

К определению упругих характеристик кристаллической решетки  $\alpha$ -графита при учете моментного взаимодействия между частицами

С.С. Хакало, А.М. Кривцов

*В данной работе рассмотрена модель решетки графита при учете моментного взаимодействия между частицами. Получено выражение для макроскопического тензора жесткости решетки в моментной теории упругости. Осуществлен переход к безмоментной теории упругости и показано, что макроскопические упругие модули безмоментной теории зависят как от силовых, так и от моментных характеристик межатомного взаимодействия. Определены числовые значения микропараметров решетки с использованием экспериментальных данных.*

## 1 Введение

Графит – одна из аллотропных форм углерода, минерал со слоистой структурой. Слоем графита является графен – плоский кристалл, атомы которого в недеформированном состоянии расположены в вершинах правильных шестиугольников. Каждый атом углерода в слое графена ковалентно связан с тремя другими окружающими его атомами углерода. Взаимодействие между слоями осуществляется силами Ван-дер-Ваальса. Различают две модификации графита:  $\alpha$ -графит и  $\beta$ -графит, которые различаются упаковкой слоев (рис. 1).

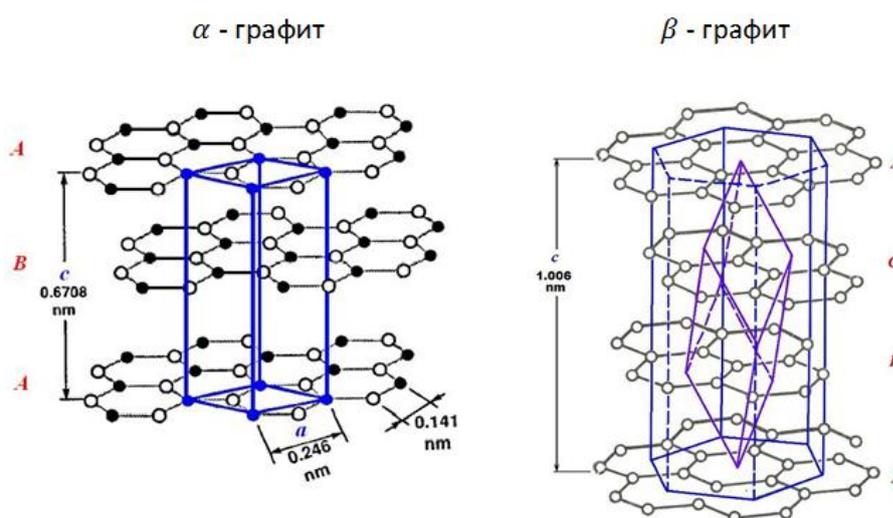


Рис. 1: Модификации графита

Кристаллическая решетка, для которой смещение на любые векторы, соединяющие узлы решетки, является тождественным преобразованием, называется простой (одноатомной). В противном случае решетка называется сложной. У  $\alpha$ -графита половина атомов каждого слоя располагается над и под центрами шестиугольников. Решетка  $\alpha$ -графита представляет собой сложную четырехатомную кристаллическую решетку, так как элементарная ячейка такой решетки содержит 4 атома. У  $\beta$ -графита каждый четвертый слой повторяет первый. Решетка  $\beta$ -графита представляет собой сложную двухатомную кристаллическую решетку, так как элементарная ячейка такой решетки содержит 2 атома. В чистом виде  $\beta$ -графит не наблюдается, так как является метастабильной фазой. Однако, в природных графитах содержание  $\beta$ -графита может достигать 30%. Далее, если это не будет специально оговорено, под графитом будем понимать  $\alpha$ -графит.

## 2 Описание модели. Вывод формул

Рассмотрим модель решетки графита (рис. 2). Предполагается, что атомы взаимодействуют только с ближайшими соседями. Взаимодействие между атомами,

расположенными в одной плоскости, моделируется с помощью стержней про-

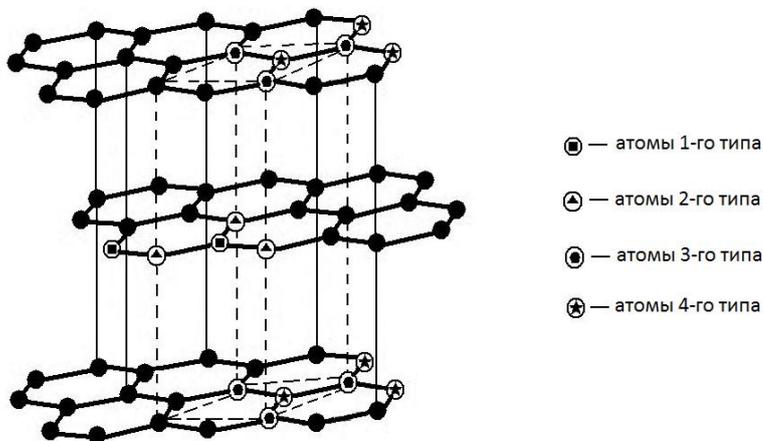


Рис. 2: Модель решетки графита

дольной и поперечной жесткости  $c_A$  и  $c_D$  соответственно. Взаимодействие между плоскостями моделируется стержнями продольной и поперечной жесткости  $s_A$  и  $s_D$ . Причем взаимодействуют только те атомы, которые располагаются непосредственно друг над другом. Для описания упругих свойств решетки графита будем использовать модель моментного взаимодействия между частицами [1]. Следствием моментного подхода является наличие поперечных жесткостей  $c_D$  и  $s_D$ .

Рассмотрим некоторую элементарную ячейку, которую для удобства будем назы-

вать исходной. На рисунке 2 исходная ячейка ограничена штриховыми линиями и представлена в виде прямой призмы, основаниями которой являются ромбы. Элементарная ячейка решетки графита содержит четыре атома. Пронумеруем все ячейки, в которых есть атомы, взаимодействующие с атомами исходной ячейки. Исходной ячейке присвоим номер  $\alpha = 0$ , остальным  $\alpha = \pm 1$ ,  $\alpha = \pm 2$ ,  $\alpha = \pm 3$ , так как таких ячеек в данном случае шесть. При этом нумерация производится так, чтобы ячейки, расположенные симметрично относительно исходной, имели индексы, противоположные по знаку. Частицы, входящие в каждую ячейку, пронумеруем индексами от 1 до 4. Атомы каждого типа на рисунке 2 обозначены разными геометрическими фигурами. Обозначим  $\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma$  — радиус-вектор, определяющий положение частицы  $\beta$  ячейки  $\alpha$  относительно частицы  $\gamma$  исходной ячейки. А  $\mathbf{n}_{\alpha\beta}^\gamma$  — орт, соответствующий вектору  $\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma$ .

Впишем базис так, чтобы орт  $\mathbf{k}$  был перпендикулярен графеновым плоскостям, а орт  $\mathbf{j}$  был коллинеарен линии связи между атомами в плоскости. Тогда орты, задающие направления связей в плоскости между атомами первого типа исходной ячейки и атомами второго типа, могут быть представлены следующим образом

$$\mathbf{n}_{02}^1 = \frac{1}{2}(-\sqrt{3}\mathbf{i} + \mathbf{j}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_1, \quad \mathbf{n}_{12}^1 = -\mathbf{j} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_2, \quad \mathbf{n}_{22}^1 = \frac{1}{2}(\sqrt{3}\mathbf{i} + \mathbf{j}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_3. \quad (1)$$

Орты, задающие направления связей атомов второго типа исходной ячейки с атомами третьего типа между плоскостями, могут быть представлены следующим образом

$$\mathbf{n}_{03}^2 = \mathbf{k}, \quad \mathbf{n}_{-33}^2 = -\mathbf{k}. \quad (2)$$

В силу геометрии решетки и следующего свойства радиус-векторов, а именно  $\mathbf{a}_{-\alpha\beta}^\gamma = -\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma$ , все оставшиеся орты направлений связей будут коллинеарны введенным ранее ортам  $\mathbf{n}_1$ ,  $\mathbf{n}_2$ ,  $\mathbf{n}_3$ ,  $\mathbf{k}$ , а, значит, и выражены через них.

В работе [1] были получены следующие формулы для макроскопического тензора жесткости сложной решетки

$${}^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* + {}^4\mathbf{A}', \quad (3)$$

где

$${}^4\mathbf{A}^* = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad {}^4\mathbf{A}' = \sum_{\beta,\gamma} {}^3\mathbf{A}_\beta^\gamma \cdot \left[ {}^3\mathbf{U}_\beta - {}^3\mathbf{U}_\gamma \right]^T. \quad (4)$$

Здесь  ${}^4\mathbf{A}$ ,  ${}^4\mathbf{A}^*$ ,  ${}^4\mathbf{A}'$ ,  ${}^3\mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma$ ,  $\mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma$  — тензоры жесткости;  ${}^3\mathbf{U}_\gamma$  — тензоры невязки;  $\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma$  — векторы направления связи;  $V_0$  — объем элементарной ячейки решетки. Тензоры невязки  ${}^3\mathbf{U}_\gamma$  определяются в результате решения системы 4 уравнений

$${}^3\mathbf{A}^\gamma + \sum_{\beta} \left[ {}^3\mathbf{U}_\beta - {}^3\mathbf{U}_\gamma \right] \cdot \mathbf{A}_\beta^\gamma = 0. \quad (5)$$

Промежуточные тензоры жесткости определяются следующим образом

$${}^3\mathbf{A}^\gamma = \sum_{\beta} {}^3\mathbf{A}_\beta^\gamma, \quad {}^3\mathbf{A}_\beta^\gamma = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad \mathbf{A}_\beta^\gamma = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma. \quad (6)$$

Решая систему уравнений (5) относительно тензоров невязки  ${}^3\mathbf{U}_\gamma$  с учетом геометрии решетки графита, получаем формулу для тензора жесткости  ${}^4\mathbf{A}'$

$${}^4\mathbf{A}' = -4 {}^3\mathbf{A}_1^2 \cdot (\mathbf{A}_2^1)^{-T} \cdot ({}^3\mathbf{A}_1^2)^T. \quad (7)$$

Тензор жесткости  ${}^4\mathbf{A}^*$  для удобства представим в виде

$${}^4\mathbf{A}^* = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} {}^4\mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad {}^4\mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma = \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma. \quad (8)$$

Тогда с учетом геометрии решетки графита тензор жесткости  ${}^4\mathbf{A}^*$  можно представить в следующем виде

$${}^4\mathbf{A}^* = 4 \sum_{\alpha} {}^4\mathbf{A}_{\alpha 2}^1 + 2 \sum_{\beta} {}^4\mathbf{A}_{\beta 3}^2, \quad \alpha = 0, 1, 2; \beta = 0, 3. \quad (9)$$

Тензоры жесткости межатомных связей [2] в общем виде можно представить как

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}^\gamma = c_A \mathbf{n}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{n}_{\alpha\beta}^\gamma + c_D (\mathbf{E} - \mathbf{n}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{n}_{\alpha\beta}^\gamma). \quad (10)$$

С учетом геометрии решетки графита и введенных ранее обозначений для ортов  $\mathbf{n}_{\alpha\beta}^\gamma$  запишем тензоры жесткости межатомных взаимодействий для связей в плоскости

$$\mathbf{A}_\alpha = c_A \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + c_D (\mathbf{E} - \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha), \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (11)$$

для связей между плоскостями

$$\mathbf{A}_\beta = s_A \mathbf{k} \mathbf{k} + s_D (\mathbf{E} - \mathbf{k} \mathbf{k}), \quad \beta = 4, 5. \quad (12)$$

Подставив тензоры жесткости (11) и (12), а также орты направлений связей (1), (2) в формулы для тензоров жесткости 4-го ранга (7) и (9), нетрудно получить макроскопический тензор жесткости  ${}^4\mathbf{A}$  среды в моментной теории упругости. Но мы находимся в рамках безмоментной теории упругости, поэтому необходимо произвести пересчет тензора жесткости  ${}^4\mathbf{A}$  по следующей формуле

$${}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{A} - {}^4\mathbf{A}_\times \cdot ({}^4\mathbf{A}_\times)^{-1} \cdot {}^4\mathbf{A}, \quad (13)$$

где  ${}^4\mathbf{C}$  — тензор жесткости среды в безмоментной теории упругости. Символ " $\times$ " означает, что соответственные крайние векторы данного тензора умножаются векторно друг на друга

$$(\mathbf{abcd})_\times = \mathbf{abc} \times \mathbf{d}, \quad \times(\mathbf{abcd}) = \mathbf{a} \times \mathbf{bcd}, \quad \times(\mathbf{abcd})_\times = \mathbf{a} \times \mathbf{bc} \times \mathbf{d}. \quad (14)$$

Подставив в формулу (13) выражение для тензора  ${}^4\mathbf{A}$ , мы получим выражение для тензора жесткости графита в безмоментной теории упругости. Координаты тензора  ${}^4\mathbf{C}$  через координаты тензора  ${}^4\mathbf{A}$  выражаются следующим образом

$$C_{1111} = A_{1111}, \quad C_{1122} = A_{1122}, \quad C_{3333} = A_{3333}, \quad (15)$$

$$C_{1212} = \frac{1}{4}(A_{1212} + A_{1221} + A_{2112} + A_{2121}), \quad C_{1313} = \frac{A_{1331}A_{3113}}{A_{1331} + A_{3113}}.$$

Парам индексов поставим в соответствие один индекс. Тогда координаты тензора  ${}^4\mathbf{C}$  можно записать в виде

$$C_{1111} \stackrel{\text{def}}{=} C_{11}, \quad C_{1122} \stackrel{\text{def}}{=} C_{12}, \quad C_{3333} \stackrel{\text{def}}{=} C_{33}, \quad C_{1313} \stackrel{\text{def}}{=} C_{55}, \quad C_{1212} \stackrel{\text{def}}{=} C_{66}. \quad (16)$$

Определим координаты  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_{66}$  тензора  ${}^4\mathbf{C}$ . Это и есть упругие модули графита, которые выражаются через микропараметры решетки следующим образом

$$C_{11} = \frac{3a^2 c_A(c_A + 3c_D)}{2V_0 c_A + c_D}, \quad C_{12} = \frac{3a^2 c_A(c_A - c_D)}{2V_0 c_A + c_D}, \quad C_{33} = \frac{2h^2}{V_0} s_A, \quad (17)$$

$$C_{66} = 3 \frac{a^2}{V_0} \frac{c_A c_D}{c_A + c_D}, \quad C_{55} = 12 \frac{a^2 h^2}{V_0} \frac{c_D s_D}{3a^2 c_D + 4h^2 s_D},$$

где  $c_A$ ,  $c_D$ ,  $s_A$ ,  $s_D$  — жесткости межатомного взаимодействия,  $V_0$  — объем элементарной ячейки решетки,  $a$ ,  $h$  — расстояния между соседними атомами в одной плоскости и в смежных плоскостях. Легко видеть, что упругий модуль  $C_{66}$  является линейной комбинацией модулей  $C_{11}$  и  $C_{12}$

$$C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}).$$

Отметим, что рассматриваемая модель решетки графита не позволяет получить выражение для модуля  $C_{13}$ , который отвечает за изменение размеров графита в плоскости, параллельной слоям графена, при растяжении (сжатии) графита в направлении, перпендикулярном графеновым слоям. Из формул (17) видно, что упругие модули графита  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{66}$  зависят только от жесткостей  $c_A$  и  $c_D$ , которые характеризуют взаимодействие атомов, лежащих в одной плоскости. Отметим, что для упругих модулей графена, полученных в работе [2], выполняются следующие равенства

$$C_{11}^{\text{graphene}} = hC_{11}^{\text{graphite}}, \quad C_{12}^{\text{graphene}} = hC_{12}^{\text{graphite}}, \quad C_{66}^{\text{graphene}} = hC_{66}^{\text{graphite}}. \quad (18)$$

Расстояние  $h$  является коэффициентом пропорциональности между двумерными и трехмерными модулями упругости. Таким образом, упругие модули графена отделяются от модулей графита.

### 3 Вычисление микропараметров с использованием экспериментальных данных

Долгое время коэффициенты упругости монокристаллов графита, имеющих обычно очень малые размеры, определялись только косвенно [3]. Наилучшие экспериментальные оценки коэффициентов упругости гексагональных кристаллов графита ( $\alpha$ -графита) были основаны на довольно косвенных данных для ансамбля кристалликов пиролитического графита, имеющих близкие ориентации вдоль оси  $c$  и

большой разброс ориентаций в перпендикулярных направлениях. Эти экспериментальные данные из работ [4, 5] долго оставались наилучшими данными по упругости гексагонального графита. Пять коэффициентов жесткости были определены разнообразными методами механических испытаний (статическими испытаниями растяжения-сжатия и сдвига, анализом распространения ультразвука и резонансных вибраций, изгиба и кручения стержней и дисков). Было найдено:

$$C_{11} = 1060 \text{ GPa}, \quad C_{12} = 180 \text{ GPa}, \quad C_{33} = 36.5 \text{ GPa}, \quad C_{55} = 4 \text{ GPa}. \quad (19)$$

Наименее точно был определен коэффициент  $C_{55}$ , чувствительный к уровню дефектности кристаллов [5]. Лишь в 2007 г. получены более прямые экспериментальные данные для монокристаллов гексагонального графита с помощью неупругого рассеяния рентгеновских лучей [6]:

$$C_{11} = 1109 \text{ GPa}, \quad C_{12} = 139 \text{ GPa}, \quad C_{33} = 38.7 \text{ GPa}, \quad C_{55} = 4.95 \text{ GPa}. \quad (20)$$

Воспользуемся этими данными для получения микропараметров решетки графита. Видно, что внутренние жесткости однозначно выражаются через упругие константы графита

$$c_A = \frac{V_0}{3a^2}(C_{11} + C_{12}), \quad c_D = \frac{V_0}{3a^2} \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11} + 3C_{12}}, \quad (21)$$

$$s_A = \frac{V_0}{2h^2} C_{33}, \quad s_D = \frac{V_0}{4h^2} C_{55} \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}^2 - C_{12}^2 - C_{55}(C_{11} + 3C_{12})}.$$

Для этого подставляем числовые значения упругих модулей в формулы (21) и находим числовые значения жесткостей межатомного взаимодействия

$$c_A = 736 \text{ N/m}, \quad c_D = 468 \text{ N/m}, \quad s_A = 5.8 \text{ N/m}, \quad s_D = 0.373 \text{ N/m}. \quad (22)$$

Так как взаимодействие между графеновыми слоями осуществляется силами Ван-дер-Ваальса, то связи между графеновыми плоскостями много слабее связей между атомами углерода в монослое графена. Это является причиной столь незначительных значений жесткостей  $s_A$  и  $s_D$  по сравнению с жесткостями  $c_A$  и  $c_D$ .

Согласно выражениям для упругих модулей графена [2]

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{c_A(c_A + 3c_D)}{c_A + c_D}, \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{c_A(c_A - c_D)}{c_A + c_D}, \quad C_{66} = \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{c_A c_D}{c_A + c_D} \quad (23)$$

и формулам (18) легко убедиться, что числовые значения жесткостей межатомных связей  $c_A$  и  $c_D$  для решеток графита и графена равны между собой. Согласно полученным значениям (22) отношение поперечной жесткости к продольной для связи атомов в одной плоскости равно

$$\frac{c_D}{c_A} = 0.64,$$

а для связи атомов в смежных плоскостях равно

$$\frac{s_D}{s_A} = 0.064.$$

Таким образом, поперечная жесткость ковалентной связи атомов углерода в слое графена сравнима с продольной жесткостью и учет ее необходим для расчета ковалентных кристаллов.

## 4 Заключение

В данной работе была рассмотрена модель кристаллической решетки графита при учете моментного взаимодействия между частицами. Аналитически была решена система четырех тензорных уравнений для четырехатомной решетки графита. Была установлена связь между макропараметрами  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{66}$  и микропараметрами  $c_A$ ,  $c_D$ ,  $s_A$ ,  $s_D$  кристаллической решетки графита в безмоментной теории упругости. Было показано, что упругие модули графена отделяются от модулей графита. С использованием экспериментальных данных для упругих коэффициентов графита были получены числовые значения для жесткостей межатомного взаимодействия. Было установлено, что числовые значения жесткостей связи  $c_A$  и  $c_D$  для графита и графена совпадают. Из полученных результатов видно, что жесткости межатомных связей в плоскости графена намного больше, чем жесткости связей в смежных плоскостях. Было показано, что учет поперечной жесткости ковалентной связи необходим для расчета ковалентных кристаллов.

## 5 Приложение. Переход между моментной и безмоментной моделями в трехмерной теории упругости

### 5.1 Общие формулы

Уравнения динамики в трехмерной линейной механике сплошной среды имеют вид

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}, \quad (24)$$

$$\rho \theta \cdot \ddot{\boldsymbol{\varphi}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\tau}_\times + \mathbf{m},$$

где  $\rho$  и  $\rho\theta$  — плотность массы и тензоров инерции,  $\mathbf{u}$  и  $\boldsymbol{\varphi}$  — перемещение и поворот элемента среды,  $\boldsymbol{\tau}$  и  $\boldsymbol{\mu}$  — тензоры силовых и моментных напряжений,  $\mathbf{f}$  и  $\mathbf{m}$  — объемные силовые и моментные воздействия,  $\boldsymbol{\tau}_\times$  — векторный инвариант тензора  $\boldsymbol{\tau}$ . Если во втором из уравнений динамики (баланс моментов) пренебречь инерцией вращения и моментными воздействиями, то оно вырождается в условие симметричности тензора напряжений:

$$\boldsymbol{\tau}_\times = \mathbf{0} \iff \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^T. \quad (25)$$

Для удобства дальнейших выкладок введем правую и левую векторные свертки тензоров произвольного ранга

$$\mathbf{A}_\times \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A} \cdot \times \mathbf{E}, \quad \times \mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E} \cdot \times \mathbf{A}. \quad (26)$$

Согласно определению

$$(\mathbf{abcd})_{\times} = \mathbf{abc} \times \mathbf{d}, \quad {}_{\times}(\mathbf{abcd}) = \mathbf{a} \times \mathbf{bcd}. \quad (27)$$

Очевидно, что данные операции понижают на единицу ранг тензора, а для тензора второго ранга они дают векторный инвариант. Будем также использовать обозначение

$${}_{\times}\mathbf{A}_{\times} \stackrel{\text{def}}{=} ({}_{\times}\mathbf{A})_{\times} = {}_{\times}(\mathbf{A}_{\times}) \implies {}_{\times}(\mathbf{abcd})_{\times} = \mathbf{a} \times \mathbf{bc} \times \mathbf{d}. \quad (28)$$

## 5.2 Нахождение тензора жесткости эквивалентной безмоментной среды

В моментной теории сплошной среды тензор напряжений связан с деформациями соотношением

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{A} \cdot \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi} + \mathbf{B} \cdot \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi}. \quad (29)$$

Для материала, обладающего симметрией не ниже ортотропии  $\mathbf{B} \equiv \mathbf{0}$ , и соотношение ( ) может быть записано в виде

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{A} \cdot \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{A}_{\times} \cdot \boldsymbol{\varphi} \implies \tau_{\times} = {}_{\times}\mathbf{A} \cdot \cdot \nabla \mathbf{u} + {}_{\times}\mathbf{A}_{\times} \cdot \boldsymbol{\varphi}. \quad (30)$$

Приравнявая  $\tau_{\times}$  к нулю, выразим из полученного выражения угол поворота среды

$$\boldsymbol{\varphi} = -{}_{\times}\mathbf{A}_{\times}^{-1} \cdot {}_{\times}\mathbf{A} \cdot \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (31)$$

Подставив полученное выражение в формулу для тензора напряжений ( ), получим

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C} \cdot \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad \mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A} - \mathbf{A}_{\times} \cdot {}_{\times}\mathbf{A}_{\times}^{-1} \cdot {}_{\times}\mathbf{A}. \quad (32)$$

Легко видеть, что для полученного тензора  $\mathbf{C}$  выполняется  $\mathbf{C}_{\times} = {}_{\times}\mathbf{C} = \mathbf{0}$ . Действительно

$$\mathbf{C}_{\times} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A}_{\times} - \mathbf{A}_{\times} \cdot {}_{\times}\mathbf{A}_{\times}^{-1} \cdot {}_{\times}\mathbf{A} - \times = \mathbf{0}. \quad (33)$$

Следовательно тензор  $\mathbf{C}$  аполярный, то есть его координаты в декартовом базисе симметричны относительно перестановок 1–2 и 3–4 индексов:  $C_{knprq} = C_{nkpqr} = C_{knqpr}$ . Это означает, что тензор напряжений в формуле ( ) зависит только от симметричной части тензора деформаций

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla \mathbf{u})^s. \quad (34)$$

Тензор жесткости  $\mathbf{C}$  будем называть тензором жесткости эквивалентной безмоментной среды.

## Список литературы

- [1] *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне // Прикладная математика и механика, 2007, том 71. вып. 4. с. 595–615.
- [2] *Кривцов А.М.* Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пос. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. - 124с.
- [3] *Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С.* Мезомеханика многослойных нанотрубок и наносуспензий // Физ. мезомеханика. 2008. Т. 11, вып. 6. С. 25 - 42.
- [4] *Blackslee O.L., Proctor D.G., Seldin E.J., Spence G.B., Weng T.* Elastic constants of compression-annealed pyrolytic graphite // J. Appl. Phys.–1970.–V.41.–No.8.–P.3373–3382.
- [5] *Seldin E.J., Nezbeda C.W.* Elastic constants and electron-microscope observations of neutron-irradiated compression-annealed pyrolytic and single-crystal graphite // J. Appl. Phys.–1970.–V.41.–No.8.–P.3389–3400.
- [6] *Bosak A., Krisch M., Mohr M., Maultzsch J., Thomsen C.* Elasticity of single-crystalline graphite: Inelastic X-ray scattering study // Phys. Rev. B. - 2007. - V. 75. - No. 15. - P. 153408(4).