

УДК 539.3

© 2012 г. А. М. КРИВЦОВ, О. С. ЛОБОДА, С. С. ХАКАЛО

СРАВНЕНИЕ МИКРОМОДЕЛЕЙ ОПИСАНИЯ УПРУГИХ СВОЙСТВ АЛМАЗА

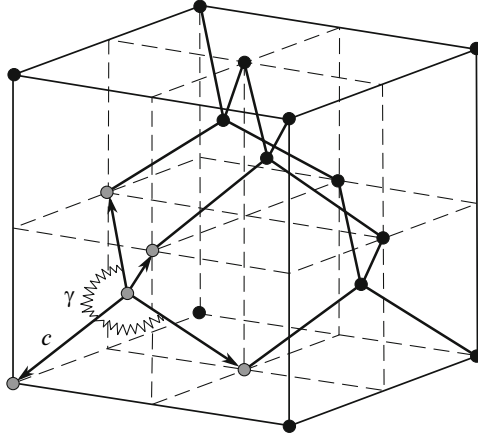
Предложена механическая модель двухатомной кристаллической решетки, учитывающая силовое взаимодействие между атомами и угловое взаимодействие между связями. Получены соотношения, связывающие макроскопические модули упругости с микропараметрами продольной жесткости межатомных связей и жесткости углового взаимодействия для кристаллов с решеткой алмаза. Проведено сравнение с экспериментальными данными, а также с другими теориями, описывающими подобные решетки с помощью двух постоянных на микроуровне.

Ключевые слова: упругие свойства, структура алмаза, угловое взаимодействие, механическая модель.

1. Введение. Создание математических моделей, описывающих углерод и его аллотропные модификации, занимает исследователей не одно десятилетие. Основными и хорошо изученными модификациями углерода являются графит и алмаз. С развитием технологий были открыты такие формы углерода, как фуллерены, углеродные нанотрубки и графен, уникальные механические свойства которых открывают широкие перспективы их практического использования в различных областях науки и техники. В этой связи разработка математических моделей, позволяющих адекватно описывать упругие свойства углерода и его модификаций, является актуальной задачей.

Разнообразие форм углерода обусловлено его способностью образовывать химические связи разного типа. Во всех случаях связь является направленной (ковалентной), поэтому простейшая модель, где атомы представляются материальными точками, связанными парным силовым взаимодействием, оказывается недостаточной. Подход, рассматриваемый в работе, состоит в том, что помимо продольной жесткости межатомных связей принимается во внимание жесткость углового взаимодействия между связями. Это позволяет учесть направленность связей в ковалентных структурах. Предложенный подход применяется для описания упругих свойств кристаллов, имеющих структуру алмаза (кристаллы алмаза, кремния, германия, олова). 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. Получены соотношения, связывающие макроскопические упругие модули с параметрами продольной жесткости межатомных связей и жесткости углового взаимодействия. Таким образом для описания упругих свойств используются две константы на микроуровне.

В работе приводится краткий обзор и сравнение статических моделей, в которых упругие свойства кристаллов с решеткой алмаза также описываются с помощью двух констант на микроуровне. Рассматриваются теории Борна [1], Харрисона [2]–[3], Кетинга [4]. Особое внимание уделено теории моментного взаимодействия, использо-



ванию которой для описания кристаллических структур посвящены работы [5]–[13]. Отметим также работы [14], [15] в которых обсуждаются вопросы описания механических свойств углеродных структур.

2. Вывод уравнений. Алмаз – одна из аллотропных форм углерода, минерал со сложной кристаллической структурой. Алмаз является ортотропным материалом, то есть он имеет три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии.

Рассмотрим модель решетки алмаза, представленную на рисунке (фиг. 1). Она представляет собой идеальную двухатомную кристаллическую решетку, атомы которой в недеформированном состоянии расположены в центре и вершинах правильного тетраэдра.

Связь между атомами будет осуществляться при помощи продольных пружин с жесткостью c и угловых пружин с жесткостью γ . Элементарная ячейка такой решетки содержит два атома. Будем условно называть их атомами первого и второго типа. Атомы каждого типа образуют простую кристаллическую решетку, причем эти решетки при наложении друг на друга совпадут. Выберем один из атомов первого типа и назовем его отсчетным. Будем считать, что каждый атом взаимодействует только с ближайшими. Из фиг. 1 видно, что каждый атом окружает только четыре соседних. Соответствующие связи пронумеруем от 1 до 4. Впишем базис так, чтобы его векторы были перпендикулярны плоскостям симметрии решетки. Тогда орты направлений связей между атомами будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}), & \mathbf{n}_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{n}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}), & \mathbf{n}_4 &= \frac{-1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \end{aligned} \tag{2.1}$$

В работе [8] были получены следующие формулы для ортотропного материала

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{C} &= \kappa \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \lambda \mathbf{J}_1 + \mu \mathbf{J}_{23} \\ \mathbf{J}_1 &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, & \mathbf{J}_{23} &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \end{aligned} \tag{2.2}$$

Здесь ${}^4\mathbf{C}$ – макроскопический тензор жесткости ортотропного материала; \mathbf{J}_1 и \mathbf{J}_{23} – изотропные тензоры четвертого ранга; κ , λ и μ – обобщенные коэффициенты Ляме;

\mathbf{e}_k и \mathbf{e}_n – орты некоторого произвольного базиса. Макроскопический тензор жесткости получается из выражения для энергии деформирования материала

$$W = 1/2 \varepsilon \cdot \cdot \cdot \mathbf{C} \cdot \cdot \cdot \varepsilon, \quad \mathbf{C} = \mathbf{C}^* - \mathbf{C} \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{C}^T \quad (2.3)$$

$$\mathbf{C}^* = \frac{2}{V_0} \left(H_1 \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + H_2 \sum'_{\alpha, \beta=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta + H_3 \sum'_{\alpha, \beta=1}^4 (\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta) \right) \quad (2.4)$$

$$\mathbf{C} = \frac{1}{V_0} H_4 \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad \mathbf{C} = \frac{2}{V_0} H_5 \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \quad V_0 = \frac{16\sqrt{3}}{9} a^3 \quad (2.5)$$

Здесь W – энергия деформирования материала; ε – тензор деформации; \mathbf{C}^* , \mathbf{C} и \mathbf{C}^{-1} – промежуточные тензоры жесткости; V_0 – объем элементарной ячейки кристалла; a – длина межатомной связи. Штрих у знака суммы означает, что суммирование ведется по смежным связям.

Коэффициенты H_k для алмаза принимают вид

$$\begin{aligned} H_1 &= 1/2 ca^2 - 9/8 c_\gamma a^2, & H_2 &= 1/8 c_\gamma a^2, & H_3 &= 9/8 c_\gamma a^2 \\ H_4 &= ca^2 - 4c_\gamma a^2, & H_5 &= 1/2 ca^2 + 4c_\gamma a^2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

где $c_\gamma = \gamma/a^2$ – приведенная жесткость углового взаимодействия.

Подставляем полученные коэффициенты H_k (2.6) и значения векторов \mathbf{n}_k из выражения (2.1) в формулы для промежуточных тензоров жесткости (2.5). С помощью полученных формул находим макроскопический тензор жесткости (2.3) для алмаза. Приводя этот тензор к виду (2.1), получаем следующие выражения для обобщенных коэффициентов Ляме:

$$\kappa = \frac{3\sqrt{3}}{2a} c_\gamma \frac{8c_\gamma - c}{c + 8c_\gamma}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c - 6c_\gamma), \quad \mu = \frac{3\sqrt{3}}{2a} \frac{cc_\gamma}{c + 8c_\gamma} \quad (2.7)$$

Воспользуемся формулами для компонентов тензора жесткости C_{11} , C_{12} , C_{44} , модуля объемного сжатия K , модуля Юнга E , коэффициента Пуассона ν и параметра анизотропии η , выраженными через обобщенные коэффициенты Ляме в [9]:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \kappa + \lambda + 2\mu, & C_{12} &= \lambda, & C_{44} &= \mu, & K &= \frac{\kappa + 3\lambda + 2\mu}{3} \\ E &= \frac{(\kappa + 2\mu)(\kappa + 3\lambda + 2\mu)}{\kappa + 2\lambda + 2\mu}, & \nu &= \frac{\lambda}{\kappa + 2\lambda + 2\mu}, & \eta &= \frac{2\mu}{\kappa + 2\mu} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Тогда, подставляя соотношения для обобщенных коэффициентов Ляме (2.7) в формулы (2.8), получаем

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c + 12c_\gamma), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a} (c - 6c_\gamma), \quad C_{44} = \frac{3\sqrt{3}}{2a} \frac{cc_\gamma}{c + 8c_\gamma} \quad (2.9)$$

$$K = \frac{\sqrt{3}}{12a} c, \quad E = \frac{9\sqrt{3}}{4a} \frac{cc_\gamma}{c + 3c_\gamma}, \quad \nu = \frac{1c - 6c_\gamma}{2c + 3c_\gamma}, \quad \eta = \frac{2c}{c + 8c_\gamma} \quad (2.10)$$

Таблица 1

Элемент	C_{11}	C_{12}	C_{44}	Источник
C (алмаз)	1076	125	576	McSkimin (1957) [16]
	1076	275	519	Markham (1965) [17]
	1079	124	578	McSkimin (1972) [18]
	1076	125	577	Grimsdich (1975) [19]
	1080	125	577	Gilman (2002) [20]
Si (кремний)	168	65	80	Simmons (1971) [21]
	159	61	85	Martin (1985) [22]
	160	58	80	Nikanorov (1985) [23]
	172	63	99	Clerc (1990) [24]
	164	64	80	We (1992) [25]
Ge (германий)	130	45	68	Martin (1985) [22]
	126	44	68	Nikanorov (1985) [23]
	134	49	69	We (1992) [25]
Sn (олово)	74.5	35	34	Nikanorov (1985) [23]

Как и следовало ожидать, модуль объемного сжатия K зависит только от коэффициентов c (характеризующих продольную жесткость связи) и не зависит от коэффициентов c_γ (характеризующих жесткость углового взаимодействия).

3. Определение параметров межатомных связей. Кристаллы с кубической симметрией имеют три независимых модуля упругости, в качестве которых могут быть выбраны C_{11} , C_{12} и C_{44} . Пусть известны экспериментальные значения указанных модулей. Тогда любые два значения и известное межатомное расстояние a позволят по формулам (2.9) определить микроскопические характеристики межатомных связей – коэффициенты c и c_γ . Таким образом, безмоментные макроскопические характеристики материала позволяют найти не только чисто силовую характеристику межатомной связи c , но и коэффициент c_γ , характеризующий жесткость углового взаимодействия на микроуровне. Значение третьего модуля упругости можно использовать для оценки погрешности модели.

В табл. 1 приведены экспериментальные данные для упругих постоянных алмаза, а также кремния, германия и олова, которые тоже имеют структуру алмаза. Как видно из таблицы, эти значения отличаются друг от друга, иногда существенно, так что можно говорить лишь о наиболее вероятном интервале значений упругих постоянных.

Используя данные из табл. 1 для C_{11} , C_{12} и величину межатомного расстояния a , из формул (2.9) получаем значения коэффициентов продольной жесткости и жесткости углового взаимодействия в кристаллах, которые приведены в табл. 2. Например, данные из работы [16] и значение $a = 0.154$ нм, дают следующие значения жесткостей межатомных связей в кристаллах алмаза:

$$c = 472 \text{ Н/м}, \quad c_\gamma = 56 \text{ Н/м} \quad (3.1)$$

Согласно полученным значениям (3.1), отношение продольной жесткости связи и жесткости углового взаимодействия атомов углерода в кристаллах алмаза равно:

$$c_\gamma/c = 0.12 \quad (3.2)$$

Таблица 2

Элементы	c , Н/м	c_γ , Н/м	c_γ/c , %	C_{44} эксп., ГПа	C_{44} расч., ГПа	Отклонение, %
C $a = 0.154$ нм	472	56	12	576	485	16
	578	48	8	519	487	6
	472	57	12	578	489	15
	472	56	12	577	485	16
	473	57	12	577	490	15
Si $a = 0.235$ нм	161.7	9.3	5.8	80	70.5	11.9
	152.5	8.9	5.8	85	66.9	21.3
	149.6	9.2	6.2	80	68.4	14.5
	161.7	9.9	6.1	99	73.3	26
	158.5	9	5.7	80	68.7	14.2
Ge $a = 0.245$ нм	124.5	8	6.4	68	56.1	17.5
	121.1	7.7	6.4	67.7	54.3	19.8
	131.3	8	6.1	69	57.1	17.2
Sn $a = 0.281$ нм	124.5	8	6.4	68	56.1	17.5

Коэффициент c_γ составляет 12% от коэффициента c . Значение 8%, полученное при использовании экспериментальных данных из [17], видимо можно объяснить несовершенством эксперимента, в котором получено подозрительно большое значение модуля $C_{12} = 275$ ГПа. У кристаллов кремния, германия и олова межатомное расстояние больше, чем у алмаза (0.235 нм, 0.245 нм и 0.281 нм соответственно), ковалентная связь слабее. Отношение c_γ/c лежит в промежутке от 5.7% до 6.4%, что значительно меньше, чем у алмаза. Тем не менее жесткость углового взаимодействия имеет значение, и ее нельзя не учитывать.

Используем найденные коэффициенты жесткости и формулы (2.10) для определения значений постоянной C_{44} (см. табл. 2).

В работах [9], [13] получены выражения для коэффициентов тензора жесткости C_{11} , C_{12} , C_{44} для модели алмаза при учете моментного взаимодействия между частицами:

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c_A + 2c_D), \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c_A - c_D), \quad C_{44} = \frac{3\sqrt{3}}{8a} \frac{c_A c_D}{c_A + 2c_D} \quad (3.3)$$

где c_A и c_D – продольная и поперечная жесткости связей.

В работе [13] с использованием формул 3.3 и данных из табл. 1 получены расчетные значения упругих постоянных алмаза, кремния и германия при моментном взаимодействии, которые представлены в табл. 3.

Согласно табл. 3 для каждого из элементов: алмаза, кремния, германия, имеются экспериментальные данные, дающие погрешность в определении C_{44} не более 3%, тогда как для модели углового взаимодействия погрешность не менее 14.2% (не считая значения 6%, полученного при использовании экспериментальных данных из [17]).

Таблица 3

Элементы	c_A , Н/м	c_D , Н/м	c_d/c_A , %	C_{44} эксп., ГПа	C_{44} расч., ГПа	Отклонение, %
C $a = 0.154$ нм	471.6	338.22	0.72	576	586.0	1.7
	578.3	284.87	0.49	519	605.2	16.6
	471.9	339.64	0.72	578	587.2	1.6
	472	338.22	0.72	577	586.3	1.6
	473	339.64	0.72	577	588.0	1.9
Si $a = 0.235$ нм	161.7	55.9	0.35	80	91.4	14.2
	152.5	53.19	0.35	85	86.6	1.9
	149.8	55.36	0.37	80	88.0	10.0
	161.7	59.16	0.37	99	94.6	4.6
	158.5	54.27	0.34	80	89.0	11.3
Ge $a = 0.245$ нм	124.5	48.09	0.39	68	71.9	5.8
	121.1	46.40	0.38	67	69.6	2.4
	131.3	48.09	0.37	69	73.6	6.6
Sn $a = 0.281$ нм	93.4	25.74	0.28	34	38.4	12.9

Отметим, что формулы для модулей C_{11} и C_{12} для моментного (3.3) и для углового взаимодействия (2.9), очевидно, совпадут, если положить

$$c_A = c, \quad c_D = 6c_\gamma \tag{3.4}$$

Тогда как формулы для C_{44} не удастся связать между собой столь простым соотношением.

4. Теории упругости статической решетки типа алмаза и их сравнение. Теория упругих свойств кристаллов с решеткой алмаза впервые была разработана Борном в [1]. Она основывалась на простом феноменологическом рассмотрении направленных валентных связей с помощью силовых постоянных. Используются две силовые постоянные, отражающие центральное и нецентральное взаимодействие ближайших соседних атомов. С помощью метода длинных волн для трех независимых модулей упругости были получены следующие выражения:

$$C_{11} = \frac{(\alpha + \beta)}{4a}, \quad C_{12} = \frac{\alpha - 2\beta}{4a}, \quad C_{44} = \frac{3\beta(\alpha + \beta/4)}{4a(\alpha + \beta)} \tag{4.1}$$

Здесь $4a$ – постоянная решетки, α и β – силовые постоянные соответственно центрального и нецентрального взаимодействия первых соседей. По Борну три модуля упругости связываются соотношением:

$$(C_{11} + C_{12})^2 = 4C_{11}(C_{11} - C_{44}) \tag{4.2}$$

В дальнейшем модель была усовершенствована. В работе Харрисона [2] предложена модель с тремя силовыми постоянными, две из них описывают центральное взаимодействие первых и вторых соседей, а третья представляет нецентральное взаимодействие вторых соседей, отражая эффект изменения угла между тетраэдрическими связями. В работе [3] получено соотношение между модулями упругости в предположе-

Таблица 4

Элемент	C_{11}	C_{12}	C_{44}
С (алмаз)	1079	124	578
Si (кремний)	166	60	82
Ge (германий)	132	46	71

Таблица 5

Теория	Соотношение	Отклонение, % алмаз	Отклонение, % кремний	Отклонение, % германий
Борн	(4.2)	49	9	2
Харрисон	(4.3)	19	16	24
Китинг	(4.5)	0.6	1	9
Угловая	(4.3)	19	16	24
Моментная	(4.6)	2	11	3

нии, что в модели Харрисона существенное влияние оказывают только две константы, без учета центрального взаимодействия вторых соседей:

$$(7C_{11} + 2C_{12})C_{44} = 3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12}) \quad (4.3)$$

Связь между модулями упругости при рассмотрении углового взаимодействия в точности совпадает с (4.3). Также в [3] была проведена проверка соотношений (4.2) и (4.3) по экспериментальным данным модулей упругости для алмаза при комнатной температуре. Оказалось, что соотношения (4.2) выполняются с точностью 49%, а (4.3) – 19%. Теория Борна оказывается в плохом согласии с экспериментом, так как неудовлетворительно отражает характер межатомного взаимодействия в решетке алмаза. В выражение для модуля объемного сжатия входит силовая постоянная нецентрального взаимодействия β :

$$K = (C_{11} + 2C_{12})/3 = (\alpha - \beta)/(4a) \quad (4.4)$$

Но модуль объемного сжатия не должен зависеть от β , так как при всестороннем сжатии изменяется только длина между ближайшими соседями. На эти недостатки обращено внимание в работе Китинга [4]. Здесь же Китингом была предложена еще одна модель, имеющая две силовые постоянные: α характеризует центральное взаимодействие между первыми соседями, β характеризует нецентральное взаимодействие вторых соседей. Путем сравнения уравнения для плотности энергии упругой деформации решетки с хорошо известным уравнением макроскопической теории упругости получены соотношения для модулей упругости кристаллов с решеткой алмаза, откуда можно получить следующее соотношение между модулями:

$$(C_{11} + C_{12})2C_{44} = (C_{11} + 3C_{12})(C_{11} - C_{12}) \quad (4.5)$$

Для моментной теории соотношения между модулями (3.3) выглядят следующим образом:

$$2C_{11}C_{44} = (C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12}) \quad (4.6)$$

В табл. 5 приведено сравнение соотношений теорий, описывающих упругие свойства кристаллов со структурой алмаза и использующих две силовые постоянные на микроуровне, с экспериментальными данными табл. 4 из [23] для алмаза, кремния и германия.

Как видно из табл. 5, наилучшие результаты показывают модель Китинга и модель, учитывающая моментное взаимодействие на микроуровне.

5. Заключение. В работе предложена механическая модель двухатомной кристаллической решетки при учете силового взаимодействия между атомами и углового взаимодействия между связями. В рамках модели выведены выражения для тензора жесткости, получены соотношения, связывающие макроскопические модули упругости с микропараметрами продольной жесткости межатомных связей и жесткости углового взаимодействия. Предложенная модель применена к описанию упругих свойств кристаллов с решеткой алмаза. Для данных кристаллов определены значения продольной жесткости межатомных связей и жесткости углового взаимодействия. Произведены оценки погрешности модели. Отношение жесткости углового взаимодействия к продольной жесткости межатомной связи имеет наибольшее отношение у алмаза $c_{\gamma}/c = 0.12$, что свидетельствует о кавалентном взаимодействии и заметной роли, которую играет жесткость угловой связи. В группе углерода (углерод, кремний, германий, олово) с увеличением межатомного расстояния ковалентное взаимодействие ослабевает, отношение жесткостей связи уменьшается: c_{γ}/c для кремния, германия и олова приблизительно составило 0.06, что в два раза меньше, чем для углерода.

Проведено сравнение предложенной модели с другими статическими моделями, описывающими упругие свойства кристаллов со структурой алмаза и использующих две силовые постоянные на микроуровне для алмаза, кремния и германия. Наилучшие результаты показывают модель Китинга и модель, учитывающая моментное взаимодействие на микроуровне. Результаты предложенной модели, учитывающей угловое взаимодействие между связями, совпадают с результатами модели Харрисона.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 11-01-00809-а) и программы президиума РАН № 11 “Фундаментальные проблемы механики взаимодействий в технических и природных системах, материалах и средах”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Born M.* Zur Raumgittertheorie des Diamanten // *Ann. Phys.* 1914. Bd. 44. S. 605–642.
2. *Harrison W.A.* Ph. D. Dissertation. University of Illinois, 1956.
3. *Хангтингтон Г.* Упругие постоянные кристаллов. Перевод с англ. Под ред. А.В. Степанова // УФН. 1961. Ч. 1. Т. 74. Вып. 2. С. 303–352; Ч. 2. Т. 74. Вып. 3. С. 461–520.
4. *Keating P.N.* Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure // *Phys. Rev. Ser. 2.* 1966. V. 145. № 2. P. 637–645.
5. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д.* Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // *Изв. РАН. МТТ.* 2003. № 4. С. 110–127.
6. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д.* Теоретическая механика. Описание механических свойств кристаллических твердых тел на микро- и макроуровне. СПб: Изд-во СПбГПУ. 2003. 32 с.
7. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток при учете моментных взаимодействий на микроуровне // *ПММ.* 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595–615.
8. *Кривцов А.М.* Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. СПб: Изд-во СПбГПУ. 2009. 125 с.
9. *Беринский И.Е., Двас Н.Г., Кривцов А.М. и др.* Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов // Под ред. А.М. Кривцова. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2009. 144 с.
10. *Беринский И.Е.* Стержневая модель кристаллической решетки графена // *Науч.-техн. ведомости СПбГПУ.* 2010. № 3. С. 13–20.

11. Кузькин В.А., Кривцов А.М. Описание механических свойств графена с использованием частиц с вращательными степенями свободы // Докл. АН. 2011. Т. 440. № 4. С. 476–479.
12. Кривцов А.М., Подольская Е.А. Моделирование упругих свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой // Изв. РАН. МТТ. 2010. № 3. С. 77–86.
13. Кривцов А.М., Лобода О.С. Описание упругих свойств двухатомных кристаллов со структурой алмаза и сфалерита с использованием моментного взаимодействия // Физическая мезомеханика. 2012. Т. 15. № 2. С. 23–29.
14. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Изв. РАН. МТТ. 2005. № 4. С. 57–74.
15. Беринский И.Е., Кривцов А.М. Об использовании многочастичных межатомных потенциалов для расчета упругих характеристик графена и алмаза // Изв. РАН. МТТ. 2010. № 6. С. 60–85.
16. McSkimin H.J., Bond W.L. Elastic moduli of diamond // Phys. Rev. 1957. V. 105. № 1. P. 116–121.
17. Markham H.F. National Physical Laboratory measurements presented by Musgrave: Diamond conf. Reading, 1965.
18. McSkimin H.J., Andreatch P. Elastic moduli of diamond as a function of pressure and temperature // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. № 7. P. 2944–2948.
19. Grimsditch M.H., Ramdas A. K. Brillouin scattering in diamond // Phys. Rev. 1975. V. B11. № 8. P. 3139–3148.
20. Gilman J.J. Origins of the outstanding mechanical properties of diamond // Springer-Verlag, Mat. Res. Innovat. 2002. V. 6. P. 112–117.
21. Simmons G., Wang H. Singl Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook. MIT. Cambridge MA, 1971. 370 p.
22. Nielsen O.H., Martin R. Quantum-mechanical theory of stress and force // Phys. Rev. B 32, 3797. 1985. V. 32. № 6. P. 3780–3791.
23. Никаноров С.П., Кардашов Б.К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов // М.: Наука, 1985. 253 с.
24. Clerc D.G. Mechanical hardness: atomic-level calculations for diamond-like materials// J. Materials Scie. Letters. 1990. V. 17. № 17. P. 1461–1462.
25. Wei S., Allan D.C., Wilkins J.W. Elastic coustauts of a Si/GI superlattice and of bulk Si and Ge // Phys. Rev. 1992. V. 46. P. 12411.

С.-Петербург
E-mail: akrivtsov@bk.ru

Поступила в редакцию
20.06.2012