental data for a number of silicate glasses and glassy met phosphates of alkaline earth metals.

Keywords. Grüneisen’s equation, elastic properties, acoustic wave velocities, Grüneisen’s parameter, Poisson’s ratio, shear modulus, isothermal bulk modulus.

Acknowledgments

The authors express their gratitude to Professor Sanditov D. S. for the proposed topic for this article and advice.

For citation

Darmaev M. V., Sangadiev S. Sh., Mantatov V.V. Determination of the Belomestnykh–Tesleva’s formula from the Grüneisen’s equation // *Bulletin of Buryat State University. Chemistry. Physics.* 2022; 1: 18-23 (In Russ.)

The article was submitted 15.01.2022; approved after reviewing 17.03.2022; accepted for publication 11.05.2022.