

Исследование структуры и свойств Structure and properties investigation

**Физические методы
исследования и контроля**

**Physical methods
of investigation and monitoring**

DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2019-85-9-29-35>

ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

© Виктор Васильевич Красавин^{1*}, Алексей Викторович Красавин²

¹ Ковровская государственная технологическая академия; Россия, 601910, г. Ковров, ул. Маяковского 19;
*e-mail: v.v.krasavin@yandex.ru

² Королевский колледж Лондона; Великобритания, Лондон; e-mail: alexey.krasavin@kcl.ac.uk

*Статья поступила 28 декабря 2018 г. Поступила после доработки 20 июня 2019 г.
Принята к публикации 25 июня 2019 г.*

Металлы гексагональной группы (например, Be, Zr, Ti) находят широкое применение в атомной промышленности, ракетно- и авиастроении (в элементах конструкций, работающих в экстремальных условиях). Перспективное направление повышения качества изделий из таких металлов — улучшение физических свойств материалов путем использования естественной анизотропии металлических монокристаллов. Представлены результаты исследования анизотропии и сравнительного анализа технических характеристик упругих свойств монокристаллов гексагональных металлов. На основе преобразований тензора коэффициентов упругой податливости в главных осях к новой произвольной системе координат с последующим использованием углов Эйлера получены в явном виде уравнения компонентов матрицы коэффициентов упругой податливости для произвольных кристаллографических направлений. Приведены аналитические выражения для технических характеристик упругих свойств (модулей Юнга и сдвига, коэффициента Пуассона) монокристаллов 10 металлов с гексагональной решеткой в произвольных кристаллографических направлениях. Установили, что характеристики имеют аксиальную симметрию относительно гексагональной оси. Суммы коэффициентов упругой податливости, определяющих модули сдвига, и коэффициентов Пуассона в двух взаимно перпендикулярных направлениях постоянны в любой кристаллографической плоскости монокристалла. Сравнительным анализом анизотропии упругих свойств монокристаллов исследуемой группы металлов выявлены ауксетические свойства у монокристаллов Zn и Be и области кристаллографических направлений одноосного растяжения, приводящего к ауксетическому эффекту. Ауксетический эффект у Zn фиксировали при растяжении в направлениях плоскости, перпендикулярной гексагональной оси монокристалла. Плоскости проявления ауксетического эффекта у монокристаллов Be перпендикулярны направлениям, составляющим угол 45° с гексагональной осью.

Ключевые слова: гексагональные монокристаллы; коэффициенты упругой податливости; модули упругости; ауксетические свойства.

STUDY OF THE ELASTIC PROPERTIES OF HEXAGONAL METAL SINGLE CRYSTALS

© Victor V. Krasavin^{1*}, Alexey V. Krasavin²

¹ Kovrov State Technological Academy; ul. Mayakovskogo 19, Kovrov, 601910, Russia; *e-mail: v.v.krasavin@yandex.ru

² King's College London, University of London; London, UK; e-mail: alexey.krasavin@kcl.ac.uk

Received December 28, 2018. Revised June 20, 2019. Accepted June 25, 2019.

Hexagonal metals (e.g., Be, Zr, Ti) are widely used in the nuclear industry, space and aircraft engineering (in manufacturing of the structural elements operating under extreme conditions). A promising way to

improve the quality of products made of them is to improve the physical properties of materials using the natural anisotropy of metal single crystals. The results of studying anisotropy and a comparative analysis of the technical characteristics of the elastic properties of single crystals of hexagonal metals are presented. The equations of the elastic compliance matrix components are derived in the explicit form for arbitrary crystallographic direction proceeding from transformations of the elastic compliance tensor in the principal axes to a new arbitrary coordinate system with a subsequent use of Euler angles. Analytical expressions are presented for the technical characteristics of the elastic properties (shear and Young's moduli, Poisson's ratio) of the single crystals of 10 hcp metals for an arbitrary crystallographic direction. The axial symmetry of the characteristics about the hexagonal axis is revealed. The sums of the elastic compliance coefficients which determine the shear moduli and the Poisson's ratios in two mutually perpendicular directions are constant in any crystallographic plane of the single crystal. A comparative analysis of the anisotropy of the elastic properties of single crystals of the studied group of metals revealed auxetic properties of Zn and Be single crystals and the region of crystallographic directions of uniaxial tension, leading to an auxetic effect. The auxetic effect in Zn was observed under tension in the directions of the plane perpendicular to the hexagonal axis of the single crystal. The planes of the auxetic effect manifestation in Be single crystals are perpendicular to the directions making an angle of 45° with the hexagonal axis.

Keywords: hexagonal single crystals; elastic compliance tensor; Young's moduli; auxetic properties.

Введение

Перспективное направление повышения качества металлопродукции — улучшение физических свойств полуфабрикатов и изделий из металлов и сплавов путем использования естественной анизотропии металлических кристаллов.

Монокристаллическое состояние материала, получаемое методами направленной кристаллизации, необходимо использовать при изготовлении деталей для экстремальных условий (высоких температур, больших нагрузок, повышенных требований к жесткости). Это значительно улучшает физические свойства изделий. Так, при производстве лопаток авиационных ГТД из жаропрочных сплавов в виде монокристаллов с кубической решеткой рабочая температура изделий повышается на $50 - 60^\circ \text{C}$, прочностные характеристики по сравнению с другими технологиями улучшаются [1].

Металлы гексагональной группы (например, Be, Zr, Ti) находят широкое применение в атомной промышленности, ракето- и авиастроении,

поэтому необходимо детальное изучение анизотропии упругих свойств их монокристаллического состояния. Однако при исследовании упругих характеристик монокристаллов гексагональных металлов [2, 3], как правило, анализируют или отдельные монокристаллы, или их характеристики.

Цель работы — исследование упругих свойств группы гексагональных металлов с известными модулями упругости в главных осях монокристаллов.

Методика расчета

Исследовали поведение коэффициентов упругой податливости обобщенного закона Гука, а также технических характеристик упругих свойств (модули Юнга и сдвига, коэффициент Пуассона), включая ауксетический эффект, в зависимости от кристаллографических направлений в монокристаллах металлов с гексагональной решеткой. Использовали методику [4], включающую приведение матрицы коэффициентов упругой податливости в главных осях S_{ij} к новой системе отсчета $x'y'z'$ с дальнейшим использованием углов Эйлера для определения кристаллографических направлений. Направления главных осей в монокристаллах с гексагональной решеткой приведены на рис. 1.

Углы Эйлера: α — поворот вокруг z ; β — поворот вокруг y' и γ — вокруг z' . Угол α — азимутальный, β — полярный угол сферической системы координат, в которой этими углами можно задать произвольное кристаллографическое направление z' . Угол γ определяет направление сдвига и коэффициент Пуассона в плоскости, перпендикулярной выбранному кристаллографическому направлению z' . Направление N — узловая ось углов Эйлера — всегда лежит в плоскости, перпендикулярной гексагональной оси монокристалла.

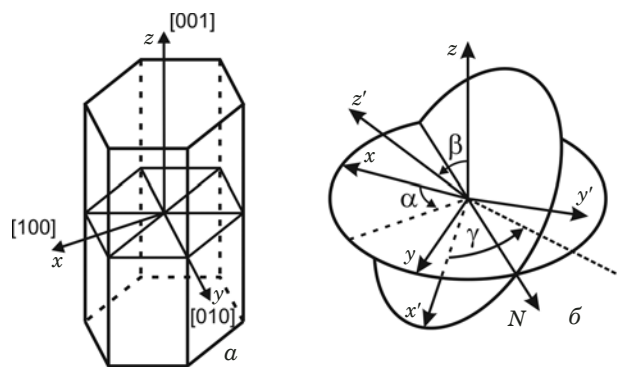


Рис. 1. Главные оси гексагональных монокристаллов (а) и углы Эйлера (б)

Fig. 1. Principal axes of hexagonal single crystals (a) and Euler angles (b)

В результате получили общие решения для коэффициентов упругой податливости, через которые определяли модули Юнга (в произвольном кристаллографическом направлении z') и сдвига (в плоскости, перпендикулярной z'), а также коэффициенты Пуассона (в той же плоскости). Модули упругости (C) в главных осях монокристаллов и коэффициенты упругой податливости (S) приведены в табл. 1 [5, 6].

Для определения зависимости коэффициентов упругой податливости от произвольных кристаллографических направлений монокристалла и известных значений S_{11} , S_{12} и S_{44} необходимо привести матрицу S_{ij} в главных осях кристалла, совпадающих с кристаллографическими направлениями $[100]$, $[010]$, $[001]$, к новой системе отсчета $x'y'z'$, связав, например, ось z' с выбранным кристаллографическим направлением. Это можно сделать, используя правило преобразования тензоров к новым координатным осям:

$$S'_{ijkl} = \alpha_{ip}\alpha_{jq}\alpha_{kr}\alpha_{ls}S_{pqrs}, \quad (1)$$

где S'_{ijkl} , S_{pqrs} — компоненты тензора в системах координат $x'y'z'$ и xuz (главные оси монокристалла); α_{ip} , α_{jq} , α_{kr} , α_{ls} — косинусы углов между соответствующими осями «новой» и «старой» систем отсчета.

Такое преобразование с последующим использованием углов Эйлера позволяет найти компоненты тензора S'_{ijkl} , необходимые для определения искомых характеристик упругости в произвольном кристаллографическом направлении. В дальнейшем трехмерный тензор четвертого ранга S'_{ijkl} свернут до шестимерного тензора второго ранга S'_{ik} по известным правилам.

Для компоненты S'_{33} матрицы коэффициентов упругой податливости, через которую выра-

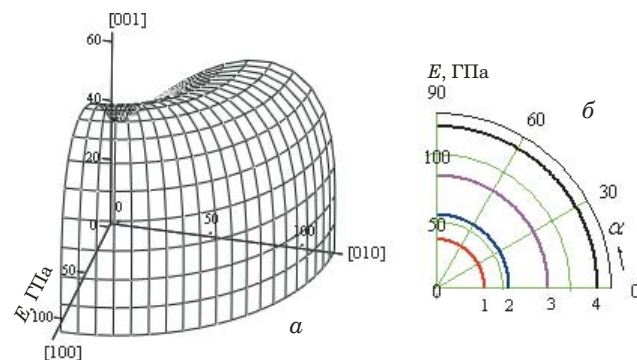


Рис. 2. Указательная поверхность (а) для Zn и модуль Юнга E (б) для углов $\beta = 0$ (1), $\pi/6$ (2), $\pi/4$ (3), $\pi/2$ (4)

Fig. 2. Indicative surface in Zn (a), and Young's modulus E (b) for angles $\beta = 0$ (1), $\pi/6$ (2), $\pi/4$ (3), $\pi/2$ (4)

жается модуль Юнга, после преобразований получаем:

$$\begin{aligned} S'_{33} &= S_{11} + ((S_{33} - S_{11}) - S \sin^2 \beta) \cos^2 \beta = \\ &= S'_{33}(\beta) = E(\beta)^{-1}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $S = S_{11} + S_{33} - 2S_{13} - S_{44}$, S_{11} , S_{33} , S_{13} , S_{44} — компоненты матрицы коэффициентов упругой податливости в главных осях.

Обсуждение результатов

Модуль Юнга, как следует из (2), не зависит от угла α и, следовательно, обладает цилиндрической симметрией относительно гексагональной оси монокристалла для любых углов β . Наглядное представление об анизотропии E дает указательная поверхность — геометрическое место точек конца вектора, указывающего выбранное кристаллографическое направление и по модулю равного E (рис. 2).

Анализ формы указательной поверхности показывает, что цилиндрическая симметрия сохра-

Таблица 1. Модули упругости (ГПа) и коэффициенты упругой податливости (ГПа⁻¹)

Table 1. Young's moduli (GPa) and compliance tensor components (GPa⁻¹)

Металл	C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}	$S_{11} \cdot 10^{-3}$	$S_{33} \cdot 10^{-3}$	$S_{44} \cdot 10^{-3}$	$S_{12} \cdot 10^{-3}$	$S_{13} \cdot 10^{-3}$
Be	292,3	336,4	163	25,7	14,0	3,46	2,98	6,15	-0,31	-0,13
Cd	121	51,3	18,5	48,1	44,2	12,0	35,0	54,0	-1,48	-9,27
Co	307	358	75,5	165	103	4,73	3,19	13,0	-2,31	-0,697
Hf	193	222	51,0	90,0	75,0	7,01	5,49	20,0	-2,70	-1,45
It	77,9	76,9	24,3	29,2	30,0	16,0	17,0	41,0	-4,29	-4,67
Mg	59,7	61,7	16,4	26,2	2,17	22,0	20,0	61,0	-7,85	-4,98
Re	613	683	162	270	203	2,12	1,70	6,17	-0,799	-0,398
Ti	162	181	47,7	92,0	69,0	9,63	6,97	21,0	-4,66	-1,88
Zn	161	61,0	38,3	34,2	50,1	8,37	28,0	26,0	0,485	-7,27
Zr	144	165	32,1	72,8	65,3	10,0	7,96	31,0	-3,99	-2,40

няется для всех рассматриваемых монокристаллов, однако по гексагональной оси поверхность может быть вогнутой (Be, Cd, Hf, Zn) или выпуклой (Co, Mg, Ti, Zr) в зависимости от отношения $E_{[001]}/E_{[100]}$ (табл. 2). Указательная поверхность у It — практически сфера.

При $\beta = 0$ (направление гексагональной оси $[001]$) $E_{[001]}^{-1} = S'_{33}(0) = S_{33}$, при $\beta = \pi/2$ (направление $[100]$ и все другие, лежащие в плоскости узловой оси) $E_{[100]}^{-1} = S'_{33}(\pi/2) = S_{11}$.

Для компонентов S'_{jj} ($j = 4, 5$) матрицы коэффициентов упругой податливости, через которые выражаются модули сдвига в плоскости, перпендикулярной z' , получаем

$$S'_{jj}(\alpha, \beta, \gamma) = S_{44} + ((S_{66} - S_{44}) \sin^2 \gamma +$$

$$+ 4S \cos^2 \beta \cos^2 \gamma) \sin^2 \beta = S'_{jj}(\beta, \gamma), j = 5, 6, \quad (3)$$

где $S_{66} = 2(S_{11} - S_{12})$, $S'_{jj}(\beta, 0) = S'_{55}$, $S'_{jj}(\beta, \pi/2) = S'_{44}$.

Из (3) следует, что коэффициент упругой податливости для любого выбранного направления не зависит от азимутального угла α . Следовательно, и модуль сдвига $G_{jj}(\beta, \gamma) = S'_{jj}(\beta, \gamma)^{-1}$ не будет зависеть от α . Это значит, что модули сдвига (как и модули Юнга) обладают цилиндрической симметрией относительно гексагональной оси кристалла.

На рис. 3 приведены модули сдвига $G(\beta, \gamma)$ для кристаллографических направлений Zn, а также полярные диаграммы поведения G в плоскостях, перпендикулярных выбранным направлениям с различными углами β .

Таблица 2. Упругие характеристики гексагональных монокристаллов для ряда направлений [HKL]

Table 2. The elastic characteristics of hexagonal single crystals in selected directions [HKL]

Металл	[HKL] оси z'	β	E , ГПа	G_{31} , ГПа	G_{32} , ГПа	ν_{31}	ν_{32}	$E_{[001]}/E_{[100]}$	G_{31}/G_{32}
Be	[001]	0	235	163	163	0,044	0,044	0,802	1,00
	[101]	$\pi/4$	324	149	146	-0,002	0,071		1,02
	[100]	$\pi/2$	289	163	133	0,038	0,090		1,23
Cd	[001]	0	28,2	18,5	18,5	0,261	0,261	0,345	1,00
	[101]	$\pi/4$	48,1	15,1	24,5	0,299	0,258		0,62
	[100]	$\pi/2$	81,7	18,5	36,5	0,758	0,121		0,51
Co	[001]	0	313	75,5	75,5	0,218	0,218	1,48	1,00
	[101]	$\pi/4$	202	107	73,2	0,339	0,304		1,47
	[100]	$\pi/2$	211	75,5	71,0	0,147	0,488		1,06
Hf	[001]	0	182	51,0	51,0	0,265	0,265	0,79	1,00
	[101]	$\pi/4$	137	64,9	51,2	0,343	0,285		0,32
	[100]	$\pi/2$	142	51,0	51,5	0,208	0,386		0,62
It	[001]	0	60,1	24,3	24,3	0,280	0,280	0,98	1,00
	[101]	$\pi/4$	61,8	23,7	24,3	0,272	0,277		0,98
	[100]	$\pi/2$	61,6	24,3	24,3	0,287	0,264		1,00
Mg	[001]	0	50,7	16,4	16,4	0,253	0,253	1,12	1,00
	[101]	$\pi/4$	43,1	19,4	16,6	0,315	0,277		1,17
	[100]	$\pi/2$	45,4	16,4	16,8	0,226	0,357		0,98
Re	[001]	0	590	162	162	0,230	0,230	1,25	1,00
	[101]	$\pi/4$	435	218	167	0,342	0,259		1,31
	[100]	$\pi/2$	473	162	172	0,184	0,379		0,94
Ti	[001]	0	143	47,7	47,7	0,272	0,272	1,39	1,00
	[101]	$\pi/4$	118	49,1	40,4	0,242	0,388		1,22
	[100]	$\pi/2$	104	47,7	35,0	0,197	0,484		1,36
Zn	[001]	0	35,3	38,3	38,3	0,257	0,257	0,294	1,00
	[101]	$\pi/4$	82,9	19,5	47,8	0,082	0,281		0,41
	[100]	$\pi/2$	120	38,3	63,4	0,869	-0,058		0,60
Zr	[001]	0	126	32,1	32,1	0,301	0,301	1,27	1,00
	[101]	$\pi/4$	90,2	43,9	33,8	0,404	0,288		1,30
	[100]	$\pi/2$	99,5	32,1	35,6	0,238	0,397		0,90

Видно, что в плоскости, перпендикулярной гексагональной оси кристалла ($\beta = 0$), модуль сдвига изотропен, т. е. одинаков для любого кристаллографического направления этой плоскости, и равен $G_{[100]} = S_{44}^{-1}$.

Обозначив $S_{55}'^{-1} = G_{31}$ (модуль сдвига по оси x' в плоскости, перпендикулярной z') и $S_{44}'^{-1} = G_{32}$ (модуль сдвига по оси y' в плоскости, перпендикулярной z'), можно проанализировать поведение модуля сдвига для других углов β (см. табл. 2). Например, при $\alpha = 0$, $\beta = 90^\circ$ (направление $[100]$ ось x' занимает направление гексагональной оси кристалла. Тогда при $\gamma = 0$

$$G_{[001]} = (S_{jj}'(\pi/2, 0))^{-1} = G_{31} = S_{44}^{-1},$$

а при $\gamma = 90^\circ$ (направление $[010]$)

$$G_{[010]} = (S_{jj}'(\pi/2, \pi/2))^{-1} = G_{32} = S_{66}^{-1}.$$

Полученные результаты полностью соответствуют скорости распространения упругих волн в гексагональных кристаллах [7]. Как известно, скорость поперечных волн, распространяющихся вдоль гексагональной оси и поляризованных в плоскости, перпендикулярной этой оси, составляет $\rho V_{[100]}^2 = C_{44} = G_{[100]} = S_{44}^{-1}$, а скорость волн, распространяющихся вдоль $[100]$ и поляризованных по гексагональной оси кристалла и направлению $[010]$, —

$$\rho V_{[100]}^2 = C_{44} = G_{[001]} = S_{44}^{-1},$$

$$\rho V_{[100]}^2 = (C_{11} - C_{12})/2 = C_{66} = G_{[010]} = S_{66}^{-1}.$$

Данные по анизотропии модуля сдвига свидетельствуют, что цилиндрическая симметрия относительно гексагональной оси сохраняется для всех рассматриваемых монокристаллов. Для других кристаллографических направлений в плоскости, им перпендикулярной, G меняются от минимальных до максимальных значений при изменении угла γ . Степень анизотропии можно оценить отношением G_{31}/G_{32} , которое для всех направлений составляет $G(\beta, 0)/G(\beta, \pi/2)$ (см. табл. 2). Равенство этого отношения единице говорит о наличии изотропии модуля сдвига в плоскости, перпендикулярной этому направлению.

Из (3) также следует, что сумма коэффициентов упругой податливости для сдвига во взаимно перпендикулярных направлениях не зависит от угла γ и постоянна для любого выбранного направления z' , заданного углом β :

$$\begin{aligned} S_{jj}'(\beta, \gamma) + S_{jj}'(\beta, \gamma + \pi/2) = \\ = 2S_{44} + ((S_{66} - S_{44}) + 4S \cos^2 \beta) \sin^2 \beta = \text{const.} \end{aligned} \quad (4)$$

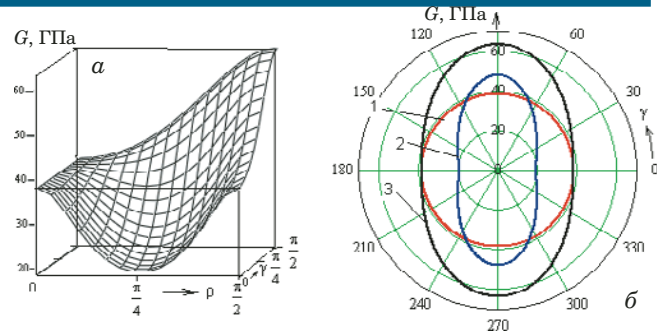


Рис. 3. Модуль сдвига $G(\beta, \gamma)$ для верхней полусферы монокристалла Zn (a) и зависимость $G(\gamma)$ (b) в плоскостях, перпендикулярных направлениям с углами β , равными 0 (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3)

Fig. 3. Directional dependence of shear modulus $G(\beta, \gamma)$ in Zn single crystal plotted for the top hemisphere (a), $G(\gamma)$ (b) in the planes perpendicular to the directions given by $\beta = 0$ (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3)

Это означает, что угловая анизотропия сдвига в плоскости, перпендикулярной произвольно выбранному кристаллографическому направлению ($\beta = \text{const}$), такова, что сумма коэффициентов упругой податливости сдвигу в любых двух взаимно перпендикулярных направлениях в плоскости сдвига постоянна:

$$G^{-1}(\beta, \gamma) + G^{-1}(\beta, \gamma + \pi/2) = \text{const.}$$

Учитывая, что модуль сдвига для кручения выражается через полусумму S_{44}' и S_{55}' , получаем

$$\begin{aligned} S_{\text{кр}}' = (S_{44}' + S_{55}')/2 = S_{44} + \\ + \left[\frac{1}{2}(S_{66} - S_{44}) + 2S \cos^2 \beta \right] \sin^2 \beta = G_{\text{кр}}^{-1}. \end{aligned} \quad (5)$$

В частности, модуль сдвига при кручении вокруг гексагональной оси ($\beta = 0$) $G_{\text{кр}} = S_{44}^{-1}$.

Коэффициент Пуассона в плоскости, перпендикулярной произвольно выбранному кристаллографическому направлению, определяется отношением коэффициентов упругой податливости:

$$\nu_{3j}'(\alpha, \beta, \gamma) = -S_{3j}'(\alpha, \beta, \gamma)/S_{33}'(\alpha, \beta), \quad j = 1, 2.$$

Из (2) находим модуль Юнга в выбранном кристаллографическом направлении. Для компонентов S_{3j}' ($j = 1, 2$) матрицы коэффициентов упругой податливости, через которые выражаются поперечное сужение при растяжении, а следовательно, и коэффициенты Пуассона для выбранного кристаллографического направления z' , в результате преобразований получаем

$$\begin{aligned} S_{3j}'(\alpha, \beta, \gamma) = S_{13} + ((S_{12} - S_{13}) \sin^2 \gamma + \\ + S \cos^2 \gamma \cos^2 \beta) \sin^2 \beta = S_{3j}'(\beta, \gamma). \end{aligned} \quad (6)$$

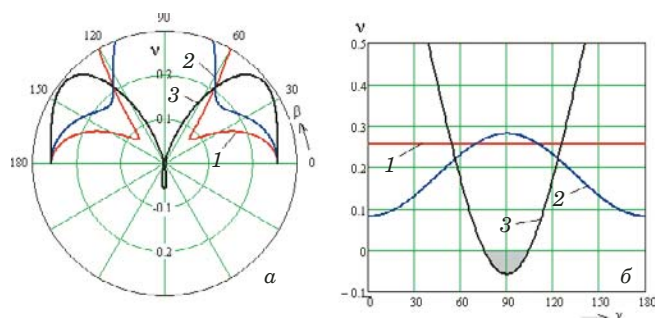


Рис. 4. Коэффициент Пуассона $\nu(\beta)$ (а) для Zn при углах $\gamma = 0$ (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3) (направление растяжения определяется углом β) и зависимость $\nu(\gamma)$ (б) для углов $\beta = 0$ (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3) (область ауксетического эффекта зачернена, $\gamma = 90 \pm 14,5^\circ$)

Fig. 4. Poisson's ratio $\nu(\beta)$ (a) in Zn at $\gamma = 0$ (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3) (the stretch direction is defined by β) and the dependence $\nu(\gamma)$ (b) at $\beta = 0$ (1), $\pi/4$ (2), $\pi/2$ (3) (the region of the auxetic behavior is shown black, $\gamma = 90 \pm 14,5^\circ$)

Для коэффициента Пуассона —

$$\nu(\beta, \gamma) = -\frac{S'_{3j}(\beta, \gamma)}{S'_{33}(\beta)}$$

$$= -\frac{S_{13} + ((S_{12} - S_{13}) \sin^2 \gamma + S \cos^2 \gamma \cos^2 \beta) \sin^2 \beta}{S_{11} + ((S_{33} - S_{11}) - S \sin^2 \beta) \cos^2 \beta}, \quad (7)$$

где $\nu(\beta, 0) = \nu_{31}(\beta)$, $\nu(\beta, \pi/2) = \nu_{32}(\beta)$ — коэффициенты Пуассона по осям x' и y' в плоскости, перпендикулярной направлению z' .

Для всей рассматриваемой группы монокристаллов металлов установили, что коэффициент Пуассона в силу независимости от угла α обладает цилиндрической симметрией относительно гексагональной оси. В плоскости, перпендикулярной гексагональной оси, $\nu_{31} = \nu_{32} = -S_{13}/S_{33}$. Угловая анизотропия коэффициента Пуассона в плоскости, перпендикулярной произвольно выбранному кристаллографическому направлению ($\beta = \text{const}$), такова, что сумма коэффициентов в любых двух взаимно перпендикулярных направлениях в этой плоскости постоянна: $\nu(\beta, \gamma) + \nu(\beta, \gamma + \pi/2) = \text{const}$.

На рис. 4 приведена угловая анизотропия коэффициента Пуассона монокристалла Zn для ряда направлений одноосного растяжения.

Видно, что ауксетический эффект максимален при углах $\beta = \pi/2$ и $\gamma = \pi/2$. Это означает, что при растяжении по любому направлению в плоскости, перпендикулярной гексагональной оси, наблюдается ауксетический эффект в направлении, лежащем в той же плоскости под углом 90° к направлению растяжения. Например, при растяжении по [100] ауксетический эффект присут-

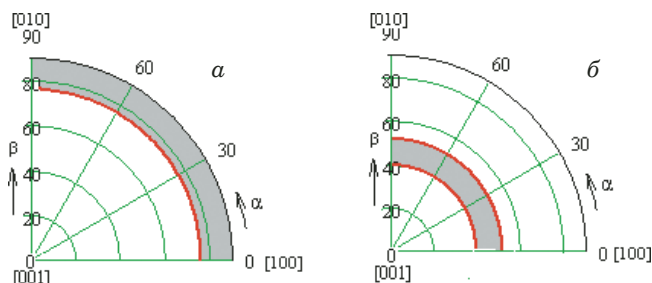


Рис. 5. Области кристаллографических направлений растяжения с ауксетическими свойствами (зачернены) в монокристаллах Zn (а) и Be (б)

Fig. 5. The areas of crystallographic directions of tension with auxetic properties (blackened) in Zn (a) and Be (b) single crystals

ствует в [010] и равен $\nu[100], [010] = -S_{12}/S_{11} = -0,058$.

Область кристаллографических направлений растяжения, вызывающих ауксетический эффект, находим из условия $S'_{3j}(\beta, \pi/2) = 0$. Для одного октанта верхней полусферы монокристаллов Zn и Be она представлена на рис. 5.

Ауксетический эффект в монокристалле Be незначителен. Его особенность состоит в том, что он наблюдается при растяжении по направлениям вблизи углов $\beta = 45 \pm 6^\circ$. Максимального значения эффект достигает при $\beta = \pi/4$ и $\gamma = 0$. Так, при растяжении в направлении [101] ауксетический эффект фиксируется в направлении $[10\bar{1}]$ и равен $-0,002$. В других монокристаллах исследуемой группы ауксетический эффект не обнаружен.

Заключение

Таким образом, на основе анализа модулей упругости с использованием полученных уравнений для компонентов матрицы коэффициентов упругой податливости монокристаллов гексагональных металлов выявлена цилиндрическая симметрия модулей Юнга и сдвига и коэффициента Пуассона относительно гексагональной оси для всех рассматриваемых образцов, исследована степень анизотропии модуля сдвига относительно осей, не совпадающих с гексагональной осью. Установлено, что суммы коэффициентов упругой податливости и Пуассона в двух взаимно перпендикулярных направлениях в любой кристаллографической плоскости монокристалла постоянны [$G_{31}^{-1} + G_{32}^{-1} = \text{const}$, $\nu(\beta, \gamma) + \nu(\beta, \gamma + \pi/2) = \text{const}$]. Определены области кристаллографических направлений растяжения, вызывающих ауксетический эффект, у монокристаллов Zn и Be.

ЛИТЕРАТУРА

1. Производство высокотемпературных литых лопаток авиационных ГТД / Под ред. С. И. Яцка. — М.: Машиностроение, 1995. — 256 с.
2. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Изменчивость коэффициента Пуассона для гексагональных кристаллов под давлением / Труды МАИ. 2016. Т. 87. С. 1 – 22.
3. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Об отрицательности коэффициента Пуассона для анизотропных материалов / Доклады РАН. 2009. Т. 429. № 5. С. 614 – 616.
4. Красавин В. В., Красавин А. В. Расчет характеристик сдвиговой упругости в кубических кристаллах / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2004. Т. 70. № 2. С. 32 – 35.
5. Адамеску Р. А., Гельфед П. В., Митюшов Е. А. Анизотропия физических свойств металлов. — М.: Металлургия, 1985. — 136 с.
6. Францевич И. Н., Воронов Ф. Ф., Бакута С. А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. — Киев: Наукова думка, 1982. — 286 с.
7. Труэлл Р., Эльбаум Ч., Чик Б. Ультразвуковые методы в физике твердого тела. — М.: Мир, 1972. — 304 с.

REFERENCES

1. Manufacturing of high temperature molten vanes for jet turbo-shafts / S. I. Yatsyk, ed. — Moscow: Mashinostroenie, 1995. — 256 p. [in Russian].
2. Goldshtein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Variation of Poisson's ratio in hexagonal crystals under pressure / Trudy MAI. 2016. Vol. 87. P. 1 – 22 [in Russian].
3. Goldshtein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. On the negativity of Poisson's ratio for anisotropic materials / Dokl. RAN. 2009. Vol. 429. N 5. P. 614 – 616 [in Russian].
4. Krasavin V. V., Krasavin A. V. Calculation of shear elasticity characteristics in cubic crystals / Zavod. Lab. Diagn. Mater. 2004. Vol. 70. N 2. P. 32 – 35 [in Russian].
5. Adamescu R. A., Gelfed P. V., Mitushov E. A. Anisotropy of physical properties of metals. — Moscow: Metallurgiya, 1985. — 136 p. [in Russian].
6. Frantsevich I. N., Voronov F. F., Bakuta S. A. Elastic constants and moduli of metals and non-metals. — Kiev: Naukova dumka, 1982. — 286 p. [in Russian].
7. Truell R., Elbaum H., Chik B. Ultrasonic methods in solid state physics. — Moscow: Mir, 1972. — 304 p. [Russian translation].

DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2019-85-9-35-41>

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ ВЗАИМОДИФФУЗИИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ С ОГРАНИЧЕННОЙ РАСТВОРИМОСТЬЮ КОМПОНЕНТОВ

© Николай Николаевич Афонин^{1*}, Вера Алексеевна Логачева²

¹ Воронежский государственный педагогический университет; Россия, 394043, г. Воронеж, ул. Ленина 86;
*e-mail: nafonin@vspu.ac.ru

² Воронежский государственный университет; Россия, 394018, г. Воронеж, Университетская пл. 1.

*Статья поступила 20 ноября 2018 г. Поступила после доработки 18 апреля 2019 г.
Принята к публикации 23 апреля 2019 г.*

Синтез многослойных тонкопленочных функциональных покрытий предусматривает осаждение материалов и отжиг. При этом возможны процессы взаимодиффузии и фазообразования. Однако моделирование реакционной взаимодиффузии в таких системах, как металл — поликристаллический оксид с ограниченной растворимостью компонентов до последнего времени не осуществляли. Вместе с тем моделирование позволяет выбирать условия отжига (время и температуру), необходимые для включения металла в решетку оксида и его однородного распределения в ней. Представлена количественная модель взаимодействия в слоистой системе металл — поликристаллический оксид другого металла в условиях ограниченной растворимости на основе представлений о взаимной диффузии компонентов и объемных реакций образования сложных оксидов. Модель использовали при исследовании процесса модифицирования тонких пленок оксида титана переходными металлами. Приведены результаты численного анализа экспериментальных концентрационных распределений компонентов в тонкопленочных поликристаллических системах $\text{Co} - \text{TiO}_2$ и $\text{Fe} - \text{TiO}_2$, включая значения индивидуальных коэффициентов диффузии исследуемых металлов и титана в условиях вакуумного отжига. Модель хорошо описывает основные закономерности процесса (появление титана в пленке металла, глубокое проникновение Fe и Co в пленку оксида титана), а также позволяет объяснить образование сложных оксидов не путем послойного роста на границе раздела металл — оксид, а по всей толщине пленки TiO_2 . Полученные данные анализа межфазного взаимодействия в слоистых системах, сопровождающегося реакционной взаимной диффузией, могут использоваться для прогнозирования эволюции фазового состава и управления технологическими процессами получения материалов с заданными свойствами.

Ключевые слова: моделирование; реакционная взаимодиффузия; эффект Киркендалла; межфазные границы; тонкие поликристаллические пленки; слоистая бинарная система металл — поликристаллический оксид; вакуумный отжиг.