ПМТФ, № 4, 1972

УДК 539.89

К РАСЧЕТУ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДУЛЕЙ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Ю. Я. Богуславский, Ф. Ф. Воронов, С. Б. Григорьев

(Москва)

На основе теории конечных деформаций получены в общем виде выражения для эффективных адиабатических упругих постоянных второго порядка кристаллов любой симметрии, выраженные через изотермические упругие постоянные второго, третьего и более высоких порядков, входящие в разложение свободной энергии. Эти выражения применены в случае кристаллов кубической симметрии в условиях гидростатики для нахождения скоростей упругих волн в монокристаллах и поликристаллах и их зависимости от давления.

Поликристалл рассматривался как изотропное тело, состоящее из большого числа кубических монокристаллов. Изотропные упругие постоянные вычислялись из теоретических и экспериментальных данных для монокристаллов в приближении Фохта — Ройсса — Хилла. Предложен метод применения этого приближения к термодинамическим эффективным упругим постоянным второго порядка. Результаты расчета сравниваются с данными экспериментов по измерению скоростей звука в поликристаллических образцах NaCl и CsCl при давлениях до 100 *кбар*. Проведено обсуждение результатов этого сравнения.

Исследования динамическими методами упругих свойств твердых тел, подвергнутых конечным деформациям, приводят к определению «эффективных» адиабатических упругих постоянных деформированного монокристалла или поликристалла. В то же время из теоретических расчетов известны изотермические упругие постоянные второго (ВПУ постоянные), третьего (ТПУ постоянные) и высших порядков, определенные для исходного «естественного» состояния монокристалла.

Найдем в общем виде связь между эффективными адиабатическими ВПУ постоянными твердого тела и изотермическими упругими постоянными монокристалла.

Будем различать три разных состояния:

1) исходное естественное состояние, характеризуемое координатами a_i и плотностью ρ_0, в котором напряжения отсутствуют;

2) «начальное» деформированное равновесие состояние, характеризуемое координатами X_i и плотностью ρ^*;

3) состояние «в данный момент», характеризуемое координатами x_i и плотностью ρ.

Компоненты вектора смещения из начального состояния в состояние в данный момент определяются выражениями

$$u_i = x_i - X_i$$

Связь между механическими и термодинамическими напряжениями согласно Мэрнагану [1], имеет вид

$$T_{ij} = \frac{1}{J} \frac{\partial x_i}{\partial a_k} \frac{\partial x_j}{\partial a_m} t_{km} \tag{1}$$

Здесь t_{km} — термодинамические напряжения, определяемые выражениями

$$t_{km} = \rho_0 \frac{\partial U(\eta_{km}, S)}{\partial \eta_{km}}, \quad t_{km} = \rho_0 \frac{\partial A(\eta_{km}, T)}{\partial \eta_{km}}, \quad \rho = \frac{\rho_0}{J}$$

где $U(\eta, S)$ и $A(\eta, T)$ — внутренняя энергия и свободная энергия Гельмгольца соответственно, η — деформация в переменных Лагранжа, S — энтропия, T — температура, J — якобиан перехода от переменных x_1, x_2, x_3 к переменным a_1, a_2, a_3. Опуская члены второго и более высоких порядков по градиентам смещения u_i [2], запишем выражение для термодинамических напряжений в виде разложения их в ряд вблизи начального состояния

$$t_{km} = \overset{*}{t}_{km} + \overset{*}{c}_{kmpn}(\eta_{pn} - \overset{*}{\eta}_{pn}) + \ldots = \overset{*}{t}_{km} + \overset{*S}{c}_{kmpn} \frac{\partial X_f}{\partial a_p} \frac{\partial X_h}{\partial a_n} e_{fh} \tag{2}$$

$$e_{fh} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_f}{\partial X_h} + \frac{\partial u_h}{\partial X_f}\right)$$

Для механического напряжения согласно (1) и (2) получаем

$$T_{ij} = \frac{1}{J} \frac{\partial X_i}{\partial a_k} \frac{\partial X_j}{\partial a_m} t_{km} = T_{ij}^* \left(1 - \frac{\partial u_l}{\partial X_l}\right) + \tag{3}$$

$$+ T_{il}^* \frac{\partial u_j}{\partial X_l} + T_{jl}^* \frac{\partial u_i}{\partial X_l} + C_{ijfh}^{*S} e_{fh}$$

где

$$T_{ij}^* = \frac{1}{J^*} \frac{\partial X_i}{\partial a_k} \frac{\partial X_j}{\partial a_m} \overset{*}{t}_{km} \tag{4}$$

$$C_{ijfh}^{*S} = \frac{1}{J^*} \frac{\partial X_i}{\partial a_m} \frac{\partial X_j}{\partial a_p} \frac{\partial X_f}{\partial a_q} \frac{\partial X_h}{\partial a_l} \overset{*S}{c}_{mpql} \tag{5}$$

Звездочкой отмечены величины в начальном состоянии.

Из выражения (3) получаем связь между напряжениями и деформациями для случая малых адиабатических деформаций в начальных координатах

$$T_{ij}' = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial e_{fh}}\right)_{S, e=0} e_{fh} = C_{ijfh}^{*'S} e_{fh} \tag{6}$$

где

$$C_{ijfh}^{*'S} = - T_{ij}^* \delta_{fh} + T_{if}^* \delta_{hj} + T_{jf}^* \delta_{ih} + C_{ijfh}^{*S} \tag{7}$$

В дальнейшем будем рассматривать только случай однородной начальной деформации, при которой величины $C_{ijfh}^{*'S}$ являются постоянными. Тогда, используя выражение (6), получим волновое уравнение

$$\rho^* \frac{\partial^2 u_i}{\partial \tau^2} = B_{ijfh}^{*S} \frac{\partial^2 u_f}{\partial X_j \partial X_h} \tag{8}$$

$$B_{ijfh}^{*S} = \delta_{if} T_{jh}^* + \frac{1}{J^*} \frac{\partial X_i}{\partial a_m} \frac{\partial X_j}{\partial a_p} \frac{\partial X_f}{\partial a_q} \frac{\partial X_h}{\partial a_l} \overset{*S}{c}_{mpql}$$

где τ — время.

Разлагая упругие постоянные $\overset{*S}{c}_{mpql}$, входящие в выражения (7) и (8), в ряд вблизи естественного состояния, получим

$$\overset{*S}{c}_{mpql} = c_{mpql}^{S} + \left(\frac{\partial \overset{*S}{c}_{mpql}}{\partial \eta_{ns}}\right)_T \eta_{ns} + \ldots$$

где $(\partial c^{*S}_{mpql}/\partial\eta_{ns})_T$, по определению Браггера [3],— смешанные ТПУ постоянные. Определим эффективные изотермические ВПУ постоянные, для которых получаются следующие выражения:

$$C^{*\prime T}_{ijfh} = -T_{ij}{}^*\delta_{fh} + T_{if}{}^*\delta_{hj} + T_{jf}{}^*\delta_{ih} + \tag{9}$$

$$+\frac{1}{J^*}\frac{\partial X_i}{\partial a_m}\frac{\partial X_j}{\partial a_p}\frac{\partial X_f}{\partial a_q}\frac{\partial X_h}{\partial a_l}\left(c^T_{mpql} + C^T_{mpqlns}\eta_{ns}\right)$$

Для вычисления динамических упругих моделей твердого тела необходимо связать эффективные изотермические ВПУ постоянные с эффективными адиабатическими упругими постоянными того же порядка, которые определяются выражениями (7).

Так как тензор механического напряжения можно представить функцией вида

$$T_{ij} = T_{ij}\{\eta, e, T(\eta, e, S)\}$$

где η — конечная деформация и e — бесконечно малая деформация, создаваемая звуковой волной, то эффективная адиабатическая ВПУ постоянная есть

$$C^{*\prime S}_{ijfh} = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial e_{fh}}\right)_{S,e=0} = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial e_{fh}}\right)_{T,e=0} + \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial t_{\kappa m}}\right)_{\eta,e=0}\left(\frac{\partial t_{\kappa m}}{\partial T}\right)_{\eta,e=0}\left(\frac{\partial T}{\partial e_{fh}}\right)_{S,e=0} =$$

$$= C^{*\prime T}_{ijfh} + \frac{1}{J^*}\frac{\partial X_i}{\partial a_\kappa}\frac{\partial X_j}{\partial a_m}\frac{T\lambda_{\kappa m}\lambda_{fh}}{\rho_0 C_\eta{}^*} = C^{*\prime T}_{ijfh} +$$

$$+\frac{1}{J^*}\frac{\partial X_i}{\partial a_k}\frac{\partial X_j}{\partial a_m}\frac{T\alpha^*_{pn}\, c^{*T}_{kmpn}\,\alpha^*_{p'n'}\, c^{*T}_{p'n'fh}}{\rho_0 C_\eta{}^*}$$

$$\lambda_{ij} = \alpha^*_{vw} c^{*T}_{vwij}$$

Разлагая λ_{ij} в ряд вблизи естественного состояния, получим

$$\lambda_{ij} = \lambda_{ij}(0) + \left(\frac{\partial\lambda_{ij}}{\partial\eta_{mn}}\right)_{T,\eta=0}\eta_{mn}$$

Здесь

$$\left(\frac{\partial\lambda_{ij}}{\partial\eta_{mn}}\right)_{T,\eta=0} = c^T_{ijvw}c^T_{zymn}\left(\frac{\partial s_{vwzy}}{\partial T}\right)_t + \alpha_{vv}C^T_{ijvwmn}$$

Производя аналогичное разложение, имеем

$$C_\eta{}^*(\eta_{mn}) = C_\eta(0) + \frac{T}{\rho_0}\left(\frac{\partial\lambda_{ij}}{\partial T}\right)_{\eta=0}\eta_{ij}$$

где s_{vwzy} — изотермические упругие податливости второго порядка, $\alpha_{vw} = (\partial\eta_{vw}/\partial T)_t$ — линейные коэффициенты теплового расширения, C_η — теплоемкости при постоянном объеме.

Таким образом

$$C^{*\prime S}_{ijfh} = -T_{ij}\delta_{fh} + T_{if}\delta_{hj} + T_{jf}\delta_{ih} + \tag{10}$$

$$+\frac{1}{J^*}\frac{\partial X_i}{\partial a_m}\frac{\partial X_j}{\partial a_p}\frac{\partial X_f}{\partial a_q}\frac{\partial X_h}{\partial a_l}\left(c^T_{mpql} + C^T_{mpqlns}\eta_{ns}\right) +$$

$$+\frac{1}{J^*}\frac{\partial X_i}{\partial a_k}\frac{\partial X_j}{\partial a_m}\frac{T\alpha^*_{pn}\, c^{*T}_{kmpn}\,\alpha^*_{p'n'}\, c^{*T}_{p'n'fh}}{\rho_0 C^*_\eta}$$

Это выражение связывает эффективные адиабатические ВПУ постоянные с изотермическими ВПУ и ТПУ постоянными твердого тела в исходном состоянии и справедливо для произвольного вида конечных деформаций и кристаллов всех классов симметрии.

Для случая всестороннего сжатия — высокого гидростатического давления — это выражение упростится.

В этом случае

$$T_{ij} = -\delta_{ij}P, \quad \eta_{ij} = \eta\delta_{ij}, \quad \frac{\partial X_i}{\partial a_m} = (1 + 2\eta)^{1/2}\delta_{im} \tag{11}$$

Используя (5), (7), (11), имеем для эффективной ВПУ постоянной

$$C^{*'S}_{ijfh} = P(\delta_{ij}\delta_{fh} - \delta_{if}\delta_{hj} - \delta_{jf}\delta_{ih}) + (1 + 2\eta)^{1/2}\, \overset{*}{c}{}^{S}_{ijfh} \tag{12}$$

$$\overset{*}{c}{}^{S}_{ijfh} = c^{S}_{ijfh} + \left(\frac{\partial \overset{*}{c}{}^{S}_{ijfh}}{\partial \eta_{vw}}\right)_T \eta_{vw} + \ldots = c^{S}_{ijfh} + \Gamma_{ijfhnn}\eta + \ldots$$

где Γ_{ijfhnn} — комбинации смешанных ТПУ постоянных

$$P = -\eta(1 + 2\eta)^{-1/2}\left(\frac{1}{2}c^{T}_{iipp} + \eta\frac{C^{T}_{iippnn}}{6}\right) \tag{13}$$

и окончательно

$$C^{*'S}_{ijfh} = P(\delta_{ij}\delta_{fh} - \delta_{if}\delta_{hj} - \delta_{jf}\delta_{ih}) + (1 + 2\eta)^{1/2}(c^{T}_{ijfh} + \eta C^{T}_{ijfhnn}) + \\ + \frac{T\lambda_{ij}\lambda_{fh}}{\rho_0(1 + 2\eta)^{1/2}C_\eta{}^*} \tag{14}$$

что справедливо для кристаллов любой симметрии.

Естественно, что полученные выражения (10) и (14) могут быть использованы для расчета эффективных упругих постоянных поликристаллов при любых деформациях, исходя из изотермических ВПУ и ТПУ постоянных поликристалла в исходном состоянии.

Однако для получения эффективных упругих постоянных поликристаллов, используя результаты теоретических расчетов [4-8] для монокристаллов, необходимо провести раздельное усреднение изотермических ВПУ и ТПУ постоянных.

Для этой цели можно воспользоваться усреднением по Фохту — Ройссу — Хиллу (ФРХ — приближение) [9]. Так, для ВПУ и ТПУ постоянных можно записать

$$c^{X}_{ijkl} = {}^1/_2(C^{\Phi}_{ijkl} + C^{P}_{ijkl})$$
$$C^{X}_{ijklmn} = {}^1/_2(C^{\Phi}_{ijklmn} + C^{P}_{ijklmn})$$

где C^{X}_{ijkl} и C^{X}_{ijklmn} — усредненные по ФРХ изотермические ВПУ и ТПУ постоянные для поликристалла, а c^{Φ}_{ijkl}, C^{Φ}_{ijklmn} и C^{P}_{ijkl}, C^{P}_{ijklmn} — средние по Фохту [10] и Ройссу [11] соответственно.

В случае усреднения по Ройссу справедливы следующие выражения [12]:

$$c^{P}_{ijkl}s^{P}_{klmn} = {}^1/_2(\delta_{im}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jm}) \tag{15}$$
$$C^{P}_{ijklmn} = -c^{P}_{ijpq}c^{P}_{klrs}c^{P}_{mnuv}S^{P}_{pqrsuv}$$

где s^{P}_{klmn}, S^{P}_{pqrsuv} — соответственно модули податливостей второго и третьего порядков. Предыдущие выражения справедливы также и для монокристаллов.

Так, в случае всестороннего сжатия поликристаллов, состоящих из монокристаллов кубической симметрии, для поликристаллических образцов адиабатические эффективные ВПУ постоянные, полученные из данных по скоростям звука под высоким давлением будут равны

$$\langle C'^{S}_{11}\rangle = \langle B^{S}_{11}\rangle = \frac{v_l^2\rho_0}{(1+2\eta)^{3/2}} = K^S + \frac{4}{3}G = \langle c_{11}{}^T\rangle +$$
$$+\eta\left(2\langle c_{11}{}^T\rangle + 2\langle c_{12}{}^T\rangle + \langle C_{111}{}^T\rangle + 2\langle C_{112}{}^T\rangle\right) + \frac{T\langle\lambda_{11}\rangle^2}{\rho_0(1+2\eta)^{1/2}C^*{}_\eta} \qquad (16)$$
$$\langle C'^{S}_{44}\rangle = \langle B_{44}\rangle = \frac{v_t^2\rho_0}{(1+2\eta)^{3/2}} = G = \langle c_{44}{}^T\rangle +$$
$$+\eta\left(\langle c_{11}{}^T\rangle + 2\langle c_{12}{}^T\rangle + \langle c_{44}{}^T\rangle + \langle C^T_{144}\rangle + 2\langle C^T_{166}\rangle\right)$$

где K, G — модули объемной упругости и сдвига, v_l и v_t — скорости продольного и поперечного звука. Знак $\langle\ \rangle$ показывает, что величины усреднены и относятся к поликристаллам.

Для давления согласно (10) имеем

$$P = -\eta(1+2\eta)^{-1/2}\left[\langle c_{11}{}^T\rangle + 2\langle c_{12}{}^T\rangle + \eta\left({}^1/_2\langle C^T_{111}\rangle + 3\langle C^T_{112}\rangle + \langle C^T_{123}\rangle\right)\right] \qquad (17)$$
$$\eta = -P\left(\langle c_{11}{}^T\rangle + 2\langle c_{12}{}^T\rangle\right)^{-1} + P^2\left[\langle c_{11}{}^T\rangle + 2\langle c_{12}{}^T\rangle -\right.$$
$$\left. - \left({}^1/_2\langle C^T_{111}\rangle + 3\langle C^T_{112}\rangle + \langle C^T_{123}\rangle\right)\right]\left(\langle c_{11}{}^T\rangle + 2\langle c_{12}{}^T\rangle\right)^{-3} \qquad (18)$$

Покажем, что к тем же результатам усреднения можно прийти другим путем, который в случае кристаллов кубической симметрии существенно короче. Этот путь заключается в непосредственном усреднении эффективных термодинамических ВПУ постоянных для монокристалла по схеме ФРХ-приближения.

Из выражения типа (2) имеем

$$\frac{\partial t_{km}}{\partial\beta_{pq}}\frac{\partial\beta_{pq}}{\partial t_{km}} = \overset{*}{c}_{kmpq}s_{pqk'm'} = \delta_{kk'}\delta_{mm'}$$
$$\beta_{pq} = \frac{\partial X_s}{\partial a_p}\frac{\partial X_t}{\partial a_q}e_{st}$$
$$\overset{*}{c}_{fhkm} = \overset{*}{c}_{fhk'm'}\overset{*}{c}_{kmpq}\overset{*}{s}_{k'm'pq} \qquad (19)$$

Разлагая это выражение в ряд вблизи естественного состояния, получим

$$c_{fhkm} = c_{fhk'm'}c_{kmpq}s_{k'm'pq}$$
$$C_{fhkmvw} = -c_{fhk'm'}c_{kmpq}c_{vwst}S_{k'm'pqst}$$

что аналогично выражениям (15). В случае поликристаллов получим аналогично предыдущему

$$\langle\overset{*}{c}_{fhkm}\rangle = \langle\overset{*}{c}_{fhk'm'}\rangle\langle\overset{*}{c}_{kmpq}\rangle\langle\overset{*}{s}_{k'm'pq}\rangle$$

Усреднение по схеме ФРХ-приближения дает

$$\langle\overset{*}{c}_{fhkm}\rangle = {}^1/_2\left(\overset{*\Phi}{c}_{fhkm} + \overset{*P}{c}_{fhk'm'}\overset{*P}{c}_{kmpq}\overset{*P}{s}_{k'm'pq}\right)$$

Разлагая $\langle\overset{*}{c}_{fhkm}\rangle$ вблизи естественного состояния, имеем

$$\langle c_{fhkm}\rangle = \langle c_{fhk'm'}\rangle\langle c_{kmpq}\rangle\langle s_{k'm'pq}\rangle$$
$$\langle C_{fhkmvw}\rangle = -\langle c_{fhk'm'}\rangle\langle c_{kmpq}\rangle\langle c_{vwst}\rangle\langle S_{k'm'pqst}\rangle.$$

Рассматривая поликристаллические $\langle c_{fhkm}\rangle$, $\langle C_{fhkmvw}\rangle$ как средние в ФРХ-приближении приходим к выражениям

$$\langle c_{fhkm}\rangle = {}^1/_2\,(\overset{\Phi}{c}_{fhkm} + \overset{P}{c}_{fhkm}) \tag{20}$$
$$\langle C_{fhkmvw}\rangle = {}^1/_2\,(\overset{\Phi}{c}_{fhkmvw} - \overset{P}{c}_{fhk'm'}\overset{P}{c}_{kmpq}\overset{P}{c}_{vwst}\overset{P}{S}_{k'm'qst})$$

что аналогично выражениям (15). Следовательно, при вычислении динамических модулей поликристалла из упругих постоянных монокристалла усредние по схеме ФРХ-приближения ВПУ, ТПУ постоянных ($\langle c_{fhkm}\rangle$, $\langle c_{fhkmvw}\rangle$) эквивалентно усреднению эффективных термодинамических ВПУ постоянных $\langle c^*_{fhkm}\rangle$.

Однако в общем случае для вычисления $\langle c^*_{fhkm}\rangle$ необходимо знать связь $\eta_{ij} = \eta_{ij}\ (T_{ij})$, т. е. необходимо усреднение ВПУ, ТПУ и т. д. постоянных. Согласно выражению (13) для кубических монокристаллов в условиях гидростатического сжатия связь $\eta_{ij} = \eta_{ij}\,(T_{ij})$ имеет вид

$$\eta = -\,P\,(c^T_{12} + 2c^T_{12})^{-1} + P^2\,\frac{[c_{11}{}^T + 2c_{12}{}^T - ({}^1/_2 C^T_{111} + 3C^T_{112} + C^T_{123})]}{(c_{11}{}^T + 2c_{12}{}^T)^3}$$

Известно [13], что в этом случае комбинации упругих постоянных монокристалла $c^T_{11} + 2c^T_{12}$, ${}^1/_2 C^T_{111} + 3C^T_{112} + C^T_{123}$ совпадают с их средними в ФРХ — приближении в выражении (18). Это позволяет проводить усреднение упругих постоянных только второго порядка $\langle c^*_{fhkm}\rangle$, что приводит к резкому сокращению вычислений и дает возможность по известным из эксперимента значениям эффективных термодинамических упругих постоянных $C_{11}{}^{*\prime s}$, $C_{44}{}^{*\prime s}$ для кубического монокристалла в условиях гидростатического сжатия в направлении (001) и (110) определить поликристаллические динамические модули.

Используя полученные выражения, было проведено усреднение ВПУ и ТПУ постоянных, определенных экспериментально для монокристаллов CsCl [14] и NaCl [15] и из выражений (16), (18), были рассчитаны зависимости скоростей распространения продольных v_l и поперечных v_t упругих волн от давления в поликристаллах этих веществ.

Эти зависимости (кривые *2*) представлены на фиг. 1 (для NaCl) и фиг. 2 (для CsCl) в сравнении с аналогичными зависимостями для поликристаллических образцов NaCl и CsCl, полученными авторами экспериментально ([15], кривая *1*).

Расхождение этих зависимостей — экспериментальной для поликристаллов (кривая *1*) и полученной усреднением из экспериментов на монокристаллах (кривая *2*) — не превышает 3—4% как для NaCl, так и для CsCl, что соответствует существующей точности определения ТПУ постоянных и показывает, что, по-видимому, погрешность проведенного усреднения меньше указанного расхождения.

Кроме того, на этих же фигурах представлены зависимости от давления скоростей распространения продольных и поперечных волн для поликристаллов NaCl и CsCl, полученные усреднением теоретически рассчитанных ВПУ и ТПУ постоянных.

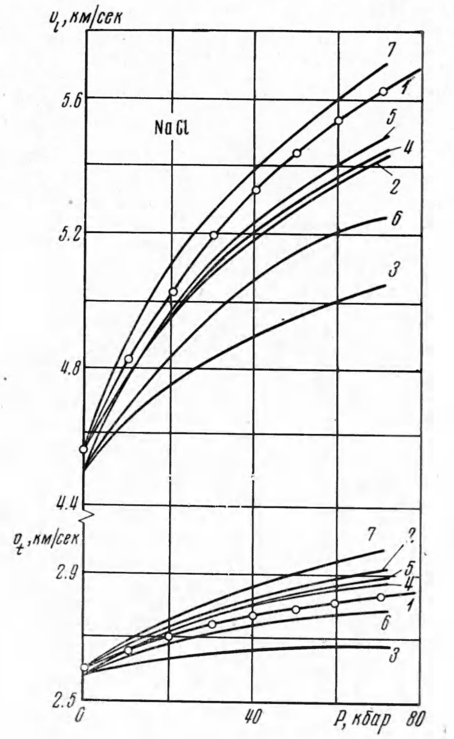
На фиг. 1 кривая *3* построена по данным из работы Нраньяна [4], *4* — Гейта [6], *5*, *6* — Линкольна и др. [7], *7* — Пауля [9].

На фиг. 2 кривая *3* построена по данным из работы Нраньяна [4], *5* — Гейта [6]. Следует отметить, что в работе]7] температурная зависимость упругих постоянных вычислялась двумя способами. Это приводит к появлению двух наборов ТПУ постоянных (при $T = 298°$ К) и, соответственно, двух зависимостей $v\,(P)$ (кривые *5* и *6*).

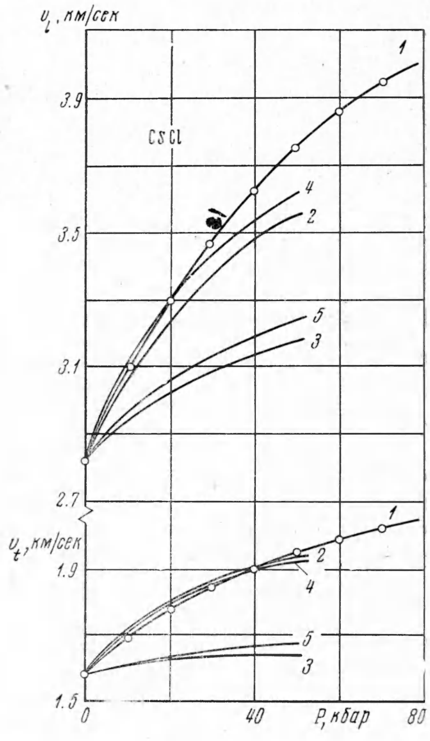
В использованных теоретических работах [4–8,17] вычисление ТПУ постоянных основывалось на модели центральных сил с потенциалом типа Борна — Майера, в котором отталкивание из-за перекрытия электронных оболочек ионов имеет вид

$$\varphi = B \exp (r/\varepsilon)$$

где B и ε — параметры отталкивания (ε — коэффициент «жесткости»).



Фиг. 1



Фиг. 2

Основные характеристики потенциалов [4–8] приведены в таблице, где отмечен учет Ван-дер-Ваальсового притяжения, вторых соседей и трехчастичного взаимодействия. В последних графах таблицы приведены оценки сходимости с экспериментом. При этом сходимость считается «хорошей», если рассчитанная теоретическая зависимость $v(P)$ лежит в области между кривыми *1* и *2* (фиг. 1, 2), полученными из эксперимента, «удовлетворительной», если отклонения от области кривых *1*—*2* не превышает возможные ошибки в экспериментах, и «плохой», если зависимость лежит вне указанной области за возможными пределами экспериментальных ошибок. Все расчеты для $v(P)$ проводились до давлений 50 *кбар* для CsCl и 70 *кбар* для NaCl, так как выше этих давлений для этих веществ требуется учет упругих постоянных четвертого и более высоких порядков [18].

Анализ результатов расчетов (фиг. 1, 2, таблица) показал существенное влияние характера учета короткодействующих сил в кристалле на ТПУ постоянные и соответственно на эффективные упругие постоянные и зависимость скоростей распространения упругих волн от давления.

Вещество	Автор	Номер кривой	ξ, Å	Силы притяжения Ван-дер-Ваальса	Силы отталкивания				Сходимость с экспериментом	
					первые соседи	вторые соседи: без учета знака заряда ионов	вторые соседи: с учетом знака зарядов ионов	трехчастичное взаимодействие	$v_l (P)$	$v_t (P)$
NaCl	Нраньян [4]	3	0.333	—	+	—	—	—	плохая	плохая
	Гейт [6]	4	0.288	—	+	+	—	—	хорошая	хорошая
	Линкольн и др. [7]	5	0.317	+	+	—	+	—	хорошая	хорошая
	Линкольн и др. [7]	6	0.317	+	+	—	+	—	плохая	удовл.
	Пауль [8]	7	0.322	+	+	—	—	+	удовл.	плохая
CsCl	Нраньян [5]	3	0.333	—	+	—	—	—	плохая	плохая
	Гейт [6]	4	0.256	—	+	+	—	—	хорошая	хорошая
	Гейт [6]	5	0.333	—	+	+	—	—	плохая	плохая

Примечание:
«+» — учтены
«—» — не учтены.

Лучшие результаты получены при учете вторых соседей и использовании параметра отталкивания и постоянной решетки, определенных при $T = 298°$ К и $P = 0$.

Учет трехчастичного взаимодействия в потенциале решетки играет меньшую роль.

Поступила 16 VII 1971

ЛИТЕРАТУРА

1. Murnaghan F. D. Finite deformations of an elastic. Solids N. Y., J. Wiley and Sons Inc., 1951.
2. Thurston R. N. Wave propagation in fluids and normal solids. In: Phys. Acoustics, vol. 1, pt A, New York — London, Acad. Press), 1964, pp. 1—110. (Рус. перев: Распространение волн в жидкостях и твердых телах. В сб. «Физическая акустика», т. 1, ч. А, М., «Мир», 1966.)
3. Brugger K. Thermodynamic definition of higher order elastic coefficients. Phys. Rev., 1964, vol. 133, No. 6A.
4. Нраньян А. А., Упругие постоянные третьего порядка кристаллов типа NaCl. Физика твердого тела, 1963, т. 5, вып. 1.
5. Нраньян А. А. Упругие постоянные третьего порядка кристаллов типа CsCl. Физика твердого тела, 1963, т. 5, вып. 7.
6. Ghate P. B. Third-order elastic constants of alkali halide crystals. Phys. Rev., 1965, vol. 139, No. 5A.
7. Lincoln R. C., Koliwad K. M., Ghate P. B. Elastic constants of some NaCl type alkali halides. Phys. Stat. Sol., 1966, vol. 18, No. 1, p. 265.
8. Paul S. Effect of a short-range three-body interaction on the third order elastic constants of alkaly halides. Ind. Pure Appl. Phys., 1970, vol. 8, No. 6, p. 307.
9. Hill R. The elastic behaviour of a crystal-line aggregate. Proc. Phys. London, 1952, vol. 65A, No. 389, pt 5.
10. Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik. Leipzig, Teubner, 1910.
11. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsberechnung für Einkristalle. Z. Angen. Math. und Mech., 1929, Bd 9, H. 1.

12. B a r s c h G. R. Relation Between third-order elastic constants of single crystals and polycrystals. J. Appl. Phys., 1968, vol. 39, No. 8.
13. C o u s i n s C. S. G. A note on the estimation of the third-order elastic constants of quasi-isotropic materials. J. Phys. C, Proc. Phys. Soc. Ser. 2, 1968, vol. 1, No. 4.
14. C h a n g Z. P., B a r s c h G. R. Nonlinear pressure dependence of elastic constants and fourth-order elastic constants of cesium halides. Phys. Rev. Letters, 1967, vol. 19, No. 24, p. 1381.
15. C h a n g Z. P. Third-order elastic constants of NaCl and KCl single crystals. Phys. Rev., 1965, vol. 140, No. 5A.
16. В о р о н о в Ф. Ф., Г р и г о р ь е в С. Б. Скорости звука в хлористом цезии и хлористом натрии при давлениях до 100 *кбар*. Докл. АН СССР, 1970, т. 195, № 6.
17. L e i b f r i e d C., H a h n H. Temperaturabhängigkeit der elastischer Konstanten von Alkalihalogenidkristallen. Z. Phys., 1958, Bd 150, Nr 4.
18. Н р а н ь я н А. А. Упругие постоянные высших порядков кубических кристаллов. Кристаллография, 1967, т. 12, вып. 6.