СВЯЗЬ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН С МИКРОСКОПИЧЕСКИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ТВЕРДОГО ТЕЛА.

DOI: 10.18572/2686-8598-2019-2-2-33-39

Ерохин К.М., Калашников Н.П
Московский политехнический университет (МПУ) (1),
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ (3)
kmekm@yandex.ru, kalash@mephi.ru

Аннотация: В работе получены соотношения между макроскопическими величинами, такими как модуль упругой деформации и скорость звука, с микроскопическими характеристиками твердого тела (энергией связи отдельного атома). Предложены формулы для расчета скорости звука и модуля Юнга в металлическом стержне.

Ключевые слова: упругая деформация, модуль Юнга, модуль сдвига, энергия связи атома, коэффициент Пуассона, скорость звука.

THE CONNECTION OF MACROSCOPIC VALUES WITH THE MICROSCOPIC CHARACTERISTICS OF THE SOLIDS.

Erokhin K.M., Kalachnikov E.S.
Moscow Polytechnic University (1),
National Research Nuclear University “MEPhI” (3).
kmekm@yandex.ru, kalash@mephi.ru

Abstract: A relationship between the macroscopic parameters, such as the elastic modulus and the sound speed with the binding energy of an individual atom, has been obtained. The formulas are offered to calculate the speed of sound and the Young’s modulus Jung module in the metal rod.

Key words: elastic deformation, Young’s modulus, shear modulus, atomic binding energy, Poisson’s ratio, sound speed.

Введение

В серии работ «Просто о сложном» [1-4] В.Вайскопф описал возможность микроскопической интерпретации некоторых макроскопических характеристик веществ. В статьях [1-3] коэффициент теплового расширения выражается через энергию связи атомов в твердом теле. В статье [4] оценивается максимальная высота гор на Земле, которая связана с энергией отделения молекулы двуокиси кремния SiO_2 от твердого тела и ускорением силы тяжести вблизи земной поверхности. В работе [5] был рассмотрен процесс упругой деформации вещества, получено соотношение между макроскопической характеристикой - модулем Юнга, энергией связи отдельного атома и концентрацией атомов в единице объема. В работе [6] найдена связь температуры Дебая металлов с основными физико-химическими характеристиками простых и сложных веществ.

Закон Гука предполагает, что упругая сила деформации пропорциональна относительному изменению длины стержня [6]:

$$\frac{F}{S} = \sigma = E\,\frac{\Delta x}{x}, \quad (1)$$

где σ – напряжение в стержне, E - модуль Юнга, $\frac{\Delta x}{x}$ относительное удлинение стержня.

Упругая деформация стержня приводит к увеличению потенциальной энергии единицы объема стержня [6,7]:

$$\Delta U/\Delta V = \frac{\sigma^2}{2E} = \frac{E}{2}\left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2. \quad (2)$$

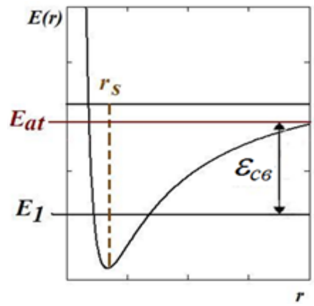

Рис.1 Качественная зависимость полной энергии электрона проводимости от центра ячейки

Допустим, что мы сообщаем стержню такую потенциальную энергию, что на каждый атом вещества приходится энергия, равная энергии связи атома $\varepsilon_{\text{св}}$ ($\varepsilon_{\text{св}}$ – энергия, необходимая для отделения атома от вещества [8]). Если бы мы проделаем такую операцию, то весь материал разделился бы на отдельные атомы, т.е. разрушился. Примем качественно, что такое разрушение происходит, когда межатомные расстояния увеличиваются в два раза, т.е. длина стержня удваивается:) $\frac{\Delta x}{x} = 1!$

Одним из важных макроскопических параметров металла является скорость распространения в нем звука. Упругие колебания, возбужденные в какой-либо точке среды, распространяются в ней с конечной скоростью, зависящей от свойств этой среды [7]. Длины волн λ колебаний в твердом теле могут быть произвольными и должны удовлетворять условию λ>d (постоянная решетки. Уравнение дисперсии для упругих колебаний одномерной цепочки:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}\left|\sin\left(\frac{kd}{2}\right)\right| \qquad (3)$$

где $k = {2\pi}/{\lambda}$ - волновое число, M – масса иона цепочки, γ - константа упругости

$$\gamma \sim \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 d^3} \qquad (4)$$

Звуковыми волнами называют упругие волны, распространяющиеся в газах, жидкостях и твердых телах, для которых справедливо длинноволновое приближение, с законом дисперсии имеющим вид:

$$\omega \approx \sqrt{\frac{\gamma d^2}{M}} = Vk \qquad (5)$$

ω - частота колебаний, V – скорость звука. Такие колебания называют акустическими.

Скорость звука

Скорость звука в изотропных твердых телах определяется модулями упругости вещества. Так для стержня - тела, длина которого значительно превышает его поперечные размеры, но (по порядку) не меньшие длины волны упругих колебаний, скорость звука [9]:

$$V_k = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \qquad (6)$$

где E – модуль Юнга, ρ - плотность. В однородных твёрдых телах могут существовать два типа объемных волн, отличающихся друг от друга поляризацией колебаний относительно направления распространения волны: продольная (P-волна) и поперечная (S-волна) [7]. Продольные и поперечные волны обладают разными скоростями, которые зависят от плотности ρ и модуля упругости E твердого тела. Фазовая скорость звука для продольной волны равна:

$$V_p = \sqrt{\frac{E}{\rho}\frac{1-\mu}{(1+\mu)(1-2\mu)}} = V_k\sqrt{\frac{1-\mu}{(1+\mu)(1-2\mu)}} \qquad (7)$$

μ - коэффициент Пуассона. Скорость поперечной волны

$$V_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}} = \sqrt{\frac{E}{\rho}\frac{1}{2(1+\mu)}} = V_k\sqrt{\frac{1}{2(1+\mu)}} \qquad (8)$$

где G – модуль сдвига. Связь между модулем упругости E, модулем сдвига G твердого тела и коэффициентом Пуассона μ определяется равенством:

$$\frac{E}{G} = 2(1+\mu) \qquad (9)$$

Поэтому можно рассчитать скорости звука зная модуль упругости Юнга и коэффициент Пуассона [9]. В самом стержне могут возбуждаться как продольные, так и поперечные волны.

Модуль Юнга

В равновесном состоянии при температуре T ионы кристаллической решетки с параметром d совершают малые колебания с частотой ω около положения равновесия. Предполагая, что колебания являются классическими и гармоническими, оценим амплитуду таких колебаний ξ. Считая, что колебания происходят вдоль оси ОХ с частотой ω (линейная цепочка ионов), согласно теореме Больцмана

$$\frac{M\xi^2\omega^2}{2} = \frac{1}{2}k_B T \qquad (10)$$

В формуле (10) ξ - амплитуда колебаний. Для оценки частоты колебания ионов решетки запишем потенциальную энергию взаимодействия ионов как:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{d+\xi} \approx U_0 + \frac{U_0}{2}\frac{\xi^2}{d^2} \qquad (11)$$

Оценка первого слагаемого

$$U_0 \approx \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 d} \sim 3 \div 7eV \qquad (12)$$

которое является потенциальной энергией иона в атомной цепочке и определяется размером кристаллической решетки металла, дает. Энергия иона, совершающего гармонические колебания в цепочке

$$M\omega^2\frac{\xi^2}{2} = \frac{U_0}{d^2}\frac{\xi^2}{2} \qquad (13)$$

Тогда для частоты колебаний иона с массой М имеет место отношение:

$$\omega^2 = \frac{U_0}{d^2 M} \qquad (14)$$

Для оценки амплитуды колебания иона с учетом (11)

$$\xi = \sqrt{\frac{k_B T}{U_0}}d \qquad (15)$$

Пусть металл подвергается деформации расширения или сжатия вдоль направления ОХ. В результате деформации расстояние между ионами изменится

$$d \to \delta x - \xi \qquad (16)$$

Оценим максимальное значение параметра δx, при котором металл еще остается устойчивым. В этом случае потенциальная энергия иона U0 становится сравнимой с его энергией связи E_b. Согласно(15), максимальная амплитуда колебаний становится сравнимой с постоянной решетки:

$$\delta x = d + \sqrt{\frac{k_B T}{E_b}}d \qquad (17)$$

Для относительной величины смещения

$$\frac{\delta x}{d} = \left|1 + \sqrt{\frac{k_B T}{E_b}}\right| \qquad (18)$$

Упругая деформация стержня приводит к увеличению потенциальной энергии единицы объема стержня [8-9]. При относительной деформации $\delta x/d$ потенциальная энергия одного атома увеличивается на величину:

$$\frac{\Delta U}{\Delta V} = \frac{E}{2n_0}\left(\frac{\delta x}{d}\right)^2 \quad (19)$$

Металл сохраняет свою устойчивость при выполнении условия

$$\frac{\Delta U}{\Delta V} \le E_b \quad (20)$$

Из формул (18 – 20) следует оценка модуля Юнга

$$E = \frac{2n_0 E_b}{\left(1+\sqrt{\frac{k_B T}{E_b}}\right)^2} \approx 2n_0 E_b \quad (21)$$

что с точностью до множителя

$$\frac{1}{1+2\sqrt{\frac{k_B T}{E_b}}} \sim 0.95 \quad (22)$$

согласуется с результатами работы [5].

Для определения величины модуля Юнга пользуются либо измерениями упругих деформаций при статических испытаниях материала, либо различными динамическими способами, основанными на измерении скорости распространения звуковых волн в металле [11].

Результаты расчетов.

Вычисления модуля Юнга с использованием выражения (22) для различных металлов с атомными номерами Z и сравнение их со справочными данными работы [12] представлены на Рис.2. Как видно из Рис.2. имеет место достаточно хорошее соответствие между расчетными и соответствующими справочными данными [12]. Следует отметить, что в расчетах не учитывались индивидуальные особенности кристаллических решеток металлов.

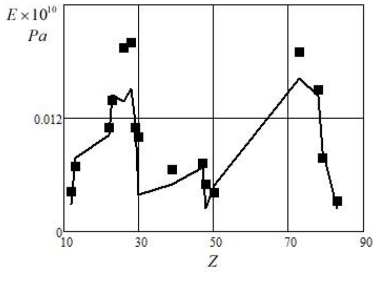

Рис.2. Сравнение расчетных - и экспериментальных данных ■ модуля Юнга для металлов.

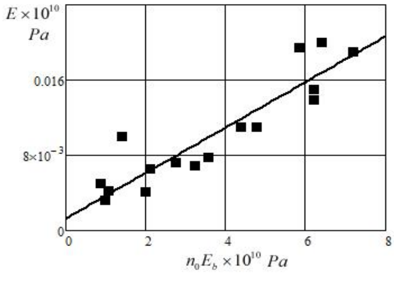

Рис.3 Экспериментальные значения ■ модуля Юнга в зависимости от энергии связи иона в решетке.

Согласно (21) Рис.4. соответствует линейной зависимости между значениями модуля Юнга и энергией связи ионов. Подстановка (19) в формулу (4) определяет соотношение между скоростью звука в стержне, состоящим из элемента с атомная массой иона решетки А, и энергией связи E_b

$$V_k = \sqrt{2\frac{N_A}{A}E_b} \quad (23)$$

где N_A – число Авогадро. На Рис.3 показаны результаты расчетов скорости звука по формуле (23) и справочными данными [12] для нескольких металлов периодической системы с атомным номером Z.

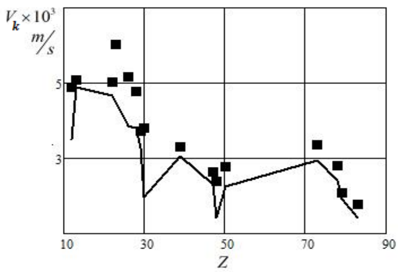

Рис.4. Скорость звука в стержне для ряда металлов периодической системы.

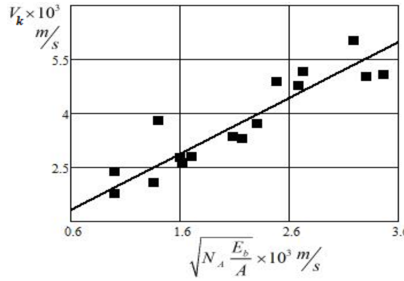

Рис.5. Зависимость скорости звука в стержне от энергии связи иона металла

На Рис.5. представлена зависимость расчетных (23) и экспериментальных данных [12] для скорости звука в зависимости от энергии связи и атомной массы ионов в металлическом стержне.

С целью дополнительной проверки полученных формул (22) и (23) был проведен расчет продольных и поперечных скоростей звука по формулам (7) и(6). Результаты расчетов и их сравнение со справочными данными [12] представлены на Рис.6 и Рис.7.

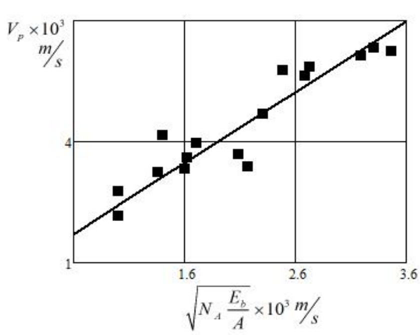

Рис.6. Зависимость продольной скорости колебаний от энергии связи.

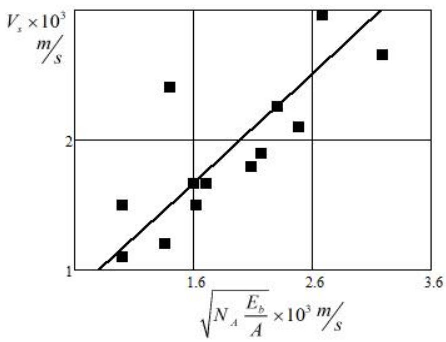

Рис.7. Зависимость поперечной скорости колебаний от энергии связи.

Заключение

Рассматривая ион в атомной решетки как осциллятор, на основе микроскопического подхода, был сделан анализ макроскопического параметра, характеризующего свойство материалов сопротивляться растяжению или сжатию при упругой деформации. Показано, что жесткость металла, характеризуемая модулем Юнга, определяется удельной энергий связи атома в кристаллической решетке. Такой подход позволяет на единой основе оценить не только величину модуля Юнга, но и такие макроскопические параметры, как продольную и поперечную скорость звука в металле и металлическом стержне. Получена простая зависимость между скоростью звука, модулем Юнга, энергией связи и атомной массой иона решетки.

Литература

1. V.F. Weisskopf, H. Bernstein. Search for Simplicity. Amer. Journal Physics. December 1985. v. 53, №12, p. 1140-1142. 2.
V. F. Weisskopf. Modern Physics from an Elementary Point of View. Lectures Given in the Summer Vacation Programme 1969, CERN Geneva, 1970.
3. Физика за рубежом. Сборник статей.–М.: МИР. 1988. -160с.
4. V.F. Weisskopf. Amer. Journal Physics. February. 1985. v. 54, №2, p. 110. 5. К.М. Ерохин, E.S. Kalachnikov, Н.П. Калашников. Высшая школа. Новые технологии науки, техники, педагогики: материалы Всероссийской научно-практической конференции «Наука – Общество – Технологии – 2018» –М.: МПУ. 2018. с.с. 45-47. Микроскопическая интерпретация модуля Юнга в законе Гука. 6.
В.Я. Хентов, В.В. Семченко, Х.Х. Хуссейнов. Научный вестник. 2016. № 3(9), с.с. 142-152. Роль температуры Дебая в проявлении физико-химических свойств простых и сложных веществ.
7. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Теория упругости т.VII.–М.: ГИФМЛ. Наука. 1965. - 203 с.
8.Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. –М.: ГТФМЛ. Наука. 1978. -791 с.
9. Н. Ашкрофт, Н. Мерлин. Физика твердого тела. т.1..–М.: МИР. 1979. -399с.
10. С.Э. Хайкин. Физические основы механики. - М.: ГИФМЛ. Наука. 1963. – 772 с.
11.Металлы. Динамический метод определения характеристик упругости: ГОСТ 25156-82. Введение. 02.03.82. -М.: Государственный комитет СССР по стандартам: Издательство стандартов, 1982. 21 с.
12. Физические величины. Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, У.З. Мейлихова. –М.: Энергоатомиздат. 1991. -1232с.