

Зависимость упругих свойств кубических кристаллов, нано/микротрубок и двухслойных пластин из кубических кристаллов от давления

Магистр: Жезлова Екатерина Александровна

Группа: ЗФИЗ-2ДМ-050

Научный руководитель: Лисовенко Дмитрий Сергеевич

Кубические ауксетики

Три независимых модуля податливости:

$$s_{11} > 0, \quad s_{11} > s_{12} > -s_{11}/2, \quad s_{44} > 0$$

Коэффициент Пуассона и модуль Юнга

$$\frac{\nu}{E} = -\frac{\Delta}{2} [N(\varphi, \theta, \psi) - \Pi] \quad \frac{1}{E} = s_{11} - \frac{\Delta}{2} M(\varphi, \theta)$$

$$\Delta = s_{11} - s_{12} - s_{44} / 2 \quad M(\varphi, \theta) \equiv \sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \sin^2 2\varphi$$

$$\Pi \equiv -\frac{2s_{12}}{\Delta} \quad \delta = \frac{\Delta}{s_{11}}$$

$$N(\varphi, \theta, \psi) \equiv \left\{ 3 \cos^2 \theta \cos^2 \psi + (\cos \theta \cos 2\varphi \cos \psi - \sin 2\varphi \sin \psi)^2 \right\} \sin^2 \theta$$

При
этом

$$0 \leq N(\varphi, \theta, \psi) \leq 1 \quad 0 \leq M(\varphi, \theta) \leq 4/3$$

Кубические ауксетики

Терминология:

1. Неауксетики. При любых ориентациях коэффициент Пуассона положителен.
2. Частичные ауксетики. В зависимости от ориентации коэффициент Пуассона может быть положительным и отрицательным.
3. Полные ауксетики. При любых ориентациях коэффициент Пуассона отрицателен.

$$\text{Коэффициент Пуассона: } \frac{\nu}{E} = -\frac{\Delta}{2} [N(\varphi, \theta, \psi) - \Pi]$$

Полные ауксетики

1. $\Delta > 0, \Pi < 0$
2. $\Delta < 0, \Pi > 1$

Примеры: $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$,
 $\text{Sm}_{0.75}\text{La}_{0.25}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$

Неауксетики

1. $\Delta > 0, \Pi > 1$
2. $\Delta < 0, \Pi < 0$

Примеры: молибден Mo, ванадий V, хром Cr, ниобий Nb, их сплавы и целый ряд твердых растворов и бинарных соединений

Частичные ауксетики

Для частичных ауксетиков граница ауксетичности $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ принимает вид условия

$$N(\varphi, \theta, \psi) = \Pi \equiv -\frac{2s_{12}}{\Delta} \quad \Rightarrow \quad 0 < \Pi \equiv -\frac{2s_{12}}{\Delta} < 1 \quad \Pi \equiv -\frac{2s_{12}}{\Delta}$$

Частичных ауксетики будут наблюдаться при $\Delta > 0, s_{12} < 0$ и $\Delta < 0, s_{12} > 0$

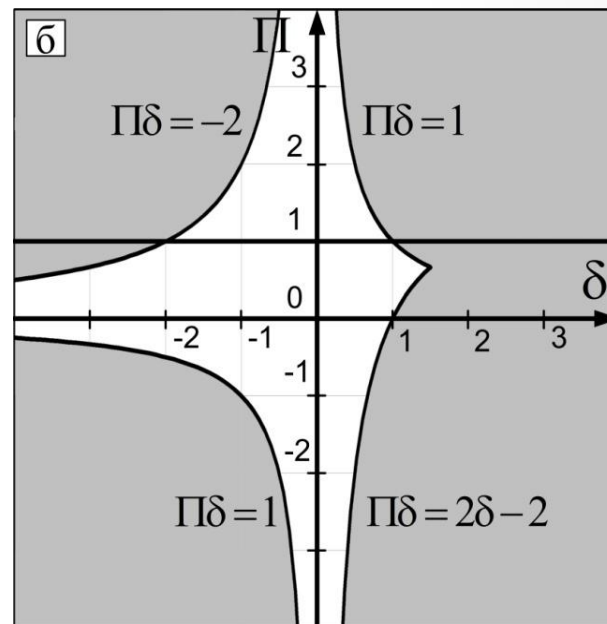
Примеры: литий Li, натрий Na, углерод C, германий Ge, платина Pt и др.

Классификационные схемы

Классификационная схема для кубических ауксетиков



Классификационная схема с границами устойчивости кубических кристаллов



Влияние давления на упругие свойства кубических кристаллов

Упругие модули и давление

$$C'_{11} = C_{11} - P$$

$$C'_{12} = C_{12} + P$$

$$C'_{44} = C_{44} - P$$

Связь между модулем
податливости и модулем
упругости

$$s_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} + C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$$

$$s_{12} = \frac{C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$$

$$s_{44} = \frac{1}{C_{44}}$$

Термодинамические ограничения,
накладываемые на упругие константы

$$C_{11} + 2C_{12} + P > 0 \quad C_{11} - C_{12} - 2P > 0$$

$$C_{44} - P > 0$$

Материал	P_{\min} , ГПа	P_{\max} , ГПа
Al	-232	23.0
Mo	-791	109
Na	-20.3	0.630

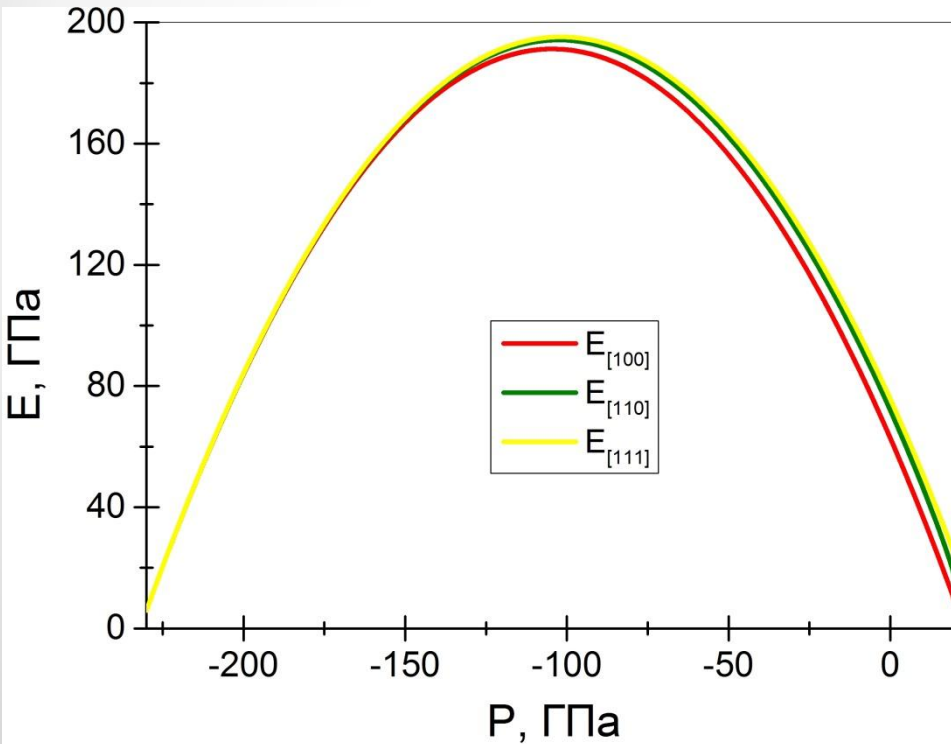
Модуль Юнга

Модуль Юнга при частных ориентациях

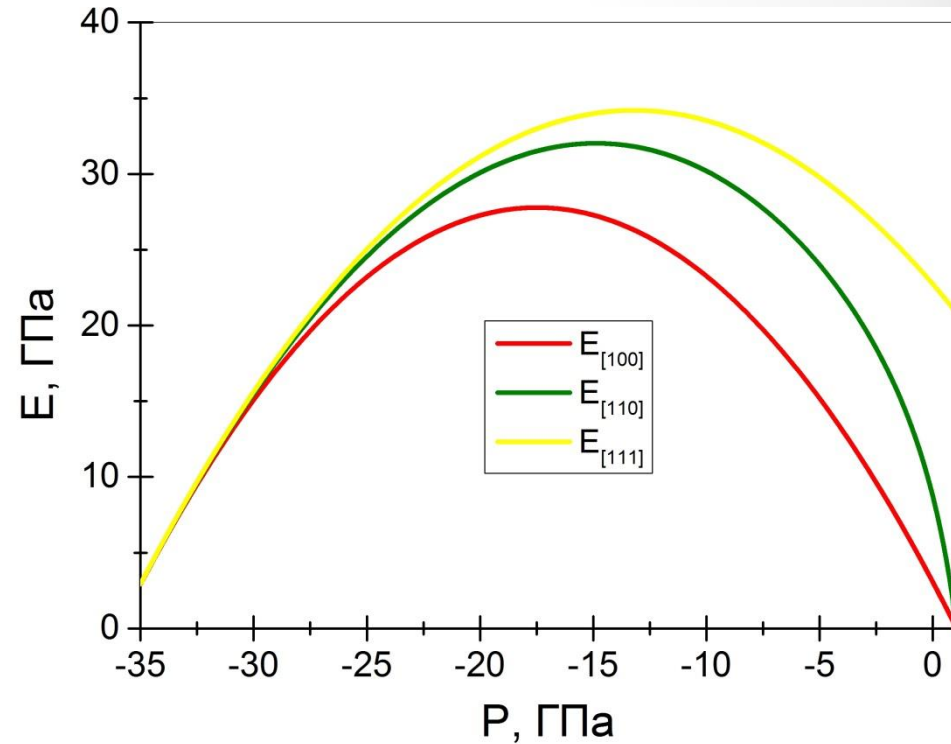
$$\frac{1}{E_{[110]}} = \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12} + 0,5s_{44})$$

$$\frac{1}{E_{[111]}} = s_{11} - \frac{2}{3}(s_{11} - s_{12} - 0,5s_{44})$$

$$\frac{1}{E_{[100]}} = s_{11}$$



Изменение модуля Юнга от давления Al (алюминий)

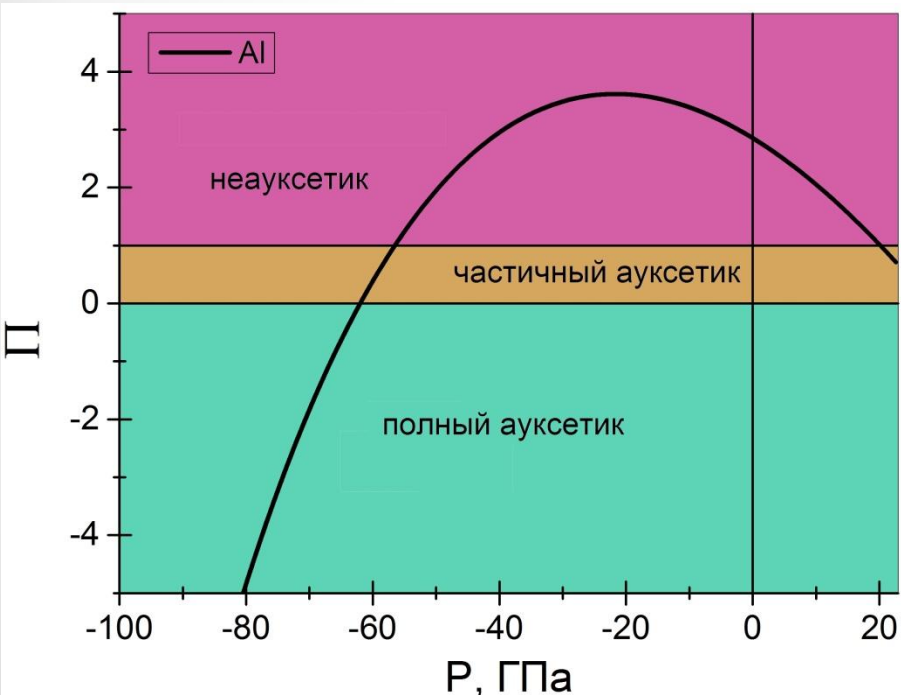
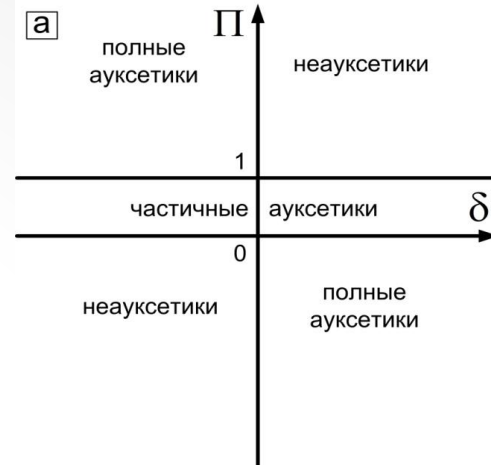


Изменение модуля Юнга от давления Li (литий)

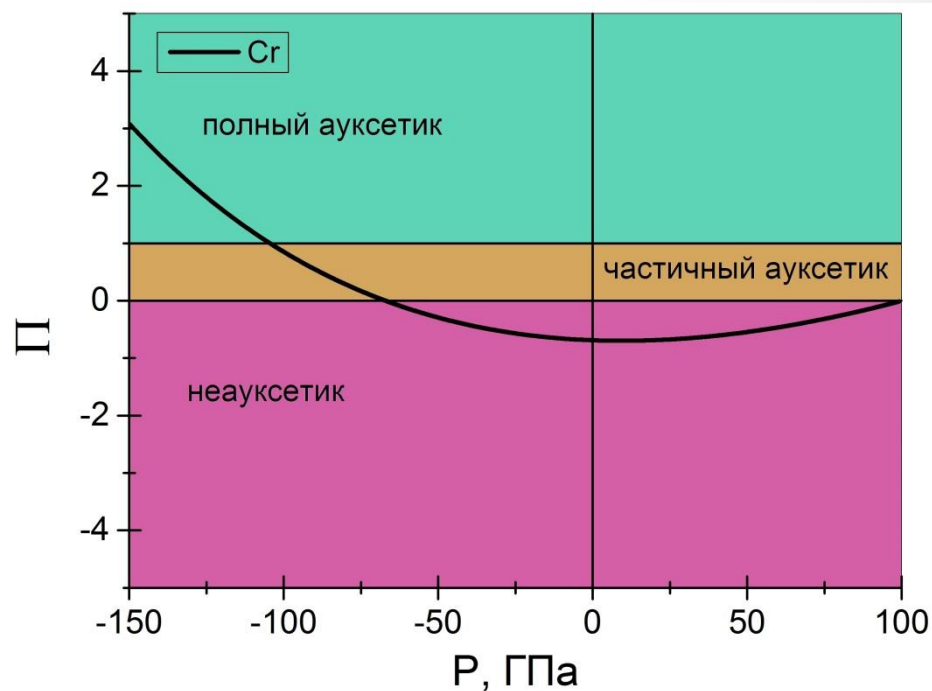
Безразмерный параметр Π

Выражаем безразмерный параметр Π через модули жесткости и давление

$$\Pi(P) = \frac{4(C_{12} + P)(C_{44} - P)}{(C_{11} + 2C_{12} + P)(2C_{44} + C_{12} - C_{11})}$$



Изменение безразмерного параметра Π от давления материала Al ($\Pi_0 = 2.85$, $\delta_0 = 0.256$)



Изменение безразмерного параметра Π от давления материала Cr ($\Pi_0 = -0.686$, $\delta_0 = -0.47$)

Коэффициент Пуассона и безразмерный параметр Π

Коэффициент Пуассона

$$1. \quad v_{[100]} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}$$

$$v_{[100]} = 0 \quad \text{при} \quad P = -C_{12}$$

$$2. \quad v_{[110],[001]} = -\frac{2s_{12}}{s_{11} + s_{12} + 0,5s_{44}}$$

$$v_{[110],[001]} = 0 \quad \text{при} \quad P = -C_{12}$$

$$3. \quad v_{[110],[110]} = -\frac{s_{11} + s_{12} - 0,5s_{44}}{s_{11} + s_{12} + 0,5s_{44}}$$

$$v_{[110],[110]} = 0 \quad \text{при} \quad 4P^2 - (C_{11} - C_{12} + 2C_{44})P + 2C_{11}C_{44} - C_{11}^2 - C_{11}C_{12} + 2C_{12}^2 = 0$$

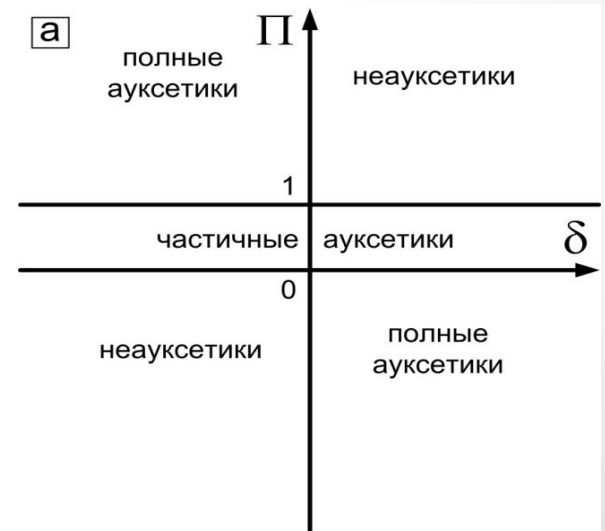
$$4. \quad v_{[111]} = -\frac{s_{11} + 2s_{12} - 0,5s_{44}}{s_{11} + 2s_{12} + s_{44}}$$

$$v_{[111]} = 0 \quad \text{при} \quad P = \frac{1}{3}(2C_{44} - C_{11} - 2C_{12})$$

Безразмерный параметр Π

$$\Pi = 0 \quad \text{при} \quad P = -C_{12}$$

$$\Pi = 1 \quad \text{при} \quad 4P^2 + (5C_{12} - 2C_{44} - C_{11})P + 2C_{11}C_{44} - 2C_{12}^2 - C_{11}C_{12} = 0$$



Коэффициент Пуассона

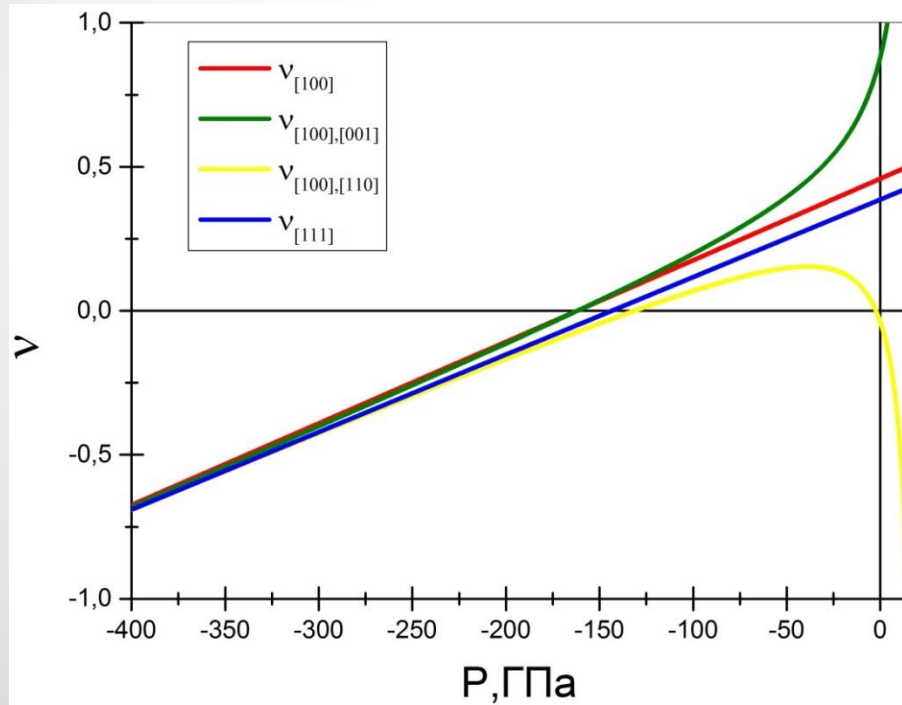
Расчетные формулы по
коэффициентам Пуассона
кубических монокристаллов

$$\nu_{[100]} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}$$

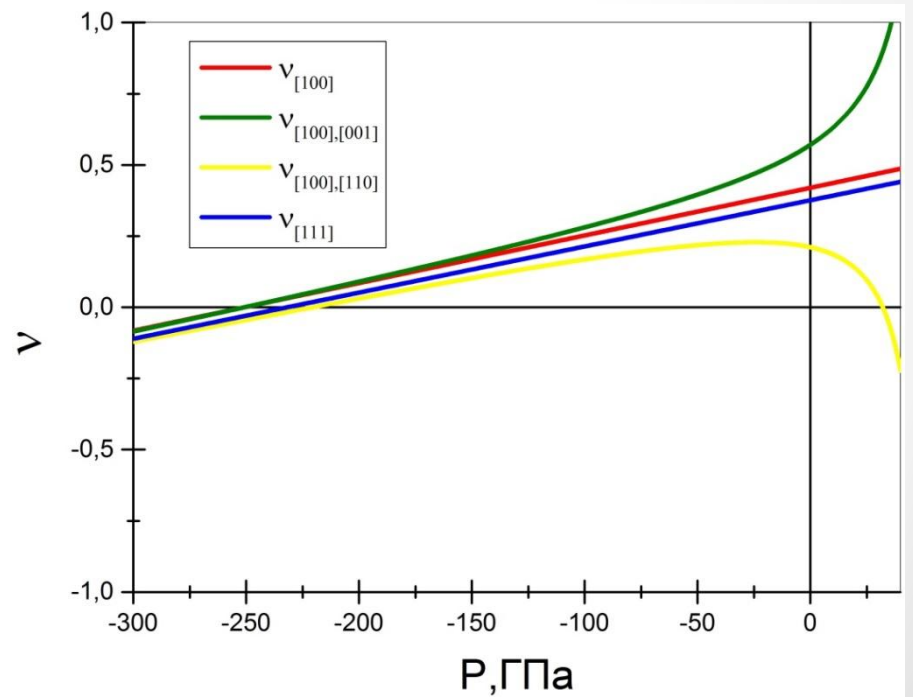
$$\nu_{[111]} = -\frac{s_{11} + 2s_{12} - 0,5s_{44}}{s_{11} + 2s_{12} + s_{44}}$$

$$\nu_{[110],[001]} = -\frac{2s_{12}}{s_{11} + s_{12} + 0,5s_{44}}$$

$$\nu_{[110],[110]} = -\frac{s_{11} + s_{12} - 0,5s_{44}}{s_{11} + s_{12} + 0,5s_{44}}$$



- Изменение коэффициента
Пуассона от давления Au (золото)
-



- Изменение коэффициента
Пуассона от давления Pt(платина)
-

Выводы

- Исследовано влияние давления на модуль Юнга и коэффициент Пуассона элементарных кубических металлов .
- Среди элементарных кубических металлов выявлено, что при давлении все материалы проявляют ауксетичные свойства.
- Исследовано влияние давления на модуль Юнга и коэффициент Пуассона при однородном растяжении.
- Проанализированы кубические кристаллы под давлением, подчищен текст, проводится анализ и обработка графического материала.

План на 2 полугодие

- Проанализировать растяжение двухслойной пластинки, состоящей из ауксетика и неауксетика.
- Выяснить, при каком давлении двухслойные пластинки из кубических кристаллов проявляют ауксетичные свойства.
- Проанализировать нано/микротрубки под давлением.