

The fluctuation approach for the estimation of the temperature coefficient of surface tension of simple substances

A. G. Cherevko

Siberian State University of Telecommunications and Informatics, Novosibirsk, Russia
E-mail: rectorat@sibsuiris.ru

On the basis of the analysis of temperature fluctuations of liquid critical clusters during a vapor to liquid phase transition the semiempirical relationship defining temperature dependence of a surface tension of simple substances from melting point up to a point of their boiling is offered. The formula for temperature coefficient of a surface tension is offered also. The relationship is carried out with satisfactory accuracy for a wide range of elements. Relationships link the thermophysical properties with the capillary properties of simple substances within a wide temperatures interval.

PACS: 68.35.-p

УДК 543.22:548.55

Анизотропия скорости ультразвука в монокристаллах металлов кубической симметрии

В. В. Красавин

Ковровская государственная технологическая академия, г. Ковров, Россия
E-mail: plddesigner@gmail.com

А. В. Красавин

Королевский университет Белфаста, г. Белфаст, Великобритания

Путем решения уравнения движения элементов среды под действием упругих напряжений получены аналитические выражения для продольной (квазипродольной) и двух поперечных (квазипоперечных) ультразвуковых волн в любом произвольном кристаллографическом направлении кубических кристаллов. Пространственная анизотропия скорости ультразвуковых волн в монокристаллах никеля и меди демонстрируется указательными поверхностями скоростей и численными оценками их разброса.

PACS: 81.10.-h

Введение

Распространение упругих волн в частности ультразвуковых, в анизотропной кристаллической среде определяется уравнением движения элементов среды под действием упругих напряжений [1]:

$$C_{ijkl} S_{ol} n_k n_j = \rho V^2 S_{oi}, \quad (1)$$

где C_{ijkl} — тензор модулей упругости кристалла;
 S_{ol}, S_{oi} — компоненты вектора смещения;
 n_k, n_j — компоненты единичного вектора \vec{n} (n_1, n_2, n_3), определяющего направление распространения упругой волны;
 ρ — плотность упругой среды;
 V — скорость упругой волны.

Анализ анизотропии скорости ультразвуковых волн в монокристаллах кубических металлов требует точного решения уравнения (1). Известны [1] решения этого уравнения для главных кристаллографических направлений в кристалле [100], [110] и [111]:

- для продольных волн:

$$\begin{aligned} \rho V^2_{[100]} &= C_{11}, \\ \rho V^2_{[110]} &= \frac{1}{2} (C_{11} + C_{12} + 2C_{44}), \\ \rho V^2_{[111]} &= \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}); \end{aligned} \quad (2)$$

- для поперечных волн:

$$\rho V^2_{[100]} = C_{44} \text{ — независимо от поляризации,}$$

$\rho V^2_{[110]} = C_{44}$ — при поляризации в направлении $[001]$,

$\rho V^2_{[110]} = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12})$ — при поляризации в направлении $[1\bar{1}0]$,

$\rho V^2_{[111]} = \frac{1}{3} (C_{11} + C_{12} - C_{44})$, независимо от поляризации.

Решения, позволяющее найти скорости ультразвуковых волн в любом произвольном кристаллографическом направлении, неизвестны. Цель настоящей работы — нахождение этих решений.

Постановка задачи

Тензор модулей упругости в уравнении (1) является симметричным, его компоненты не зависят от перестановки пар индексов, а также индексов в парах, т. е.

$$C_{ijkl} = C_{klij} = C_{lkij}.$$

Это дает возможность свернуть по определенным правилам тензор четвертого ранга C_{ijkl} до тензора второго ранга C_{ij} , где $i, j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Для кубических кристаллов новый шестимерный тензор второго ранга в главных осях кристалла записывается следующей матрицей:

$$C_{ij} = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{vmatrix}.$$

При этом для кубических кристаллов выполняются следующие равенства: $C_{11} = C_{22} = C_{33}$; $C_{12} = C_{13} = C_{23} = C_{21} = C_{31} = C_{32}$; $C_{44} = C_{55} = C_{66}$, а остальные модули оказываются равным нулю.

С учетом этого тензорное уравнение (1) принимает вид системы уравнений

$$\begin{aligned} (\lambda_{11} - \rho V^2)S_{o1} + \lambda_{12}S_{o2} + \lambda_{13}S_{o3} &= 0; \\ \lambda_{12}S_{o1} + (\lambda_{22} - \rho V^2)S_{o2} + \lambda_{23}S_{o3} &= 0; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\lambda_{13}S_{o1} + \lambda_{23}S_{o2} + (\lambda_{11} - \rho V^2)S_{o3} = 0,$$

где

$$\lambda_{ij} = \begin{cases} (C_{11} - C_{44})n_i n_j + C_{44} & \text{— при } i = j \\ (C_{12} + C_{44})n_i n_j & \text{— при } i \neq j. \end{cases}$$

Совместимость системы уравнений (4) обеспечивается равенством нулю определителя из коэффициентов при компонентах смещения:

$$\begin{vmatrix} \lambda_{11} - \rho V^2 & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \lambda_{12} & \lambda_{22} - \rho V^2 & \lambda_{23} \\ \lambda_{13} & \lambda_{23} & \lambda_{33} - \rho V^2 \end{vmatrix} = 0.$$

Из этого условия следует кубическое уравнение относительно ρV^2 , три корня которого дадут значения трех скоростей для любого кристаллографического направления:

$$(\rho V^2)^3 - J_1(\rho V^2)^2 + J_2(\rho V^2) - J_3 = 0. \quad (5)$$

Коэффициенты этого кубического уравнения выражаются через значения λ_{ij} :

$$\begin{aligned} J_1 &= \lambda_{11} + \lambda_{22} + \lambda_{33}; \\ J_2 &= \begin{vmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{12} & \lambda_{11} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{13} \\ \lambda_{13} & \lambda_{11} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ \lambda_{23} & \lambda_{22} \end{vmatrix}; \\ J_3 &= \begin{vmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \lambda_{12} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ \lambda_{13} & \lambda_{23} & \lambda_{33} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Явный вид уравнения (5), в котором коэффициенты J_1, J_2 и J_3 выражены через модули упругости и направляющие косинусы кристаллографического направления, приведен ниже:

$$\begin{aligned} (\rho V^2)^3 + A(\rho V^2)^2 + [B(n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2) + \\ + C](\rho V^2) + D(n_1^2 n_2^2 n_3^2) + BC_{44}(n_1^2 n_2^2 + \\ + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2) - C_{11}C_{44}^2 = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $A = -(C_{11} + 2C_{44})$;

$$B = (C_{11} - C_{44})^2 - (C_{12} + C_{44})^2;$$

$$C = C_{44}(2C_{11} + C_{44});$$

$$D = 3(C_{11} - C_{44})(C_{12} + C_{44})^2 - (C_{12} - C_{44})^3 - \\ - 2(C_{12} + C_{44})^3.$$

Три корня кубического уравнения (6) являются решениями для скоростей ультразвуковых волн в произвольном кристаллографическом направлении: одной продольной (квазипродольной) и двух поперечных (квазипоперечных) волн, поляризованных во взаимно перпендикулярных направлениях. Эти корни могут быть найдены в виде аналитических выражений [2].

Решение для продольной волны выражается формулой:

$$\begin{aligned} \rho V_1^2 &= 2\sqrt{\frac{BN+P}{3}} \times \\ &\times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{EN+DM+Q}{2\left(\frac{BN+P}{3}\right)^{3/2}} \right) \right] - \frac{A}{3}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $E = \frac{B}{3}(C_{11} - C_{44})$;

$P = -\frac{1}{3}(C_{11} - C_{44})^2$;

$Q = -\frac{2}{27} C_{11} - C_{44}^3$;

$N = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2$;

$M = n_1^2 n_2^2 n_3^2$.

Решение для поперечных волн

Решение для двух поперечных волн, поляризованных во взаимно перпендикулярных направлениях, выражается формулами:

$$\rho V_2^2 = 2\sqrt{\frac{BN+P}{3}} \times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{EN+DM+Q}{2\left(\frac{BN+P}{3}\right)^{3/2}} \right) + \frac{2\pi}{3} \right] - \frac{A}{3}, \tag{8}$$

$$\rho V_3^2 = 2\sqrt{\frac{BN+P}{3}} \times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(-\frac{EN+DM+Q}{2\left(\frac{BN+P}{3}\right)^{3/2}} \right) + \frac{4\pi}{3} \right] - \frac{A}{3}. \tag{9}$$

Для кристаллографических направлений [100] и [111] уравнения (7)–(9) приводят к известным аналитическим формулам, приведенным в (2) и (3). Для кристаллографического направления [110] можно получить только численные решения, которые, однако, совпадают с рассчитанными по формулам (2) и (3). Более подробно результаты этого анализа приведены в таблице.

Произвольная поляризация

Если задать кристаллографическое направление через сферические координаты (азимутальный угол φ и полярный угол β), то коэффициенты N и M , определяющие положение направления в пространстве, преобразуются к виду:

$N = \sin^2\beta [\sin^2\alpha \cdot \cos^2\alpha + \cos^2\beta (1 - \sin^2\alpha \cdot \cos^2\alpha)],$

$M = \sin^2\alpha \cdot \cos^2\alpha \cdot \cos^2\beta \alpha \cdot \sin^4\beta.$

Это дает возможность построить так называемые указательные поверхности, количественно и наглядно характеризующие пространственную анизотропию скорости ультразвука в кристалле. На рисунке, *a* (I) приведены указательная поверхность скорости продольных волн V_1 и ее сечения (*a*, II) для кристаллографических направлений одного октанта верхней полусферы монокристалла никеля. Наименьшее значение скорости продольных волн приходится на углы $\alpha = 45^\circ, \beta = 0^\circ$ (кристаллографическое направление [001]), наибольшее — на кристаллографическое направление [111]. Разброс значений скорости продольных волн составляет 15,7 % от наибольшего.

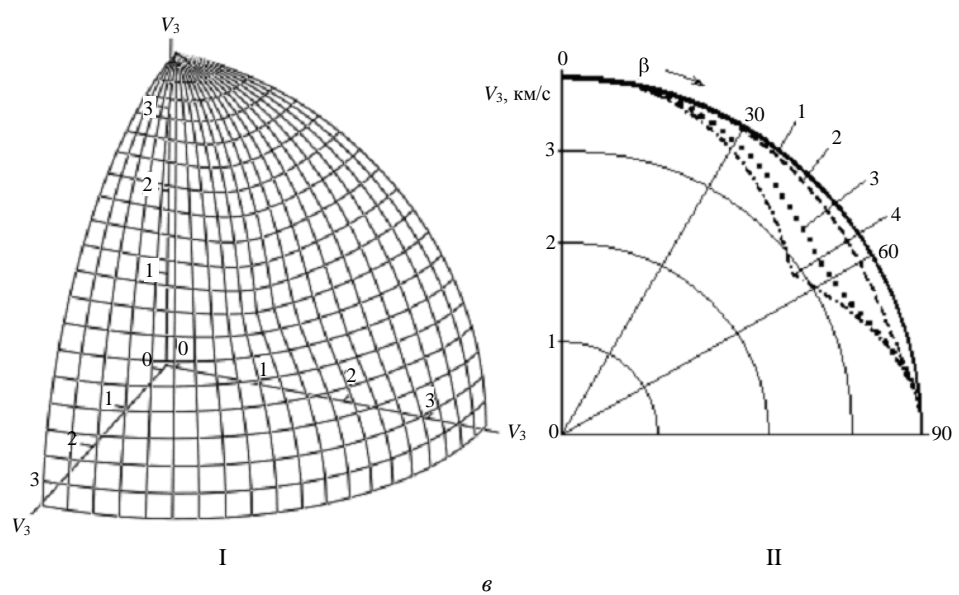
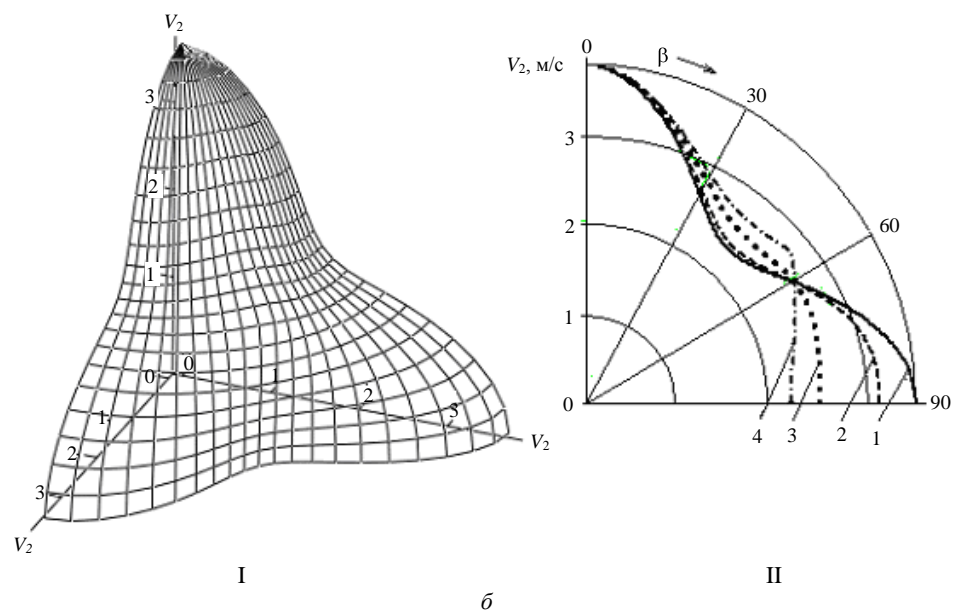
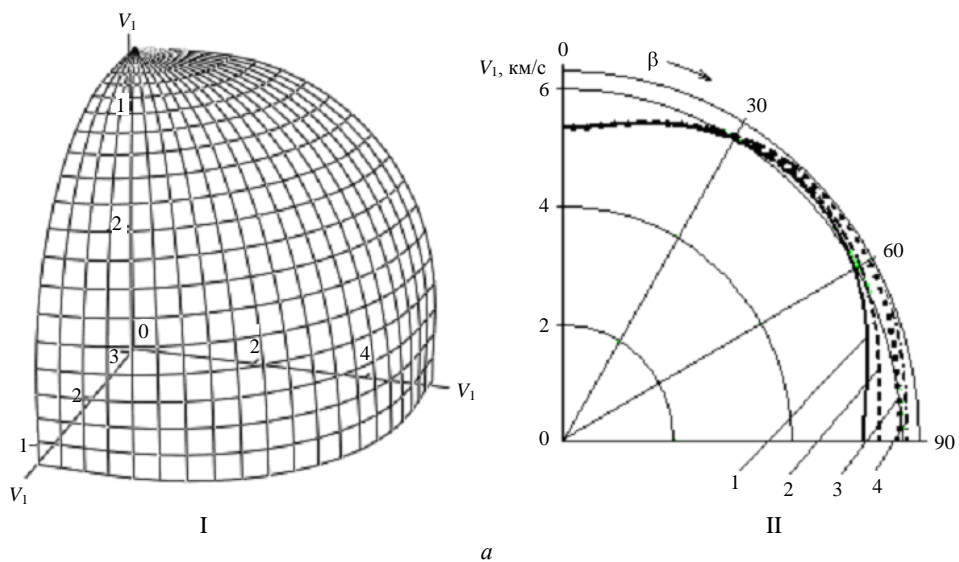
Аналогичные результаты для скорости поперечных волн V_2 приведены на рисунке, *b* (I, II), для скорости поперечных волн V_3 — на рисунке, *в* (I, II).

Наименьшее значение скорости поперечных волн V_2 приходится на углы $\alpha = 45^\circ, \beta = 90^\circ$ (кристаллографическое направление [110], поляризация в направлении $[1\bar{1}0]$), наибольшее — на кристаллографическое направление [001] (поляризация произвольна).

Разброс значений скорости этих поперечных волн V_2 составляет 36,9 %. Для скорости поперечных волн V_3 анизотропия значительно меньше. Наименьшее значение скорости приходится на углы $\alpha = 45^\circ, \beta = 54,7^\circ$ (кристаллографическое

Направление	Аналитическое решение (7)–(9)	Численное решение (7)–(9), ГПа	Скорость, м/с
[100] $N = 0,$ $M = 0$	$\rho V_1^2 = C_{11}$ $\rho V_2^2 = C_{44}$ $\rho V_3^2 = C_{44}$	246,5 124,7 124,7	5263 3743 3743
[110] $N = 1/4,$ $M = 0$	ρV_1^2 — ρV_2^2 — ρV_3^2 —	$321,6 = (C_{11} + C_{12} + 2C_{44})/2$ $49,60 = (C_{11} - C_{12})/2$ $124,7 = C_{44}$	6011 2361 3743
[111] $N = 1/3,$ $M = 1/27$	$\rho V_1^2 = (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/3$ $\rho V_2^2 = (C_{11} - C_{12} + C_{44})/3$ $\rho V_3^2 = (C_{11} - C_{12} + C_{44})/3$	346,6 74,63 74,63	6241 2896 2896

Примечание. Численные значения рассчитаны для монокристалла никеля (значения $C_{11} = 246,5$; $C_{12} = 147,3$; $C_{44} = 124,7$ ГПа взяты из [3]).



Указательная поверхность скоростей $V_1 - V_3$ (а—в) в монокристалле никеля (I) и их сечений (II) для различных азимутальных углов α :
 1 — 0° ; 2 — 15° ; 3 — 30° ; 4 — 45°

направление [111], поляризация произвольна), наибольшее — на кристаллографическое направление [001] (поляризация произвольна).

Разброс значений скорости этих поперечных волн V_3 составляет 22,6 %.

Степень анизотропии упругих свойств для кубических кристаллов, как показано в [4], характеризуется величиной

$$A = (S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2} S_{44}) = -\frac{C_{11} - C_{12} - 2C_{44}}{2C_{44}(C_{11} - C_{12})},$$

где S_{11} , S_{12} , S_{44} — коэффициенты упругой податливости в главных осях.

Если $A = 0$, то монокристалл является упруго-изотропным, и скорость ультразвуковых волн во всех кристаллографических направлениях должна быть одинакова. Примером этого являются монокристаллы вольфрама с очень малым значением фактора анизотропии ($A = 15 \cdot 10^{-6}$ ГПа⁻¹). Для никеля фактор анизотропии $A = 6,1 \cdot 10^{-3}$ ГПа⁻¹, и, как показано выше, он обладает значительной анизотропией скорости ультразвука.

К кубическим кристаллам, обладающим еще большей анизотропией, относятся монокристаллы меди. Для них фактор анизотропии $A = 14,6 \cdot 10^{-3}$ ГПа⁻¹.

Качественно указательные поверхности для меди подобны таковым для никеля, т. е. наибольшие и наименьшие значения скоростей приходятся на те же самые кристаллографические направления.

Различаются численные оценки анизотропии скорости ультразвука. Разброс значений скорости продольных волн для меди составляет 15,9 % от

наибольшего, поперечных волн V_2 — 44,1 %, а значений V_3 — 26,2 %.

Как видно из приведенных цифр, существенное увеличение анизотропии скорости ультразвука для меди по сравнению с никелем наблюдается для поперечных волн, особенно для V_2 .

Заключение

Получены аналитические формулы для расчета скоростей продольной (квазипродольной) и поперечных (квазипоперечных) ультразвуковых волн в произвольных кристаллографических направлениях кубических монокристаллов.

Проведена проверка полученных формул по главным кристаллографическим направлениям [001], [110] и [111], показавшая или их идентичность с известными формулами (для направлений [001] и [111]), или совпадение с численными значениями, подсчитанными по известным формулам (для направления [110]). Проведен анализ анизотропии скорости ультразвука для монокристаллов никеля и меди.

Л и т е р а т у р а

1. Труэлл Р., Эльбаум Ч., Чик Б. Ультразвуковые методы в физике твердого тела. — М.: Мир, 1972.
2. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. — М.: Наука, 1977.
3. Шутлов В. А. Основы физики ультразвука. — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980.
4. Красавин В. В., Красавин А. В. // Заводская лаборатория. Сер. Диагностика материалов. 2005. Т. 71. № 10. С. 29—32.

Статья поступила в редакцию 15 сентября 2008 г.

Anisotropy of ultrasound velocity in monocrystals of metals with cubic symmetry

V. V. Krasavin

The Kovrov State Technological Academy, Kovrov, Russia
E-mail: plddesigner@gmail.com

A. V. Krasavin

The Queen's University of Belfast, Belfast, United Kingdom

By solving the equations of medium response under elastic stresses analytical expressions have been found for one longitudinal (quasi-longitudinal) and two transverse (quasi-transverse) ultrasound waves in any arbitrary crystallographic direction in cubic crystals. Space anisotropy of ultrasound wave velocity in nickel and copper monocrystals is demonstrated by velocity surfaces and also numerical estimations of their variation.

PACS: 81.10.-h