

УДК 534.2:539

## КОЭФФИЦИЕНТЫ ПУАССОНА ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ. Ч. II. ГАЛОГЕНИДЫ НАТРИЯ

В.Н. Беломестных, Э.Г. Соболева

Юргинский технологический институт (филиал) ТПУ

E-mail: sobolevaeno@mail.ru

Исследованы коэффициенты Пуассона кристаллов галогенидов натрия при стандартных условиях и с изменением температуры. Установлено, что с повышением температуры в кристаллах NaX (X=F, Cl, Br, I) происходит смена вида неравенств между анизотропными коэффициентами Пуассона  $\sigma_{(hkl)}$  в соответствующих точках их упругой изотропии.

**Ключевые слова:**

Коэффициент Пуассона, кристалл, упругие свойства.

**Key words:**

Poisson's ratio, crystal, elastic properties.

Ранее нами были опубликованы результаты по коэффициентам Пуассона кристаллов галогенидов лития [1]. Одной из интересных особенностей полученных данных было то, что в кристалле LiF при определенных условиях наблюдались отрицательные анизотропные коэффициенты Пуассона. Представляет интерес рассмотреть аналогичные зависимости для кристаллов галогенидов натрия.

В настоящей работе приводятся сведения о коэффициентах Пуассона кристаллов галогенидов натрия с общей формулой NaX (где X=F, Cl, Br, I). Некоторые физические свойства этих кристаллов указаны в табл. 1. Из таблицы следует, что при стандартных условиях фактор упругой анизотропии  $A < 1$  для всех галогенидов натрия, а соотношение Коши  $\Delta$  так же, как и в галогенидах лития, увеличивается по ряду NaF → NaCl → NaBr → NaI.

**Таблица 1.** Некоторые физические свойства галогенидов натрия (300 К) [2, 3]

Свойство	NaF	NaCl	NaBr	NaI
1. Компоненты тензора упругой жесткости $c_{ij}$ , ГПа				
$c_{11}$	97,10	49,60	39,65	30,07
$c_{12}$	24,30	13,10	10,29	9,12
$c_{44}$	28,00	12,68	9,95	7,33
2. Температура плавления, К	1265	1074	1028	935
3. Соотношение Коши $\Delta = c_{12}/c_{44}$	0,87	1,03	1,03	1,24
4. Фактор упругой анизотропии $A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12})$	0,77	0,70	0,68	0,70
5. Точка упругой изотропии ( $A=1$ ), К	923	637	710	673

В табл. 2 для исследуемого ряда кристаллов представлены анизотропные  $\sigma_{(hkl)}$ , средние  $\sigma$ , усредненные  $\bar{\sigma}$  коэффициенты Пуассона и параметр Грюнайзена  $\gamma$  при стандартных условиях. Расчетные соотношения для указанных величин были приведены нами ранее [1]. Из данных таблицы вытекает, что при комнатной температуре анизотропные коэффициенты Пуассона в галогенидах натрия подчиняются закономерности:  $\sigma_{\langle 110,1\bar{1}0 \rangle} > \sigma_{\langle 111 \rangle} > \sigma_{\langle 100 \rangle} > \sigma_{\langle 110,001 \rangle}$ . Параметр Грюнайзена, средний и усредненный коэффициенты Пуассона возрастают по ряду NaF → NaCl → NaBr → NaI.

**Таблица 2.** Коэффициенты Пуассона и параметр Грюнайзена кристаллов галогенидов натрия (300 К)

Кристалл	$\sigma_{\langle 100 \rangle}$	$\sigma_{\langle 110,001 \rangle}$	$\sigma_{\langle 110,1\bar{1}0 \rangle}$	$\sigma_{\langle 111 \rangle}$	$\sigma$	$\bar{\sigma}$	$\gamma$
NaF	0,20	0,17	0,32	0,26	0,24	0,24	1,44
NaCl	0,21	0,17	0,37	0,29	0,26	0,26	1,53
NaBr	0,22	0,18	0,38	0,29	0,27	0,27	1,59
NaI	0,23	0,18	0,39	0,30	0,28	0,28	1,64

Температурные изменения коэффициентов Пуассона кристаллов NaX представлены на рисунке. Виды этих зависимостей для отдельных кристаллов натриевого ряда в целом схожи между собой: как и следовало ожидать, в точках упругой изотропии все коэффициенты Пуассона данного кристалла равны между собой ( $\sigma_{\langle 100 \rangle} = \sigma_{\langle 110,001 \rangle} = \sigma_{\langle 110,1\bar{1}0 \rangle} = \sigma_{\langle 111 \rangle} = \sigma$ ). Подобного не наблюдалось для аналогичных зависимостей  $\sigma_{(hkl)}(T)$  и  $\sigma(T)$  в кристаллах галогенидов лития [1]. При температурах выше соответствующих точек упругой изотропии кристаллов NaX анизотропия их коэффициентов Пуассона описывается следующим неравенством:  $\sigma_{\langle 110,001 \rangle} > \sigma_{\langle 100 \rangle} > \sigma_{\langle 111 \rangle} > \sigma_{\langle 110,1\bar{1}0 \rangle}$ . В области предплавления NaCl вид зависимостей  $\sigma(T)$  напоминает аналогичные кривые в NaClO<sub>3</sub>, только без перехода в отрицательную область значений коэффициентов Пуассона (ауксетичное состояние) [4].

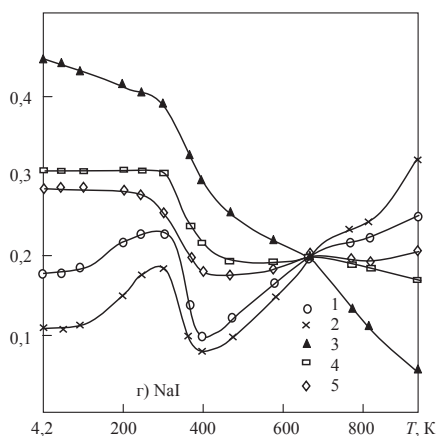
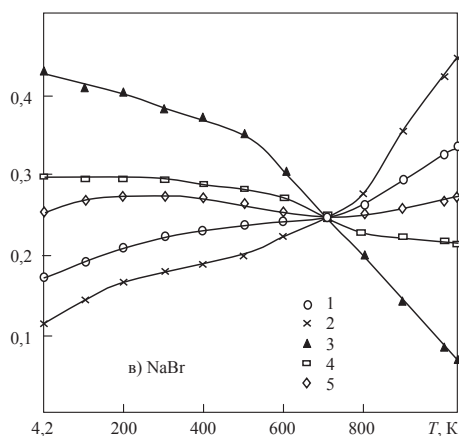
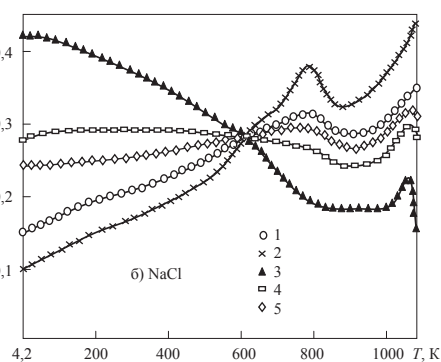
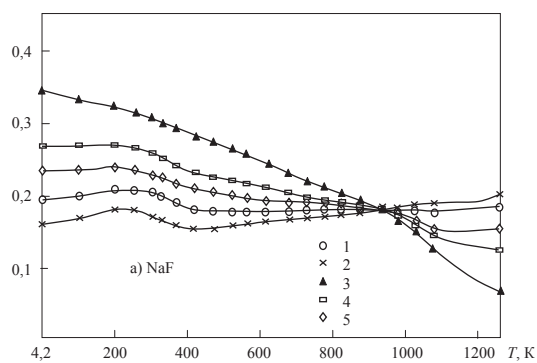
Представляло интерес рассмотреть температурные изменения анизотропных модулей сдвига  $G_{(hkl)}$  и Юнга  $E_{(hkl)}$  кристаллов галогенидов натрия (табл. 3–6). Анизотропные упругие модули, приведенные в этих таблицах, были определены по расчетным соотношениям [4], где  $s_{ij}$  – постоянные податливости:

$$E_{(100)} = \frac{1}{s_{11}}, \quad E_{(110)} = \frac{2}{s_{11} + s_{12} + 0,5s_{44}},$$

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

$$G_{(100)} = \frac{1}{s_{44}}, \quad G_{(110)} = \frac{2}{s_{11} - s_{12} + 0,5s_{44}},$$

$$G_{(111)} = \frac{1}{s_{44} - \frac{4}{3}(s_{11} - s_{12} + 0,5s_{44})}.$$



**Рисунок.** Температурные изменения коэффициентов Пуассона кристаллов NaX: 1)  $\sigma_{\langle 100 \rangle}$ ; 2)  $\sigma_{\langle 110,001 \rangle}$ ; 3)  $\sigma_{\langle 110,110 \rangle}$ ; 4)  $\sigma_{\langle 111 \rangle}$ ; 5)  $\sigma$  (поликристалл)

В работе использовались справочные сведения по упругим постоянным монокристаллов галогенидов натрия [5].

Из табл. 3–6 следует, что у кристаллов галогенидов натрия с повышением температуры до точек упругой изотропии наблюдаются следующие неравенства между анизотропными упругими модулями:  $G_{\langle 100 \rangle} < G_{\langle 110 \rangle} < G_{\langle 111 \rangle}$ ,  $E_{\langle 100 \rangle} > E_{\langle 110 \rangle} > E_{\langle 111 \rangle}$ , а выше этих точек –  $G_{\langle 111 \rangle} < G_{\langle 110 \rangle} < G_{\langle 100 \rangle}$ ,  $E_{\langle 111 \rangle} > E_{\langle 110 \rangle} > E_{\langle 100 \rangle}$ .

**Таблица 3.** Анизотропные упругие модули кристалла NaF

T	$G_{\langle 100 \rangle}$	$G_{\langle 110 \rangle}$	$G_{\langle 111 \rangle}$	$E_{\langle 100 \rangle}$	$E_{\langle 110 \rangle}$	$E_{\langle 111 \rangle}$
K	ГПа					
4,2	30,40	35,60	37,70	98,0	82,50	76,00
100	29,50	34,25	36,10	94,00	78,71	74,36
200	29,00	33,00	34,75	88,00	77,01	71,49
300	28,00	31,65	33,09	85,00	74,03	68,50
400	27,52	30,50	31,80	80,00	70,05	66,00
500	26,85	29,15	30,25	76,50	67,50	64,00
600	26,17	27,80	28,60	71,50	65,00	62,50
700	25,50	26,50	27,10	66,50	62,00	60,00
800	24,80	25,25	25,60	62,50	58,00	57,50
900	24,00	24,25	24,60	57,50	56,00	55,00
1000	23,45	22,60	22,50	52,45	53,00	53,50
1100	22,75	21,40	21,00	48,00	50,00	51,00
1200	22,00	20,00	19,50	44,50	47,50	48,00
1265	21,52	19,34	18,71	41,56	46,62	48,60

**Таблица 4.** Анизотропные упругие модули кристалла NaCl

T	$G_{\langle 100 \rangle}$	$G_{\langle 110 \rangle}$	$G_{\langle 111 \rangle}$	$E_{\langle 100 \rangle}$	$E_{\langle 110 \rangle}$	$E_{\langle 111 \rangle}$
K	ГПа					
4,2	13,25	17,10	19,10	57,50	41,00	36,50
100	13,10	16,60	18,10	52,50	37,50	35,00
200	13,01	15,87	17,13	48,47	36,28	33,47
300	12,68	14,97	15,92	44,13	34,87	32,58
400	12,34	13,97	14,61	39,57	33,33	31,67
500	12,00	13,00	13,25	31,00	30,45	30,00
600	11,50	11,80	12,00	30,00	29,50	29,45
700	11,20	10,75	10,50	25,00	27,50	28,00
800	10,90	9,50	9,25	22,50	24,00	26,00
900	10,10	8,25	8,00	20,00	22,00	25,00
1000	7,50	6,50	5,90	15,00	17,50	19,00
1073	5,35	4,62	4,42	10,97	13,09	13,99

**Таблица 5.** Анизотропные упругие модули кристалла NaBr

T	$G_{\langle 100 \rangle}$	$G_{\langle 110 \rangle}$	$G_{\langle 111 \rangle}$	$E_{\langle 100 \rangle}$	$E_{\langle 110 \rangle}$	$E_{\langle 111 \rangle}$
K	ГПа					
4,2	10,50	13,00	14,15	41,00	30,00	27,00
100	10,30	12,83	13,97	40,68	29,28	26,78
200	10,00	12,00	12,86	36,82	28,17	26,12
300	9,95	11,70	12,42	34,65	27,51	25,74
400	9,00	10,47	11,06	30,55	24,69	23,20
500	8,80	9,80	10,18	27,32	23,59	22,57
600	8,50	9,08	9,29	24,18	22,16	21,56
700	8,00	8,12	8,17	20,69	20,29	20,16
800	7,50	7,31	7,25	17,96	18,54	18,75
900	7,00	5,92	5,63	13,29	16,09	17,30
1000	6,50	4,92	4,55	10,43	14,07	15,92
1028	6,00	4,42	4,07	9,27	12,81	14,68

**Таблица 6.** Анизотропные упругие модули кристалла NaI

T	$G_{\langle 100 \rangle}$	$G_{\langle 110 \rangle}$	$G_{\langle 111 \rangle}$	$E_{\langle 100 \rangle}$	$E_{\langle 110 \rangle}$	$E_{\langle 111 \rangle}$
K	ГПа					
4,2	7,81	10,23	11,40	34,81	22,80	20,44
100	7,40	9,75	10,80	32,50	22,00	20,40
200	7,35	9,25	9,50	27,00	21,50	19,50
300	7,33	8,63	9,16	25,83	20,43	19,09
400	7,30	8,40	9,00	23,45	19,00	18,00
500	7,20	8,10	8,25	20,00	18,10	17,50
600	7,00	7,20	7,25	18,10	17,00	16,50
700	6,70	6,50	6,40	15,00	15,50	16,00
800	6,45	5,80	5,60	12,50	13,50	15,00
900	6,20	5,10	4,80	11,25	13,25	14,00
924	6,10	4,90	4,60	10,30	12,98	14,21

Таким образом, качественно анизотропии коэффициентов Пуассона и упругих модулей (виды

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беломестных В.Н., Соболева Э.Г. Коэффициенты Пуассона щелочно-галогидных кристаллов. Ч. I. Галогениды натрия // Известия Томского политехнического университета. – 2012. – Т. 320. – № 2. – С. 137–139.
2. Беломестных В.Н., Похолков Ю.П., Ульянов В.Л., Хасанов О.Л. Упругие и акустические свойства ионных, керамических диэлектриков и высокотемпературных сверхпроводников. – Томск: СТТ, 2001. – 226 с.
3. Беломестных В.Н., Теслева Е.П. Ангармонические эффекты в твердых телах (акустические аспекты). – Томск: Изд-во ТПУ, 2009. – 151 с.

неравенств) кристаллов NaX (X=F,Cl,Br,I) не совпадают между собой во всем исследованном интервале температур.

#### Выводы

1. Определены коэффициенты Пуассона моно- и поликристаллов галогенидов натрия в температурной области их существования.
2. Установлены два вида неравенств между анизотропными коэффициентами Пуассона монокристаллов галогенидов натрия в зависимости от значения фактора упругой анизотропии по отношению к единице ( $A < 1$  или  $A > 1$ ). Такие виды неравенств для  $\sigma_{(hkl)}$  должны быть присущи всем кубическим кристаллам с решеткой типа B1 (NaCl).

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-08-98014 р\_сибирь\_a на проведение фундаментальных научных исследований.*

4. Беломестных В.Н., Соболева Э.Г. Акустические, упругие и неупругие свойства кристаллов галогенатов натрия. – Томск: Изд-во ТПУ, 2009. – 276 с.
5. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов: справочник. – Киев: Наукова думка, 1982. – 286 с.

*Поступила 18.03.2013 г.*