

Федеральное агентство по образованию

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАШИНОВЕДЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

А. М. Кривцов

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА
УПРУГИЕ СВОЙСТВА ОДНОАТОМНЫХ
И ДВУХАТОМНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2009

Федеральное агентство по образованию

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАШИНОВЕДЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

А. М. Кривцов

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

УПРУГИЕ СВОЙСТВА ОДНОАТОМНЫХ
И ДВУХАТОМНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Рекомендовано Учебно-методическим объединением по университетскому политехническому образованию в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки 150300 “Прикладная механика”

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2009

УДК 531.3(075.8)

Рецензенты:

Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН

Е.А. Иванова,

Доктор физико-математических наук, профессор СПбГПУ *В.А. Пальмов*

А.М. Кривцов. **Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов** : учеб. пособие. — СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. — 126 с.

Пособие соответствует направлениям бакалаврской подготовки “Прикладная математика и физика”, “Механика” и “Прикладная механика”, магистерским программам “Механика деформируемого твердого тела”, “Наномеханика” и “Вычислительная механика”.

Исследуются упругие свойства идеальных монокристаллов и наноструктур. Описана методика, позволяющая получить связь макроскопических характеристик с параметрами микроструктуры в рамках линейной теории упругости. Проводится сравнительный анализ трех моделей межатомного взаимодействия: силовой, моментной и угловой. Рассматриваются структуры, имеющие одноатомные кристаллические решетки (треугольная, квадратная, кубическая, ОЦК, ГЦК) и двухатомные кристаллические решетки (графен, алмаз).

Предназначено для студентов, изучающих теоретическую механику, механику сплошной среды и физику твердого тела, а также аспирантов, научных работников и инженеров.

Табл. 9. Библиогр.: 36 назв.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

© Кривцов А.М., 2009

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2009

Оглавление

Введение	6
Часть I. Общие сведения	11
Глава 1. Кристаллы	12
1.1. Основные понятия и предположения	12
1.2. Типы межатомных взаимодействий	15
1.3. Способы описания межатомных взаимодействий	17
1.4. Параметры кристаллических решеток	19
Глава 2. Тензорные величины	23
2.1. Обозначения векторных и тензорных величин	23
2.2. Изотропные тензоры	25
2.3. Координационный тензор	28
Глава 3. Тензор жесткости	30
3.1. Общие формулы	30
3.2. Ортоотропный материал с кубической симметрией	32
3.3. Модули упругости ортоотропного материала	34
3.4. Изотропный тензор жесткости	36
3.5. Модули упругости изотропного материала	37
Часть II. Одноатомные кристаллы	39
Глава 4. Силовое взаимодействие, тензор жесткости	40
4.1. Вывод уравнений	40

4.2. Треугольная решетка	42
Глава 5. Силовое взаимодействие, различные решетки	44
5.1. Основные понятия	44
5.2. Одна координационная сфера	45
5.3. Две координационные сферы	48
Глава 6. Многочастичное взаимодействие	51
6.1. Исходные уравнения	51
6.2. Преобразование формулы для тензора жесткости	52
6.3. Модель с угловыми пружинами	55
6.4. Квадратная и кубическая решетки	58
6.5. Изотропная часть тензора жесткости	58
6.6. Треугольная решетка	60
Глава 7. Моментное взаимодействие	62
7.1. Вывод уравнений	62
7.2. Переход к безмоментной теории	64
7.3. Трансверсально-изотропные связи	65
7.4. Сравнение с трехчастичным взаимодействием	67
7.5. Квадратная и кубическая решетки	69
7.6. Треугольная решетка	69
7.7. Модель связанных многоугольников	70
Часть III. Двухатомные кристаллы	74
Глава 8. Упругие характеристики	75
8.1. Сложная двухатомная решетка	75
8.2. Тензоры жесткости	76
8.3. Кристаллическая решетка графена	77

Глава 9. Силовое взаимодействие	82
9.1. Получение тензоров жесткости второго, третьего и четвертого рангов	82
9.2. Упрощенный подход	86
9.3. Получение макроскопического тензора жесткости	88
9.4. Решетка графена: общие формулы	89
9.5. Конкретные модели решетки графена	94
Глава 10. Моментное взаимодействие	102
10.1. Вывод уравнений	102
10.2. Переход к безмоментной теории	104
10.3. Трансверсально-изотропные связи	106
10.4. Решетки графена и алмаза	107
Глава 11. Многочастичное взаимодействие	112
11.1. Основные уравнения	112
11.2. Решетка графена	115
Глава 12. Три модели графена	116
12.1. Модули упругости	116
12.2. Устойчивость	116
12.3. Силовое взаимодействие	117
12.4. Моментное взаимодействие	118
12.5. Многочастичное взаимодействие	120
Заключение	121
Библиографический список	123

Введение

Классическая механика изучает движение материальных тел в пространстве. Понятие материального тела является неопределяемым, однако в зависимости от задачи могут использоваться более или менее сложные модели материальных тел, допускающие относительно строгое математическое определение. Перечислим такие модели в порядке их усложнения: материальная точка, абсолютно твердое тело, твердое деформируемое тело, твердое тело с микроструктурой. Если первые три модели широко представлены в учебной литературе, то четвертая — чаще используется в научных работах и относительно редко рассматривается в учебниках по механике. Однако эта модель имеет давнюю историю, более того, именно она, точнее ее частный случай — идеальный монокристалл, использовался для получения и обоснования континуальной модели деформируемого твердого тела. В большей степени твердое тело с микроструктурой рассматривается в учебниках по физике твердого тела, но необходимость описывать механические процессы в подобных телах требует детального рассмотрения этой модели в учебниках по механике. Частичному восполнению этого пробела и посвящено данное учебное пособие.

Простейшей моделью твердого тела с микроструктурой является идеальный монокристалл. В силу его регулярности многие соотношения, связывающие параметры микроструктуры с макроскопическими параметрами деформирования, удается получить аналитически. С одной стороны, подобные аналитические соотношения представляют самостоятельный интерес для теоретического анализа деформирования кристаллических твердых тел. С другой стороны, в связи с развитием нанотехнологий возникла необходимость определять механические свойства

объектов, размеры которых сопоставимы с межатомными расстояниями, а следовательно, потребовалось явно учитывать особенности их атомарной структуры. Многие наноструктуры или являются идеальными кристаллами, или содержат значительные монокристаллические участки, поэтому развитие математического аппарата и механических моделей для описания деформирования кристаллических твердых тел необходимо для правильного описания и эксплуатации объектов нанометрового масштабного уровня. И, наконец, возможность связывать микро- и макропараметры необходима для постановки задач компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения методом частиц [18], так как в основе этого метода лежит представление твердого тела с помощью различных упаковок частиц, из которых монокристаллические являются наиболее распространенными.

В пособии взаимодействие на микроуровне описывается в рамках классической механики (без учета квантово-механических эффектов), что оказывается достаточным для изучения упругого деформирования большинства кристаллических твердых тел. Однако даже чисто классическое описание взаимодействия оказывается весьма непростым. Связано это прежде всего с тем, что для ряда кристаллов простейшая классическая модель (далее будем называть ее силовой), где атомы представляются материальными точками, связанными парным силовым взаимодействием, оказывается недостаточной. Это, прежде всего, относится к ковалентным кристаллам. Однако именно ковалентные связи характерны для многих наноструктур, таких как графен, фуллерены, углеродные нанотрубки, органические молекулы и т.д. В пособии рассматривается два подхода к решению этой проблемы. Первый подход состоит в использовании многочастичного взаимодействия — потенциалы зависят от относительного положения нескольких частиц (атомов). Второй подход состоит в учете парного моментного взаимодействия — потенциалы зависят от относительных положений и поворотов двух взаимодействующих частиц. И тот, и другой подход приводят к тому, что силы взаимодействия между атомами перестают быть центральными: наряду с усилием вдоль связи появляется поперечное усилие. Это позволяет учесть направлен-

ность связей в ковалентных структурах.

Одна из основных целей данного пособия — сравнительный анализ трех моделей: парной силовой, парной моментной и многочастичной; получение для них формул, связывающих параметры микроструктуры с макроскопическими характеристиками упругости кристаллов. Для многочастичной модели будет рассмотрен только ее простейший вариант, при котором взаимодействие определяется относительным положением трех частиц — трехчастичное взаимодействие. Это эквивалентно тому, что взаимодействие определяется расстоянием между парами частиц и углами между связями.

В равновесии расположение атомов монокристалла характеризуется трансляционной симметрией, т. е. они образуют идеальную кристаллическую решетку. Кристаллические решетки принято делить на простые и сложные. В простой решетке все атомы одинаковы и находятся в одинаковом положении. Сложная решетка может содержать как различные атомы, так и одинаковые атомы, но имеющие различное геометрическое положение относительно соседних атомов. Мы будем рассматривать только второй случай, которому соответствуют кристаллы, сформированные из одного химического элемента, хотя многие результаты, практически без изменений, могут быть перенесены для двух элементов. Сложная решетка всегда состоит из нескольких простых. В пособии рассматриваются простые решетки (или одноатомные) и сложные двухатомные (т.е. состоящие из двух подрешеток). Двухатомными решетками обладают, в частности, углеродные кристаллы, такие, как графен, графит, алмаз. Рассмотрение двухатомных решеток позволяет существенно упростить математический аппарат, требуемый для описания сложных решеток. Получение тензора жесткости для произвольных (многоатомных) сложных решеток описывается в монографии [18] для силового взаимодействия и в работе [13] для моментного взаимодействия.

Пособие состоит из трех частей. Первая часть вводная; вторая посвящена кристаллам, имеющим простую (одноатомную) решетку; третья — сложную (двухатомную) решетку.

Для характеристик упругости будут получены общие формулы, спра-

ведливые для пространства размерности 1, 2, 3. В качестве примеров будут рассматриваться двухмерные решетки: треугольная, квадратная, шестиугольная (решетка графена); трехмерные решетки: кубическая, ОЦК (объемоцентрированная кубическая), ГЦК (гранецентрированная кубическая), решетка алмаза. Графен (монослой графита) особенно интересен, так как представляет собой, как недавно было показано [34, 35], реально существующий практически двухмерный монокристалл. Поэтому он представляет собой как монокристалл, так и наноструктуру. Кроме того, графен является основным структурным элементом для многих углеродных наноструктур, таких, как фуллерены и нанотрубки. В основном будут рассматриваться монокристаллы и их упругие характеристики, но также будет использоваться осреднение тензора жесткости, позволяющее приближенно описывать деформирование поликристаллических материалов.

Рассматривается линейное упругое деформирование системы. Каждая частица считается взаимодействующей лишь с ограниченным числом соседей — это позволяет при переходе к макроскопическому масштабному уровню получить локальную теорию. Для получения характеристик упругости используется энергетический подход — связь микро- и макропараметров получается из сравнения выражений для энергии деформирования. Данный подход позволяет наиболее просто получить требуемые соотношения, особенно для моментного и многочастичного взаимодействий. Подходы, позволяющие выводить из микроскопических представлений не только упругие характеристики, но и полную систему уравнений динамики сплошной среды, излагаются в монографии [18] для силового взаимодействия и в работах [12, 13] для моментного взаимодействия.

Рассматриваются только идеальные бесконечные кристаллы. Влияние конечности кристалла на его упругие характеристики, что особенно важно для наноструктур, исследовано в работах [11, 17, 22].

Основополагающими по динамике кристаллической решетки считаются работы М. Борна и др. [2]. В них, в частности, получены линейные соотношения упругости для идеального кристалла на основе развитого

Борном метода длинных волн. Впоследствии механика кристаллических решеток исследовалась многими авторами [14, 15, 18, 19, 21].

Используемое в пособии описание механики деформируемого твердого тела опирается на работы П. А. Жилина, А. И. Лурье, В. А. Пальмова [7, 25, 27]. Построение моментной модели кристалла основывается на идеях П. А. Жилина [7, 8] и работах [10, 12, 13]; построение трехчастичной модели двухатомной кристаллической решетки — на результатах работы [30].

Автор многим обязан своему Учителю — Павлу Андреевичу Жилину, под влиянием которого формировалось научное мировоззрение автора.

За неизменную научную поддержку и ценные советы автор благодарен Е. А. Ивановой, Д. А. Индейцеву, Н. Ф. Морозову и В. А. Пальмову. Автор благодарен А. И. Боровкову и Р. В. Гольдштейну за полезные обсуждения. Автор благодарен И. Е. Беринскому, Н. Г. Двасу, А. М. Кударовой, В. А. Кузькину, А. А. Ле-Захарову, О. С. Лобода, И. И. Нейгебауэр и Е. А. Подольской, совместная работа с которыми способствовала появлению этой книги.

Ряд материалов, приведенных в пособии, разработан при поддержке РФФИ (гранты 08-01-00865-а, 09-01-12096-офи-м).

Часть I
Общие сведения

Глава 1

Кристаллы

Приводятся краткие сведения о структуре и свойствах кристаллов, которые потребуются в последующих главах. Более подробную информацию можно найти, например, в монографии [3].

1.1. Основные понятия и предположения

Кристаллической решеткой называется множество точек (узлов) в трехмерном пространстве, для которого существует такая тройка некопланарных векторов, что смещение этого множества на любой из них есть тождественное преобразование. Очевидно, что подобное множество должно быть неограниченным в пространстве. Если указанная тройка векторов существует, то она может быть выбрана не единственным образом. В качестве основной тройки выбирается такая, чтобы параллелепипед, построенный на ее векторах, имел минимальный объем. Эти векторы называются основными, а параллелепипед — элементарной ячейкой. Основные векторы также определены неоднозначно, однако всегда можно выделить какую-нибудь одну тройку из возможных. Введенное понятие решетки очевидным образом может быть распространено на пространство произвольной размерности, в том числе на одно- и двухмерные пространства.

Будем рассматривать совокупность частиц, образующих в равновесном состоянии идеальную кристаллическую решетку. Частицы будем называть атомами, а всю совокупность — кристаллом. Определенный

таким образом кристалл является идеальным (бездефектным). Реальные кристаллы отличаются наличием дефектов структуры, однако при небольшом количестве дефектов отклонениями от идеальности можно пренебречь, если речь идет о вычислении упругих характеристик. Кроме того, согласно определению, рассматриваемые кристаллы являются бесконечными. Изменение упругих свойств, связанное с конечностью кристаллов, имеет порядок $1/N$, где N — число слоев атомов в направлении измерения характеристик упругости. Для наноструктур эти отклонения могут быть заметными, подробнее об этом можно прочитать в работах [11, 17, 22]. Многие излагаемые в данной книге результаты могут применяться также для различных периодических структур, в том числе макроскопических, в которых частицы вовсе не являются атомами. Отметим, что только при недеформированном состоянии кристалла частицы находятся в узлах решетки, при деформации они получают некоторые смещения и их положения с узлами уже не совпадают.

Совокупность узлов, которая может быть получена из некоторого одного узла композициями перемещений на основные векторы, называется решеткой Браве данной кристаллической решетки. Решетка, совпадающая со своей решеткой Браве, называется простой, не совпадающая — сложной. Сложная решетка состоит из нескольких вставленных друг в друга одинаковых решеток Браве. Иными словами, простой называется решетка, для которой перемещение на вектор, соединяющий любые два узла, есть тождественное преобразование. Элементарная ячейка простой решетки содержит один узел, сложной — несколько.

В пособии будут рассматриваться кристаллические решетки, элементарная ячейка которых содержит один или два узла (атома). Называть их будем, соответственно, одноатомной и двухатомной решетками. Очевидно, одноатомная решетка — это другое название простой решетки, двухатомная — это простейший частный случай сложной решетки. Интерес именно к двухатомным решеткам в значительной степени связан с тем, что такую структуру имеют многие материалы, используемые в нанотехнологиях. Так, двухатомными являются решетки графена и алмаза. Графен сам по себе является наноструктурой; кроме того, он явля-

ется геометрической основой для углеродных наноструктур, таких, как нанотрубки и фуллерены. Структуру алмаза имеют некоторые элементы и их соединения, используемые, в частности, в полупроводниковых нанотехнологиях.

Рассмотрим некоторый узел решетки, который будем называть исходным. Сферы с центром в исходном узле и проходящие через другие узлы решетки, называются координационными. Их принято нумеровать в порядке возрастания радиуса, причем первой считается координационная сфера, на которой находятся узлы, ближайшие к исходному. Координационным числом называется число узлов, лежащих на координационной сфере. Если номер сферы не указывается, то подразумевается первая, а координационное число дает число узлов, соседствующих с исходным. Предполагается, что межатомное взаимодействие достаточно быстро убывает на расстоянии, что позволяет рассматривать конечное число координационных сфер, а в ряде случаев ограничиваться одной или двумя сферами.

Для получения макроскопических характеристик упругости кристаллических решеток будет использоваться энергетический подход. Суть его состоит в том, что энергия деформирования записывается в двух представлениях — микроскопическом (через деформации межатомных связей) и макроскопическом (через деформации сплошной среды). Приравнявая выражения для энергий, получим связь между макроскопическими характеристиками упругости материала и микроскопическими параметрами кристалла. При этом для удобства будем рассматривать лишь однородное деформирование кристаллической решетки, т. е. деформирование, при котором перемещения атомов каждой решетки Браве являются линейными функциями координат.

Возможны другие способы получения характеристик упругости. В частности, в монографии [18] для этого используется длинноволновое приближение, позволяющее получить не только характеристики упругости, но и полностью вывести макроскопические уравнения движения из микроскопических. Но для рассмотрения упругих свойств при малых деформациях энергетический подход оказывается предпочтительнее. Он

позволяет проще получить искомые соотношения, особенно для непарного (многочастичного) взаимодействия.

1.2. Типы межатомных взаимодействий

Рассмотрим существующие в природе основные типы межатомных взаимодействий. По характеру преобладающих сил взаимодействия кристаллы грубо могут быть разделены на четыре группы.

1. Ван-дер-Ваальсовы кристаллы. Из-за отсутствия обобществленных электронов силы взаимодействия являются парными и при небольших размерах структурных элементов (атомов или молекул) центральными. Кроме того, они быстро убывают с расстоянием — пропорционально r^{-7} . Это прежде всего кристаллы инертных газов, а также молекулярные кристаллы с насыщенными внутримолекулярными связями. В этом случае достаточно ограничиться парным силовым взаимодействием между атомами.
2. Ионные кристаллы. Кристалл состоит из ионов, силы взаимодействия кулоновские, значит, парные и центральные. Однако силы взаимодействия медленно убывают на расстоянии, в связи с чем ионные кристаллы, вообще говоря, уже не могут описываться локальной макроскопической теорией — в общем случае они являются пьезоэлектриками. Однако если кристаллы обладают определенными свойствами симметрии, а именно каждый атом является центром инверсии, то пьезоэлектрических эффектов не возникает и взаимодействие можно считать локальным. Это прежде всего относится к щелочно-галогидным соединениям. В этом случае также может использоваться модель парного силового взаимодействия с ограниченным числом соседей по кристаллической решетке.
3. Металлы. Представляют собой совокупность положительных ионов, погруженных в электронный газ. Для анализа физических свойств подобной системы часто требуется привлечение квантово-механических соображений. Однако для описания механических свойств

металлов могут с успехом применяться и классические модели. В простейшем случае они основываются на парном взаимодействии, для более точного описания требуется учет многочастичного или моментного взаимодействия.

4. Ковалентные кристаллы. Каждый атом может образовывать ограниченное число ковалентных связей, кроме того, имеется ярко выраженная преимущественная направленность связей. Использование чисто силового взаимодействия для описания таких систем встречает серьезные трудности, связанные с обеспечением устойчивости решетки и правильным описанием ее упругих характеристик. Здесь предпочтительным является применение моделей, использующих многочастичное или моментное взаимодействие.

Для кристаллов, решетки которых центрально-симметричны относительно любого узла (в частности, это выполняется для любой простой решетки), при чисто силовом взаимодействии тензор жесткости оказывается абсолютно симметричным (проекции тензора в ортонормированном базисе симметричны относительно любой перестановки индексов) [2]. Подобная связь между проекциями тензора жесткости исторически носит название соотношений Коши. Из экспериментальных данных [26, 29] следует, что для многих щелочно-галлоидных соединений отклонения от соотношений Коши лишь несколько превосходят погрешность эксперимента. Для большинства же металлов и ковалентных соединений соотношения Коши не выполняются. Отметим, что для изотропных материалов из абсолютной симметрии тензора жесткости следует значение коэффициента Пуассона $\nu = 0.25$. На самом же деле ν изменяется в достаточно широких пределах со средним значением, близким к 0.3. Однако большинство теорий, построенных на более сложных моделях, учитывающих квантово-механическую природу взаимодействия, дают в лучшем случае правильный знак отклонения от соотношений Коши, величина же этого отклонения плохо согласуется с экспериментом (см., например, сравнение в работах [26, 29]). Впрочем, и экспериментальные данные порой различаются весьма существенно. В этой ситуации приемлемого соот-

ветствия с экспериментом удастся добиться, оставаясь в рамках классической механики, но при использовании усложненных моделей. Действительно, соотношения Коши строго выполняются только при следующих условиях:

- 1) простая кристаллическая решетка;
- 2) парное силовое взаимодействие;
- 3) идеальный бесконечный монокристалл;
- 4) отсутствие теплового движения.

Отказ от любого из них может привести к отклонению от соотношений Коши. В пособии будут рассмотрены альтернативы первому и второму условиям: сложная решетка, непарное трехчастичное или парное моментное взаимодействие.

1.3. Способы описания межатомных взаимодействий

Простейшей моделью межатомного взаимодействия является парное силовое взаимодействие. В этом случае межатомное взаимодействие определяется потенциалом, зависящим только от расстояния между парами частиц (здесь и далее рассматриваются только потенциальные взаимодействия). Силы взаимодействия в этом случае являются центральными, т. е. направлены они вдоль прямой, соединяющей центры атомов. Для краткости такой тип взаимодействия будем называть силовым.

Силовое взаимодействие с успехом может использоваться для решения многих классов задач, таких, как моделирование физико-механических процессов в плотноупакованных кристаллических структурах, моделирование деформирования и разрушения вещества на мезоуровне [18]. Однако для ряда задач использование силового взаимодействия приводит к принципиальным проблемам. В частности, это относится к описанию молекулярных структур с направленными связями. Таковыми являются углеродные наноструктуры, ковалентные кристаллы (например, кристаллы графита, алмаза), практически все органические молекулы. Причина состоит в том, что при центральном взаимодействии все направления оказываются равнозначными, что затрудняет возникновение

направленных связей; в результате частицы стремятся сформировать структуры с наибольшей возможной плотностью упаковки. Структуры же с направленными связями отличаются, напротив, низкой плотностью упаковки.

Изложенное выше, однако, не означает, что структуры с направленными связями в принципе не могут быть описаны с помощью силового взаимодействия. В ряде работ параметры силового взаимодействия с успехом подбираются так, что они делают устойчивыми ковалентные углеродные кристаллы [1, 4, 23]. Однако при этом приходится выбирать различный закон взаимодействия между ближними и дальними атомами, что затрудняет описание перестроек кристаллической структуры. Кроме того, как будет показано далее, при силовом взаимодействии удастся удовлетворить только части экспериментальных значений упругих модулей.

Существуют различные способы решения указанных выше проблем. Наиболее распространенный подход состоит в применении многочастичных потенциалов взаимодействия [32, 33, 36] — потенциалов, зависящих от относительных положений нескольких частиц, окружающих данную. Мы ограничимся трехчастичным взаимодействием, когда, наряду с растяжением межатомных связей, взаимодействие определяется изменением углов между связями.

Альтернативный подход состоит во введении в рассмотрение вращательных степеней свободы и учете моментного вклада в межатомное взаимодействие [10, 12, 13]. При этом взаимодействие остается парным, но силы взаимодействия уже не обязаны быть центральными — наряду с продольной силой взаимодействия возникает поперечная, которая и поддерживает направленность связей. Подобный подход сближает описание молекулярных систем с описанием моментных континуальных сред [8, 9], что позволяет дать ясную физическую интерпретацию параметрам взаимодействия. Для краткости такой тип взаимодействия будем называть моментным.

Одной из основных задач данного пособия является сравнительный анализ трех различных подходов к описанию межатомных взаимодей-

ствий в кристаллических структурах: парного силового, парного моментного и многочастичного.

1.4. Параметры кристаллических решеток

В качестве примера далее будут рассматриваться семь кристаллических решеток: треугольная, квадратная, шестиугольная (решетка графена), кубическая, ОЦК (объемноцентрированная кубическая), ГЦК (гранецентрированная кубическая), решетка алмаза. Из них три двумерные (треугольная, квадратная, шестиугольная) и четыре трехмерные (кубическая, ОЦК, ГЦК, решетка алмаза). Решетки графена и алмаза двухатомные, остальные — одноатомные. Тензор жесткости треугольной и шестиугольной решеток изотропен, для остальных он обладает кубической (квадратной) симметрией. Для квадратной решетки будем отдельно рассматривать две ее ориентации, для одной из которых сохраним название квадратной решетки, а другую, полученную в результате поворота на $\pi/4$, будем условно называть ромбической решеткой.

Рассмотрим подробнее перечисленные кристаллические решетки. Выпишем для них орты (единичные векторы) \mathbf{n}_α , задающие направление от некоторого атома кристаллической решетки к его ближайшим соседям. Все орты \mathbf{n}_α выразим через орты \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} ортонормированной системы координат. При кубической симметрии решетки орты \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} направляются вдоль осей кубической симметрии.

Треугольная решетка. Атомы расположены в вершинах равносторонних треугольников, плотно заполняющих плоскость. Соответствует плотной упаковке шаров на плоскости.

$$\mathbf{n}_{1,2} = \pm \mathbf{i}, \quad \mathbf{n}_{2,3,4,5,6} = \pm \frac{1}{2} \mathbf{i} \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{j}.$$

Квадратная решетка. Атомы расположены в вершинах квадратов, плотно заполняющих плоскость.

$$\mathbf{n}_{1,2} = \pm \mathbf{i}, \quad \mathbf{n}_{3,4} = \pm \mathbf{j}.$$

Ромбическая решетка. Квадратная решетка, повернутая на $\pi/4$.

$$\mathbf{n}_{1,2,3,4} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j}).$$

Шестиугольная решетка (решетка графена). Атомы расположены в вершинах равносторонних шестиугольников, плотно заполняющих плоскость. В природе этой решеткой обладает графен — монослой графита, который может существовать и как отдельная наноструктура — практически двухмерный монокристалл.

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{i}, \quad \mathbf{n}_{2,3} = -\frac{1}{2}\mathbf{i} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{j}.$$

Кубическая решетка. Атомы расположены в вершинах кубов, плотно заполняющих пространство. Часто эту решетку называют простой кубической. Единственный элемент, который может образовывать данную решетку — полоний.

$$\mathbf{n}_{1,2} = \pm \mathbf{i}, \quad \mathbf{n}_{3,4} = \pm \mathbf{j}, \quad \mathbf{n}_{5,6} = \pm \mathbf{k}.$$

ОЦК (объемноцентрированная кубическая) решетка. Атомы расположены в центрах и вершинах кубов, плотно заполняющих пространство. Этой решеткой обладает железо (при не слишком высокой температуре), щелочные металлы, а также барий, ванадий, вольфрам, молибден, хром и др.

$$\mathbf{n}_{1,2,3,4,5,6,7,8} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j} \pm \mathbf{k}).$$

ГЦК (гранецентрированная кубическая) решетка. Атомы расположены в центрах граней и вершинах кубов, плотно заполняющих пространство. Соответствует одной из возможных плотных упаковок шаров в пространстве. Этой решеткой обладает ряд металлов (алюминий, золото, медь, никель, серебро, платина и др.), ее образуют при конденсации инертные газы.

$$\mathbf{n}_{1,2,3,4} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{j}), \quad \mathbf{n}_{5,6,7,8} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm \mathbf{j} \pm \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{n}_{9,10,11,12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm \mathbf{i} \pm \mathbf{k}).$$

Решетка алмаза. Эта решетка может быть получена из ОЦК удалением с первой координационной сферы каждого второго атома так, чтобы оставшиеся атомы лежали на вершинах тетраэдра. Данной решеткой обладает алмаз, а также элементы четвертой группы: кремний, германий и α -олово.

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}), & \mathbf{n}_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}), \\ \mathbf{n}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{i} - \mathbf{j} - \mathbf{k}), & \mathbf{n}_4 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

Для двухатомных решеток (графена и алмаза) выше выписаны орты, отвечающие одному из двух атомов элементарной ячейки. Для второго атома орты отличаются знаком. Отметим, что если для этих решеток объединить множество ортов для двух типов атомов, то для решетки графена орты совпадут с ортами треугольной решетки, а для решетки алмаза — с ортами ОЦК решетки.

Безразмерные параметры различных решеток приведены в табл. 1.1, где d — размерность пространства, L — число подрешеток, M — координационное число (число ближайших соседей атома), V_0 — объем элементарной ячейки, a — расстояние между ближайшими соседями. В предпо-

Таблица 1.1: Безразмерные параметры кристаллических решеток.

Решетка	d	L	M	$V_0 a^{-d}$	$V_0 a^{-d}/L$	$\tilde{\rho}$
Треугольная	2	1	6	$\sqrt{3}/2$	0.87	1.00
Квадратная	2	1	4	1	1.00	0.87
Графена	3	2	3	$3\sqrt{3}/2$	1.30	0.67
Кубическая	3	1	6	1	1.00	0.71
ОЦК	3	1	8	$4\sqrt{3}/9$	0.77	0.92
ГЦК	3	1	12	$\sqrt{2}/2$	0.71	1.00
Алмаза	3	2	4	$16\sqrt{3}/9$	1.54	0.46

следнем столбце приведен удельный объем, приходящийся на атом кристаллической решетки. Из двумерных решеток наименьший удельный объем имеет треугольная, из трехмерных — ГЦК решетка. Эти решетки являются плотноупакованными — им отвечает плотная упаковка шаров

в пространстве соответствующей размерности. В последнем столбце указана относительная плотность упаковки. Вычислена она как отношение удельного объема плотноупакованной решетки к удельному объему данной решетки. Согласно табл.1.1, из двухмерных решеток наименьшую плотность упаковки имеет решетка графена, из трехмерных — решетка алмаза.

Глава 2

Тензорные величины

В главе даны краткие сведения о тензорных величинах и основных алгебраических операциях с ними. Используется язык прямого тензорного исчисления. Более подробно основы тензорной алгебры изложены в учебном пособии В. А. Пальмова [28]. Основы векторной и тензорной алгебры для использования в задачах механики изложены в пособии П. А. Жилина [6]. В сжатой форме, но достаточно полно, прямое тензорное исчисление описывается в книгах А. И. Лурье [24, 25]. Кроме того, по прямому тензорному исчислению можно порекомендовать монографии [5, 16, 20], а по применению его в задачах механики — монографии [7, 27].

2.1. Обозначения векторных и тензорных величин

В пособии для обозначения векторных и тензорных величин используется жирный прямой шрифт: \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{A} , \mathbf{B} . Ранг тензора обозначается верхним индексом, расположенным слева от тензора, например: ${}^3\mathbf{B}$ — тензор третьего ранга. Для тензоров второго ранга этот индекс, как правило, опускается. Тензор n -го ранга представляет собой сумму слагаемых, каждое из которых является тензорным произведением n векторов. Так, тензор второго ранга представляет собой сумму диад:

$$\mathbf{A} = \mathbf{a}_1\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3\mathbf{a}_4 + \dots, \quad (2.1)$$

тензор третьего ранга — сумму триад:

$${}^3\mathbf{B} = \mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_4\mathbf{a}_5\mathbf{a}_6 + \dots, \quad (2.2)$$

четвертого ранга — сумму тетрад:

$${}^4\mathbf{C} = \mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3\mathbf{a}_4 + \mathbf{a}_5\mathbf{a}_6\mathbf{a}_7\mathbf{a}_8 + \dots \quad (2.3)$$

Координаты тензора n -го ранга в векторном базисе имеют n индексов. Например, соотношение ${}^4\mathbf{C} = \mathbf{a}\mathbf{a}\mathbf{a}\mathbf{a}$ в индексной форме принимает вид $C_{klmn} = a_k a_l a_m a_n$, где величины C_{klmn} — координаты тензора четвертого ранга ${}^4\mathbf{C}$, а величины a_k — координаты вектора \mathbf{a} .

Произведения векторов обозначаются, соответственно: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ — скалярное, $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ — векторное, $\mathbf{a}\mathbf{b}$ — тензорное (диадное). Тензорное произведение ассоциативно и дистрибутивно как по вектору, так и по числу (скалярному множителю), однако оно некоммутативно — векторы в тензорном произведении нельзя переставлять местами. Операция транспонирования, примененная к тензору \mathbf{A} , обозначается \mathbf{A}^T , в частности $(\mathbf{a}\mathbf{b})^T = \mathbf{b}\mathbf{a}$. Если $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$, то тензор \mathbf{A} называется симметричным, а если $\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}$, то антисимметричным. Симметричная и антисимметричная части тензора определяются формулами

$$\mathbf{A}^S \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T), \quad \mathbf{A}^A \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T). \quad (2.4)$$

Рассмотрим два тензора второго ранга \mathbf{A} и \mathbf{C} . Представим их в виде суммы трех диад (это возможно для любого тензора второго ранга):

$$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^3 \mathbf{a}_k \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{C} = \sum_{n=1}^3 \mathbf{c}_n \mathbf{d}_n. \quad (2.5)$$

Тогда следом и сопутствующим вектором тензора \mathbf{A} называются, соответственно, скаляр и вектор:

$$\text{tr } \mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^3 \mathbf{a}_k \cdot \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{A}_\times \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^3 \mathbf{a}_k \times \mathbf{b}_k. \quad (2.6)$$

Скалярные произведения тензора \mathbf{A} и вектора \mathbf{c} определяются формулами

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k,n=1}^3 (\mathbf{c} \cdot \mathbf{a}_k) \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{c} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k,n=1}^3 \mathbf{a}_k (\mathbf{b}_k \cdot \mathbf{c}); \quad (2.7)$$

векторные — формулами

$$\mathbf{c} \times \mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k,n=1}^3 (\mathbf{c} \times \mathbf{a}_k) \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{A} \times \mathbf{c} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k,n=1}^3 \mathbf{a}_k (\mathbf{b}_k \times \mathbf{c}). \quad (2.8)$$

Скалярное произведение тензоров \mathbf{A} и \mathbf{C} определяется формулой

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{C} = \sum_{k,n=1}^3 \mathbf{a}_k (\mathbf{b}_k \cdot \mathbf{c}_n) \mathbf{d}_n = \sum_{k,n=1}^3 (\mathbf{b}_k \cdot \mathbf{c}_n) \mathbf{a}_k \mathbf{d}_n, \quad (2.9)$$

двойное скалярное произведение — формулой

$$\mathbf{A} \cdot \cdot \mathbf{C} = \sum_{k,n=1}^3 (\mathbf{b}_k \cdot \mathbf{c}_n) (\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{d}_n). \quad (2.10)$$

Свертка ${}^s \mathbf{A} \odot {}^s \mathbf{B}$ двух тензоров ранга s представляет собой скаляр, полученный в результате последовательного скалярного перемножения входящих в тензоры векторов, причем сначала перемножаются внутренние векторы, затем — внешние. В частности, двойное скалярное произведение (2.10) — свертка тензоров второго ранга.

Единичный тензор обозначается \mathbf{E} . Для любого вектора \mathbf{a} справедливы тождества

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{a}, \quad \mathbf{E} \times \mathbf{a} = \mathbf{a} \times \mathbf{E}. \quad (2.11)$$

Для тензора \mathbf{A}^{-1} , обратного тензору \mathbf{A} , выполняются тождества

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{E}. \quad (2.12)$$

2.2. Изотропные тензоры

Тензор называется изотропным, если его координаты не изменяются при повороте базиса. Изотропные тензоры образуют линейное пространство: линейная комбинация изотропных тензоров также является изотропным тензором. Для тензоров второго и третьего ранга это пространство одномерно, четвертого ранга — трехмерно. Для описания кристаллических

решеток потребуются изотропные тензоры второго и четвертого ранга, которые ниже будут рассмотрены подробнее.

Изотропный тензор второго ранга называют шаровым, его общее представление

$$\mathbf{A} = \lambda \mathbf{E}, \quad \lambda = \frac{\text{tr } \mathbf{A}}{d}, \quad (2.13)$$

где \mathbf{E} — единичный тензор; $\text{tr } \mathbf{A} = \mathbf{E} \cdot \cdot \mathbf{A}$ — след тензора; d — размерность пространства.

С использованием ортонормированного базиса \mathbf{e}_k единичный тензор может быть записан в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^d \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k, \quad d = 1, 2, 3. \quad (2.14)$$

Здесь и далее используется суммирование по повторяющемуся латинскому индексу от 1 до d . Если тензор \mathbf{A} не шаровой, то он может быть представлен в виде разложения на шаровую часть $\mathcal{S}(\mathbf{A})$ и девиатор $\text{dev } \mathbf{A}$:

$$\mathbf{A} = \mathcal{S}(\mathbf{A}) + \text{dev } \mathbf{A}; \quad \mathcal{S}(\mathbf{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\text{tr } \mathbf{A}}{d} \mathbf{E}, \quad \text{dev } \mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A} - \mathcal{S}(\mathbf{A}). \quad (2.15)$$

Очевидно, следы тензора и его шаровой части совпадают.

Произвольный изотропный тензор четвертого ранга может быть представлен в виде [25]

$${}^4\mathbf{C} = \lambda_1 \mathbf{J}_1 + \lambda_2 \mathbf{J}_2 + \lambda_3 \mathbf{J}_3, \quad (2.16)$$

где \mathbf{J}_1 , \mathbf{J}_2 и \mathbf{J}_3 — базисные изотропные тензоры четвертого ранга, имеющие вид

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, \quad \mathbf{J}_2 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k, \quad \mathbf{J}_3 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n. \quad (2.17)$$

Отметим, что $\mathbf{J}_1 = \mathbf{E}\mathbf{E}$. Коэффициенты λ_k могут быть вычислены через свертки тензоров \mathbf{J}_k с тензором ${}^4\mathbf{C}$ (подробнее см. [13]). Математический смысл тензоров \mathbf{J}_k , применительно к умножению на тензор второго ранга $\boldsymbol{\varepsilon}$, следующий:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &= d\mathbf{J}_S, & \mathbf{J}_S \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}), \\ \mathbf{J}_2 &= \mathbf{J}_E, & \mathbf{J}_E \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} &= \boldsymbol{\varepsilon}, \\ \mathbf{J}_3 &= \mathbf{J}_T, & \mathbf{J}_T \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} &= \boldsymbol{\varepsilon}^T. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Таким образом, в результате умножения тензоров \mathbf{J}_S , \mathbf{J}_E , \mathbf{J}_T на тензор $\boldsymbol{\varepsilon}$ получаются, соответственно, его шаровая часть $\mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon})$, сам тензор $\boldsymbol{\varepsilon}$ и транспонированный тензор $\boldsymbol{\varepsilon}^T$.

Ограничимся теперь рассмотрением изотропных тензоров четвертого ранга, обладающих симметрией тензора жесткости в безмоментной теории упругости. Такие тензоры называют симметричными аполярными (подробнее см. гл. 3). Рассматриваемые тензоры также образуют линейное пространство, однако оно двухмерно — в качестве базисных тензоров могут быть выбраны тензоры

$$\mathbf{J}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, \quad \mathbf{J}_{23} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_3 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n, \quad (2.19)$$

тогда представление (2.16) примет вид

$${}^4\mathbf{C} = \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}, \quad (2.20)$$

где коэффициенты λ , μ принято называть коэффициентами Ляме.

Математический смысл тензоров (2.19), применительно к умножению на *симметричный* тензор второго ранга $\boldsymbol{\varepsilon}$, следующий:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &= d \mathbf{J}_S, & \mathbf{J}_S \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}), \\ \mathbf{J}_{23} &= 2 \mathbf{J}_e, & \mathbf{J}_e \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} &= \boldsymbol{\varepsilon}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Здесь в результате умножения тензоров \mathbf{J}_S , \mathbf{J}_e на тензор $\boldsymbol{\varepsilon}$ получается, соответственно, его шаровая часть $\mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon})$ и сам тензор $\boldsymbol{\varepsilon}$. Удобно ввести также тензор четвертого \mathbf{J}_d , дающий в результате умножения на симметричный тензор второго ранга $\boldsymbol{\varepsilon}$ его девиатор $\text{dev } \boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\mathbf{J}_d \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{J}_e - \mathbf{J}_S = \frac{1}{2} \mathbf{J}_{23} - \frac{1}{d} \mathbf{J}_1, \quad \mathbf{J}_d \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \text{dev } \boldsymbol{\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\varepsilon} - \mathcal{S}(\boldsymbol{\varepsilon}). \quad (2.22)$$

Если тензор симметричен относительно любой перестановки входящих в него векторов, то он называется абсолютно симметричным тензором. Изотропный абсолютно симметричный тензор может быть представлен в виде

$${}^4\mathbf{C} = \lambda \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_3. \quad (2.23)$$

Коэффициент λ может быть вычислен по формуле

$$\lambda = \frac{1}{d(d+2)} \mathbf{E} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \mathbf{E}. \quad (2.24)$$

2.3. Координационный тензор

Выберем некоторый атом решетки, назовем его исходным. Рассмотрим орты (единичные векторы) \mathbf{n}_α , задающие направление от исходного атома к его ближайшим соседям. Будем полагать, что выполняется тождество

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha = 0. \quad (2.25)$$

Тензор $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha$ для всех рассматриваемых решеток является шаровым:

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = \frac{M}{d} \mathbf{E}, \quad (2.26)$$

где M — координационное число (число ближайших соседей исходного атома), d — размерность пространства.

Тензор четвертого ранга $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha$ будем называть координационным тензором. Для рассматриваемых решеток он может быть представлен в виде

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = M_{\kappa} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + M_{\mu} (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_3), \quad (2.27)$$

где \mathbf{e}_k — орты осей кубической подрешетки (для кристаллов кубической симметрии) или орты произвольного ортонормированного базиса (при изотропии упругих свойств); M_{κ} и M_{μ} — безразмерные коэффициенты, характеризующие кристаллическую решетку.

Из коэффициентов M_{κ} и M_{μ} только один является новым независимым параметром, так как для них выполняется тождество

$$M_{\kappa} + (d + 2)M_{\mu} = \frac{1}{d} M, \quad (2.28)$$

где M — координационное число.

Тождество (2.28) получается в результате свертки уравнения (2.27) с тензором $\mathbf{J}_1 = \mathbf{E}\mathbf{E}$.

Введем безразмерный параметр

$$\eta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2M_{\mu}}{M_{\kappa} + 2M_{\mu}}. \quad (2.29)$$

Как будет показано далее, параметр η является параметром анизотропии координационного тензора, а также тензора жесткости рассматриваемого кристалла при чисто силовом взаимодействии. Для изотропного

Таблица 2.1: Безразмерные параметры координационного тензора для различных кристаллических решеток.

Решетка	η	M_κ	M_μ
Треугольная	1	0	3/4
Ромбическая	∞	-2	1
Квадратная	0	2	0
Графена	1	0	3/8
Кубическая	0	2	0
ОЦК	∞	-16/9	8/9
ГЦК	2	-1	1
Алмаза	∞	-8/9	4/9

тензора $\eta = 1$. Подставляя (2.29) в (2.28), получаем

$$M_\kappa = \frac{2M}{d} \frac{1 - \eta}{d\eta + 2}, \quad M_\mu = \frac{M}{d} \frac{\eta}{d\eta + 2}. \quad (2.30)$$

Значения безразмерных параметров η , M_κ , M_μ для различных кристаллических решеток приведены в табл. 2.3.

Глава 3

Тензор жесткости

Приводится информация о тензоре жесткости анизотропных материалов (преимущественно с кубической симметрией), а также о коэффициентах, характеризующих упругие свойства анизотропных материалов.

3.1. Общие формулы

Энергия деформирования W линейно-упругого материала может быть представлена в виде

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (3.1)$$

где тензор \mathbf{C} называют тензором жесткости материала.

Тензор жесткости \mathbf{C} устанавливает связь между тензором напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и тензором деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{dW}{d\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3.2)$$

В ортонормированном базисе \mathbf{e}_k тензор жесткости может быть представлен формулой

$$\mathbf{C} = C_{knpq} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_p \mathbf{e}_q, \quad (3.3)$$

где C_{knpq} — коэффициенты жесткости (координаты тензора жесткости в ортонормированном базисе).

Здесь и далее используется суммирование по повторяющемуся латинскому индексу от 1 до d , где d — размерность пространства.

Коэффициенты жесткости симметричны относительно следующих перестановок индексов:

$$C_{knpr} = C_{pqkn}, \quad C_{knpr} = C_{nkpr}, \quad C_{knpr} = C_{knqr}, \quad (3.4)$$

что следует из симметрии формулы (3.1) для энергии деформирования и симметричности тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ в классической (безмоментной) теории упругости. Тензоры, коэффициенты которых удовлетворяют формулам (3.4), называют симметричными (первая перестановка) аполярными (вторая и третья перестановки). Данные симметрии позволяют воспользоваться упрощенной записью, при которой парам индексов ставится в соответствие один индекс. Так, координаты тензора деформации можно записать в виде

$$\varepsilon_1 \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{11}, \quad \varepsilon_2 \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{22}, \quad \varepsilon_3 \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{33}, \quad \varepsilon_4 \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{12}, \quad \varepsilon_5 \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{23}, \quad \varepsilon_6 \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{31}. \quad (3.5)$$

Тогда тензору жесткости можно поставить в соответствие симметричную матрицу коэффициентов жесткости. В двухмерном случае это матрица 3×3 :

$$\mathbf{C} \sim \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{14} \\ C_{12} & C_{22} & C_{24} \\ C_{14} & C_{24} & C_{44} \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1112} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2212} \\ C_{1112} & C_{2212} & C_{1212} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

В трехмерном случае тензору жесткости соответствует матрица 6×6 :

$$\mathbf{C} \sim \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1131} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2231} \\ C_{1133} & C_{2233} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3331} \\ C_{1112} & C_{2212} & C_{3312} & C_{1212} & C_{1223} & C_{1231} \\ C_{1123} & C_{2223} & C_{3323} & C_{1223} & C_{2323} & C_{2331} \\ C_{1131} & C_{2231} & C_{3331} & C_{1231} & C_{2331} & C_{3131} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Из этих представлений видно, что число независимых коэффициентов жесткости равно 6 в двухмерном и 21 в трехмерном случае.

Модуль объемного сжатия K определяется как коэффициент пропорциональности между давлением p и объемной деформацией ϑ :

$$p = -K\vartheta; \quad p \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{d} \operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}, \quad \vartheta \stackrel{\text{def}}{=} \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3.8)$$

Связь модуля объемного сжатия с тензором жесткости дается формулой

$$K = \frac{1}{d^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{d^2} C_{kknn}, \quad (3.9)$$

что дает в двухмерном случае выражение

$$K = \frac{1}{4} (C_{11} + C_{22} + 2C_{12}), \quad (3.10)$$

а в трехмерном —

$$K = \frac{1}{9} (C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{23} + 2C_{31}). \quad (3.11)$$

3.2. Ортотропный материал с кубической симметрией

Ортотропным называется материал, имеющий три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии. Выберем направление векторов \mathbf{e}_k так, чтобы они были перпендикулярны плоскостям симметрии. Кроме того, ограничимся рассмотрением ортотропных материалов с кубической симметрией, т. е. с одинаковыми свойствами в направлении осей \mathbf{e}_k . Для простоты будем называть эти материалы ортотропными, при этом подразумевая, что рассматривается частный случай ортотропного материала.

Матрица коэффициентов жесткости рассматриваемого материала в двухмерном случае имеет вид

$$\mathbf{C} \sim \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 \\ C_{12} & C_{11} & 0 \\ 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & 0 \\ 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

а в трехмерном случае —

$$\mathbf{C} \sim \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Таким образом, имеется три независимых коэффициента жесткости как в двумерном, так и в трехмерном случае.

Запишем ортогруппный тензор в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{C} = & C_{11} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + C_{12} (\mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n - \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k) + \\ & + C_{44} (\mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n - 2\mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k). \end{aligned} \quad (3.14)$$

После преобразований получаем

$$\mathbf{C} = (C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + C_{12} \mathbf{J}_1 + C_{44} \mathbf{J}_{23}, \quad (3.15)$$

где \mathbf{J}_1 , \mathbf{J}_{23} — изотропные тензоры, определяемые формулами (2.19).

Тензор $\mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k$, напротив, анизотропен, поэтому из формулы (3.15) следует, что ортогруппный материал будет изотропным при

$$C_{11} = C_{12} + 2C_{44} \iff C_{1111} = C_{1122} + 2C_{1212}. \quad (3.16)$$

С другой стороны, поскольку изотропный материал всегда ортогруппен, то соотношение (3.15) вместе с (3.16) должно выполняться для любого изотропного материала.

Формулу (3.15) для тензора жесткости можно записать в виде

$$\mathbf{C} = \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}, \quad (3.17)$$

где κ , λ и μ — обобщенные коэффициенты Ляме, связанные с коэффициентами жесткости соотношениями

$$C_{11} = \kappa + \lambda + 2\mu, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{44} = \mu. \quad (3.18)$$

Условие изотропии в обобщенных коэффициентах Ляме записывается в виде: $\kappa = 0$.

3.3. Модули упругости ортотропного материала

Модуль объемного сжатия (3.9) ортотропного материала может быть записан в виде

$$K = \frac{C_{11} + (d-1)C_{12}}{d} = \frac{\kappa + d\lambda + 2\mu}{d}. \quad (3.19)$$

Модуль сдвига G ортотропного материала определяется как половина коэффициента пропорциональности между касательным напряжением τ_{12} и деформацией сдвига ε_{12} :

$$\tau_{12} = 2G\varepsilon_{12} \quad \Rightarrow \quad G = C_{1212} = C_{44} = \mu. \quad (3.20)$$

Возьмем тензоры деформации и напряжений в виде

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_e \mathbf{e}\mathbf{e} + \varepsilon_{\perp} \tilde{\mathbf{E}}, \quad \boldsymbol{\tau} = \tau_e \mathbf{e}\mathbf{e} + \tau_{\perp} \tilde{\mathbf{E}}, \quad \tilde{\mathbf{E}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E} - \mathbf{e}\mathbf{e}, \quad (3.21)$$

где \mathbf{e} — один из ортов ортотропии; индексом e обозначены координаты тензоров в направлении \mathbf{e} , индексом \perp — координаты в ортогональном направлении.

Тогда коэффициент Пуассона и модуль Юнга определяются выражениями

$$\nu \stackrel{\text{def}}{=} - \left. \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_e} \right|_{\tau_{\perp}=0}, \quad E \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\tau_e}{\varepsilon_e} \right|_{\tau_{\perp}=0}. \quad (3.22)$$

Используя соотношения упругости в виде $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$, получим

$$\nu = \frac{\mathbf{e}\mathbf{e} \cdot \mathbf{C} \cdot \tilde{\mathbf{E}}}{\tilde{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{C} \cdot \tilde{\mathbf{E}}}, \quad E = \frac{(\mathbf{e}\mathbf{e} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{e}\mathbf{e}) (\tilde{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{C} \cdot \tilde{\mathbf{E}}) - (\mathbf{e}\mathbf{e} \cdot \mathbf{C} \cdot \tilde{\mathbf{E}})^2}{\tilde{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{C} \cdot \tilde{\mathbf{E}}}. \quad (3.23)$$

Вычисление с использованием формул (2.21) и (3.17) дает

$$\nu = \frac{\lambda}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}, \quad E = \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + d\lambda + 2\mu)}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}. \quad (3.24)$$

Эти же формулы (3.24), выраженные через коэффициенты жесткости:

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + (d-2)C_{12}}, \quad E = (C_{11} - C_{12}) \frac{C_{11} + (d-1)C_{12}}{C_{11} + (d-2)C_{12}}. \quad (3.25)$$

Особенно простой вид эти формулы приобретают в двухмерном случае ($d = 2$):

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}}, \quad E = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}}. \quad (3.26)$$

В трехмерном случае ($d = 3$) формулы принимают вид

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}, \quad E = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad (3.27)$$

Отметим также следующее тождество, не зависящее от размерности пространства:

$$E = (\kappa + 2\mu)(1 + \nu) = (C_{11} - C_{12})(1 + \nu). \quad (3.28)$$

Подведем итоги. Для ортотропного материала деформацию растяжения-сжатия характеризуют модули K , C_{11} , $C_{12} = \lambda$, $\kappa + 2\mu$, E , ν . Из перечисленных модулей только два являются независимыми: если выбрать в качестве основных любые два модуля, то все остальные могут быть выражены через них. Полученные выше формулы демонстрируют такое представление, когда в качестве основных модулей выбраны пары λ , $\kappa + 2\mu$ или C_{11} , C_{12} . Отношение же любых двух из перечисленных модулей может быть выражено через коэффициент Пуассона, в частности запишем отношения рассматриваемых модулей к модулю объемного сжатия

$$\begin{aligned} \frac{C_{11}}{K} &= d \frac{1 - (d-2)\nu}{1 + \nu}, & \frac{C_{12}}{K} &= \frac{\lambda}{K} = \frac{d\nu}{1 + \nu}, \\ \frac{\kappa + 2\mu}{K} &= d \frac{1 - (d-1)\nu}{1 + \nu}, & \frac{E}{K} &= d \left(1 - (d-1)\nu\right). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Используя формулы (3.29), несложно получить любые отношения размерных модулей, например,

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} = \frac{1}{\nu} + 2 - d, \quad \frac{C_{11}}{E} = \frac{1}{1 + \nu} \frac{1 - (d-2)\nu}{1 - (d-1)\nu}. \quad (3.30)$$

Кроме того, ортотропный материал имеет еще модуль сдвига $G = \mu = C_{44}$, независимый от перечисленных модулей. Коэффициент κ также связан со сдвиговой деформацией. Для ортотропного материала можно ввести безразмерный коэффициент, независимый от коэффициента

Пуассона, в качестве которого обычно выбирают параметр анизотропии η :

$$\eta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu}. \quad (3.31)$$

Для изотропного материала параметр анизотропии равен единице. Отношения сдвиговых модулей к коэффициенту объемного сжатия, в отличие от рассмотренных выше, выражаются через два безразмерных параметра — коэффициент Пуассона и параметр анизотропии:

$$\frac{C_{44}}{K} = \frac{G}{K} = \frac{\mu}{K} = \frac{d\eta}{2} \frac{1 - (d-1)\nu}{1 + \nu}, \quad \frac{\kappa}{K} = 2 \frac{1 - \eta}{\eta} \frac{\mu}{K}. \quad (3.32)$$

3.4. Изотропный тензор жесткости

Представим изотропный тензор жесткости в виде линейной комбинации изотропных тензоров \mathbf{J}_1 и \mathbf{J}_{23} :

$$\mathbf{C} = \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}, \quad (3.33)$$

тогда соотношения упругости для изотропного материала могут быть записаны в виде

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \lambda \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3.34)$$

Коэффициенты λ , μ называют коэффициентами Ляме.

Выразим тензор \mathbf{J}_{23} через тензор \mathbf{J}_1 и девиаторный тензор \mathbf{J}_d :

$$\mathbf{J}_{23} = \frac{2}{d} \mathbf{J}_1 + 2\mathbf{J}_d. \quad (3.35)$$

Подстановка этого выражения в (3.33) дает

$$\mathbf{C} = K \mathbf{J}_1 + 2\mu \mathbf{J}_d \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\tau} = K \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E} + 2\mu \operatorname{dev} \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (3.36)$$

где K — модуль объемного сжатия, связанный с коэффициентами Ляме формулой

$$K = \lambda + \frac{2}{d} \mu. \quad (3.37)$$

Как и для ортотропного материала, коэффициент μ тождественно равен модулю сдвига G .

Коэффициенты жесткости связаны с коэффициентами Ляме соотношениями

$$C_{11} = \lambda + 2\mu, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{44} = \mu. \quad (3.38)$$

Из соотношений (3.38) следует связь коэффициентов жесткости для изотропного материала:

$$C_{11} = C_{12} + 2C_{44} \iff \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = C_{44}. \quad (3.39)$$

3.5. Модули упругости изотропного материала

Изотропный материал является частным случаем ортотропного материала при $\kappa = 0$, что позволяет из формул (3.24) получить следующие представления для коэффициента Пуассона и модуля Юнга через коэффициенты Ляме:

$$\nu = \frac{\lambda}{(d-1)\lambda + 2\mu}, \quad E = \frac{2\mu(d\lambda + 2\mu)}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}. \quad (3.40)$$

Представление (3.25) для ν и E через коэффициенты жесткости остается без изменений. Отметим также следующее тождество, не зависящее от размерности пространства:

$$E = 2\mu(1 + \nu) = (C_{11} - C_{12})(1 + \nu). \quad (3.41)$$

Изотропный тензор жесткости может иметь только одну независимую безразмерную характеристику, в качестве которой обычно выступает коэффициент Пуассона. Отношение любых размерных модулей может быть выражено через коэффициент Пуассона; в частности, следуя (3.29), выпишем отношения рассматриваемых модулей к модулю объемного сжатия:

$$\begin{aligned} \frac{C_{11}}{K} &= d \frac{1 - (d-2)\nu}{1 + \nu}, & \frac{C_{12}}{K} &= \frac{\lambda}{K} = \frac{d\nu}{1 + \nu}, \\ \frac{C_{44}}{K} &= \frac{\mu}{K} = \frac{d}{2} \frac{1 - (d-1)\nu}{1 + \nu}, & \frac{E}{K} &= d \left(1 - (d-1)\nu \right). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Используя формулы (3.29), несложно получить любые отношения размерных модулей, например,

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} = \frac{1}{\nu} + 2 - d, \quad \frac{C_{11}}{E} = \frac{1}{1 + \nu} \frac{1 - (d - 2)\nu}{1 - (d - 1)\nu}. \quad (3.43)$$

Часть II

Одноатомные кристаллы

Глава 4

Силовое взаимодействие, тензор жесткости

Выводится тензор жесткости простой кристаллической решетки при силовом взаимодействии с произвольным числом координационных сфер. В качестве примера рассматривается треугольная решетка.

4.1. Вывод уравнений

Рассмотрим простую кристаллическую решетку. Выберем один из атомов и назовем его отсчетным. Пронумеруем атомы, с которыми взаимодействует отсчетный, индексами α ; расстояния до них обозначим a_α и A_α для недеформированного и деформированного состояний кристалла, соответственно. Тогда энергия, приходящаяся на элементарную ячейку решетки, может быть представлена в виде

$$W \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha}, \quad (4.1)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки недеформированной решетки; Π_{α} — потенциал взаимодействия отсчетного атома с атомом α .

Множитель $1/2$ в формуле (4.1) возник в связи с тем, что потенциал Π_{α} описывает взаимодействие двух атомов. Будем использовать два представления для Π_{α} — в виде функции от A_{α} и функции от A_{α}^2 :

$$\Pi_{\alpha} = \Pi(A_{\alpha}) = \tilde{\Pi}(A_{\alpha}^2). \quad (4.2)$$

Производные по аргументу от этих функций связаны соотношениями

$$\tilde{\Pi}'(a^2) = \frac{1}{2a}\Pi'(a), \quad \tilde{\Pi}''(a^2) = \frac{1}{4a^2}\Pi''(a) - \frac{1}{4a^3}\Pi'(a). \quad (4.3)$$

Предположим, что на кристалл наложена однородная деформация $\boldsymbol{\varepsilon}$. Тогда квадрат расстояния между атомами может быть записан в виде

$$A_\alpha^2 = a_\alpha^2 (1 + 2\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon}), \quad (4.4)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор деформации; \mathbf{n}_α — орт, задающий направление от отсчетного атома к атому α в недеформированной решетке. Формула (4.4) является точной, если в качестве $\boldsymbol{\varepsilon}$ взять тензор конечной деформации Коши—Грина [25]. При слабом деформировании тензор Коши—Грина переходит в тензор малой деформации, используемый в линейной теории сплошной среды. Считая $\boldsymbol{\varepsilon}$ малым параметром, разложим потенциал Π_α в ряд, сохраняя слагаемые до второго порядка малости включительно:

$$\tilde{\Pi}(A_\alpha^2) = \tilde{\Pi}(a_\alpha^2) + 2a_\alpha^2 \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot 2a_\alpha^4 \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (4.5)$$

Подставляя формулу (4.5) в выражение (4.1) для энергии деформирования, получим

$$W = W_0 + \boldsymbol{\tau}_0 \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (4.6)$$

$$\boldsymbol{\tau}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V_0} \sum_\alpha a_\alpha^2 \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad \mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \sum_\alpha a_\alpha^4 \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha.$$

Здесь W_0 — энергия равновесного состояния (без ущерба для общности может быть принята нулевой); $\boldsymbol{\tau}_0$ — тензор напряжений равновесного состояния (обращение его в нуль является условием равновесия); \mathbf{C} — тензор жесткости решетки.

Используя формулы (4.3), получаем условие равновесия решетки

$$\boldsymbol{\tau}_0 = \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha a_\alpha \Pi'(a_\alpha) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = 0 \quad (4.7)$$

и формулу для тензора жесткости

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha \left(a_\alpha^2 \Pi''(a_\alpha) - a_\alpha \Pi'(a_\alpha) \right) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha. \quad (4.8)$$

Отметим, что полученный тензор жесткости является абсолютно симметричным, то есть он не меняется при любой перестановке входящих в него векторов, а его координаты не меняются при любой перестановке индексов. Из этого следуют соотношения Коши

$$C_{1122} = C_{1212} \iff C_{12} = C_{44}, \quad (4.9)$$

не выполняющиеся для произвольного тензора жесткости.

4.2. Треугольная решетка

В качестве примера простой кристаллической решетки рассмотрим двухмерную треугольную решетку. Для нее тензоры $\boldsymbol{\tau}_0$ и \mathbf{C} изотропны, что позволяет их представить в виде

$$\boldsymbol{\tau}_0 = \sigma_0 \mathbf{E}, \quad \sigma_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_0 = \frac{1}{4V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha} \Pi'(a_{\alpha}); \quad (4.10)$$

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2} K \mathbf{J}, \quad K \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{4} \mathbf{E} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{8V_0} \sum_{\alpha} \left(a_{\alpha}^2 \Pi''(a_{\alpha}) - a_{\alpha} \Pi'(a_{\alpha}) \right); \quad (4.11)$$

$$\mathbf{J} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_3, \quad V_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a_e^2. \quad (4.12)$$

Здесь \mathbf{J}_k — базисные изотропные тензоры четвертого ранга (2.17); a_e — расстояние между ближайшими соседями в равновесной решетке.

Условие равновесия (4.7) принимает вид

$$\sigma_0 = 0 \iff \sum_{\alpha} a_{\alpha} \Pi'(a_{\alpha}) = 0. \quad (4.13)$$

С учетом соотношения (4.13) выражение (4.11) для тензора жесткости запишем в виде

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2} K \mathbf{J}, \quad K = \frac{\sqrt{3}}{12a_e^2} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 \Pi''(a_{\alpha}). \quad (4.14)$$

Коэффициент K называют модулем объемного сжатия.

Удобно от суммирования по α перейти к суммированию по координационным сферам, что позволяет записать условие равновесия (4.13) в виде

$$\sum_{k=1}^n M_k \rho_k \Pi'(\rho_k a_e) = 0, \quad (4.15)$$

где k — номер координационной сферы; M_k — число лежащих на ней атомов (координационное число); n — число учитываемых координационных сфер; ρ_k и R_k — относительный и абсолютный радиус координационной сферы, $\rho_k \stackrel{\text{def}}{=} R_k/a_e$. Уравнение (4.15) служит для определения одной неизвестной a_e . Отметим, что, согласно определению, a_e равно радиусу первой координационной сферы R_1 . Выражение (4.11) для модуля объемного сжатия при суммировании по координационным сферам принимает вид

$$K = \frac{\sqrt{3}}{12} \sum_{k=1}^n M_k \rho_k^2 c_k, \quad c_k \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(\rho_k a_e), \quad (4.16)$$

где c_k — жесткость соответствующей связи.

При взаимодействии только ближайших соседей получаем

$$K = \frac{\sqrt{3}}{2} c, \quad c \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a^2), \quad (4.17)$$

где c — жесткость связи; a — равновесное расстояние между атомами: $\Pi'(a) = 0$.

После нахождения модуля объемного сжатия K остальные характеристики упругости находим по формулам

$$\lambda = \mu = G = C_{12} = C_{44} = \frac{1}{2} K, \quad C_{11} = \frac{3}{2} K, \quad E = \frac{4}{3} K, \quad \nu = \frac{1}{3}. \quad (4.18)$$

Здесь λ и μ — коэффициенты Ляме; G — модуль сдвига; C_{kn} — коэффициенты жесткости; E — модуль Юнга; ν — коэффициент Пуассона.

Глава 5

Силовое взаимодействие, различные решетки

Анализируется тензор жесткости простых кристаллических решеток при силовом взаимодействии. Рассматриваются треугольная, квадратная, кубическая, ОЦК и ГЦК решетки. Характеристики упругости выводятся для взаимодействия с одной и двумя координационными сферами.

5.1. Основные понятия

Выберем некоторый атом простой кристаллической решетки и назовем его отсчетным. Пронумеруем атомы, с которыми взаимодействует отсчетный, индексами α . Орт, задающий направление от отсчетного атома к атому α , обозначим \mathbf{n}_α . Тогда тензор жесткости кристаллической решетки может быть записан в виде

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} c_{\alpha} a_{\alpha}^2 \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}, \quad (5.1)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки; a_{α} и c_{α} — длина и жесткость связи α .

Формула (5.1) справедлива при отсутствии усилий в связях (в равновесном состоянии кристалла связи считаются ненапряженными). В противном случае жесткость c_{α} должна быть заменена приведенной жесткостью \tilde{c}_{α} , определяемой формулой

$$\tilde{c}_{\alpha} = c_{\alpha} + \frac{1}{a_{\alpha}} f_{\alpha}, \quad (5.2)$$

где c_α — жесткость связи; f_α — усилие в связи (сила, действующая при равновесном состоянии решетки).

Если взаимодействие между атомами определяется потенциалом Π , то

$$c_\alpha = \Pi''(a_\alpha), \quad f_\alpha = -\Pi'(a_\alpha). \quad (5.3)$$

Далее для простоты будем полагать $f_\alpha = 0$, однако все полученные ниже формулы могут быть распространены на случай $f_\alpha \neq 0$ заменой жесткостей связей приведенными жесткостями.

Для вычисления тензора жесткости удобно перейти в формуле (5.1) от суммирования по α к суммированию по координационным сферам, тогда формула (5.1) примет вид

$$\mathbf{C} = \sum_{s=1}^S \mathbf{C}_s, \quad \mathbf{C}_s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c_s a_s^2}{2V_0} \sum_{\alpha \in \Omega_s} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad (5.4)$$

где s и S — номер и число координационных сфер; a_s — радиус координационной сферы; c_s жесткость связи с атомами, лежащими на координационной сфере; Ω_s — множество индексов атомов, принадлежащих координационной сфере s ; тензор \mathbf{C}_s — тензор жесткости, соответствующий взаимодействию с s -й координационной сферой.

5.2. Одна координационная сфера

При учете взаимодействия только с атомами первой координационной сферы формула для тензора жесткости принимает вид

$$\mathbf{C} = \frac{ca^2}{2V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad (5.5)$$

где c — жесткость связи; a — длина связи; V_0 — объем элементарной ячейки.

Для решеток, упругие свойства которых изотропны или обладают кубической симметрией, справедлива формула (2.27):

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = M_\kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + M_\mu (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}), \quad (5.6)$$

где \mathbf{e}_k — орты ортонормированного базиса, направленные или вдоль осей кубической симметрии, или при изотропии, произвольным образом; \mathbf{J}_1 и \mathbf{J}_{23} — изотропные тензоры четвертого ранга (2.19); M_κ и M_μ — безразмерные коэффициенты, определяемые формулами

$$M_\kappa = \frac{2M}{d} \frac{1 - \eta}{d\eta + 2}, \quad M_\mu = \frac{M}{d} \frac{\eta}{d\eta + 2}, \quad (5.7)$$

где M — координационное число; d — размерность пространства; η — параметр анизотропии.

Подставляя представление (5.6) в (5.5), получаем

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C} &= \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}, \\ \kappa &= M_\kappa \frac{ca^2}{2V_0}, \quad \lambda = \mu = M_\mu \frac{ca^2}{2V_0}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

где κ , λ , μ — обобщенные коэффициенты Ляме.

Далее все модули тензора жесткости могут быть вычислены по формулам

$$\begin{aligned} C_{11} &= \kappa + 3\mu, \quad C_{12} = C_{44} = \lambda = \mu; \quad K = \frac{\kappa + (d+2)\mu}{d}, \\ E &= \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + (d+2)\mu)}{\kappa + (d+1)\mu}, \quad \nu = \frac{\mu}{\kappa + (d+1)\mu}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Удобно вычислить одну размерную характеристику, а остальные — определять по отношению к ней. В качестве такой характеристики выберем коэффициент объемного сжатия:

$$K = \frac{\kappa + (d+2)\mu}{d} = \frac{Mca^2}{2V_0d^2}. \quad (5.10)$$

Тогда для остальных характеристик

$$\begin{aligned} C_{11} &= d \frac{M_\kappa + 3M_\mu}{M_\kappa + (d+2)M_\mu} K, \quad C_{12} = \frac{dM_\mu}{M_\kappa + (d+2)M_\mu} K; \\ E &= d \frac{M_\kappa + 2M_\mu}{M_\kappa + (d+1)M_\mu} K, \quad \nu = \frac{M_\mu}{M_\kappa + (d+1)M_\mu}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Безразмерные параметры различных решеток приведены в табл. 5.1, а вычисленные по ним характеристики упругости — в табл. 5.2. Для удоб-

Таблица 5.1: Безразмерные параметры кристаллических решеток.

Решетка	d	M	η	M_κ	M_μ	$V_0 a^{-d}$
Треугольная	2	6	1	0	3/4	$\sqrt{3}/2$
Ромбическая	2	4	∞	-2	1	1
Квадратная	2	4	0	2	0	1
Кубическая	3	6	0	2	0	1
ОЦК	3	8	∞	-16/9	8/9	$4\sqrt{3}/9$
ГЦК	3	12	2	-1	1	$\sqrt{2}/2$

ства сравнения различных решеток в табл. 5.3 приведены числовые значения ряда безразмерных характеристик.

Таблица 5.2: Характеристики упругости кристаллических решеток.

Решетка	K	C_{11}	C_{12}	E	ν
Треугольная	$\frac{\sqrt{3}}{2}c$	$\frac{3\sqrt{3}}{4}c$	$\frac{\sqrt{3}}{4}c$	$\frac{2\sqrt{3}}{3}c$	$\frac{1}{3}$
Ромбическая	$\frac{1}{2}c$	$\frac{1}{2}c$	$\frac{1}{2}c$	0	1
Квадратная	$\frac{1}{2}c$	c	0	c	0
Кубическая	$\frac{1}{3}\frac{c}{a}$	$\frac{c}{a}$	0	$\frac{c}{a}$	0
ОЦК	$\frac{\sqrt{3}}{3}\frac{c}{a}$	$\frac{\sqrt{3}}{3}\frac{c}{a}$	$\frac{\sqrt{3}}{3}\frac{c}{a}$	0	$\frac{1}{2}$
ГЦК	$\frac{2\sqrt{2}}{3}\frac{c}{a}$	$\sqrt{2}\frac{c}{a}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{c}{a}$	$\frac{2\sqrt{2}}{3}\frac{c}{a}$	$\frac{1}{3}$

Под ромбической решеткой (см. табл. 5.2–5.3) понимается квадратная решетка, повернутая на $\pi/4$. Иными словами, для квадратной решетки орты \mathbf{e}_k направлены вдоль сторон квадратов, для ромбической — вдоль диагоналей. Отметим, что значения параметра анизотропии η для квадратной и ромбической решеток различаются, следовательно, параметр η не является инвариантной характеристикой решетки. Если осреднить тензор жесткости по всем направлениям (вычислить его изотропную часть), то полученный таким образом тензор жесткости будет иметь тот же коэффициент объемного сжатия, что и исходный, а коэффициент Пуассона у него будет равен $1/(d+1)$, то есть $1/3$ для двухмерного и $1/4$ для трехмерного случая.

Таблица 5.3: Числовые значения безразмерных характеристик кристаллических решеток.

Тип решетки	$V_0 a^{-d}$	$K/(ca^{2-d})$	C_{11}/K	C_{12}/K	E/K	ν
Треугольная	0.87	0.87	1.50	0.50	1.33	0.33
Ромбическая	1.00	0.50	1.00	1.00	0.00	1.00
Квадратная	1.00	0.50	2.00	0.00	2.00	0.00
Кубическая	1.00	0.33	3.00	0.00	3.00	0.00
ОЦК	0.77	0.58	1.00	1.00	0.00	0.50
ГЦК	0.71	0.94	1.50	0.75	1.00	0.33

5.3. Две координационные сферы

При учете взаимодействия с атомами первой и второй координационных сфер формула (5.4) для тензора жесткости принимает вид

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_1 + \mathbf{C}_2, \quad \mathbf{C}_s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c_s a_s^2}{2V_0} \sum_{\alpha \in \Omega_s} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha. \quad (5.12)$$

Как и ранее, воспользуемся формулой (5.6), которая в данном случае может быть записана в виде

$$\sum_{\alpha \in \Omega_s} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = M_\kappa^s \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + M_\mu^s (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}), \quad (5.13)$$

где M_κ^s и M_μ^s — безразмерные коэффициенты, определяемые формулами

$$M_\kappa^s = \frac{2M_s}{d} \frac{1 - \eta_s}{d\eta_s + 2}, \quad M_\mu^s = \frac{M_s}{d} \frac{\eta_s}{d\eta_s + 2}, \quad (5.14)$$

где M_s — s -е координационное число; η_s — параметр анизотропии тензора \mathbf{C}_s .

Подставляя представление (5.13) в (5.12), получаем

$${}^4\mathbf{C} = \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23};$$

$$\kappa = \frac{1}{2V_0} (M_\kappa^1 c_1 a_1^2 + M_\kappa^2 c_2 a_2^2), \quad \lambda = \mu = \frac{1}{2V_0} (M_\mu^1 c_1 a_1^2 + M_\mu^2 c_2 a_2^2), \quad (5.15)$$

где κ , λ , μ — обобщенные коэффициенты Ляме.

Таблица 5.4: Типы подрешеток, отвечающих второй координационной сфере.

Основная решетка	Подрешетка	a_2/a_1
Треугольная	Треугольная	$\sqrt{3} \approx 1.73$
Ромбическая	Квадратная	$\sqrt{2} \approx 1.41$
Квадратная	Ромбическая	$\sqrt{2} \approx 1.41$
Кубическая	ГЦК	$\sqrt{2} \approx 1.41$
ОЦК	Кубическая	$\frac{2}{3}\sqrt{3} \approx 1.15$
ГЦК	Кубическая	$\sqrt{2} \approx 1.41$

Таблица 5.5: Характеристики упругости кристаллических решеток

Решетка	K	C_{11}	C_{12}
Треугольная	$\frac{\sqrt{3}}{2}(c_1 + 3c_2)$	$\frac{3\sqrt{3}}{4}(c_1 + 3c_2)$	$\frac{\sqrt{3}}{4}(c_1 + 3c_2)$
Ромбическая	$\frac{1}{2}(c_1 + 2c_2)$	$\frac{1}{2}(c_1 + 4c_2)$	$\frac{1}{2}c_1$
Квадратная	$\frac{1}{2}(c_1 + 2c_2)$	$c_1 + c_2$	c_2
Кубическая	$\frac{1}{3a}(c_1 + 4c_2)$	$\frac{1}{a}(c_1 + 2c_2)$	$\frac{1}{a}c_2$
ОЦК	$\frac{\sqrt{3}}{3a}(c_1 + c_2)$	$\frac{\sqrt{3}}{3a}(c_1 + 3c_2)$	$\frac{\sqrt{3}}{3a}c_1$
ГЦК	$\frac{2\sqrt{2}}{3a}(c_1 + c_2)$	$\frac{\sqrt{2}}{a}(c_1 + 2c_2)$	$\frac{\sqrt{2}}{2a}c_1$

Далее все модули тензора жесткости могут быть вычислены по формулам (5.9). Однако удобнее пользоваться тем, что все характеристики упругости, кроме E , ν , η , являются линейными функциями жесткостей, а следовательно, они могут быть вычислены с помощью принципа суперпозиции: характеристика равна сумме характеристик, соответствующих каждой координационной сфере. Тогда

$$\begin{aligned} \kappa &= \kappa_1 + \kappa_2, & \mu &= \mu_1 + \mu_2, \\ C_{11} &= C_{11}^1 + C_{11}^2, & C_{12} &= C_{12}^1 + C_{12}^2, & K &= K_1 + K_2. \end{aligned} \quad (5.16)$$

В частности, для коэффициента объемного сжатия получаем

$$K = \frac{1}{2V_0 d^2} \left(M_1 c_1 a_1^2 + M_2 c_2 a_2^2 \right). \quad (5.17)$$

Таким образом, для определения характеристик упругости достаточно вычислить соответствующие характеристики, отвечающие взаимо-

действию с атомами второй координационной сферы. Фактически требуется рассмотреть подрешетку, полученную из данной сохранением атомов второй координационной сферы для всех атомов, начиная с данного. Типы полученных таким образом подрешеток приведены в табл. 5.4.

Использование данного подхода позволяет из табл. 5.2 в ходе несложных преобразований получить формулы для характеристик упругости кристаллических решеток с учетом взаимодействия с двумя координационными сферами (табл. 5.5).

Глава 6

Многочастичное взаимодействие

Выводится тензор жесткости простой кристаллической решетки при учете многочастичного взаимодействия. Учитывается взаимодействие между ближайшими соседями и смежными связями (трехчастичное взаимодействие). В качестве примера рассматриваются треугольная, квадратная и кубическая решетки.

6.1. Исходные уравнения

Рассмотрим простую кристаллическую решетку. Ограничимся взаимодействием ближайших атомов и смежных связей. Энергия, приходящаяся на элементарную ячейку кристалла, может быть представлена в виде

$$W = \frac{1}{2V_0} \left(G_1 \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^2 + G_2 \sum'_{\alpha, \beta} \xi_{\alpha\beta}^2 + G_3 \sum'_{\alpha, \beta} (\varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\beta}) \xi_{\alpha\beta} \right), \quad (6.1)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки; α, β — номера соседних атомов; ε_{α} , ε_{β} — деформации связей; $\xi_{\alpha\beta} = \xi_{\beta\alpha}$ — изменение угла между связями; G_k — постоянные коэффициенты; штрих у знака суммы означает, что суммирование ведется только по смежным связям.

Если взаимодействие осуществляется линейными пружинами жесткости c и угловыми пружинами жесткости γ , то

$$G_1 = \frac{1}{2} ca^2, \quad G_2 = \frac{1}{2} \gamma, \quad G_3 = 0, \quad (6.2)$$

где a — длина линейной пружины.

Предположим, что кристалл подвергнут малой однородной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$, тогда

$$\xi_{\alpha\beta} = \frac{(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta) \cos \varphi - 2\varepsilon_{\alpha\beta}}{\sin \varphi}, \quad \varepsilon_\alpha = \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (6.3)$$

где φ — угол между смежными связями; \mathbf{n}_α , \mathbf{n}_β — единичные векторы, задающие направление связей.

Подстановка формул (6.3) в выражение (6.1) приводит к следующему представлению удельной энергии деформирования:

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (6.4)$$

где \mathbf{C} — макроскопический тензор жесткости, представленный формулой

$$\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \left(H_1 \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + H_2 \sum'_{\alpha, \beta} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta + H_3 \sum'_{\alpha, \beta} (\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta) \right), \quad (6.5)$$

выраженной через постоянные коэффициенты H_k :

$$\begin{aligned} H_1 &= G_1 - 6M_1 G_2 \operatorname{ctg}^2 \varphi - 2M_1 G_3 \operatorname{ctg} \varphi, \\ H_2 &= 2G_2 \operatorname{ctg}^2 \varphi + 2G_3 \operatorname{ctg} \varphi, \quad H_3 = 2G_2 (1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi), \end{aligned} \quad (6.6)$$

где M_1 — число связей, смежных с данной.

При получении (6.5)–(6.6) учтена симметрия тензора жесткости относительно перестановки индексов и использованы тождества

$$\begin{aligned} \sum'_{\alpha, \beta} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha &= M_1 \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \\ \sum'_{\alpha, \beta} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta &= M_1 \cos \varphi \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha. \end{aligned} \quad (6.7)$$

6.2. Преобразование формулы для тензора жесткости

Рассмотрим орты \mathbf{n}_α и \mathbf{n}_β , задающие направление двух смежных связей. Представим \mathbf{n}_β в виде суммы двух слагаемых, параллельных и перпендикулярных \mathbf{n}_α :

$$\mathbf{n}_\beta = \mathbf{n}_\alpha \cos \varphi + \mathbf{n}_\beta^\alpha \sin \varphi, \quad (6.8)$$

где \mathbf{n}_β^α — единичный вектор, перпендикулярный \mathbf{n}_α .

Предположим, что в силу симметрии решетки выполняются тождества

$$\sum_{\beta(\alpha)} \mathbf{n}_\beta^\alpha = 0, \quad \sum_{\beta(\alpha)} \mathbf{n}_\beta^\alpha \mathbf{n}_\beta^\alpha = \frac{M_1}{d-1} (\mathbf{E} - \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha), \quad \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = \frac{M}{d} \mathbf{E}, \quad (6.9)$$

где суммирование по $\beta(\alpha)$ означает суммирование по всем связям, смежным с \mathbf{n}_α ; $d = 2, 3$ — размерность пространства; \mathbf{E} — единичный тензор, соответствующий размерности пространства.

Тождества (6.9) выполняются для следующих простых кристаллических решеток: треугольной, квадратной (ромбической), кубической, ОЦК. Для ГЦК решетки второе из тождеств (6.9) не выполняется — соответствующий тензор не обладает трансверсальной изотропией. Поэтому для ГЦК решетки все полученные ниже формулы неприменимы и ее упругие характеристики должны напрямую рассчитываться по формулам (6.5)–(6.6).

С использованием формул (6.8)–(6.9) получаем

$$\sum_{\beta(\alpha)} \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta = M_1 k(\varphi) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \frac{M_1}{d-1} \mathbf{E}, \quad k(\varphi) \stackrel{\text{def}}{=} \cos^2 \varphi - \frac{\sin^2 \varphi}{d-1}. \quad (6.10)$$

Тогда тензоры, входящие в (6.5), могут быть преобразованы к виду

$$\begin{aligned} \sum'_{\alpha, \beta} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta &= M_1 k(\varphi) \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \frac{M_1 M \sin^2 \varphi}{d(d-1)} \mathbf{J}_1, \\ \sum'_{\alpha, \beta} (\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta) &= 2M_1 k(\varphi) \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \frac{M_1 M \sin^2 \varphi}{d(d-1)} \mathbf{J}_{23}, \end{aligned} \quad (6.11)$$

где $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_{23}$ — изотропные тензоры четвертого ранга (2.19).

Подстановка тождеств (6.11) в формулу (6.5) позволяет представить тензор жесткости кристаллической решетки в виде

$$\mathbf{C} = \kappa' \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \lambda' \mathbf{J}_1 + \mu' \mathbf{J}_{23}, \quad (6.12)$$

где

$$\begin{aligned} \kappa' &= \frac{1}{V_0} \left(H_1 + M_1 k(\varphi)(H_2 + 2H_3) \right), \\ \lambda' &= \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M \sin^2 \varphi}{d(d-1)} H_2, \quad \mu' = \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M \sin^2 \varphi}{d(d-1)} H_3. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Рассмотрим координационный тензор $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}$. Для данных решеток он может быть представлен в виде (2.27)

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = M_{\kappa} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + M_{\mu} (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}), \quad (6.14)$$

где \mathbf{e}_k — орты осей кубической подрешетки для кристаллов кубической симметрии или орты произвольного ортонормированного базиса при изотропии упругих свойств; M_{κ} и M_{μ} — безразмерные коэффициенты, определяемые формулами

$$M_{\kappa} = \frac{2M}{d} \frac{1 - \eta_c}{d\eta_c + 2}, \quad M_{\mu} = \frac{M}{d} \frac{\eta_c}{d\eta_c + 2}, \quad (6.15)$$

где η_c — параметр анизотропии тензора $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}$, совпадающий с параметром анизотропии тензора жесткости рассматриваемого материала при чисто силовом взаимодействии.

Подставляя представление (6.14) в (6.12), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}; \\ \kappa &= M_{\kappa} \kappa', \quad \lambda = M_{\mu} \kappa' + \lambda', \quad \mu = M_{\mu} \kappa' + \mu', \end{aligned} \quad (6.16)$$

где κ , λ , μ — обобщенные коэффициенты Ляме.

Далее все модули тензора жесткости могут быть вычислены по формулам

$$\begin{aligned} C_{11} &= \kappa + \lambda + 2\mu, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{44} = \mu; \quad K = \frac{\kappa + d\lambda + 2\mu}{d}, \\ E &= \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + d\lambda + 2\mu)}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}, \quad \eta = \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

6.3. Модель с угловыми пружинами

Рассмотрим материал, в котором взаимодействие осуществляется линейными пружинами жесткости c и угловыми пружинами жесткости γ . Тогда

$$G_1 = \frac{1}{2}ca^2, \quad G_2 = \frac{1}{2}\gamma, \quad G_3 = 0; \quad (6.18)$$

$$H_1 = \frac{1}{2}ca^2 - 3M_1\gamma \operatorname{ctg}^2 \varphi, \quad H_2 = \gamma \operatorname{ctg}^2 \varphi, \quad H_3 = \gamma (1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi). \quad (6.19)$$

Подставляя эти выражения в (6.13), получим следующее представление тензора жесткости:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \kappa' \sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + \lambda' \mathbf{J}_1 + \mu' \mathbf{J}_{23}; \\ \kappa' &= \frac{1}{V_0} \left(\frac{ca^2}{2} - \frac{d \cos^2 \varphi + 2}{d-1} M_1 \gamma \right), \\ \lambda' &= \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M \cos^2 \varphi}{d(d-1)} \gamma, \quad \mu' = \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M}{d(d-1)} \gamma. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Проанализируем формулы (6.20). При отсутствии угловых пружин ($\gamma = 0$) в выражении для тензора жесткости сохраняется только первое слагаемое. Появление положительного γ приводит к появлению второго и третьего слагаемых, в результате чего тензор жесткости перестает быть абсолютно симметричным¹. Коэффициенты λ' и μ' положительны и увеличиваются с ростом γ . Коэффициент κ' , наоборот, уменьшается с увеличением γ и при достаточно больших γ может стать отрицательным.

Используя формулу (6.16), выразим тензор жесткости через обоб-

¹Абсолютно симметричным называется тензор, симметричный относительно любой перестановки индексов.

ценные коэффициенты Ляме:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}; \\ \kappa &= \frac{1}{V_0} \frac{2(1 - \eta_c)M}{d(d\eta_c + 2)} \left(\frac{ca^2}{2} - \frac{d \cos^2 \varphi + 2}{d - 1} M_1 \gamma \right), \\ \lambda &= \frac{1}{V_0} \frac{M}{d(d\eta_c + 2)} \left(\eta_c \frac{ca^2}{2} + 2 \frac{\cos^2 \varphi - \eta_c}{d - 1} M_1 \gamma \right), \\ \mu &= \frac{1}{V_0} \frac{M}{d(d\eta_c + 2)} \left(\eta_c \frac{ca^2}{2} + \frac{d\eta_c \sin^2 \varphi + 2(1 - \eta_c)}{d - 1} M_1 \gamma \right). \end{aligned} \quad (6.21)$$

Введем приведенные жесткости

$$c_\gamma \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\eta_c - \cos^2 \varphi}{d - 1} \frac{M_1 \gamma}{a^2}, \quad c'_\gamma \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{d} \frac{d\eta_c \sin^2 \varphi + 2(1 - \eta_c)}{d - 1} \frac{M_1 \gamma}{a^2}. \quad (6.22)$$

Приведенные жесткости имеют размерность жесткости линейных пружин c , однако определяются жесткостью угловых пружин γ . При изотропии ($\eta_c = 1$) выполняется $c'_\gamma = c_\gamma$. Подставляя (6.21) в (6.17), получаем следующие выражения для характеристик упругости:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{Ma^2}{2dV_0} \frac{(\eta_c + 2)c + 2(d - 1)c_\gamma}{d\eta_c + 2}, & C_{12} = \lambda &= \frac{Ma^2}{2dV_0} \frac{\eta_c c - 2c_\gamma}{d\eta_c + 2}, \\ C_{44} = \mu &= \frac{Ma^2}{2dV_0} \frac{\eta_c c + dc'_\gamma}{d\eta_c + 2}, & \kappa &= \frac{Ma^2}{dV_0} \frac{(1 - \eta_c)c + d(c_\gamma - c'_\gamma)}{d\eta_c + 2}, \end{aligned} \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned} K &= \frac{Ma^2}{2d^2V_0} c, & E &= \frac{Ma^2}{dV_0} \frac{c(c + dc_\gamma)}{(d\eta_c - \eta_c + 2)c + 2c_\gamma}, \\ \nu &= \frac{\eta_c c - 2c_\gamma}{(d\eta_c - \eta_c + 2)c + 2c_\gamma}, & \eta &= \frac{\eta_c c + dc'_\gamma}{c + dc_\gamma}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Рассмотрим частный случай чисто силового взаимодействия: $c_\gamma = c'_\gamma = 0$.

Тогда формулы (6.23) приобретают вид

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{Ma^2}{2dV_0} \frac{\eta_c + 2}{d\eta_c + 2} c, & C_{12} = C_{44} = \lambda = \mu &= \frac{Ma^2}{2dV_0} \frac{\eta_c c}{d\eta_c + 2}, \\
\kappa &= \frac{Ma^2}{dV_0} \frac{1 - \eta_c}{d\eta_c + 2} c, & K &= \frac{Ma^2}{2d^2V_0} c, & E &= \frac{Ma^2}{dV_0} \frac{c}{d\eta_c - \eta_c + 2}, \\
\nu &= \frac{\eta_c}{d\eta_c - \eta_c + 2}, & \eta &= \eta_c.
\end{aligned} \tag{6.25}$$

Когда приведенные жесткости углового взаимодействия намного превосходят жесткость линейных пружин ($c_\gamma \sim c'_\gamma \gg c$), формулы (6.23) приобретают вид

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{Ma^2}{dV_0} \frac{d - 1}{d\eta_c + 2} c_\gamma, & C_{12} = \lambda &= -\frac{Ma^2}{dV_0} \frac{c_\gamma}{d\eta_c + 2}, \\
C_{44} = \mu &= \frac{Ma^2}{2V_0} \frac{c'_\gamma}{d\eta_c + 2}, \\
\kappa &= \frac{Ma^2}{V_0} \frac{c_\gamma - c'_\gamma}{d\eta_c + 2}, & K &= \frac{Ma^2}{2d^2V_0} c, & E &= \frac{Ma^2}{2V_0} c, \\
\nu &= -1, & \eta &= \frac{c'_\gamma}{c_\gamma}.
\end{aligned} \tag{6.26}$$

Параметры кристаллических решеток, для которых могут использоваться полученные выше формулы, приведены в табл. 6.1.

Таблица 6.1: Безразмерные параметры рассматриваемых кристаллических решеток.

Решетка	d	M	M_1	φ	η_c	$V_0 a^{-d}$
Треугольная	2	6	2	$\pi/3$	1	$\sqrt{3}/2$
Квадратная	2	4	2	$\pi/2$	0	1
Кубическая	3	6	4	$\pi/2$	0	1
ОЦК	3	8	3	$\arcsin \frac{\sqrt{3}}{3}$	∞	$4\sqrt{3}/9$

6.4. Квадратная и кубическая решетки

Значения параметров квадратной и кубической решеток могут быть записаны в виде общих формул для пространства размерности $d = 2, 3$:

$$M = 2d, \quad M_1 = 2(d - 1), \quad \varphi = \frac{\pi}{2}, \quad \eta_c = 0, \quad V_0 = a^d. \quad (6.27)$$

Тогда для приведенных жесткостей (6.22) получаем

$$c_\gamma = 0, \quad c'_\gamma = \frac{8\gamma}{da^2}, \quad (6.28)$$

а из формул (6.23) находим значения модулей упругости

$$\begin{aligned} C_{11} &= ca^{2-d}, & C_{12} &= \lambda = 0, & C_{44} &= \mu = 4\gamma a^{-d}, \\ \kappa &= (ca^2 - 8\gamma)a^{-d}, & K &= \frac{1}{d}ca^{2-d}, & E &= ca^{2-d}, \\ \nu &= 0, & \eta &= \frac{8\gamma}{ca^2}. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Таким образом, для квадратной и кубической решеток коэффициент Пуассона тождественно равен нулю, модуль Юнга равен продольной жесткости и не зависит от жесткости угловых пружин, сдвиговая жесткость определяется жесткостью угловых пружин и не зависит от жесткости линейных пружин, при $\gamma = ca^2/8$ упругие свойства решеток становятся изотропными.

6.5. Изотропная часть тензора жесткости

В выражении (6.12) для тензора жесткости только первое слагаемое может быть анизотропным, остальные слагаемые изотропны. Вычислим изотропную часть координационного тензора:

$$\mathcal{I} \left(\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \right) = \frac{M}{d(d+2)} (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}). \quad (6.30)$$

Здесь \mathcal{I} — оператор вычисления изотропной части.

Тогда изотропная часть тензора жесткости (6.12) может быть представлена в виде

$$\mathcal{I}(\mathbf{C}) = \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23},$$

$$\lambda = \frac{M}{d(d+2)} \kappa' + \lambda', \quad \mu = \frac{M}{d(d+2)} \kappa' + \mu'. \quad (6.31)$$

Здесь λ и μ — коэффициенты Ляме соответствующего изотропного материала, а коэффициенты κ' , λ' и μ' определяются формулами (6.13).

Модуль объемного сжатия K , модуль Юнга E и коэффициент Пуассона ν могут быть вычислены по формулам

$$K = \lambda + \frac{2}{d} \mu, \quad E = \frac{2\mu(d\lambda + 2\mu)}{(d-1)\lambda + 2\mu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{(d-1)\lambda + 2\mu}. \quad (6.32)$$

Для материала с угловыми пружинами формулы (6.31) дают

$$\lambda = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{2d(d+2)} (c - 2c_\gamma), \quad \mu = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{2d(d+2)} (c + dc_\gamma), \quad (6.33)$$

где

$$c_\gamma = c'_\gamma = \frac{2 \sin^2 \varphi}{d-1} M_1 \frac{\gamma}{a^2}. \quad (6.34)$$

Используя (6.32), получим следующие выражения для модуля объемного сжатия K , модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν :

$$K = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{2d^2} c, \quad E = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{d} \frac{c(c + dc_\gamma)}{(d+1)c + 2c_\gamma}, \quad \nu = \frac{c - 2c_\gamma}{(d+1)c + 2c_\gamma}. \quad (6.35)$$

При достаточно большой жесткости угловых пружин ($c_\gamma > c/2$) коэффициент Пуассона становится отрицательным. Согласно полученным формулам, при произвольных положительных значениях c и γ выполняются

$$\mu \geq \mu_c, \quad K = K_c, \quad E_c \leq E \leq \frac{d(d+1)}{2} E_c, \quad -1 \leq \nu \leq \nu_c, \quad (6.36)$$

где

$$\mu_c = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{2d(d+2)} c, \quad K_c = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{2d^2} c, \quad (6.37)$$

$$E_c = \frac{a^2}{V_0} \frac{M}{d(d+1)} c, \quad \nu_c = \frac{1}{d+1}$$

— значения модулей при чисто силовом взаимодействии ($c_\gamma = 0$). Впрочем, материал может быть устойчивым и при отрицательном значении жесткости угловых пружин. Из макроскопических условий устойчивости $K > 0$, $\mu > 0$ получаем следующие условия устойчивости на микроуровне:

$$c > 0, \quad c_\gamma > -c/d. \quad (6.38)$$

6.6. Треугольная решетка

Рассмотрим двухмерную треугольную кристаллическую решетку. Она обладает симметрией вращения шестого порядка относительно любого атома, а следовательно, тензор жесткости треугольной решетки должен быть изотропным. Поэтому для треугольной решетки $\mathbf{C} = \mathcal{I}(\mathbf{C})$ и для вычисления тензора жесткости можно пользоваться формулами предыдущего параграфа. Для треугольной решетки

$$M = 6, \quad M_1 = 2, \quad \varphi = \frac{\pi}{3}, \quad d = 2, \quad V_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2, \quad (6.39)$$

где a — шаг решетки.

Тогда из формул (6.13), (6.31) получаем для коэффициентов Ляме

$$\lambda = \frac{3}{4V_0} (H_1 + 5H_2 - 2H_3), \quad \mu = \frac{3}{4V_0} (H_1 - H_2 + 4H_3). \quad (6.40)$$

Когда взаимодействие осуществляется линейными пружинами жесткости c и угловыми пружинами жесткости γ , используя формулы (6.2), (6.6), получаем

$$\lambda = \frac{\sqrt{3}}{4a^2} (ca^2 - 6\gamma), \quad \mu = \frac{\sqrt{3}}{4a^2} (ca^2 + 6\gamma). \quad (6.41)$$

Тогда, с учетом (6.32), для модуля объемного сжатия, модуля Юнга и коэффициента Пуассона треугольной решетки

$$K = \frac{\sqrt{3}}{2} c, \quad E = \frac{2\sqrt{3}}{3} c \frac{ca^2 + 6\gamma}{ca^2 + 2\gamma}, \quad \nu = \frac{1}{3} \frac{ca^2 - 6\gamma}{ca^2 + 2\gamma}. \quad (6.42)$$

Согласно полученным формулам, при произвольных положительных значениях c и γ выполняются

$$\mu \geq \mu_c, \quad K = K_c, \quad E_c \leq E \leq 3E_c, \quad -1 \leq \nu \leq \nu_c, \quad (6.43)$$

где

$$\mu_c = \frac{\sqrt{3}}{4} c, \quad K_c = \frac{\sqrt{3}}{2} c, \quad E_c = \frac{2\sqrt{3}}{3} c, \quad \nu_c = \frac{1}{3} \quad (6.44)$$

— значения модулей при $\gamma = 0$, в точности равные известным значениям, соответствующим чисто силовому взаимодействию [18].

Отметим, что, согласно (6.42), при достаточно большой жесткости угловых пружин ($\gamma > ca^2/6$) коэффициент Пуассона становится отрицательным. Условия устойчивости (6.38) для треугольной решетки приобретают вид

$$c > 0, \quad \gamma > -ca^2/6. \quad (6.45)$$

Глава 7

Моментное взаимодействие

Выводится тензор жесткости простой кристаллической решетки при учете силового и моментного взаимодействия. Связи для равновесного кристалла считаются ненапряженными. Более подробно рассматриваются трансверсально-изотропные связи при взаимодействии с атомами первой координационной сферы. В качестве примера рассматриваются треугольная, квадратная и кубическая решетки, а также модель связанных многоугольников.

7.1. Вывод уравнений

Рассмотрим простую кристаллическую решетку. Выберем один из атомов и назовем его отсчетным. Пронумеруем атомы, с которыми взаимодействует отсчетный, индексами α ; векторы, направленные из отсчетного атома в атом α для недеформированного состояния кристалла, обозначим \mathbf{a}_α . Атомы решетки будем моделировать твердыми телами, векторы перемещения и поворота которых по отношению к их положению в недеформированном кристалле обозначим \mathbf{u}_α и φ_α ; векторы перемещения и поворота отсчетного атома обозначим \mathbf{u} и φ .

Энергия, приходящаяся на элементарную ячейку решетки, может быть представлена в виде

$$W \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha}, \quad (7.1)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки недеформированной решетки; Π_{α} — потенциал взаимодействия отсчетного атома с атомом α ; множитель $1/2$

в формуле (7.1) требуется в виду того, что потенциал Π_α описывает взаимодействие двух атомов. Потенциал взаимодействия атомов запишем в виде [13]

$$\Pi_\alpha = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha \cdot \mathbf{A}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha + \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha \cdot \mathbf{B}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa}_\alpha + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}_\alpha \cdot \mathbf{G}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa}_\alpha, \quad (7.2)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha$ и $\boldsymbol{\kappa}_\alpha$ — векторы деформации межатомных связей

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u} + \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \times (\boldsymbol{\varphi}_\alpha + \boldsymbol{\varphi}), \quad \boldsymbol{\kappa}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\varphi}_\alpha - \boldsymbol{\varphi}; \quad (7.3)$$

\mathbf{A}_α , \mathbf{B}_α и \mathbf{G}_α — тензоры жесткости межатомных связей (второго ранга).

В представлении (7.2) отсутствуют линейные по деформациям слагаемые, что означает отсутствие начальных усилий в связях (в равновесном состоянии кристалла связи являются ненапряженными). Использование данного приближения оправдано, так как в реальности, в силу быстрого убывания взаимодействия, начальные усилия в связях малы. Учет же их приводит к сильному усложнению формул и, вообще говоря, необходимости привлечения нелинейной теории. Данное приближение соответствует распространенной модели, в которой кристалл описывается совокупностью твердых тел, связанных ненапряженными пружинами.

Макроскопическое представление удельной (приходящейся на единицу объема) энергии деформирования моментной среды при малых деформациях имеет вид [13]

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot \cdot \mathbf{A} \cdot \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot \mathbf{B} \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \cdot \cdot \cdot \mathbf{G} \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa}. \quad (7.4)$$

Здесь ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{B}$ и ${}^4\mathbf{G}$ — тензоры жесткости среды (четвертого ранга); $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ — макроскопические тензоры деформации:

$$\boldsymbol{\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi}, \quad \boldsymbol{\kappa} \stackrel{\text{def}}{=} \nabla \boldsymbol{\varphi}, \quad (7.5)$$

где \mathbf{u} и $\boldsymbol{\varphi}$ — векторы перемещения и поворота элемента среды; ∇ — векторный дифференциальный оператор.

При однородном¹ деформировании решетки справедливы представления

$$\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u} + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad \boldsymbol{\varphi}_\alpha = \boldsymbol{\varphi} + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi}, \quad (7.6)$$

¹Под однородным будем понимать деформирование, при котором перемещения и повороты являются линейными функциями координат.

подстановка которых в выражения (7.3) позволяет получить следующую связь векторов деформации связей и тензоров деформации среды:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{a}_\alpha, \quad \boldsymbol{\kappa}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa}. \quad (7.7)$$

Используя выражения (7.7), из сравнения микроскопического (7.1)–(7.2) и макроскопического (7.4) представлений для энергии деформирования получим формулы связи тензоров жесткости:

$${}^4\mathbf{A} = \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{A}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad {}^4\mathbf{B} = \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \tilde{\mathbf{B}}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad {}^4\mathbf{G} = \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \tilde{\mathbf{G}}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad (7.8)$$

где тензоры $\tilde{\mathbf{B}}_\alpha$ и $\tilde{\mathbf{G}}_\alpha$ линейным образом выражаются через тензоры \mathbf{A}_α , \mathbf{B}_α , \mathbf{G}_α .

7.2. Переход к безмоментной теории

На макроуровне, как правило, достаточно безмоментного описания деформирования среды, поэтому рассмотрим переход к безмоментной теории. Можно показать, что для линейно-упругого материала, с симметрией не ниже кубической, условие безмоментности приводит к симметрии тензора деформации. Тогда, используя (7.5), получаем

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^S \iff (\nabla \mathbf{u})^A + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi} = 0 \iff \boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}. \quad (7.9)$$

Геометрически соотношение (7.9) означает, что все частицы поворачиваются вместе со средой. Для второго тензора деформации получаем

$$\boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{2} \nabla \nabla \times \mathbf{u}, \quad (7.10)$$

а следовательно, при однородном деформировании данный тензор тождественно обращается в нуль.

Так как тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ в безмоментной теории симметричен, то для описания упругих свойств безмоментной среды используется тензор ${}^4\mathbf{C}$, полученный в результате симметризации тензора \mathbf{A} относительно перестановок первого со вторым и третьего с четвертым индексов:

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{A}^S; \quad C_{knpq} = \frac{1}{4} (A_{knpq} + A_{nkpq} + A_{knqp} + A_{nkqp}). \quad (7.11)$$

Для получения тензора ${}^4\mathbf{C}$ можно провести симметризацию только по одной паре индексов

$$C_{knpq} = \frac{1}{2} (A_{knpq} + A_{knqp}) \quad (7.12)$$

с последующей проверкой симметричности по другой паре индексов. Отметим, что если тензор ${}^4\mathbf{A}$, в силу своего определения, обладает симметрией относительно перестановки первого с четвертым и второго с третьим индексов, то тензор ${}^4\mathbf{C}$, вообще говоря, такой симметрией не обладает. Это, в частности, будет видно по результатам следующего параграфа. Возможность замены тензора ${}^4\mathbf{A}$ тензором ${}^4\mathbf{C}$ обеспечивается равенством энергий

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{A} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \quad (7.13)$$

для симметричного тензора $\boldsymbol{\varepsilon}$. Условие равенства энергий, в частности, не позволяет заменить тензор ${}^4\mathbf{A}$ абсолютно симметричным тензором, полученным в результате симметризации ${}^4\mathbf{A}$ по всем возможным перестановкам индексов. Такой тензор обладал бы симметриями как тензора ${}^4\mathbf{A}$, так и тензора ${}^4\mathbf{C}$, однако соответствующая ему энергия содержит слагаемые, не входящие в (7.13).

Данный безмоментный подход удобен для получения упругих модулей, однако для полного исследования устойчивости решетки требуется рассмотрение всех тензоров жесткости ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{B}$, ${}^4\mathbf{G}$.

7.3. Трансверсально-изотропные связи

Будем считать тензоры жесткости силового межатомного взаимодействия трансверсально-изотропными, при этом, для простоты, ограничимся взаимодействием с атомами первой координационной сферы. Тогда тензоры жесткости связей могут быть записаны в виде

$$\mathbf{A}_\alpha = c_A \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + c_D (\mathbf{E} - \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha), \quad \mathbf{n}_\alpha = \frac{1}{a} \mathbf{a}_\alpha, \quad a = |\mathbf{a}_\alpha|, \quad (7.14)$$

где c_A и c_D — продольная и поперечная жесткости связей.

Подстановка выражения (7.14) в (7.8) дает

$${}^4\mathbf{A} = \frac{a^2}{2V_0} \sum_{\alpha} \left((c_A - c_D) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + c_D \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{E} \mathbf{n}_{\alpha} \right). \quad (7.15)$$

Для рассматриваемых кристаллических решеток тензор $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}$ изотропен, что дает

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = \frac{M}{d} \mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{E} \mathbf{n}_{\alpha} = \frac{M}{d} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k, \quad (7.16)$$

где M — координационное число; d — размерность пространства; \mathbf{e}_k — ортонормированный базис; здесь и далее ведется суммирование по повторяющемуся латинскому индексу от 1 до d .

Тогда для тензора ${}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{A}^S$, использующегося в безмоментной теории упругости, получаем

$${}^4\mathbf{C} = \frac{a^2}{2V_0} \left((c_A - c_D) \sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + \frac{M}{2d} c_D \mathbf{J}_{23} \right). \quad (7.17)$$

Представим тензор жесткости кристаллической решетки в виде (6.12):

$${}^4\mathbf{C} = \kappa' \sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + \lambda' \mathbf{J}_1 + \mu' \mathbf{J}_{23}. \quad (7.18)$$

Для коэффициентов представления получаем

$$\kappa' = \frac{a^2}{2V_0} (c_A - c_D), \quad \lambda' = 0, \quad \mu' = \frac{Ma^2}{4V_0d} c_D. \quad (7.19)$$

Из полученных формул следует различие между моментным и трехчастичным взаимодействием: для моментного взаимодействия коэффициент λ' равен нулю, в то время как для трехчастичного, согласно формулам (6.13), этот коэффициент, вообще говоря, ненулевой.

Представим координационный тензор в виде (2.27):

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = M_{\kappa} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + M_{\mu} (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}), \quad (7.20)$$

где \mathbf{e}_k — орты осей кубической симметрии подрешетки для кристаллов кубической симметрии или орты произвольного ортонормированного базиса при изотропии упругих свойств; M_κ и M_μ — безразмерные коэффициенты, определяемые формулами

$$M_\kappa = \frac{2M}{d} \frac{1 - \eta_c}{d\eta_c + 2}, \quad M_\mu = \frac{M}{d} \frac{\eta_c}{d\eta_c + 2}, \quad (7.21)$$

где η_c — параметр анизотропии тензора $\sum_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha$, совпадающий с параметром анизотропии тензора жесткости рассматриваемого материала при чисто силовом взаимодействии.

Подставляя представление (7.20) в (7.18), получаем

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C} &= \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}; \\ \kappa &= M_\kappa \kappa', \quad \lambda = M_\mu \kappa', \quad \mu = M_\mu \kappa' + \mu', \end{aligned} \quad (7.22)$$

где κ , λ , μ — обобщенные коэффициенты Ляме.

Далее все модули тензора жесткости могут быть вычислены по формулам

$$\begin{aligned} C_{11} &= \kappa + \lambda + 2\mu, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{44} = \mu; \quad K = \frac{\kappa + d\lambda + 2\mu}{d}, \\ E &= \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + d\lambda + 2\mu)}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{\kappa + (d-1)\lambda + 2\mu}, \quad \eta = \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu}. \end{aligned} \quad (7.23)$$

7.4. Сравнение с трехчастичным взаимодействием

Мы получили

$${}^4\mathbf{C} = \kappa' \sum_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \lambda' \mathbf{J}_1 + \mu' \mathbf{J}_{23}, \quad (7.24)$$

где

$$\kappa' = \frac{a^2}{2V_0} (c_A - c_D), \quad \lambda' = 0, \quad \mu' = \frac{Ma^2}{4V_0 d} c_D. \quad (7.25)$$

При трехчастичном взаимодействии для этих коэффициентов были получены формулы (6.20)

$$\begin{aligned} \kappa' &= \frac{1}{V_0} \left(\frac{ca^2}{2} - \frac{d \cos^2 \varphi + 2}{d-1} M_1 \gamma \right) \\ \lambda' &= \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M \cos^2 \varphi}{d(d-1)} \gamma, \quad \mu' = \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M}{d(d-1)} \gamma, \end{aligned} \quad (7.26)$$

где c и γ — жесткость линейной и угловой пружин; M_1 — число смежных связей; φ — угол между связями.

Формулы (7.26) справедливы для треугольной, квадратной, кубической и ОЦК решеток. Сравнение формул (7.25) и (7.26) показывает, что они могут быть эквивалентны при $\varphi = \pi/2$, что выполняется для квадратной и кубической решеток. Тогда формулы (7.26) принимают вид

$$\kappa' = \frac{1}{V_0} \left(\frac{ca^2}{2} - \frac{2}{d-1} M_1 \gamma \right), \quad \lambda' = 0, \quad \mu' = \frac{1}{V_0} \frac{M_1 M}{d(d-1)} \gamma. \quad (7.27)$$

Сравнивая (7.27) с формулами (7.25), получаем, что они эквивалентны при

$$c_A = c, \quad c_D = \frac{4M_1}{d-1} \frac{\gamma}{a^2}. \quad (7.28)$$

А если учесть, что для квадратной и кубической решеток $M_1 = 2(d-1)$, то условия эквивалентности принимают вид

$$c_A = c, \quad c_D = 8 \frac{\gamma}{a^2}. \quad (7.29)$$

Как будет показано далее, моментное и трехчастичное взаимодействие оказываются эквивалентными также для треугольной решетки. Вопрос об эквивалентности этих взаимодействий для остальных решеток скорее всего решается отрицательно, однако это требует дальнейшего исследования.

7.5. Квадратная и кубическая решетки

Значения параметров квадратной и кубической решеток могут быть записаны в виде общих формул для пространства размерности $d = 2, 3$:

$$M = 2d, \quad \eta_c = 0, \quad V_0 = a^d, \quad (7.30)$$

где a — шаг решетки.

Тогда

$$M_\kappa = 2, \quad M_\mu = 0, \quad (7.31)$$

$$\kappa = 2\kappa' = a^{2-d}(c_A - c_D), \quad \lambda = \lambda' = 0, \quad \mu = \mu' = \frac{a^{2-d}}{2} c_D. \quad (7.32)$$

Из формул (7.23) находим значения модулей упругости

$$\begin{aligned} C_{11} &= c_A a^{2-d}, & C_{12} &= \lambda = 0, & C_{44} &= \mu = \frac{1}{2} c_D a^{2-d}, \\ \kappa &= (c_A - c_D) a^{2-d}, & K &= \frac{1}{d} c_A a^{2-d}, & E &= c_A a^{2-d}, \\ \nu &= 0, & \eta &= \frac{c_D}{c_A}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Таким образом, для квадратной и кубической решеток коэффициент Пуассона тождественно равен нулю, модуль Юнга равен продольной жесткости и не зависит от поперечной, сдвиговая жесткость определяется поперечной жесткостью и не зависит от продольной, при равенстве продольной и поперечной жесткостей упругие свойства решеток становятся изотропными.

7.6. Треугольная решетка

Рассмотрим двумерную треугольную кристаллическую решетку. Она обладает симметрией вращения шестого порядка относительно любого атома, а следовательно, тензор жесткости треугольной решетки должен быть изотропным. Для треугольной решетки

$$M = 6, \quad d = 2, \quad \eta_c = \eta = 1, \quad V_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2, \quad (7.34)$$

где a — шаг решетки.

Тогда

$$\kappa' = \frac{\sqrt{3}}{3}(c_A - c_D), \quad \lambda' = 0, \quad \mu' = \frac{\sqrt{3}}{2}c_D, \quad (7.35)$$

$$M_\kappa = 0, \quad M_\mu = \frac{3}{4}, \quad (7.36)$$

$$\kappa = 0, \quad \lambda = \frac{\sqrt{3}}{4}(c_A - c_D), \quad \mu = \frac{\sqrt{3}}{4}(c_A + c_D). \quad (7.37)$$

Сравним с трехчастичным взаимодействием. Согласно формулам (6.41), при трехчастичном взаимодействии

$$\lambda = \frac{\sqrt{3}}{4}\left(c - 6\frac{\gamma}{a^2}\right), \quad \mu = \frac{\sqrt{3}}{4}\left(c + 6\frac{\gamma}{a^2}\right). \quad (7.38)$$

Таким образом, для треугольной решетки моментное и трехчастичное взаимодействия оказываются эквивалентными при

$$c_A = c, \quad c_D = 6\frac{\gamma}{a^2}. \quad (7.39)$$

Следовательно, при моментном взаимодействии можно воспользоваться выводами, полученными в главе 6 для треугольной решетки при угловом взаимодействии; в частности, для модуля объемного сжатия, модуля Юнга и коэффициента Пуассона треугольной решетки

$$K = \frac{\sqrt{3}}{2}c_A, \quad E = \frac{2\sqrt{3}}{3}c_A \frac{c_A + c_D}{c_A + c_D/3}, \quad \nu = \frac{1}{3} \frac{c_A - c_D}{c_A + c_D/3}. \quad (7.40)$$

Коэффициенты жесткости треугольной решетки, согласно (7.23) и (7.37)

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4}(3c_A + c_D), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4}(c_A - c_D), \quad C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{4}(c_A + c_D). \quad (7.41)$$

7.7. Модель связанных многоугольников

Рассмотрим модель, в которой каждая частица моделируется многоугольником, имеющим симметрию решетки. Связи между многоугольниками

осуществляются пружинами, которые для простоты будем считать ненапряженными в равновесном состоянии решетки. Тогда силовой тензор жесткости связи между частицами определяется формулой

$$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^N c_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k, \quad (7.42)$$

где c_k — жесткость пружины, \mathbf{e}_k — орт направления недеформированной пружины, N — число пружин.

Квадратная решетка

Рассмотрим квадратные частицы, в недеформированном состоянии обращенные друг к другу сторонами. Пружины c_1 связывают центры частиц, c_2 — одноименные углы (лежащие по одну сторону от центра), c_3 — разноименные углы (лежащие по разные стороны от центра). Полагая, что орт \mathbf{i} задает направление между центрами частиц, орт \mathbf{j} — ортогональное направление, получаем

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2^\pm = \mathbf{i}, \quad \mathbf{e}_3^\pm = \mathbf{i} \cos \varphi \pm \mathbf{j} \sin \varphi, \quad (7.43)$$

где символом \pm обозначены орты для парных пружин, φ — соответствующий угол (определяемый отношением стороны частицы к расстоянию между ними).

В результате для тензора жесткости выполняется

$$\begin{aligned} \mathbf{A} = & c_1 \mathbf{ii} + 2c_2 \mathbf{ii} + c_3 (\mathbf{i} \cos \varphi + \mathbf{j} \sin \varphi) (\mathbf{i} \cos \varphi + \mathbf{j} \sin \varphi) + \\ & + c_3 (\mathbf{i} \cos \varphi - \mathbf{j} \sin \varphi) (\mathbf{i} \cos \varphi - \mathbf{j} \sin \varphi). \end{aligned} \quad (7.44)$$

После преобразования получаем

$$\mathbf{A} = (c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos^2 \varphi) \mathbf{ii} + 2c_3 \sin^2 \varphi \mathbf{jj}. \quad (7.45)$$

Следовательно, продольная и поперечная жесткости

$$c_A = c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos^2 \varphi, \quad c_D = 2c_3 \sin^2 \varphi. \quad (7.46)$$

Тогда, используя формулы (7.33) для квадратной решетки

$$\begin{aligned} C_{11} = E = 2K = c_A, \quad C_{12} = \lambda = 0, \quad C_{44} = \mu = \frac{1}{2} c_D, \\ \kappa = c_A - c_D, \quad \nu = 0, \quad \eta = \frac{c_D}{c_A}. \end{aligned} \quad (7.47)$$

Подстановка (7.46) в (7.47) дает

$$\begin{aligned} C_{11} = E = 2K = c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos^2 \varphi, \quad C_{12} = \lambda = 0, \\ C_{44} = \mu = c_3 \sin^2 \varphi, \quad \kappa = c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos 2\varphi, \\ \nu = 0, \quad \eta = \frac{2c_3 \sin^2 \varphi}{c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos^2 \varphi}. \end{aligned} \quad (7.48)$$

Если обозначить b сторону квадрата, то тогда

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \varphi = \frac{b}{a-b}, \quad \sin \varphi = \frac{b}{\sqrt{a^2 - 2ab + 2b^2}}, \quad \cos \varphi = \frac{a-b}{\sqrt{a^2 - 2ab + 2b^2}}, \\ \cos 2\varphi = \frac{a(a-2b)}{a^2 - 2ab + 2b^2}. \end{aligned} \quad (7.49)$$

Треугольная решетка

Рассмотрим шестиугольные частицы, в недеформированном состоянии обращенные друг к другу углами. Пружины c_1 связывают центры частиц, c_2 — одноименные углы (лежащие по одну сторону от центра), c_3 — разноименные углы (лежащие по разные стороны от центра). Полагая, что \mathbf{i} — направление между центрами частиц, \mathbf{j} — ортогональное, получаем

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2^\pm = \mathbf{i}, \quad \mathbf{e}_3^\pm = \mathbf{i} \cos \varphi \pm \mathbf{j} \sin \varphi, \quad (7.50)$$

где символом \pm обозначены орты для парных пружин, φ — соответствующий угол (определяемый отношением характерного размера частицы к расстоянию между ними).

Таким образом, формулы оказываются совершенно одинаковыми с формулами для квадратных частиц, отличаться будет только выражение

для угла φ . Следовательно, для продольной и поперечной жесткостей можем воспользоваться формулой (7.46):

$$c_A = c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos^2 \varphi, \quad c_D = 2c_3 \sin^2 \varphi. \quad (7.51)$$

Тогда из формул (7.40), (7.41) получаем

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4} (3c_A + c_D), \quad C_{12} = \lambda = \frac{\sqrt{3}}{4} (c_A - c_D), \quad (7.52)$$

$$C_{44} = \mu = \frac{\sqrt{3}}{4} (c_A + c_D),$$

$$K = \frac{\sqrt{3}}{2} c_A, \quad E = \frac{2\sqrt{3}}{3} c_A \frac{c_A + c_D}{c_A + c_D/3}, \quad \nu = \frac{1}{3} \frac{c_A - c_D}{c_A + c_D/3}. \quad (7.53)$$

В частности, для коэффициентов жесткости

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{4} (3c_1 + 6c_2 + 2c_3(2 + \cos 2\varphi)), \quad (7.54)$$

$$C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4} (c_1 + 2c_2 + 2c_3 \cos 2\varphi), \quad C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{4} (c_1 + 2c_2 + 2c_3).$$

Если обозначить b сторону шестиугольника, то тогда

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sqrt{3}b}{a-b}, \quad \sin^2 \varphi = \frac{3b^2}{a^2 - 2ab + 4b^2}, \quad \cos^2 \varphi = \frac{(a-b)^2}{a^2 - 2ab + 4b^2},$$

$$\cos 2\varphi = \frac{a^2 - 2ab - 2b^2}{a^2 - 2ab + 4b^2}, \quad 2 + \cos 2\varphi = 3 \frac{a^2 - 2ab + 2b^2}{a^2 - 2ab + 4b^2}. \quad (7.55)$$

Часть III

Двухатомные кристаллы

Глава 8

Упругие характеристики

Приводится ряд общих сведений для тензоров жесткости двухатомных решеток, исследуется их структура для двумерной решетки графена (при произвольном взаимодействии). Оценивается влияние внутренних степеней свободы на характеристики упругости.

8.1. Сложная двухатомная решетка

Сложная двухатомная решетка может быть представлена как совокупность двух конгруэнтных простых решеток, сдвинутых друг относительно друга. Деформирование сложной решетки состоит из деформирования каждой из подрешеток и смещения решеток друг относительно друга. Деформирование подрешеток, как и ранее, задается тензором ϵ , а смещение подрешеток — вектором невязки ζ , имеющим размерность длины [18]. Вектор невязки задается таким образом, что при $\epsilon = 0$ он обращается в нуль. Иными словами, невязка описывает только относительное смещение подрешеток, вызванное деформированием, в нее не входит исходный сдвиг подрешеток друг относительно друга. Если невязка не учитывается при задании деформирования кристалла, то это приводит к неправильному определению характеристик упругости.

Энергия деформирования, приходящаяся на элементарную ячейку сложной двухатомной решетки, может быть представлена в виде

$$W = \frac{1}{2} \epsilon \cdot \cdot {}^4 C^* \cdot \cdot \epsilon + \epsilon \cdot \cdot {}^3 C \cdot \zeta + \frac{1}{2} \zeta \cdot {}^2 C \cdot \zeta, \quad (8.1)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор деформации, $\boldsymbol{\zeta}$ — вектор невязки; ${}^2\mathbf{C}$, ${}^3\mathbf{C}$ и ${}^4\mathbf{C}^*$ — тензоры жесткости второго, третьего и четвертого ранга, соответственно.

Вектор невязки $\boldsymbol{\zeta}_0$, соответствующий равновесию относительного положения подрешеток при заданном тензоре деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$, определяется из условия

$$\partial W / \partial \boldsymbol{\zeta} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta}_0 \stackrel{\text{def}}{=} -{}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (8.2)$$

Тогда энергия деформирования может быть записана в виде

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta}^* \cdot \cdot {}^2\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\zeta}^*, \quad (8.3)$$

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C}, \quad \boldsymbol{\zeta}^* \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta}_0. \quad (8.4)$$

Здесь ${}^4\mathbf{C}$ — макроскопический тензор жесткости материала; $\boldsymbol{\zeta}^*$ приведенная невязка, обращающаяся в нуль при равновесном расположении подрешеток в деформированном кристалле.

Условием устойчивости сложной решетки, согласно (8.3), является положительная определенность тензоров ${}^4\mathbf{C}$ (макроскопическая устойчивость материала) и ${}^2\mathbf{C}$ (микроскопическая устойчивость относительного смещения подрешеток). Это, соответственно, устойчивости акустической и оптической моды колебаний.

8.2. Тензоры жесткости

Рассмотрим тензоры жесткости двухатомной решетки и запишем их представления в некотором ортонормированном базисе \mathbf{e}_k ($k = 1, 2$).

Тензор жесткости кристалла при однородном деформировании (без учета относительного смещения подрешеток):

$${}^4\mathbf{C}^* = C_{knpr}^* \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_p \mathbf{e}_q, \quad C_{knpr}^* = C_{knqr}^* = C_{nkpr}^* = C_{pqkn}^*. \quad (8.5)$$

Тензор симметричный аполярный, что выражается в симметриях (8.5) относительно перестановок индексов. Для устойчивой решетки тензор ${}^4\mathbf{C}^*$ положительно определенный.

Перекрестный тензор жесткости:

$${}^3\mathbf{C} = C_{knp}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_p, \quad C_{knp} = C_{nkp} = C_{pkn}. \quad (8.6)$$

Для него, в частности, выполняется тождество $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta} \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$.

Тензор жесткости относительного смещения подрешеток:

$${}^2\mathbf{C} = C_{kn}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n, \quad C_{kn} = C_{nk}. \quad (8.7)$$

Тензор симметричный, для устойчивой решетки — положительно определенный.

Макроскопический тензор жесткости решетки:

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C} \quad (8.8)$$

$${}^4\mathbf{C} = C_{knpq}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_p\mathbf{e}_q, \quad C_{knpq} = C_{knqp} = C_{nkpq} = C_{pqkn}.$$

Учитывает как деформирование подрешеток, так и их относительное смещение. Тензор симметричный аполярный, для устойчивой решетки — положительно определенный.

8.3. Кристаллическая решетка графена

Графен удобно рассматривать как двухмерный материал, для которого модули упругости имеют размерность Н/м, а не Н/м², как в трехмерном случае. Кристаллическая решетка графена — плоская шестиугольная решетка, обладает симметрией вращения третьего порядка (относительно поворота на $2\pi/3$). Этой же симметрией должны обладать тензоры жесткости. Для тензоров ${}^4\mathbf{C}$, ${}^4\mathbf{C}^*$, ${}^2\mathbf{C}$ требование симметрии третьего порядка приводит к изотропии. Тензор ${}^3\mathbf{C}$ как тензор третьего ранга может обладать симметрией третьего порядка не будучи изотропным, однако требование симметрии позволяет существенно упростить его структуру. Рассмотрим подробнее структуру тензоров жесткости графена.

Тензор жесткости второго ранга

Изотропный тензор второго ранга является шаровым, что позволяет его записать в виде

$${}^2\mathbf{C} = C_2 \mathbf{E}, \quad C_2 = \frac{1}{2} \operatorname{tr} ({}^2\mathbf{C}) = C_{11} = C_{22}. \quad (8.9)$$

Требование устойчивости сводится к условию положительности C_2 .

Тензор жесткости третьего ранга

Введем ортонормированный базис $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ таким образом, что орт \mathbf{e}_k направлен вдоль одного из кристаллографических направлений решетки графена. Тогда тензор ${}^3\mathbf{C}$ может быть представлен в виде

$${}^3\mathbf{C} = C_3 {}^3\mathbf{I}, \quad {}^3\mathbf{I} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_1\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2\mathbf{e}_1, \quad (8.10)$$

$$C_3 = C_{111} = -C_{122} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{{}^3\mathbf{C} \odot {}^3\mathbf{C}}.$$

Данное утверждение следует из того, что решетка графена обладает симметрией вращения третьего порядка, а также симметрична относительно прямой, проходящей через \mathbf{e}_1 . Это утверждение несложно доказать для тензоров вида

$${}^3\mathbf{C} = \sum_{\alpha} H_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}, \quad (8.11)$$

где H_{α} и \mathbf{a}_{α} — произвольные скалярные и векторные величины.

Для всех рассмотренных в данной работе описаний решетки графена тензор ${}^3\mathbf{C}$ действительно имеет вид (8.11). Видимо, представление (8.10) справедливо и в общем случае, однако этот вопрос требует отдельного рассмотрения.

Отметим, что тензор ${}^3\mathbf{I}$ абсолютно симметричен (то есть симметричен относительно произвольной перестановки входящих в него векторов), а следовательно, и координаты тензора ${}^3\mathbf{C}$ симметричны относительно любой перестановки индексов. Приведем ряд тождеств, справедливых для тензора ${}^3\mathbf{I}$:

$${}^3\mathbf{I} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{I} = 0, \quad {}^3\mathbf{I} \odot {}^3\mathbf{I} = 4, \quad {}^3\mathbf{I} \cdot {}^3\mathbf{I} = 2\mathbf{E}, \quad {}^3\mathbf{I} \cdot {}^3\mathbf{I} = 2\mathbf{J}_d, \quad (8.12)$$

где \mathbf{J}_d — девиаторный тензор четвертого ранга.

Тензоры жесткости четвертого ранга

Изотропный тензор четвертого ранга может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C} &= \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{12}, \\ \mathbf{J}_1 &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}\mathbf{E}, \quad \mathbf{J}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n, \end{aligned} \quad (8.13)$$

где \mathbf{e}_k — произвольный ортонормированный базис; λ, μ — коэффициенты Ляме.

Альтернативное представление (эти и дальнейшие формулы справедливы только для двумерного пространства):

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C} &= 2(K\mathbf{J}_s + G\mathbf{J}_d), \\ \mathbf{J}_s &= \frac{1}{2}\mathbf{J}_1, \quad \mathbf{J}_d = \frac{1}{2}(\mathbf{J}_{23} - \mathbf{J}_1), \end{aligned} \quad (8.14)$$

где K — модуль объемного сжатия; G — модуль сдвига; \mathbf{J}_s и \mathbf{J}_d — шаровой и девиаторный тензоры четвертого ранга. Связь коэффициентов Ляме и модулей упругости

$$K = \lambda + \mu, \quad G = \mu; \quad \lambda = K - G. \quad (8.15)$$

Связь с коэффициентами жесткости

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12}), \quad G = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = C_{44}, \quad \lambda = C_{12}; \\ C_{11} &= K + G, \quad C_{12} = K - G, \quad C_{44} = G. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Коэффициент Пуассона и модуль Юнга

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}} = \frac{K - G}{K + G}, \quad E = 2G(1 + \nu) = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}} = \frac{4KG}{K + G}. \quad (8.17)$$

Отношение различных характеристик упругости к модулю объемного сжатия

$$\begin{aligned} \frac{C_{11}}{K} &= \frac{2}{1 + \nu}, & \frac{C_{12}}{K} &= \frac{\lambda}{K} = \frac{2\nu}{1 + \nu}, \\ \frac{C_{44}}{K} &= \frac{G}{K} = \frac{1 - \nu}{1 + \nu}, & \frac{E}{K} &= 2(1 - \nu). \end{aligned} \quad (8.18)$$

Отношение различных характеристик упругости к модулю Юнга

$$\begin{aligned} \frac{C_{11}}{E} &= \frac{1}{1 - \nu^2}, & \frac{C_{12}}{E} &= \frac{\lambda}{E} = \frac{\nu}{1 - \nu^2}, \\ \frac{C_{44}}{E} &= \frac{G}{E} = \frac{1}{2(1 + \nu)}, & \frac{K}{E} &= \frac{1}{2(1 - \nu)}. \end{aligned} \quad (8.19)$$

Влияние внутренних степеней свободы

Учет внутренних степеней свободы сложной решетки (относительного смещения подрешеток) приводит к появлению второго слагаемого в формуле (8.8) для тензора жесткости:

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C}. \quad (8.20)$$

Воспользуемся полученными ранее представлениями для тензоров ${}^2\mathbf{C}$ и ${}^3\mathbf{C}$:

$${}^2\mathbf{C} = C_2 \mathbf{E}, \quad {}^3\mathbf{C} = C_3 {}^3\mathbf{I}, \quad (8.21)$$

что позволяет переписать формулу (8.20) в виде

$${}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{C}^* - 2S \mathbf{J}_d, \quad S \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C_3^2}{C_2} = \frac{1}{2} \frac{{}^3\mathbf{C} \odot {}^3\mathbf{C}}{\mathbf{E} \cdot \cdot {}^2\mathbf{C}}. \quad (8.22)$$

При получении формулы (8.22) использовано тождество ${}^3\mathbf{I} \cdot {}^3\mathbf{I} = 2\mathbf{J}_d$. Из формулы (8.22) следует, что внутренние степени свободы не влияют на модуль объемного сжатия, однако существенно влияют на модуль сдвига.

Из формулы (8.22) получаем связь характеристик упругости материала (соответствующих тензору ${}^4\mathbf{C}$) с характеристиками, полученными без учета внутренних степеней свободы (соответствующих тензору ${}^4\mathbf{C}^*$, помечены “звездочкой”):

$$\begin{aligned} K &= K^*, & G &= G^* - S, & \lambda &= \lambda^* + S, \\ C_{11} &= C_{11}^* - S, & C_{12} &= C_{12}^* + S, & C_{44} &= C_{44}^* - S. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Так как для устойчивой решетки коэффициент S положителен, то внутренние степени свободы уменьшают модуль сдвига. Изменение остальных характеристик легко проследить по формулам (8.23).

Для коэффициента Пуассона и модуля Юнга справедливы формулы

$$\nu = \frac{K - G}{K + G}, \quad E = 2K(1 - \nu), \quad (8.24)$$

из которых следует, что внутренние степени свободы увеличивают коэффициент Пуассона и уменьшают модуль Юнга.

Отметим, что в работе [18] в результате компьютерных экспериментов с двухмерными аморфными материалами было показано, что учет внутренних степеней свободы приводит к значительному уменьшению модуля Юнга. Возможно, это общая тенденция, справедливая для различных сред с внутренними степенями свободы.

Глава 9

Силовое взаимодействие

Из энергетических соображений выводится тензор жесткости двухатомной кристаллической решетки при силовом взаимодействии с произвольным числом координационных сфер. В качестве примера рассматривается решетка графена. Показано, что экспериментальное значение коэффициента Пуассона не может быть получено при чисто силовом взаимодействии.

9.1. Получение тензоров жесткости второго, третьего и четвертого рангов

Рассмотрим сложную кристаллическую решетку, элементарная ячейка которой содержит два атома. Будем условно называть их атомами первого и второго типа, соответственно. Атомы каждого типа образуют простую кристаллическую решетку, причем эти решетки конгруэнтны. Выберем один из атомов первого типа и назовем его отсчетным. Пронумеруем атомы, с которыми взаимодействует отсчетный, индексами α . Векторы, проведенные из отсчетного атома в атом α , обозначим \mathbf{a}_α и \mathbf{A}_α для недеформированного и деформированного состояний кристалла. Кроме того, будем использовать обозначения

$$a_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{a}_\alpha|, \quad A_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{A}_\alpha|, \quad \mathbf{n}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{a}_\alpha/a_\alpha. \quad (9.1)$$

Потенциальная энергия, приходящаяся на отсчетный атом, может быть представлена в виде

$$P \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_{\alpha} P_{\alpha}, \quad (9.2)$$

где Π_α — потенциал взаимодействия отсчетного атома с атомом α ; множитель $1/2$ связан с тем, что потенциал Π_α описывает взаимодействие двух атомов.

Энергия, приходящаяся на элементарную ячейку решетки, определяется формулой

$$W \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \Pi = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha}, \quad (9.3)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки недеформированной решетки; множитель 2 требуется, так как элементарная ячейка содержит два атома (энергии, приходящиеся на каждый из атомов элементарной ячейки, равны в силу симметрии решетки).

Будем представлять Π_α как функцией A_α , так и A_α^2 :

$$\Pi_\alpha = \Pi(A_\alpha) = \tilde{\Pi}(A_\alpha^2). \quad (9.4)$$

Производные по аргументу от этих функций связаны соотношениями

$$\tilde{\Pi}'(a^2) = \frac{1}{2a} \Pi'(a), \quad \tilde{\Pi}''(a^2) = \frac{1}{4a^3} \left(a\Pi''(a) - \Pi'(a) \right). \quad (9.5)$$

Деформированное состояние сложной решетки представим как композицию однородной деформации, наложенной на каждую из подрешеток, и смещения подрешеток относительно друг друга. Тогда можно записать

$$\mathbf{A}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha + \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta}, \quad (9.6)$$

где $\boldsymbol{\kappa}$ — тензор, характеризующий однородную деформацию (градиент перемещения частицы подрешетки [25]); $\boldsymbol{\zeta}$ — вектор смещения второй подрешетки по отношению к первой (далее — вектор невязки); ν_α — коэффициент, принимающий значение 0 для атомов первого типа и значение 1 для атомов второго типа.

Введение коэффициента ν_α позволяет избежать трехиндексного описания, используемого при рассмотрении сложных решеток произвольного вида [18], и ограничиться применением единственного индекса α .

Квадрат расстояния между атомами может быть записан в виде

$$A_\alpha^2 = a_\alpha^2 + \delta_\alpha, \quad \delta_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} 2\mathbf{a}_\alpha \cdot (\mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta}) + (\mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta})^2. \quad (9.7)$$

Величины $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\zeta}$ и δ_α будем считать малыми:

$$\boldsymbol{\kappa} \cdots \boldsymbol{\kappa}^T \ll 1, \quad |\boldsymbol{\zeta}| \ll \mathbf{a}_\alpha, \quad |\delta_\alpha| \ll \mathbf{a}_\alpha^2. \quad (9.8)$$

Разложим энергию деформирования W в ряд, сохраняя слагаемые до второго порядка малости включительно:

$$W = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \left(\tilde{\Pi}(a_\alpha^2) + \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \delta_\alpha + \frac{1}{2} \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \delta_\alpha^2 \right). \quad (9.9)$$

Подставим (9.7) в (9.9) и, отбросив слагаемые выше второго порядка малости, получим

$$W = W_0 + W_1 + W_{21} + W_{22}, \quad (9.10)$$

$$W_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \tilde{\Pi}(a_\alpha^2), \quad W_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \sum_\alpha \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \left(\mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdots \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\zeta} \right), \quad (9.11)$$

$$W_{21} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) (\mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta})^2, \quad (9.12)$$

$$W_{22} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \sum_\alpha \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \left(\mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdots \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\zeta} \right)^2. \quad (9.13)$$

Введем обозначения

$$\boldsymbol{\tau}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \sum_\alpha \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad \mathbf{f}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha \tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \mathbf{a}_\alpha, \quad (9.14)$$

$${}^4\mathbf{C}^* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4}{V_0} \sum_\alpha \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad {}^3\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad (9.15)$$

$${}^2\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha \left(\tilde{\Pi}'(a_\alpha^2) \mathbf{E} + 2 \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2) \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \right). \quad (9.16)$$

Тогда выражение для энергии деформирования приобретает вид

$$W = W_0 + \boldsymbol{\tau}_0 \cdots \boldsymbol{\kappa} + \mathbf{f}_0 \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau}_0 \cdots \boldsymbol{\kappa} \boldsymbol{\kappa}^T + \mathbf{f}_0 \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \cdots {}^4\mathbf{C}^* \cdots \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa} \cdots {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta}^2 \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}. \quad (9.17)$$

Величину W_0 без ущерба для общности можно принять равной нулю. Тензор $\boldsymbol{\tau}_0$ и вектор \mathbf{f}_0 определяют в недеформированном состоянии

напряжение в решетке и распределенное усилие между подрешетками (сила, приходящаяся на элементарную ячейку). Приравнивая их нулю, получим уравнения для определения равновесного состояния решетки:

$$\boldsymbol{\tau}_0 = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha} \Pi'(a_{\alpha}) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = 0, \quad \mathbf{f}_0 = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} \Pi'(a_{\alpha}) \mathbf{n}_{\alpha} = 0. \quad (9.18)$$

Первое из этих уравнений полностью аналогично уравнению равновесия простой решетки; второе уравнение, как правило, выполняется тождественно.

После выполнения условий равновесия выражение для энергии примет вид

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}^* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta} \cdot {}^2\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}. \quad (9.19)$$

Здесь $\boldsymbol{\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\kappa}^s$ — тензор малой деформации, замена $\boldsymbol{\kappa}$ тензором $\boldsymbol{\varepsilon}$ стала возможной в силу симметрии тензоров жесткости (тензорных коэффициентов в полученной квадратичной форме).

Для тензоров жесткости получаем

$${}^4\mathbf{C}^* = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha} \left(a_{\alpha} \Pi''(a_{\alpha}) - \Pi'(a_{\alpha}) \right) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}, \quad (9.20)$$

$${}^3\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} \left(a_{\alpha} \Pi''(a_{\alpha}) - \Pi'(a_{\alpha}) \right) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}, \quad (9.21)$$

$${}^2\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \frac{\nu_{\alpha}}{a_{\alpha}} \left[\Pi'(a_{\alpha}) \mathbf{E} + \left(a_{\alpha} \Pi''(a_{\alpha}) - \Pi'(a_{\alpha}) \right) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \right]. \quad (9.22)$$

Альтернативное представление для тензора ${}^2\mathbf{C}$:

$${}^2\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \frac{\nu_{\alpha}}{a_{\alpha}} \left(\Pi'(a_{\alpha}) (\mathbf{E} - \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}) + a_{\alpha} \Pi''(a_{\alpha}) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \right). \quad (9.23)$$

Здесь ${}^4\mathbf{C}^*$ — тензор жесткости кристалла при однородном деформировании (без учета относительного смещения подрешеток); ${}^2\mathbf{C}$ — тензор жесткости связи между подрешетками; ${}^3\mathbf{C}$ — перекрестный тензор жесткости.

Все перечисленные тензоры жесткости абсолютно симметричны (симметричны относительно любой перестановки входящих в них векторов).

Введем обозначения

$$c_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a_\alpha), \quad f_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(a_\alpha), \quad \tilde{c}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} c_\alpha + \frac{f_\alpha}{a_\alpha}. \quad (9.24)$$

Здесь c_α — жесткость связи; f_α — усилие в связи (сила, действующая при равновесном состоянии решетки); \tilde{c}_α — приведенная жесткость связи.

Для \tilde{c}_α справедливы формула

$$\tilde{c}_\alpha = \Pi''(a_\alpha) - \frac{1}{a_\alpha} \Pi'(a_\alpha) = 4a_\alpha^2 \tilde{\Pi}''(a_\alpha^2). \quad (9.25)$$

С использованием введенных обозначений уравнения равновесия (9.18) и формулы (9.20)–(9.22) примут вид

$$\boldsymbol{\tau}_0 = -\frac{1}{V_0} \sum_\alpha a_\alpha f_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = 0, \quad \mathbf{f}_0 = -\frac{1}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha f_\alpha \mathbf{n}_\alpha = 0, \quad (9.26)$$

$${}^4\mathbf{C}^* = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha a_\alpha^2 \tilde{c}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha a_\alpha \tilde{c}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad (9.27)$$

$${}^2\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \frac{\nu_\alpha}{a_\alpha} (a_\alpha \tilde{c}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha - f_\alpha \mathbf{E}). \quad (9.28)$$

Если усилия в связях отсутствуют или ими можно пренебречь, то формулы для тензоров жесткости примут вид

$${}^4\mathbf{C}^* = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha a_\alpha^2 c_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha a_\alpha c_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad (9.29)$$

$${}^2\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha c_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha.$$

9.2. Упрощенный подход

Рассмотрим вывод уравнений для частного случая, когда усилия в связях отсутствуют. Это, в частности, выполняется, когда взаимодействие атомов моделируется линейными пружинами, не напряженными в равновесной конфигурации кристалла. Тогда энергия, приходящаяся на элементарную ячейку, может быть представлена в виде

$$W = \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \Pi_\alpha, \quad \Pi_\alpha = \frac{1}{2} c_\alpha \varepsilon_\alpha^2 \quad \Rightarrow \quad W = \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha c_\alpha \varepsilon_\alpha^2, \quad (9.30)$$

где c_α — жесткость связи; ε_α — деформация связи (ее относительное удлинение). Для векторов связей

$$\mathbf{A}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha + \mathbf{\Delta}_\alpha, \quad \mathbf{\Delta}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta}, \quad (9.31)$$

тогда деформация связи может быть вычислена по формуле

$$\varepsilon_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{A_\alpha - a_\alpha}{a_\alpha} \approx \frac{1}{a_\alpha} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{\Delta}_\alpha = \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{\nu_\alpha}{a_\alpha} \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\zeta}. \quad (9.32)$$

Здесь сохранены слагаемые до первого порядка малости по деформациям включительно.

Подстановка (9.32) в выражение для энергии (9.30) приводит его к виду (9.19):

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}^* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta} \cdot {}^2\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}, \quad (9.33)$$

где для тензоров жесткости получаются формулы, в точности совпадающие с формулами (9.29), полученными при $f_\alpha = 0$.

Таким образом, данный упрощенный подход справедлив только для случая, когда в недеформированном кристалле отсутствуют усилия в связях. В противном случае вместо использованных формул

$$P_\alpha = \frac{1}{2} c_\alpha \varepsilon_\alpha^2, \quad \varepsilon_\alpha = \frac{1}{a_\alpha} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{\Delta}_\alpha \quad (9.34)$$

следует использовать формулы

$$P_\alpha = P(a_\alpha) - f_\alpha a_\alpha \varepsilon_\alpha + \frac{1}{2} c_\alpha \varepsilon_\alpha^2, \quad \varepsilon_\alpha = \frac{1}{a_\alpha} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{\Delta}_\alpha + \frac{1}{2a_\alpha^2} (\mathbf{E} - \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha) \cdot \cdot \mathbf{\Delta}_\alpha \mathbf{\Delta}_\alpha, \quad (9.35)$$

где в выражение для потенциала добавлены линейные слагаемые, а деформация представлена с точностью до слагаемых второго порядка малости включительно.

Подстановка данных выражений в формулу (9.3) для энергии с использованием (9.31) позволяет получить выражения для тензоров жесткости при наличии усилий в связях. Однако при этом требуются громоздкие выкладки, поэтому в этом случае более удобным оказывается подход, предложенный в предыдущем параграфе, где потенциал представляется как функция квадрата расстояния между атомами.

9.3. Получение макроскопического тензора жесткости

Выше было получено, что энергия деформирования, приходящаяся на элементарную ячейку сложной двухатомной решетки, имеет вид

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}^* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta} \cdot {}^2\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}, \quad (9.36)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор деформации; $\boldsymbol{\zeta}$ — вектор невязки; ${}^2\mathbf{C}$, ${}^3\mathbf{C}$ и ${}^4\mathbf{C}^*$ — абсолютно симметричные тензоры жесткости второго, третьего и четвертого ранга, соответственно.

Если ввести приведенную невязку

$$\boldsymbol{\zeta}^* = \boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta}_0, \quad \boldsymbol{\zeta}_0 \stackrel{\text{def}}{=} -{}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9.37)$$

то энергия деформирования может быть записана в виде

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta}^* \cdot {}^2\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}^*, \quad (9.38)$$

где ${}^4\mathbf{C}$ — макроскопический тензор жесткости кристалла:

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C}. \quad (9.39)$$

Приведенная невязка обращается в нуль при равновесном расположении подрешеток:

$$\left. \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\zeta}} \right|_{\boldsymbol{\zeta}=\boldsymbol{\zeta}_0} = \left. \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\zeta}^*} \right|_{\boldsymbol{\zeta}^*=0} = 0, \quad (9.40)$$

поэтому для акустических мод колебаний второе слагаемое в формуле (9.38) может быть отброшено, в результате чего получается представление энергии деформирования, используемое в линейной теории упругости. Тензор ${}^2\mathbf{C}$ характеризует удельную жесткость связи между подрешетками.

Представление (9.38) не содержит перекрестного члена, что позволяет сразу получить условие устойчивости сложной решетки: положительная определенность тензоров ${}^4\mathbf{C}$ (макроскопическая устойчивость материала) и ${}^2\mathbf{C}$ (микроскопическая устойчивость относительного смещения

подрешеток). Это, соответственно, отвечает устойчивости акустической и оптической мод колебаний.

Рассмотрим подробнее полученную формулу (9.39) для макроскопического тензора жесткости

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C}. \quad (9.41)$$

Первое слагаемое представляет собой тензор жесткости кристалла при однородном деформировании, второе слагаемое дает вклад от внутренних степеней свободы (относительное смещение подрешеток). Если тензоры жесткости ${}^2\mathbf{C}$, ${}^3\mathbf{C}$ и ${}^4\mathbf{C}^*$ абсолютно симметричны, то макроскопический тензор жесткости, за счет второго слагаемого, таким свойством не обладает. В этом важное отличие сложной решетки от простой. Так, для простой решетки при чисто силовом взаимодействии тензор жесткости абсолютно симметричен и выполняются соотношения Коши

$$C_{1122} = C_{1212} \iff C_{12} = C_{44}, \quad (9.42)$$

не реализующиеся для сложной решетки.

9.4. Решетка графена: общие формулы

В качестве примера двухатомной решетки рассмотрим решетку графена (двухмерную шестиугольную решетку). Эта решетка обладает симметрией третьего порядка относительно каждого атома, этой же симметрией должны обладать и тензорные величины, характеризующие решетку. Требование симметрии дает: вектор $\mathbf{f}_0 = 0$; тензоры $\boldsymbol{\tau}_0$, ${}^4\mathbf{C}^*$, ${}^2\mathbf{C}$ — изотропны; тензор ${}^3\mathbf{C}$ имеет специальный вид, показанный ниже. В резуль-

тате получаем

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau}_0 &= \sigma_0 \mathbf{E}, & \sigma_0 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_0 = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha} f_{\alpha}, \\
{}^4\mathbf{C}^* &= \frac{1}{2} K \mathbf{J}, & K &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{4} \mathbf{E} \cdot {}^4\mathbf{C}^* \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{4V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 \tilde{c}_{\alpha}, \\
{}^3\mathbf{C} &= C_3 {}^3\mathbf{I}, & C_3 &= \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 \odot {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} a_{\alpha} \tilde{c}_{\alpha} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{\alpha})^3, \\
{}^2\mathbf{C} &= C_2 \mathbf{E}, & C_2 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot {}^2\mathbf{C} = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \frac{\nu_{\alpha}}{a_{\alpha}} (a_{\alpha} \tilde{c}_{\alpha} - 2f_{\alpha}).
\end{aligned} \tag{9.43}$$

Выше использованы тензоры

$$\mathbf{J} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n, \tag{9.44}$$

$${}^3\mathbf{I} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1, \tag{9.45}$$

где $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ — ортонормированный базис, причем орт \mathbf{e}_1 направлен вдоль одной из осей симметрии решетки.

Тензор ${}^3\mathbf{I}$, в отличие от \mathbf{J} , неизотропен. Объем элементарной ячейки вычисляется по формуле

$$V_0 = \frac{3\sqrt{3}}{2} a_e^2, \tag{9.46}$$

где a_e — расстояние между ближайшими соседями в недеформированной решетке.

Условие равновесия решетки принимает вид

$$\sigma_0 = 0 \iff \sum_{\alpha} a_{\alpha} f_{\alpha} = 0. \tag{9.47}$$

Из условия (9.47) следует тождество

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 \tilde{c}_{\alpha} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 c_{\alpha}, \tag{9.48}$$

позволяющее в выражении для тензора ${}^3\mathbf{C}^*$ перейти от приведенных жесткостей \tilde{c}_{α} к жесткостям c_{α} . Выпишем еще раз полученные пред-

ставления для тензорных коэффициентов:

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C}^* &= \frac{1}{2}K \mathbf{J}, & K &= \frac{1}{4V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 c_{\alpha}, \\ {}^3\mathbf{C} &= C_3 {}^3\mathbf{I}, & C_3 &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} a_{\alpha} (c_{\alpha} + \phi_{\alpha}) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{\alpha})^3, \\ {}^2\mathbf{C} &= C_2 \mathbf{E}, & C_2 &= \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} (c_{\alpha} - \phi_{\alpha}). \end{aligned} \quad (9.49)$$

Здесь приведенные жесткости \tilde{c}_{α} заменены жесткостями c_{α} и введены относительные усилия в связях

$$\phi_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{a_{\alpha}} f_{\alpha}. \quad (9.50)$$

Вычислим теперь макроскопический тензор жесткости кристалла. Используя формулу (9.39), получаем

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{2}K \mathbf{J} - \frac{C_3^2}{C_2} {}^3\mathbf{I} \cdot {}^3\mathbf{I}. \quad (9.51)$$

Таким образом, влияние внутренних степеней свободы описывается одним скалярным коэффициентом

$$S \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C_3^2}{C_2}. \quad (9.52)$$

Тогда тензор жесткости можно представить в одной из следующих форм:

$${}^4\mathbf{C} = \frac{K}{2} \mathbf{J} - 2S \mathbf{J}_d = \left(\frac{K}{2} + S\right) \mathbf{J}_1 + \left(\frac{K}{2} - S\right) \mathbf{J}_{23} = 2K \mathbf{J}_s + (K - 2S) \mathbf{J}_d, \quad (9.53)$$

где использованы изотропные тензоры (2.19), (2.21):

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, & \mathbf{J}_{23} &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n, \\ \mathbf{J}_s &= \frac{1}{2} \mathbf{J}_1, & \mathbf{J}_d &= \frac{1}{2} (\mathbf{J}_{23} - \mathbf{J}_1) = \frac{1}{2} {}^3\mathbf{I} \cdot {}^3\mathbf{I}, & \mathbf{J} &= \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}, \end{aligned} \quad (9.54)$$

в частности, \mathbf{J}_s — шаровой тензор; \mathbf{J}_d — девиаторный.

Отметим, что, хотя тензор ${}^3\mathbf{I}$ не изотропен, произведение ${}^3\mathbf{I} \cdot {}^3\mathbf{I} = 2\mathbf{J}_d$ изотропно, в результате чего макроскопический тензор жесткости оказывается изотропным, что и должно выполняться в силу симметрии решетки графена. Так как добавка, связанная с внутренними степенями

свободы, согласно (9.53), имеет чисто девиаторный характер, то она не влияет на модуль объемного сжатия, равный для тензоров ${}^4\mathbf{C}^*$ и ${}^4\mathbf{C}$.

Выпишем значения характеристик упругости, соответствующих тензору ${}^4\mathbf{C}^*$ (помечены “звездочками”):

$$\begin{aligned} \lambda^* = \mu^* = G^* = C_{12}^* = C_{44}^* &= \frac{1}{2}K, & C_{11}^* &= \frac{3}{2}K, \\ E^* &= \frac{4}{3}K, & \nu^* &= \frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (9.55)$$

Данные характеристики описывают связь между напряжениями и деформациями при однородном деформировании кристалла (без учета относительного смещения подрешеток). Согласно (9.53), выражения для макроскопических характеристик упругости (соответствующих тензору ${}^4\mathbf{C}$) имеют вид

$$G = \frac{1}{2}K - S, \quad \lambda = \frac{1}{2}K + S, \quad (9.56)$$

$$C_{11} = \frac{3}{2}K - S, \quad C_{12} = \frac{1}{2}K + S, \quad C_{44} = \frac{1}{2}K - S,$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}} = \frac{K + 2S}{3K - 2S}, \quad E = 2K(1 - \nu) = 4K \frac{K - 2S}{3K - 2S}. \quad (9.57)$$

Согласно формулам (9.56), параметр S характеризует отклонение от соотношений Коши:

$$S = \frac{1}{2}(C_{12} - C_{44}) = \frac{1}{2}(C_{1122} - C_{1212}). \quad (9.58)$$

Макроскопическое условие устойчивости (положительная определенность тензора ${}^4\mathbf{C}$) сводится к неравенствам

$$K > 0, \quad G > 0. \quad (9.59)$$

Микроскопическое условие устойчивости (положительная определенность тензора ${}^2\mathbf{C}$) имеет вид

$$C_2 > 0 \iff S > 0 \iff C_{12} > C_{44} \iff K > 2G. \quad (9.60)$$

Тогда полные условия устойчивости решетки графена (микро- и макроскопические) могут быть представлены в форме

$$K > 2S > 0 \iff K > 2G > 0. \quad (9.61)$$

Запишем формулу (9.57) для коэффициента Пуассона в виде

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\frac{1 + 2S/K}{1 - \frac{2}{3}S/K} \right). \quad (9.62)$$

Тогда, согласно неравенству (9.61), возможные значения коэффициента Пуассона находятся в интервале

$$\frac{1}{3} < \nu < 1. \quad (9.63)$$

Следовательно, рассматриваемая силовая модель ни при каком выборе потенциала взаимодействия не позволяет получить коэффициент Пуассона меньше $1/3$. Ограничение снизу для коэффициента Пуассона диктуется микроскопическим требованием устойчивости относительно смещения подрешеток. Напомним, однако, что, согласно известным экспериментальным данным [31], значение коэффициента Пуассона для графена должно быть значительно меньше — около 0.17.

Согласно формулам (9.56)–(9.57), все характеристики упругости могут быть выражены через два скалярных параметра K и S . Выпишем, используя формулы (9.49), их микроскопическое представление:

$$K = \frac{1}{4V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 c_{\alpha}, \quad S \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C_3^2}{C_2} = \frac{2}{V_0} \frac{\left(\sum_{\alpha} \nu_{\alpha} a_{\alpha} (c_{\alpha} + \phi_{\alpha}) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{\alpha})^3 \right)^2}{\sum_{\alpha} \nu_{\alpha} (c_{\alpha} - \phi_{\alpha})}. \quad (9.64)$$

Удобно также ввести безразмерный коэффициент

$$s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{S}{K} = 8 \frac{\left(\sum_{\alpha} \nu_{\alpha} a_{\alpha} (c_{\alpha} + \phi_{\alpha}) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{\alpha})^3 \right)^2}{\left(\sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 c_{\alpha} \right) \left(\sum_{\alpha} \nu_{\alpha} (c_{\alpha} - \phi_{\alpha}) \right)}, \quad (9.65)$$

характеризующий относительное влияние внутренних степеней свободы.

Условия устойчивости (9.61) вносят ограничения для значений параметра s :

$$0 < s < \frac{1}{2}. \quad (9.66)$$

С использованием коэффициента s , например, формула для коэффициента Пуассона принимает вид

$$\nu = \frac{1 + 2s}{3 - 2s} = \frac{1}{3} \left(1 + \frac{8s}{3 - 2s} \right). \quad (9.67)$$

Рассмотрим подробнее формулу (9.65) для параметра S . Она содержит неинвариантную характеристику — орт симметрии решетки \mathbf{e}_1 . Однако макроскопический тензор жесткости изотропен, следовательно, должна существовать инвариантная формула для определения S . Для получения такой формулы вычислим свертку:

$${}^3\mathbf{C} \odot {}^3\mathbf{C} = C_3^2 ({}^3\mathbf{I} \odot {}^3\mathbf{I}) = 4C_3^2. \quad (9.68)$$

Тогда, используя формулу (9.27), получим

$$C_3^2 = \frac{1}{4} {}^3\mathbf{C} \odot {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{4V_0^2} \sum_{\alpha, \beta} \nu_\alpha \nu_\beta a_\alpha a_\beta \tilde{c}_\alpha \tilde{c}_\beta (\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta)^3. \quad (9.69)$$

В результате для параметра S получаем инвариантное представление:

$$S = \frac{1}{2V_0} \frac{\sum_{\alpha, \beta} \nu_\alpha \nu_\beta a_\alpha a_\beta (c_\alpha + \phi_\alpha)(c_\beta + \phi_\beta) (\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta)^3}{\sum_\alpha \nu_\alpha (c_\alpha - \phi_\alpha)}. \quad (9.70)$$

Инвариантное представление коэффициента s :

$$s = 2 \frac{\sum_{\alpha, \beta} \nu_\alpha \nu_\beta a_\alpha a_\beta (c_\alpha + \phi_\alpha)(c_\beta + \phi_\beta) (\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta)^3}{\sum_\alpha a_\alpha^2 c_\alpha \sum_\beta \nu_\beta (c_\beta - \phi_\beta)}. \quad (9.71)$$

9.5. Конкретные модели решетки графена

Расчетные формулы

Выпишем основные формулы, определяющие связь микро- и макропараметров.

$$\begin{aligned} \sum_\alpha a_\alpha f_\alpha &= 0, & K &= \frac{1}{4V_0} \sum_\alpha a_\alpha^2 c_\alpha, & S &= \frac{C_3^2}{C_2}, \\ C_3 &= \frac{1}{V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha a_\alpha (c_\alpha + \phi_\alpha) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_\alpha)^3, & C_2 &= \frac{1}{2V_0} \sum_\alpha \nu_\alpha (c_\alpha - \phi_\alpha), \\ c_\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a_\alpha), & f_\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(a_\alpha), & \phi_\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{a_\alpha} f_\alpha. \end{aligned} \quad (9.72)$$

При суммировании по координационным сферам формулы приобретают вид

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n M_k \rho_k f_k &= 0, & K &= \frac{\sqrt{3}}{18} \sum_{k=1}^n M_k \rho_k^2 c_k, & S &= \frac{C_3^2}{C_2}, \\ C_3 &= \frac{2\sqrt{3}}{9a_e^2} \sum_{k=1}^n \nu_k a_k (c_k + \phi_k) \sum_{\alpha} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{k\alpha})^3, & C_2 &= \frac{\sqrt{3}}{9a_e^2} \sum_{k=1}^n \nu_k M_k (c_k - \phi_k), \end{aligned} \quad (9.73)$$

где k — номер координационной сферы; M_k — число лежащих на ней атомов (координационное число); n — число учитываемых координационных сфер; ρ_k и R_k — относительный и абсолютный радиусы координационной сферы, $\rho_k \stackrel{\text{def}}{=} R_k/a_e$; a_e — расстояние между ближайшими соседями в равновесной решетке; $\mathbf{n}_{k\alpha}$ — орты для координационной сферы k ; индекс α пробегает по всем атомам, лежащим на данной координационной сфере.

При отсутствии усилий в связях формулы примут вид

$$\begin{aligned} K &= \frac{\sqrt{3}}{18} \sum_{k=1}^n M_k \rho_k^2 c_k, & C_3 &= \frac{2\sqrt{3}}{9a_e} \sum_{k=1}^n \nu_k \rho_k c_k \sum_{\alpha} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{k\alpha})^3, \\ C_2 &= \frac{\sqrt{3}}{9a_e^2} \sum_{k=1}^n \nu_k M_k c_k. \end{aligned} \quad (9.74)$$

Формулы для вычисления характеристик упругости:

$$G = \frac{1}{2}K - S, \quad \lambda = \frac{1}{2}K + S, \quad (9.75)$$

$$C_{11} = \frac{3}{2}K - S, \quad C_{12} = \frac{1}{2}K + S, \quad C_{44} = \frac{1}{2}K - S,$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}} = \frac{K + 2S}{3K - 2S}, \quad E = 2K(1 - \nu) = 4K \frac{K - 2S}{3K - 2S}. \quad (9.76)$$

Формулы для вычисления характеристик упругости, выраженные через безразмерный параметр $s = S/K$:

$$G = \left(\frac{1}{2} - s\right)K, \quad \lambda = \left(\frac{1}{2} + s\right)K; \quad (9.77)$$

$$C_{11} = \left(\frac{3}{2} - s\right)K, \quad C_{12} = \left(\frac{1}{2} + s\right)K, \quad C_{44} = \left(\frac{1}{2} - s\right)K;$$

$$\nu = \frac{1 + 2s}{3 - 2s}, \quad E = \frac{1 - 2s}{3 - 2s} 4K. \quad (9.78)$$

Условия устойчивости:

$$K > 2S > 0 \quad \Rightarrow \quad G > 0, \quad 0 < s < 1/2. \quad (9.79)$$

Взаимодействие ближайших соседей

В этом простейшем случае

$$\begin{aligned} k = n = 1, \quad M_k = 3, \quad \rho_k = 1, \quad \nu_k = 1, \\ a_{\mathbf{e}} \stackrel{\text{def}}{=} a, \quad c_k \stackrel{\text{def}}{=} c, \quad f_k = 0, \quad \mathbf{n}_{k\alpha} = \mathbf{n}_\alpha. \end{aligned} \quad (9.80)$$

Орты связей запишем в виде

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{n}_{2,3} = -\frac{1}{2}\mathbf{e}_1 \pm \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_2 \quad \Rightarrow \quad \sum_{\alpha} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_\alpha)^3 = 1 - \frac{1}{8} - \frac{1}{8} = \frac{3}{4}. \quad (9.81)$$

Тогда получаем

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6}c, \quad C_3 = \frac{\sqrt{3}c}{6a}, \quad C_2 = \frac{\sqrt{3}c}{3a^2}; \quad S = \frac{\sqrt{3}}{12}c, \quad s = \frac{1}{2}. \quad (9.82)$$

Откуда для характеристик упругости

$$G = 0, \quad \lambda = K, \quad C_{11} = C_{12} = K, \quad C_{44} = 0, \quad \nu = 1, \quad E = 0. \quad (9.83)$$

Таким образом, материал имеет нулевой модуль сдвига, а коэффициент объемного сжатия в три раза меньше, чем в треугольной решетке с теми же значениями a и c (см. формулу (4.17)). Материал неустойчив относительно сдвиговой деформации.

Две координационные сферы без учета усилий в связях

Данная модель использовалась в работах Р. В. Гольдштейна и А. В. Ченцова, в частности в статье [4]. В модели учитывается взаимодействие с атомами, лежащими на первых двух координационных сферах; при этом взаимодействие описывается посредством ненапряженных пружин. То-

гда

$$\begin{aligned}
 n = 2; \quad M_1 = 3, \quad M_2 = 6, \quad \rho_1 = 1, \quad \rho_2 = \sqrt{3}, \\
 \nu_1 = 1, \quad \nu_2 = 0, \quad a_e \stackrel{\text{def}}{=} a, \quad f_k = 0, \\
 \mathbf{n}_{1\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_\alpha, \quad \sum_\alpha (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_\alpha)^3 = 3/4.
 \end{aligned} \tag{9.84}$$

Откуда получаем

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 6c_2), \quad C_3 = \frac{\sqrt{3} c_1}{6 a}, \quad C_2 = \frac{\sqrt{3} c_1}{3 a^2}. \tag{9.85}$$

Так как $\nu_2 = 0$, то по сравнению с предыдущим случаем, изменилось только выражение для коэффициента объемного сжатия K . И далее:

$$S = \frac{\sqrt{3}}{12} c_1, \quad s = \frac{1}{2} \frac{c_1}{c_1 + 6c_2}. \tag{9.86}$$

Откуда для характеристик упругости получаем

$$G = C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{2} c_2, \quad C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 9c_2), \quad \lambda = C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 3c_2), \tag{9.87}$$

$$\nu = \frac{c_1 + 3c_2}{c_1 + 9c_2}, \quad E = 2\sqrt{3} c_2 \frac{c_1 + 6c_2}{c_1 + 9c_2}. \tag{9.88}$$

Рассмотрим полученные формулы. Сдвиговая жесткость решетки G определяется исключительно жесткостью c_2 . Кроме того, полученное значение G равно удвоенному значению для треугольной решетки, жесткости связей в которой равны c_2 (см. формулу (4.18)), что естественно, так как решетка графена состоит из двух треугольных подрешеток. Вклад внутренних степеней свободы S , напротив, определяется только жесткостью c_1 и совпадает со значением, полученным для предыдущей модели (взаимодействие ближайших соседей).

Макроскопические условия устойчивости $K > 0$, $G > 0$ приводят к неравенствам

$$c_1 > -6c_2, \quad c_2 > 0, \tag{9.89}$$

допускающим отрицательную жесткость связи с атомами первой координационной сферы. Однако микроскопическое условие устойчивости

$S > 0$ равносильно требованию $c_1 > 0$. Действительно, c_1 определяет жесткость связи между подрешетками. При отрицательности c_1 при любом возмущении подрешетки начнут смещаться друг относительно друга, уходя все дальше от равновесного состояния, соответствующего шестиугольной решетке графена. Таким образом, условия устойчивости решетки, учитывающие микро- и макроскопические требования, принимают вид

$$c_1 > 0, \quad c_2 > 0. \quad (9.90)$$

Представим коэффициент Пуассона формулой

$$\nu = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \frac{1}{1 + 9c_2/c_1}, \quad (9.91)$$

из которой следует, что коэффициент Пуассона — убывающая функция отношения c_2/c_1 , лежащая при положительных жесткостях в пределах

$$\frac{1}{3} < \nu < 1, \quad (9.92)$$

причем предельные значения соответствуют:

$$\begin{aligned} c_1 \ll c_2 &\Rightarrow \nu \approx 1/3 && \text{(две треугольные решетки);} \\ c_1 \gg c_2 &\Rightarrow \nu \approx 1 && \text{(малая сдвиговая жесткость).} \end{aligned} \quad (9.93)$$

Согласно формулам

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 6c_2), \quad S = \frac{\sqrt{3}}{12} c_1, \quad (9.94)$$

имеется взаимно однозначное соответствие между жесткостями c_1 , c_2 и модулями K , S ; а согласно формулам

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 6c_2), \quad \nu = \frac{1 + 3c_2/c_1}{1 + 9c_2/c_1} \quad (9.95)$$

— взаимно однозначное соответствие между жесткостями и параметрами K , ν . Таким образом, выбором жесткостей c_1 и c_2 можно получить любые возможные значения упругих характеристик материала в пределах зоны устойчивости. Следовательно, дальнейшее усложнение модели (учет усилий в связях, учет следующих координационных сфер) не принесет качественных изменений на макроуровне. Доступной будет та же область значений, соответствующая неравенству $1/3 < \nu < 1$, и недоступными останутся материалы с коэффициентом Пуассона $\nu \leq 1/3$.

Две координационные сферы — общий случай

По сравнению с рассмотренной выше моделью, учтем усилия в связях. Тогда

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 6c_2), \quad C_3 = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{c_1 + \phi_1}{a}, \quad C_2 = \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_1 - \phi_1}{a^2}, \quad (9.96)$$

$$S = \frac{\sqrt{3}}{12} \frac{(c_1 + \phi_1)^2}{c_1 - \phi_1}, \quad s = \frac{1}{2} \frac{(c_1 + \phi_1)^2}{(c_1 - \phi_1)(c_1 + 6c_2)}. \quad (9.97)$$

Характеристики упругости могут быть вычислены по формулам

$$G = C_{44} = \left(\frac{1}{2} - s\right)K, \quad \lambda = C_{12} = \left(\frac{1}{2} + s\right)K, \quad C_{11} = \left(\frac{3}{2} - s\right)K, \quad (9.98)$$

$$\nu = \frac{1 + 2s}{3 - 2s}, \quad E = \frac{1 - 2s}{3 - 2s} 4K. \quad (9.99)$$

Как и предсказывалось в предыдущем разделе, учет усилий в связях не привел к качественным изменениям на макроуровне — усложнилось лишь выражение для коэффициента s . Однако на микроуровне изменения есть — в частности, условия устойчивости сводятся к неравенствам

$$c_1 + 6c_2 > 0, \quad (c_1 - \phi_1)(c_1 + 6c_2) > (c_1 + \phi_1)^2, \quad (9.100)$$

допускающим отрицательные значения для одной из жесткостей.

Условия равновесия

$$\sum_{k=1}^n M_k \rho_k f_k = 0 \quad (9.101)$$

в данной модели принимают вид

$$f_1 + 2\sqrt{3}f_2 = 0 \quad \iff \quad \phi_1 + 6\phi_2 = 0. \quad (9.102)$$

Они не накладывают ограничения на ϕ_1 (при произвольном законе взаимодействия) и могут использоваться для определения ϕ_2 .

Три координационные сферы без учета усилий в связях

В данной модели рассматривается взаимодействие с тремя координационными сферами посредством ненапряженных пружин. Тогда

$$\begin{aligned}
 n &= 3, & M_1 &= 3, & M_2 &= 6, & M_3 &= 3, \\
 \rho_1 &= 1, & \rho_2 &= \sqrt{3}, & \rho_3 &= 2, \\
 \nu_1 &= 1, & \nu_2 &= 0, & \nu_3 &= 1, & a_{\mathbf{e}} &\stackrel{\text{def}}{=} a, & f_k &= 0, \\
 \mathbf{n}_{3\alpha} &= -\mathbf{n}_{1\alpha}, & \sum_{\alpha} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{11})^3 &= -\sum_{\alpha} (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_{13})^3 &= 3/4.
 \end{aligned} \tag{9.103}$$

Откуда получаем

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 6c_2 + 4c_3), \quad C_3 = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{c_1 - 2c_3}{a}, \quad C_2 = \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_1 + c_3}{a^2}, \tag{9.104}$$

$$S = \frac{\sqrt{3}}{12} \frac{(c_1 - 2c_3)^2}{c_1 + c_3}, \quad s = \frac{1}{2} \frac{(c_1 - 2c_3)^2}{(c_1 + c_3)(c_1 + 6c_2 + 4c_3)}. \tag{9.105}$$

Характеристики упругости могут вычисляться по формулам

$$G = C_{44} = \frac{1}{2}K - S, \quad \lambda = C_{12} = \frac{1}{2}K + S, \quad C_{11} = \frac{3}{2}K - S, \tag{9.106}$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}}, \quad E = 2K(1 - \nu). \tag{9.107}$$

В частности,

$$G = \frac{\sqrt{3}}{4} \left(2c_2 + 3 \frac{c_1 c_3}{c_1 + c_3} \right). \tag{9.108}$$

Выпишем макроскопические условия устойчивости:

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} (c_1 + 6c_2 + 4c_3) > 0, \quad G = \frac{\sqrt{3}}{4} \left(2c_2 + 3 \frac{c_1 c_3}{c_1 + c_3} \right) > 0. \tag{9.109}$$

При их рассмотрении можно обнаружить парадоксальную ситуацию, когда модуль сдвига стремится к бесконечности при конечных значениях жесткостей, а условия устойчивости при этом не нарушаются. Для этого достаточно взять сумму c_1 и c_2 разных знаков, но так, чтобы их сумма была отрицательна и близка к нулю. Тогда дробь в выражении для G может принять сколь угодно большое положительное значение. При этом

положительность K обеспечивается достаточно большим значением c_2 . Однако существование такого материала запрещено микроскопическим условием устойчивости $S > 0$, согласно которому $c_1 + c_3 > 0$. С учетом последнего неравенства условие $K > 0$ оказывается следствием $G > 0$, в результате чего полные условия устойчивости принимают вид

$$c_2 > -\frac{3}{2} \frac{c_1 c_3}{c_1 + c_3}, \quad c_1 + c_3 > 0. \quad (9.110)$$

Из неравенств (9.110), в частности, следует, что у устойчивого материала только одна из трех жесткостей может быть отрицательной.

Глава 10

Моментное взаимодействие

Выводится тензор жесткости двухатомной кристаллической решетки при учете силового и моментного взаимодействий. Связи для равновесного кристалла считаются ненапряженными. Более подробно рассматриваются трансверсально-изотропные связи при взаимодействии с атомами первой координационной сферы. В качестве примера рассматриваются решетки графена и алмаза.

10.1. Вывод уравнений

Рассмотрим сложную кристаллическую решетку, элементарная ячейка которой содержит два атома. Будем условно называть их атомами первого и второго типа, соответственно. Атомы каждого типа образуют простую кристаллическую решетку, причем эти решетки конгруэнтны. Выберем один из атомов первого типа и назовем его отсчетным. Пронумеруем атомы, с которыми взаимодействует отсчетный, индексами α . Потенциальная энергия, приходящаяся на отсчетный атом, может быть представлена в виде

$$P \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_{\alpha} P_{\alpha}, \quad (10.1)$$

где P_{α} — потенциал взаимодействия отсчетного атома с атомом α ; множитель $1/2$ в формуле (10.1) возник в связи с тем, что потенциал P_{α} описывает взаимодействие двух атомов.

Энергия, приходящаяся на элементарную ячейку решетки опреде-

ляется формулой

$$W \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{V_0} \Pi = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha}, \quad (10.2)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки недеформированной решетки; множитель 2 требуется, так как элементарная ячейка содержит два атома (энергии, приходящиеся на каждый из атомов элементарной ячейки, равны в силу симметрии решетки).

Векторы, направленные из отсчетного атома в атом α для недеформированного состояния кристалла, обозначим \mathbf{a}_{α} . Атомы решетки будем моделировать твердыми телами, векторы перемещения и поворота которых по отношению к их положению в недеформированном кристалле обозначим \mathbf{u}_{α} и φ_{α} ; векторы перемещения и поворота отсчетного атома обозначим \mathbf{u} и φ . Тогда потенциал взаимодействия атомов может быть представлен в виде [13]

$$\Pi_{\alpha} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha} \cdot \mathbf{B}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}_{\alpha} \cdot \mathbf{G}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha}, \quad (10.3)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha}$ и $\boldsymbol{\kappa}_{\alpha}$ — векторы деформации межатомных связей:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}_{\alpha} - \mathbf{u} + \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha} \times (\varphi_{\alpha} + \varphi), \quad \boldsymbol{\kappa}_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_{\alpha} - \varphi; \quad (10.4)$$

\mathbf{A}_{α} , \mathbf{B}_{α} и \mathbf{G}_{α} — тензоры жесткости межатомных связей (второго ранга).

В представлении (10.3) отсутствуют линейные по деформациям слагаемые, что означает отсутствие начальных усилий в связях (в равновесном состоянии кристалла связи являются ненапряженными). Использование данного приближения оправдано, так как в реальности, в силу быстрого убывания взаимодействия, начальные усилия в связях малы. Учет же их приводит к сильному усложнению формул и, вообще говоря, к необходимости привлечения нелинейной теории.

Макроскопическое представление удельной (приходящейся на единицу объема) энергии деформирования моментной среды при малых деформациях имеет вид [13]

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot \cdot \mathbf{A} \cdot \cdot \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot \cdot \mathbf{B} \cdot \cdot \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \cdot \cdot \cdot \cdot \mathbf{G} \cdot \cdot \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa}. \quad (10.5)$$

Здесь ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{B}$ и ${}^4\mathbf{G}$ — тензоры жесткости среды (четвертого ранга); $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ — макроскопические тензоры деформации:

$$\boldsymbol{\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi}, \quad \boldsymbol{\kappa} \stackrel{\text{def}}{=} \nabla \boldsymbol{\varphi}, \quad (10.6)$$

где \mathbf{u} и $\boldsymbol{\varphi}$ — векторы перемещения и поворота элемента среды; ∇ — векторный дифференциальный оператор.

При однородном¹ деформировании решетки справедливы представления

$$\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u} + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta}, \quad \boldsymbol{\varphi}_\alpha = \boldsymbol{\varphi} + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi} + \nu_\alpha \boldsymbol{\psi}, \quad (10.7)$$

где $\boldsymbol{\zeta}$ и $\boldsymbol{\psi}$ — векторы трансляционной и угловой невязок, описывающих, соответственно, смещения и повороты частиц одной подрешетки по отношению к частицам другой подрешетки; ν_α — коэффициент, принимающий значение 0 для атомов первого типа и значение 1 для атомов второго типа.

Подстановка представлений (10.7) в выражения (10.4) позволяет получить следующую связь векторов деформации связей и тензоров деформации среды:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \nu_\alpha \boldsymbol{\zeta} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{a}_\alpha + \frac{1}{2} \nu_\alpha \mathbf{a}_\alpha \times \boldsymbol{\psi}, \quad \boldsymbol{\kappa}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa} + \nu_\alpha \boldsymbol{\psi}. \quad (10.8)$$

10.2. Переход к безмоментной теории

На макроуровне, как правило, достаточно безмоментного описания деформирования среды, поэтому рассмотрим переход к безмоментной теории. Можно показать, что для линейно-упругого материала, с симметрией не ниже кубической, условие безмоментности приводит к симметрии тензора деформации. Тогда, используя (10.6), получаем

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^S \iff (\nabla \mathbf{u})^A + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi} = 0 \iff \boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}. \quad (10.9)$$

Геометрически соотношение (10.9) означает, что все частицы поворачиваются вместе со средой.

¹Под однородным будем понимать деформирование, при котором перемещения и повороты являются линейными функциями координат.

Для второго тензора деформации получаем

$$\boldsymbol{\kappa} = \nabla \varphi = \frac{1}{2} \nabla \nabla \times \mathbf{u}, \quad (10.10)$$

а следовательно, при однородном деформировании данный тензор тождественно обращается в нуль. Будем также считать, что в ноль обращается угловая невязка $\boldsymbol{\psi}$. Тогда формулы (10.2), (10.3), (10.8) дают

$$W = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha} = \mathbf{a}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \nu_{\alpha} \boldsymbol{\zeta}, \quad (10.11)$$

откуда получаем

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \mathbf{C}^* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}, \quad (10.12)$$

где

$$\mathbf{C}^* = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} (\mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha})^S, \quad \mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} (\mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha})^S, \quad \mathbf{C} = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}. \quad (10.13)$$

Здесь симметризация ведется по тем векторам, на которые в формуле (10.12) умножается симметричный тензор $\boldsymbol{\varepsilon}$. Невязка находится из условия равновесия материала при заданном тензоре $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\zeta}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\zeta} = -\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{C}^{-1} = -{}^2(\mathbf{C}^{-1}) \cdot \mathbf{C}^T \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (10.14)$$

где

$${}^3\mathbf{C}^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} (\mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha})^S, \quad (10.15)$$

причем симметризация ведется по правым двум индексам. Подстановка выражения (10.14) для $\boldsymbol{\zeta}$ в формулу (10.12) дает

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{C}^* - \mathbf{C} \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{C}^T. \quad (10.16)$$

Таким образом, получено выражение для тензора жесткости макроскопической безмоментной теории упругости.

10.3. Трансверсально-изотропные связи

Будем считать тензоры жесткости силового взаимодействия между атомами трансверсально-изотропными, при этом, для простоты, ограничимся взаимодействием с атомами первой координационной сферы. Тогда тензоры жесткости связей могут быть записаны в виде

$$\mathbf{A}_\alpha = c_A \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + c_D (\mathbf{E} - \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha), \quad \mathbf{n}_\alpha = \frac{1}{a} \mathbf{a}_\alpha, \quad a = |\mathbf{a}_\alpha|, \quad (10.17)$$

где c_A и c_D — продольная и поперечная жесткости связей.

Подстановка выражения (10.17) в (10.13) дает

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C}^* &= \frac{a^2}{V_0} \sum_{\alpha} \left((c_A - c_D) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + c_D \mathbf{n}_\alpha \mathbf{E} \mathbf{n}_\alpha \right)^S, \\ {}^3\mathbf{C} &= \frac{a}{V_0} (c_A - c_D) \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \\ {}^2\mathbf{C} &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} \left((c_A - c_D) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + c_D \mathbf{E} \right). \end{aligned} \quad (10.18)$$

Здесь использовано, что $\sum_{\alpha} \nu_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha = 0$.

Далее, для упрощения, ограничимся рассмотрением кристаллических решеток, для которых $\nu_{\alpha} = 1$, т. е. на первой координационной сфере находятся атомы только второго типа. Кроме того, будем считать, что тензор $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha$ изотропен. Оба этих предположения выполняются для кристаллических решеток графена и алмаза, которые будут рассматриваться ниже. Указанные предположения позволяют воспользоваться тождествами

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = \frac{M}{d} \mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{E} \mathbf{n}_\alpha = \frac{M}{d} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k, \quad (10.19)$$

где M — координационное число; d — размерность пространства; \mathbf{e}_k — ортонормированный базис, здесь и далее ведется суммирование по повторяющемуся латинскому индексу от 1 до d .

Тогда формулы (10.18) приобретают вид

$${}^4\mathbf{C}^* = \frac{a^2}{V_0} \left((c_A - c_D) \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \frac{M}{2d} c_D \mathbf{J}_{23} \right), \quad (10.20)$$

$${}^3\mathbf{C} = \frac{a}{V_0}(c_A - c_D) \sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}, \quad {}^2\mathbf{C} = \frac{M}{V_0 d} (c_A + d_1 c_D) \mathbf{E}, \quad (10.21)$$

где

$$\mathbf{J}_{23} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n, \quad d_1 \stackrel{\text{def}}{=} d - 1. \quad (10.22)$$

Отметим, что, например, для гексагональной плотноупакованной решетки (ГПУ) указанные предположения не выполняются, и для нее вместо формул (10.20)–(10.21) должны использоваться полные формулы (10.18).

Запишем выражение (10.16) для результирующего тензора жесткости ${}^4\mathbf{C}$ в форме

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^4\mathbf{C}', \quad {}^4\mathbf{C}' \stackrel{\text{def}}{=} {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C}^T, \quad (10.23)$$

где тензор ${}^4\mathbf{C}^*$ определяется формулой (10.20), а для поправочного тензора жесткости ${}^4\mathbf{C}'$, с использованием формул (10.21), получаем

$${}^4\mathbf{C}' = \frac{a^2 d}{V_0 M} \frac{(c_A - c_D)^2}{(c_A + d_1 c_D)} \sum_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \cdot \sum_{\beta} \mathbf{n}_{\beta} \mathbf{n}_{\beta} \mathbf{n}_{\beta}. \quad (10.24)$$

10.4. Решетки графена и алмаза

Решетка графена двумерная, алмаза — трехмерная, в остальном они обладают большим числом схожих свойств, позволяющих их рассматривать вместе и получать формулы, справедливые для обеих решеток. Значение координационного числа для этих решеток определяется как

$$M = d + 1, \quad d = 2, 3, \quad (10.25)$$

что позволяет записать формулы (10.20), (10.24) в виде

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^4\mathbf{C}',$$

$${}^4\mathbf{C}^* = \frac{a^2}{V_0} \left((c_A - c_D) \sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + \frac{d+1}{2d} c_D \mathbf{J}_{23} \right), \quad (10.26)$$

$${}^4\mathbf{C}' = \frac{d}{d+1} \frac{a^2}{V_0} \frac{(c_A - c_D)^2}{(c_A + d_1 c_D)} \sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \cdot \sum_{\beta=1}^{d+1} \mathbf{n}_{\beta} \mathbf{n}_{\beta} \mathbf{n}_{\beta}.$$

Вычислим произведение

$$\sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \sum_{\beta=1}^{d+1} \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta = \sum_{\alpha, \beta=1}^{d+1} (\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta) \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta. \quad (10.27)$$

Используя условие $\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha = 0$, несложно получить, что

$$\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ -1/d, & \alpha \neq \beta, \end{cases} \iff \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta = \frac{1}{d} \left((d+1)\delta_{\alpha\beta} - 1 \right), \quad (10.28)$$

где $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера.

Подстановка формулы (10.28) в (10.27) дает

$$\sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \sum_{\beta=1}^{d+1} \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta = \frac{d+1}{d} \sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha - \frac{1}{d} \sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \sum_{\beta=1}^{d+1} \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta. \quad (10.29)$$

Формула (10.29) с учетом соотношения

$$\sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = \frac{d+1}{d} \mathbf{E} \quad (10.30)$$

позволяет упростить формулу для поправочного тензора жесткости:

$${}^4\mathbf{C}' = \frac{a^2}{V_0} \frac{(c_A - c_D)^2}{(c_A + d_1 c_D)} \left(\sum_{\alpha=1}^{d+1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha - \frac{d+1}{d^2} \mathbf{E} \mathbf{E} \right). \quad (10.31)$$

Запишем тензор жесткости в форме (3.17):

$${}^4\mathbf{C} = \kappa' \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \lambda' \mathbf{J}_1 + \mu' \mathbf{J}_{23}, \quad \mathbf{J}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E} \mathbf{E}. \quad (10.32)$$

Для коэффициентов представления, используя (10.26) и (10.31), получаем

$$\kappa' = d \frac{a^2}{V_0} \frac{c_D (c_A - c_D)}{c_A + d_1 c_D}, \quad \lambda' = \frac{d+1}{d^2} \frac{a^2}{V_0} \frac{(c_A - c_D)^2}{c_A + d_1 c_D}, \quad \mu' = \frac{d+1}{2d} \frac{a^2}{V_0} c_D. \quad (10.33)$$

Для решеток, упругие свойства которых изотропны (например, графен) или обладают кубической симметрией (например, алмаз), справедлива формула (2.27):

$$\sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha = M_\kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + M_\mu (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23}), \quad (10.34)$$

где \mathbf{e}_k — орты ортонормированного базиса, направленные или вдоль осей кубической симметрии, или для изотропии, произвольным образом; M_κ и M_μ — безразмерные коэффициенты, определяемые формулами

$$M_\kappa = \frac{2M}{d} \frac{1 - \eta_c}{d\eta_c + 2}, \quad M_\mu = \frac{M}{d} \frac{\eta_c}{d\eta_c + 2}, \quad (10.35)$$

где η_c — параметр анизотропии тензора $\sum_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha$, совпадающий с параметром анизотропии тензора жесткости рассматриваемого материала при чисто силовом взаимодействии.

Подставляя представление (10.34) в (10.32), получаем

$${}^4\mathbf{C} = \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23}, \quad (10.36)$$

$$\kappa = M_\kappa \kappa', \quad \lambda = M_\mu \kappa' + \lambda', \quad \mu = M_\mu \kappa' + \mu',$$

где κ , λ , μ — обобщенные коэффициенты Ляме.

Далее все модули тензора жесткости могут быть вычислены по формулам

$$C_{11} = \kappa + \lambda + 2\mu, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{44} = \mu; \quad K = \frac{\kappa + d\lambda + 2\mu}{d},$$

$$E = \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + d\lambda + 2\mu)}{\kappa + d_1\lambda + 2\mu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{\kappa + d_1\lambda + 2\mu}, \quad \eta = \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu}. \quad (10.37)$$

Приведем значения безразмерных параметров для решеток графена и алмаза (табл. 10.1). Для алмаза параметр анизотропии вычислялся в

Таблица 10.1: Значения безразмерных параметров для решеток графена и алмаза

Решетка	d	M	η_c	M_κ	M_μ	$V_0 a^{-d}$
Графен	2	3	1	0	3/8	$3\sqrt{3}/2$
Алмаз	3	4	∞	-8/9	4/9	$16\sqrt{3}/9$

базисе \mathbf{e}_k (т. е. для направления 100). Для вычисления параметра анизотропии алмаза удобно использовать тот факт, что он должен совпадать с таковым для ОЦК решетки (так как вершины векторов \mathbf{n}_α , вместе с векторами $-\mathbf{n}_\alpha$, дают восемь точек, являющихся вершинами куба, в центре которого находится отсчетный атом). Для вычисления объема

элементарной ячейки может использоваться следующая общая формула (полученная эмпирически):

$$V_0 = \sqrt{\frac{(d+1)^{d+1}}{d^d}} a^d, \quad d = 1, 2, 3. \quad (10.38)$$

Решетка графена

Подставляя формулы (10.33) в (10.36), с использованием табл. 10.1, получаем для решетки графена

$$\kappa = 0, \quad \lambda = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{c_A(c_A - c_D)}{c_A + c_D}, \quad \mu = \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_{ACD}}{c_A + c_D}. \quad (10.39)$$

Формулы (10.37) для решетки графена принимают вид

$$\begin{aligned} C_{11} &= \lambda + 2\mu, & C_{12} &= \lambda, & C_{44} &= \mu, \\ K &= \lambda + \mu, & E &= 4\mu \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu}, & \nu &= \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu}, & \eta &= 1, \end{aligned} \quad (10.40)$$

откуда получаем

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{\sqrt{3}}{6} c_A \frac{c_A + 3c_D}{c_A + c_D}, & C_{12} &= \frac{\sqrt{3}}{6} c_A \frac{c_A - c_D}{c_A + c_D}, & C_{44} &= \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_{ACD}}{c_A + c_D}, \\ K &= \frac{\sqrt{3}}{6} c_A, & E &= 4 \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_{ACD}}{c_A + 3c_D}, & \nu &= \frac{c_A - c_D}{c_A + 3c_D}, & \eta &= 1. \end{aligned} \quad (10.41)$$

Решетка алмаза

Подставляя формулы (10.33) в (10.36), с использованием табл. 10.1, получаем для решетки алмаза

$$\kappa = -\frac{\sqrt{3}}{2a} c_D \frac{c_A - c_D}{c_A + 2c_D}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c_A - c_D), \quad \mu = \frac{3\sqrt{3}}{8a} \frac{c_{ACD}}{c_A + 2c_D}. \quad (10.42)$$

Формулы (10.37) для решетки алмаза принимают вид

$$\begin{aligned} C_{11} &= \kappa + \lambda + 2\mu, & C_{12} &= \lambda, & C_{44} &= \mu, & K &= \frac{\kappa + 3\lambda + 2\mu}{3}, \\ E &= \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + 3\lambda + 2\mu)}{\kappa + 2\lambda + 2\mu}, & \nu &= \frac{\lambda}{\kappa + 2\lambda + 2\mu}, & \eta &= \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu}, \end{aligned} \quad (10.43)$$

что позволяет получить

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= \frac{\sqrt{3}}{12a} (c_A + 2c_D), & C_{12} &= \frac{\sqrt{3}}{12a} (c_A - c_D), & C_{44} &= \frac{3\sqrt{3}}{8a} \frac{c_A c_D}{c_A + 2c_D}, \\
 K &= \frac{\sqrt{3}}{12a} c_A, & E &= \frac{3\sqrt{3}}{4a} \frac{c_A c_D}{2c_A + c_D}, \\
 \nu &= \frac{c_A - c_D}{2c_A + c_D}, & \eta &= \frac{3c_A}{c_A + 2c_D}.
 \end{aligned} \tag{10.44}$$

Если сохранить в формулах (10.44) параметр V_0 , то они примут вид

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= \frac{4a^2}{9V_0} (c_A + 2c_D), & C_{12} &= \frac{4a^2}{9V_0} (c_A - c_D), & C_{44} &= \frac{2a^2}{V_0} \frac{c_A c_D}{c_A + 2c_D}, \\
 K &= \frac{4a^2}{9V_0} c_A, & E &= \frac{4a^2}{V_0} \frac{c_A c_D}{2c_A + c_D}.
 \end{aligned} \tag{10.45}$$

Глава 11

Многочастичное взаимодействие

Выводится тензор жесткости двухатомной кристаллической решетки при учете трехчастичного взаимодействия. Учитывается взаимодействие между ближайшими соседями и смежными связями. В качестве примера рассматриваются решетка графена.

11.1. Основные уравнения

В данной главе основные формулы приводятся без детального вывода, более подробно они описаны в работе [30]. Рассмотрим сложную кристаллическую решетку, элементарная ячейка которой содержит два атома. Как и ранее, будем условно называть их атомами первого и второго типа. Атомы каждого типа образуют простую кристаллическую решетку, причем эти решетки конгруэнтны. Выберем один из атомов первого типа и назовем его отсчетным. Пронумеруем атомы, являющиеся ближайшими соседями отсчетного. Энергия, приходящаяся на элементарную ячейку кристалла, может быть представлена в виде

$$W = \frac{1}{V_0} \left(G_1 \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha}^2 + G_2 \sum'_{\alpha, \beta} \xi_{\alpha\beta}^2 + G_3 \sum'_{\alpha, \beta} (\kappa_{\alpha} + \kappa_{\beta}) \xi_{\alpha\beta} \right), \quad (11.1)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки; α, β — номера соседних атомов; $\kappa_{\alpha}, \kappa_{\beta}$ — деформации связей; $\xi_{\alpha\beta} = \xi_{\beta\alpha}$ — изменение угла между связями; G_k — постоянные коэффициенты; штрих у знака суммы означает, что суммирование ведется только по смежным связям.

При получении формулы (11.1) мы ограничились взаимодействием

между ближайшими атомами и смежными связями, кроме того, учтен перекрестный член, зависящий от деформаций связей и углов. Если взаимодействие осуществляется линейными пружинами жесткости c и угловыми пружинами жесткости γ , то

$$G_1 = \frac{1}{2}ca^2, \quad G_2 = \frac{1}{2}\gamma, \quad G_3 = 0, \quad (11.2)$$

где a — длина линейной пружины.

Предположим, что кристалл подвергнут малой однородной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$, тогда

$$\xi_{\alpha\beta} = \frac{(\kappa_\alpha + \kappa_\beta) \cos \varphi - 2\kappa_{\alpha\beta}}{\sin \varphi}, \quad (11.3)$$

$$\kappa_\alpha = \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\zeta}, \quad \kappa_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2}(\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\beta) \cdot \boldsymbol{\zeta},$$

где φ — угол между смежными связями; \mathbf{n}_α , \mathbf{n}_β — единичные векторы, задающие направление связей; $\boldsymbol{\zeta}$ — вектор невязки, описывающий смещения частиц одной подрешетки по отношению к частицам другой подрешетки.

Подстановка формул (11.3) в выражение (11.1) приводит к следующему представлению удельной энергии деформирования:

$$W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}^* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^3\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\zeta} \cdot \cdot {}^2\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\zeta}, \quad (11.4)$$

где ${}^4\mathbf{C}^*$, ${}^3\mathbf{C}$ и ${}^2\mathbf{C}$ — тензоры жесткости;

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C}^* = \frac{2}{V_0} & \left(H_1 \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + H_2 \sum'_{\alpha, \beta} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta + \right. \\ & \left. + H_3 \sum'_{\alpha, \beta} (\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta) \right), \quad (11.5) \\ {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} H_4 & \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad {}^2\mathbf{C} = \frac{2}{V_0} H_5 \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha; \end{aligned}$$

коэффициенты H_k определяются формулами

$$\begin{aligned}
 H_1 &= G_1 - 6M_1G_2 \operatorname{ctg}^2 \varphi - 2M_1G_3 \operatorname{ctg} \varphi, \\
 H_2 &= 2G_2 \operatorname{ctg}^2 \varphi + 2G_3 \operatorname{ctg} \varphi, \quad H_3 = 2G_2 (1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi), \\
 H_4 &= 2G_1 + 4M_1G_2 \frac{\operatorname{ctg} \varphi}{\sin \varphi} (1 - \cos \varphi)^2 + 2M_1G_3 \frac{\cos 2\varphi - \cos \varphi}{\sin \varphi}, \\
 H_5 &= G_1 + 2M_1G_2(1 - \cos \varphi) - 2M_1G_3 \sin \varphi,
 \end{aligned} \tag{11.6}$$

где M_1 — число связей, смежных с данной.

При получении (11.5)–(11.6) учтена симметрия тензора жесткости относительно перестановки индексов и использованы тождества

$$\begin{aligned}
 \sum'_{\alpha, \beta} {}^r \mathbf{n}_\alpha &= M_1 \sum_{\alpha} {}^r \mathbf{n}_\alpha, \quad \sum'_{\alpha, \beta} {}^{r-1} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta = M_1 \cos \varphi \sum_{\alpha} {}^r \mathbf{n}_\alpha, \\
 {}^r \mathbf{n}_\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} \underbrace{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \dots \mathbf{n}_\alpha}_r, \quad r = 2, 3, 4.
 \end{aligned} \tag{11.7}$$

После того как тензоры жесткости ${}^4\mathbf{C}^*$, ${}^3\mathbf{C}$ и ${}^2\mathbf{C}$ найдены, макроскопический тензор жесткости среды ${}^4\mathbf{C}$ находится по формулам

$${}^4\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} {}^4\mathbf{C}^* - {}^4\mathbf{C}', \quad {}^4\mathbf{C}' \stackrel{\text{def}}{=} {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C}^T, \tag{11.8}$$

где тензор ${}^4\mathbf{C}^*$ определяется формулой (11.5), а для поправочного тензора жесткости ${}^4\mathbf{C}'$, с использованием формул (11.5), получаем

$${}^4\mathbf{C}' = \frac{dH_4^2}{2MV_0H_5} \sum_{\alpha} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \cdot \sum_{\beta} \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta. \tag{11.9}$$

При выводе формулы (11.9) использовано предположение, что в силу симметрии решетки тензор ${}^2\mathbf{C}$ является шаровым. Отметим, что тензор ${}^4\mathbf{C}^*$ в точности равен тензору жесткости простой решетки, следовательно, для его вычисления напрямую могут быть использованы формулы главы 6; тензор ${}^4\mathbf{C}'$ пропорционален соответствующему тензору для силового или моментного описания двухатомной решетки, следовательно, для него напрямую могут быть использованы формулы главы 9 или 10.

11.2. Решетка графена

Используя полученные ранее результаты для графена и формулы предыдущего параграфа, можно получить следующие выражения для коэффициентов Ляме графена:

$$\lambda = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{c(c - 6c_\gamma)}{c + 6c_\gamma}, \quad \mu = 2\sqrt{3} \frac{6cc_\gamma}{c + 6c_\gamma}. \quad (11.10)$$

Здесь для простоты рассмотрен материал, в котором взаимодействие осуществляется линейными пружинами жесткости c и угловыми пружинами жесткости γ ; приведенная жесткость c_γ определяется формулой

$$c_\gamma \stackrel{\text{def}}{=} \gamma/a^2. \quad (11.11)$$

Остальные характеристики вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} C_{11} &= \lambda + 2\mu, & C_{12} &= \lambda, & C_{44} &= \mu, \\ K &= \lambda + \mu, & E &= 4\mu \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu}, & \nu &= \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu}, & \eta &= 1, \end{aligned} \quad (11.12)$$

что дает

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{\sqrt{3}}{6} c \frac{c + 18c_\gamma}{c + 6c_\gamma}, & C_{12} &= \frac{\sqrt{3}}{6} c \frac{c - 6c_\gamma}{c + 6c_\gamma}, & C_{44} &= 2\sqrt{3} \frac{cc_\gamma}{c + 6c_\gamma}, \\ K &= \frac{\sqrt{3}}{6} c, & E &= 8\sqrt{3} \frac{cc_\gamma}{c + 18c_\gamma}, & \nu &= \frac{c - 6c_\gamma}{c + 18c_\gamma}, & \eta &= 1. \end{aligned} \quad (11.13)$$

Глава 12

Три модели графена

Проведено сравнение парной силовой, парной моментной и многочастичной моделей. Все рассмотренные модели содержат по два параметра, характеризующие различные жесткости межатомного взаимодействия. Показано, что рассматриваемая силовая модель не может обеспечить экспериментальное значение коэффициента Пуассона; моментная и многочастичная модели свободны от этого недостатка и эквивалентны друг другу.

12.1. Модули упругости

Графен удобно рассматривать как двумерный материал, для которого модули упругости имеют размерность Н/м, а не Н/м², как в трехмерном случае. В силу симметрии кристаллической решетки графена этот материал изотропен. Выпишем ряд соотношений между коэффициентами жесткости и модулями упругости двумерного изотропного материала:

$$K = \frac{1}{2} (C_{11} + C_{12}), \quad G = C_{44} = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}), \quad \nu = \frac{C_{12}}{C_{11}} = \frac{K - G}{K + G}, \quad (12.1)$$

$$E = 2K(1 - \nu) = 2G(1 + \nu) = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}} = \frac{4KG}{K + G}. \quad (12.2)$$

12.2. Устойчивость

Условием макроскопической устойчивости материала является положительная определенность энергии деформирования, что для двумерного

изотропного материала приводит к неравенству

$$C_{11} > |C_{12}|. \quad (12.3)$$

Это условие эквивалентно требованию положительности коэффициента объемного сжатия K и модуля сдвига G :

$$K = \frac{1}{2} (C_{11} + C_{12}) > 0, \quad G = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) > 0. \quad (12.4)$$

Для коэффициента Пуассона условие устойчивости приводит к неравенству

$$|\nu| < 1 \iff -1 < \nu < 1, \quad (12.5)$$

где ограничение снизу диктуется условием $K > 0$, а сверху — условием $G > 0$.

12.3. Силовое взаимодействие

Данная модель использовалась в работах [1, 4]. Согласно формулам (9.87), для графена при учете двух координационных сфер и чисто силовом взаимодействии

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{6}(c_1 + 9c_2), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{6}(c_1 + 3c_2), \quad (12.6)$$

где c_1 и c_2 — жесткости связей с атомами на первой и второй координационных сферах.

Отсюда получаем

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6}(c_1 + 6c_2), \quad G = \frac{\sqrt{3}}{2}c_2, \quad \nu = \frac{c_1 + 3c_2}{c_1 + 9c_2}. \quad (12.7)$$

Условие устойчивости (12.4) дает

$$c_1 > -6c_2, \quad c_2 > 0. \quad (12.8)$$

Следовательно, макроскопические требования устойчивости допускают отрицательную жесткость связи с атомами первой координационной сферы. Однако с микроскопической точки зрения такой материал неустойчив, так как c_1 определяет жесткость связи между подрешетками. При

отрицательности c_1 при любом возмущении подрешетки начнут смещаться друг относительно друга, уходя все дальше от равновесного состояния, соответствующего шестиугольной решетке графена. Следовательно, условия устойчивости решетки, учитывающие микро- и макроскопические требования, принимают вид

$$c_1 > 0, \quad c_2 > 0. \quad (12.9)$$

Представим коэффициент Пуассона в форме

$$\nu = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \frac{1}{1 + 9c_2/c_1}, \quad (12.10)$$

из которой видно, что коэффициент Пуассона — убывающая функция отношения c_2/c_1 , лежащая при положительных жесткостях в пределах

$$\frac{1}{3} < \nu < 1, \quad (12.11)$$

причем предельные значения соответствуют:

$$\begin{aligned} c_1 \ll c_2 &\Rightarrow \nu \approx 1/3 && \text{(две треугольные решетки);} \\ c_1 \gg c_2 &\Rightarrow \nu \approx 1 && \text{(малая сдвиговая жесткость).} \end{aligned} \quad (12.12)$$

Из полученных результатов следует, что данная модель не позволяет описать материалы коэффициентом Пуассона меньше $1/3$. Напомним, однако, что, согласно известным экспериментальным данным [31], значение коэффициента Пуассона для графена должно быть значительно меньше — около 0.17.

12.4. Моментное взаимодействие

Согласно формулам (10.41), для графена при учете одной координационной сферы и моментном взаимодействии

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{6} c_A \frac{c_A + 3c_D}{c_A + c_D}, \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{6} c_A \frac{c_A - c_D}{c_A + c_D}, \quad (12.13)$$

где c_A и c_D — продольная и поперечная жесткости связей.

Отсюда получаем

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} c_A, \quad G = \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_A c_D}{c_A + c_D}, \quad \nu = \frac{c_A - c_D}{c_A + 3c_D}. \quad (12.14)$$

Условие устойчивости (12.4) дает

$$c_A > 0, \quad \begin{cases} c_D > 0; \\ c_D < -c_A. \end{cases} \quad (12.15)$$

Следовательно, макроскопические требования устойчивости допускают отрицательное значение поперечной жесткости связи. Микроскопическое условие устойчивости, согласно формуле (10.21), имеет вид

$$c_A + c_D > 0, \quad (12.16)$$

запрещающая в комбинации с (12.15) область с отрицательными значениями c_D . В результате условия устойчивости принимают вид

$$c_A > 0, \quad c_D > 0. \quad (12.17)$$

Представим коэффициент Пуассона в форме

$$\nu = \frac{c_A - c_D}{c_A + 3c_D} = \frac{1}{3} \left(\frac{4}{1 + 3c_D/c_A} - 1 \right), \quad (12.18)$$

из которой видно, что коэффициент Пуассона — убывающая функция отношения c_D/c_A , лежащая при положительных жесткостях в пределах

$$-\frac{1}{3} < \nu < 1, \quad (12.19)$$

причем предельные значения соответствуют:

$$\begin{aligned} c_A \ll c_D &\Rightarrow \nu \approx -1/3 && \text{(материал со стесненным сдвигом);} \\ c_A = c_D &\Rightarrow \nu = 0 && \text{(материал без эффекта Пуассона);} \\ c_A \gg c_D &\Rightarrow \nu \approx 1 && \text{(малая сдвиговая жесткость).} \end{aligned} \quad (12.20)$$

Таким образом, моментное взаимодействие дает более широкую область допустимых значений коэффициента Пуассона, в которую попадает экспериментальное значение для графена [31]: $\nu = 0.17$. Используя данное

значение, вычислим отношение поперечной жесткости связи к продольной:

$$\frac{c_D}{c_A} = \frac{1 - \nu}{1 + 3\nu} \approx 0.55 \approx \frac{1}{2}. \quad (12.21)$$

Мы получили легко запоминающийся результат: в графене поперечная жесткость связи относится к продольной примерно как один к двум.

12.5. Многочастичное взаимодействие

Согласно формулам (11.13), для графена при учете одной координационной сферы и трехчастичном взаимодействии

$$K = \frac{\sqrt{3}}{6} c, \quad G = 2\sqrt{3} \frac{cc_\gamma}{c + 6c_\gamma}, \quad \nu = \frac{c - 6c_\gamma}{c + 18c_\gamma}. \quad (12.22)$$

Здесь c — продольная жесткость связи; $c_\gamma \stackrel{\text{def}}{=} \gamma/a^2$ — приведенная жесткость углового взаимодействия (γ — жесткость угловой пружины; a — радиус первой координационной сферы).

Формулы для моментного и многочастичного взаимодействия, очевидно, совпадают, если принять

$$c_A = c, \quad c_D = 6c_\gamma = 6\gamma/a^2. \quad (12.23)$$

Микроскопическое условие устойчивости, согласно формулам (11.5), (11.6), имеет вид неравенства:

$$c + 6c_\gamma > 0, \quad (12.24)$$

совпадающего при выполнении (12.23) с соответствующим условием (12.17) для моментной модели.

Таким образом, рассматриваемые моментная и многочастичная модели для графена полностью эквивалентны и позволяют удовлетворить экспериментальным значениям характеристик упругости, что не удастся сделать при использовании парной силовой модели.

Заключение

В пособии были рассмотрены три подхода к описанию идеальных кристаллических твердых тел — парный силовой, парный моментный и многочастичный. Было показано, что парная силовая модель, в которой взаимодействие осуществляется парными центральными силами, накладывает серьезные ограничения на значения макроскопических упругих характеристик кристалла. В результате для многих кристаллов не удается удовлетворить экспериментальным значениям для компонент тензора жесткости. Парная моментная и многочастичная модели позволяют решить эту проблему. Хотя в общем случае эти две модели дают разные выражения для тензоров жесткости, однако для всех рассмотренных конкретных типов решеток при простейших вариантах взаимодействия эти две модели оказывались эквивалентными — при подходящем выборе параметров они давали идентичные выражения для характеристик упругости.

В общем же случае сравнение парной моментной и многочастичной моделей показало, что сложность моментной модели в большей степени качественная, многочастичной — количественная. Моментная модель позволяет получить более простые выражения для упругих характеристик, однако требует привлечения более сложной теории. Различие это связано, в частности, с тем, что рассматриваемые моментные модели построены в рамках парного взаимодействия, поэтому количественная сложность их пропорциональна N — числу атомов, с которыми взаимодействует атом кристалла. Для трехчастичного взаимодействия количественная сложность пропорциональна N^2 , а для произвольного многочастичного взаимодействия она пропорциональна N^{s-1} , где s — кратность взаимодействия ($s = 2$ для парного и $s = 3$ для трехчастичного взаимо-

действия).

Преимуществом моментного взаимодействия также является то, что оно имеет аналогии с моментными теориями сплошной среды, такими, как теория пластин и оболочек, что может быть в дальнейшем полезно для описания изгибных деформаций таких наноструктур, как графен или углеродные нанотрубки.

Однако в пособии получены формулы для упругих характеристик многих кристаллических структур в рамках всех трех подходов, и читатель может составить свое мнение об удобстве того или иного подхода и сделать выбор в соответствии с собственными предпочтениями.

Литература

1. **Аннин Б. Д.** Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении / Б. Д. Аннин, С. Н. Коробейников, А. В. Бабичев // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2008. Т. XI, № 1(33). — С. 3–22.
2. **Борн М.** Теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. — М. : Изд-во иностр. лит., 1959. — 488 с.
3. **Васильев Д. М.** Кристаллография / Д. М. Васильев. — СПб: Изд-во СПбГПУ, 1996. — 474 с.
4. **Гольдштейн Р. В.** Дискретно-континуальная модель нанотрубки / Р. В. Гольдштейн, А. В. Ченцов // Изв. РАН. МТТ. — 2005. № 4. — С. 57–74.
5. **Димитриенко Ю. И.** Тензорное исчисление / Ю. И. Димитриенко. — М. : Высш. шк. — 2001. — 575 с.
6. **Жилин П. А.** Векторы и тензоры второго ранга в трехмерном пространстве / П. А. Жилин. — СПб: Нестор, 2001. — 276 с.
7. **Жилин П. А.** Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики / П. А. Жилин. — СПб., 2003. — 340 с.
8. **Жилин П. А.** Прикладная механика. Основы теории оболочек: учеб. пособие / П. А. Жилин — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, — 2006. — 167 с.

9. **Жилин П. А.** Прикладная механика. Теория тонких упругих стержней: учеб. пособие / П. А. Жилин — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, — 2007. — 101 с.
10. **Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.** Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий / Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов, А. Д. Фирсова // Изв. РАН. МТТ. — 2003 — № 4.— С. 110–127.
11. **Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.** Учет моментного взаимодействия при расчете изгибной жесткости наноструктур / Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов, А. Д. Фирсова // Докл. Академии наук. — 2003. — Т. 391, № 6. — С. 764–768.
12. **Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., А. Д. Фирсова** Теоретическая механика. Описание механических свойств кристаллических твердых тел на микро- и макроуровне: учеб. пособие — СПб. : Изд-во СПбГПУ, — 2004. — 32 с.
13. **Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.** Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне / Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов, А. Д. Фирсова // Прикладная математика и механика. — 2007. Т. 71. Вып. 4.— С. 595–615.
14. **Косевич А. М.** Основы механики кристаллической решетки / А. М. Косевич. — М. : Наука, 1972.
15. **Косевич А. М.** Теория кристаллической решетки / А. М. Косевич. — Харьков: Вища шк., 1988.
16. **Кочин Н. Е.** Векторное исчисление и начала тензорного исчисления / Н. Е. Кочин — М. : Изд-во Наука, 1965. 426 с.
17. **Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.** О механических характеристиках наноразмерных объектов / А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов // Физика твердого тела. — 2002 — Т. 44, № 12. — С. 2158–2163.

18. **Кривцов А. М.** Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А. М. Кривцов. – М. : Физматлит. – 2007. — 304 с.
19. **Кунин И. А.** Теория упругих сред с микроструктурой / И. А. Кунин. — М. : Наука, 1975. — 416 с.
20. **Лагалли М.** Векторное исчисление / М. Лагалли. – М.– Л. : ОНТИ, — 1936. — 343 с.
21. **Лейбфрид Г.** Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов : пер. с нем. / Г. Лейбфрид. – М. : Физматгиз, — 1963.
22. **Лобода О. С., Кривцов А. М.** Влияние масштабного фактора на модули упругости трехмерного нанокристалла / О. С. Лобода, А. М. Кривцов // Изв. РАН. Механика твердого тела. — №4. — 2005. — С. 27–41.
23. **Мелькер А. И.** Молекулярно-динамическое исследование разрушения однослойных углеродных нанотрубок при растяжении / А. И. Мелькер, Д. А. Корнилов // ФТТ. — 2005. — Т. 47, Вып. 6.
24. **Лурье А. И.** Теория упругости / А. И. Лурье. – М. : Наука, 1970.
25. **Лурье А. И.** Нелинейная теория упругости / А. И. Лурье. – М. : Наука, 1980. — 512 с.
26. **Никаноров С. П.** Упругость и дислокационная неупругость кристаллов / С. П. Никаноров, Б. К. Кардашов. – М. : Наука, 1985.
27. **Пальмов В. А.** Колебания упруго-пластических тел / В. А. Пальмов. – М. : Наука, 1976. — 348 с.
28. **Пальмов В. А.** Элементы тензорной алгебры и тензорного анализа: Учебное пособие. – СПб: Изд-во Политехн. ун-та, 2008 — 109 с.
29. **Хантингтон Г.** Упругие постоянные кристаллов / Г. Хантингтон // УФН. — 1961.— Т. 74, № 303. — С. 461.

30. **Berinskiy I. E., Krivtsov A. M., Kudarova A. M.** Determination of macroscopic characteristics for graphene layer using angle-depending potentials of atomic interactions / I. E. Berinskiy, A. M. Krivtsov, A. M. Kudarova. Proc. of XXXVI Summer School “Advanced problems in mechanics”. –St. Petersburg, 2008. P.122–132.
31. **Blakslee O. L., Proctor D. G., Seldin E. J. et al.** Elastic constants of compression — annealed pyrolytic graphite / O. L. Blakslee, D. G. Proctor, E. J. Seldin // J. Appl. Phys. –1970. Vol. 41, № 8. P. 3373–3389.
32. **Brenner D. W.** Empirical Potential for Hydrocarbons for Use in Simulating the Chemical Vapor Deposition of Diamond Films / D. W. Brenner // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 9458–9471.
33. **Erkoc S.** Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties / S. Erkoc // Physics Reports. 1997. Vol. 278. № 2. P. 80–105.
34. **Meyer J. et al.** The structure of suspended graphene sheets / J. Meyer // Nature. 2007. № 446. P. 60–63.
35. **Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., et al.** Electric field effect in atomically thin carbon films. / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // Science. 2004. Vol. 306, № 5696, P. 666–669.
36. **Tersoff J.** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems / J. Tersoff // Phys. Rev. B. –1988. Vol. 37. P. 6991–7000.

Кривцов Антон Мирославович

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА
Упругие свойства одноатомных и двуатомных кристаллов
Учебное пособие

Редактор *О. К. Чеботарева*
Технический редактор *А. И. Колодяжная*
Оригинал-макет подготовлен автором
Директор Издательства Политехнического университета *А. В. Иванов*
Свод. темплан 2004 г.
Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Налоговая льгота — Общероссийский классификатор продукции
ОК 005–93, т. 2; 95 3005 — учебная литература

Подписано в печать 2009. Формат 60X84/16.
Усл. печ. л. . Уч.-изд. л. . Тираж Заказ

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства:
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.