К определению упругих характеристик кристаллической решетки лонсдейлита при учете моментного взаимодействия между частицами

С.С. Хакало, А.М. Кривцов

В данной работе рассмотрена модель решетки лонсдейлита с учетом 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 упругих модулей лонсдейлита с использованием числовых значений жесткостей межатомного взаимодействия решетки алмаза. Проведено сравнение упругих характеристик лонсдейлита и алмаза.

1 Введение

Лонсдейлит или алмаз гексагональный — одна из аллотропных модификаций углерода. Открыт в 1966 году или ранее. Первая публикация в 1967 году [1]. Одновременно он обнаружен в природе, в метеоритном кратере. В настоящее время группе американских и китайских ученых удалось доказать, что самый твердый на сегодняшний день материал – специально обработанный лонсдейлит. Он оказался на 58% тверже алмаза. Лонсдейлит может выдержать нагрузку в 152 ГПа, в то время как алмаз – всего в 97 ГПа. Статья ученых появилась в журнале *Physical Review Letters* [2].

Алмаз и лонсдейлит имеют одинаковые валентные углы, которые равны $109°28'16''$, длины связей у них равны $0,1545$ нм, а координационное число – 4. Решетки алмаза и лонсдейлита отличаются способом упаковки. Для лонсдейлита характерна двухслойная упаковка типа $(...ABAB...)$, где каждый последующий тетраэдрический слой повернут на $60°$ по отношению к предыдущему. Для алмаза – трехслойная типа $(...ABCABC...)$, где все слои построены из одинаковых координационных тетраэдров (рис. 1).

2 Описание модели. Вывод формул

Кристаллическая решетка, для которой смещение на любые векторы, соединяющие узлы решетки, является тождественным преобразованием, называется про-

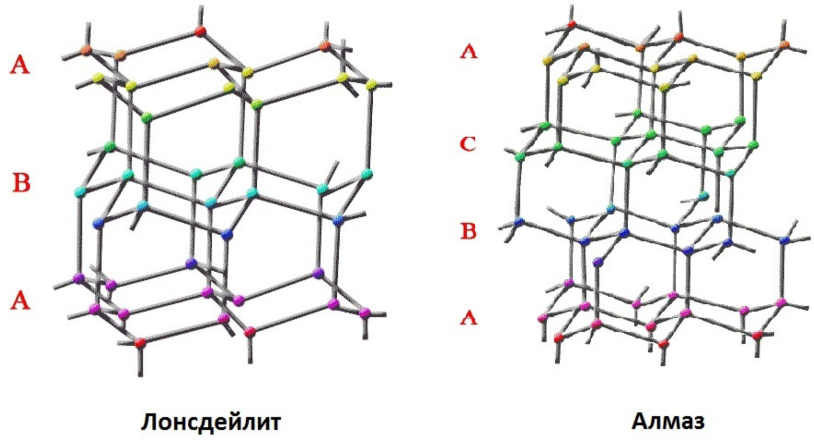

Рис. 1: Решетки лонсдейлита и алмаза

стой (одноатомной). В противном случае решетка называется сложнй. Решетка лонсдейлита представляет собой сложную четырехатомную кристаллическую решетку, так как элементарная ячейка такой решетки содержит 4 атома.

Рассмотрим модель решетки лонсдейлита (рис. 2). Предполагается, что атомы взаимодействуют только с ближайшими соседями. Для описания упругих свойств решетки лонсдейлита будем использовать модель моментного взаимодействия между частицами [3]. Следствием моментного подхода является наличие поперечной жесткости c_D. То есть, взаимодействие между атомами

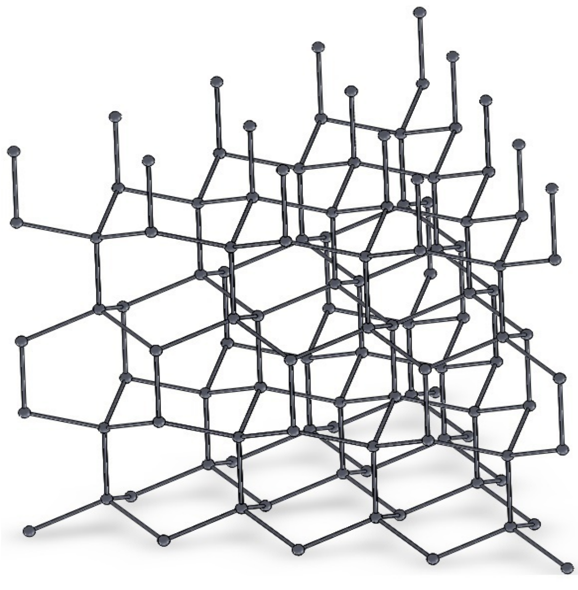

Рис. 2: Модель решетки лонсдейлита

моделируется с помощью стержней продольной и поперечной жесткости c_A и c_D соответственно. Рассмотрим некоторую элементарную ячейку, которую для удобства будем называть исходной (рис. 3).

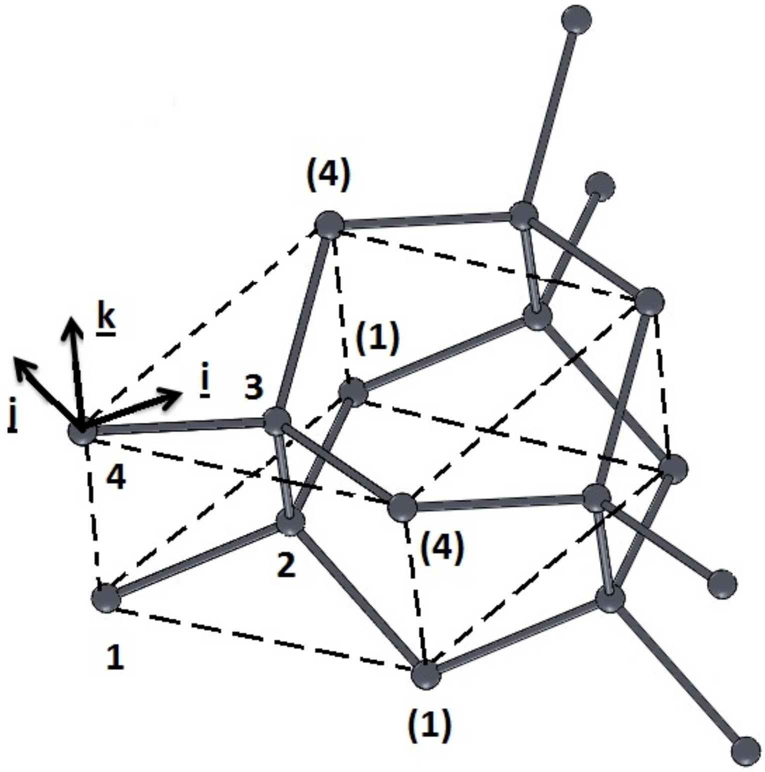

Рис. 3: Элементарная ячейка решетки лонсдейлита

На рисунке 3 исходная ячейка ограничена штриховыми линиями и представлена в виде прямой призмы, основаниями которой являются ромбы (рис. 4).

Элементарная ячейка решетки лонсдейлита 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. Обозначим $\mathbf{a}^{\gamma}_{\alpha\beta}$ — радиус-вектор, определяющий положение частицы β ячейки α относительно частицы γ исходной ячейки. А $\mathbf{n}^{\gamma}_{\alpha\beta}$ — орт, соответствующий вектору $\mathbf{a}^{\gamma}_{\alpha\beta}$.

Впишем базис так, чтобы орт $\mathbf{k}$ был коллинеарен стержням, соединяющим атомы второго и третьего типа. Орт $\mathbf{i}$ был компланарен плоскости, образованной атомами первого, второго, третьего и четвертого типа, и перпендикулярен орту $\mathbf{k}$. А орт $\mathbf{j}$ впишем так, чтобы тройка векторов $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ образовывала правую тройку векторов. Тогда орты, задающие направления связей атомов четвертого типа с ближайшим окружением, могут быть представлены следующим образом

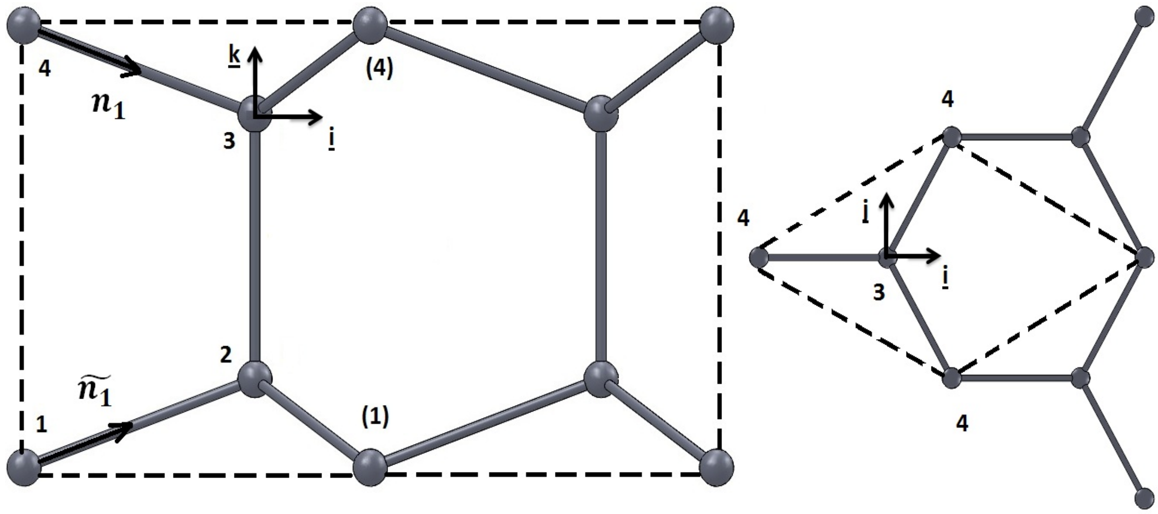

Рис. 4: Модель решетки лонсдейлита

$$\mathbf{n}^4_{03} = \frac{2\sqrt{2}}{3}\mathbf{i} - \frac{1}{3}\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{n}_1, \quad \mathbf{n}^4_{13} = -\frac{\sqrt{2}}{3}\mathbf{i} + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{j} - \frac{1}{3}\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{n}_2,$$
$$\mathbf{n}^4_{23} = -\frac{\sqrt{2}}{3}\mathbf{i} - \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{j} - \frac{1}{3}\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{n}_3, \quad \mathbf{n}^4_{31} = \mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{n}_4. \tag{1}$$

Орты, задающие направления связей атомов первого типа с ближайшим окружением, могут быть представлены следующим образом

$$\mathbf{n}^1_{02} = \frac{2\sqrt{2}}{3}\mathbf{i} + \frac{1}{3}\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \tilde{\mathbf{n}}_1, \quad \mathbf{n}^1_{12} = -\frac{\sqrt{2}}{3}\mathbf{i} + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{j} + \frac{1}{3}\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \tilde{\mathbf{n}}_2,$$
$$\mathbf{n}^1_{22} = -\frac{\sqrt{2}}{3}\mathbf{i} - \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{j} + \frac{1}{3}\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \tilde{\mathbf{n}}_3, \quad \mathbf{n}^1_{-34} = -\mathbf{k} \overset{\text{def}}{=} \tilde{\mathbf{n}}_4. \tag{2}$$

В силу геометрии решетки и следующего свойства радиус-векторов, а именно $\mathbf{a}^{\gamma}_{-\alpha\beta}$ = - $\mathbf{a}^{\beta}_{\alpha\gamma}$, все оставшиеся орты направлений связей будут коллинеарны введенным ранее ортам $\mathbf{n}_\alpha$, $\tilde{\mathbf{n}}_\beta$, где $\alpha, \beta = \overline{1,4}$ а, значит, и выражены через них.

В работе [3] были получены следующие формулы для макроскопического тензора жесткости сложной решетки

$$^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* + {}^4\mathbf{A}', \tag{3}$$

где

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

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

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

Промежуточные тензоры жесткости определяются следующим образом

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

С учетом геометрии решетки лонсдейлита формула для тензора жесткости ${}^4\mathbf{A}'$ представима следующим образом

$$ {}^4\mathbf{A}' = -4\,({}^3\mathbf{A}^1 \cdot \mathbf{U}_1^T + {}^3\mathbf{A}^4 \cdot \mathbf{U}_4^T). \tag{7} $$

Тензоры невязки $\mathbf{U}_1^T$ и $\mathbf{U}_4^T$ определены в результате решения системы уравнений (5) и имеют следующий вид

$$ \mathbf{U}_1^T = \{({}^3\mathbf{A}^1 + {}^3\mathbf{A}^4 \cdot (2\mathbf{A}_3^4 + \mathbf{A}_1^4)^{-1} \cdot \mathbf{A}_4^1) \cdot [\mathbf{A}_1^4 \cdot (2\mathbf{A}_3^4 + \mathbf{A}_1^4)^{-1} \cdot \mathbf{A}_4^1 - 2\mathbf{A}_2^1 - \mathbf{A}_4^1]^{-1}\}^T $$

$$ \mathbf{U}_4^T = \{[\mathbf{U}_1 \cdot (2\mathbf{A}_2^1 + \mathbf{A}_4^1) - {}^3\mathbf{A}^1] \cdot (\mathbf{A}_4^1)^{-1}\}^T. \tag{8} $$

Тензоры жесткости межатомных связей [4] в общем виде можно представить как

$$ \mathbf{A}^\gamma_{\alpha\beta} = c_A \mathbf{n}^\gamma_{\alpha\beta}\mathbf{n}^\gamma_{\alpha\beta} + c_D(\mathbf{E} - \mathbf{n}^\gamma_{\alpha\beta}\mathbf{n}^\gamma_{\alpha\beta}). \tag{9} $$

С учетом введенных ранее обозначений для ортов $\mathbf{n}^\gamma_{\alpha\beta}$ запишем тензоры жесткости межатомного взаимодействия для связей атомов четвертого типа с ближайшим окружением

$$ \mathbf{A}_\alpha = c_A \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + c_D(\mathbf{E} - \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha), \quad \alpha = \overline{1,4}, \tag{10} $$

для связей атомов первого типа с близлежащими атомами

$$ \tilde{\mathbf{A}}_\beta = c_A \tilde{\mathbf{n}}_\beta \tilde{\mathbf{n}}_\beta + c_D(\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{n}}_\beta \tilde{\mathbf{n}}_\beta), \quad \beta = \overline{1,4}, \tag{11} $$

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

$$ {}^4\mathbf{A}^* = \frac{a^2}{V_0} \sum_{\alpha=1}^4 (\mathbf{n}_\alpha \mathbf{A}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \tilde{\mathbf{n}}_\alpha \tilde{\mathbf{A}}_\alpha \tilde{\mathbf{n}}_\alpha). \tag{12} $$

Подставив тензоры жесткостей межатомного взаимодействия (9), (10) и (11), а также орты направлений связей (1), (2) в формулы (7), (8) и (12), получаем выражения для тензоров жесткости ${}^4\mathbf{A}^*$ и ${}^4\mathbf{A}'$

$$ {}^4\mathbf{A}^* = \frac{8}{27}\frac{a^2}{V_0}(c_A - c_D)[2\tilde{\mathbf{I}}_1 + 2\tilde{\mathbf{I}}_{23} + \hat{\mathbf{I}}_1 + \hat{\mathbf{I}}_{23} + 7\mathbf{K}] + \frac{8}{3}\frac{a^2}{V_0} c_D [\tilde{\mathbf{I}}_2 + \hat{\mathbf{I}}_2 + \mathbf{K}], $$

$$
{}^4\mathbf{A}' = -\frac{8}{27}\frac{a^2}{V_0}\frac{(c_A-c_D)^2}{c_A+2c_D}\left(8\frac{c_A+2c_D}{4c_A+5c_D}[\tilde{\mathbf{I}}_{23}-\tilde{\mathbf{I}}_1]+\tilde{\mathbf{I}}_1-2\hat{\mathbf{I}}_1+\hat{\mathbf{I}}_{23}+4\mathbf{K}\right). \tag{13}
$$

Где

$$
\tilde{\mathbf{I}}_1 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_n, \quad \tilde{\mathbf{I}}_2 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_n\mathbf{e}_k, \quad \tilde{\mathbf{I}}_3 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n, \quad \mathbf{K} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{kkkk},
$$
$$
\hat{\mathbf{I}}_1 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{kke}_k\mathbf{e}_k+\mathbf{e}_n\mathbf{e}_n\mathbf{kk}, \quad \hat{\mathbf{I}}_2 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{ke}_k\mathbf{e}_k\mathbf{k}+\mathbf{e}_n\mathbf{kke}_n, \quad \hat{\mathbf{I}}_3 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k\mathbf{ke}_k\mathbf{k}+\mathbf{ke}_n\mathbf{ke}_n. \tag{14}
$$

В формулах (13) $\tilde{\mathbf{I}}_{23} \overset{\text{def}}{=} \tilde{\mathbf{I}}_2+\tilde{\mathbf{I}}_3$, $\hat{\mathbf{I}}_{23} \overset{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{I}}_2+\hat{\mathbf{I}}_3$. Орты $\mathbf{e}_n$ перпендикулярны $\mathbf{k}$, где $n=\overline{1,2}$. Вектора $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{k}$ образуют ортонормированный базис. В формулах выше ведется суммирование по повторяющемуся индексу.
Полученный макроскопический тензор жесткости ${}^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* + {}^4\mathbf{A}'$ выведен в предположении, что ... среды в моментной теории упругости. Находясь в рамках безмоментной теории упругости, необходимо произвести пересчет тензора жесткости ${}^4\mathbf{A}$ по следующей формуле

$$
{}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{A} - {}^4\mathbf{A}_\times \cdot \left({}^4{}_\times\mathbf{A}_\times\right)^{-1} \cdot {}^4{}_\times\mathbf{A}, \tag{15}
$$

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

$$
(\mathbf{abcd})_\times = \mathbf{abc}\times\mathbf{d}, \quad {}_\times(\mathbf{abcd}) = \mathbf{a}\times\mathbf{bcd}, \quad {}_\times(\mathbf{abcd})_\times = \mathbf{a}\times\mathbf{bc}\times\mathbf{d}. \tag{16}
$$

Подставив в формулу (15) выражение для тензора ${}^4\mathbf{A}$, мы получим выражение для тензора жесткости ${}^4\mathbf{C}$ лонсдейлита в безмоментной теории упругости

$$
{}^4\mathbf{C} = C_{1122}\tilde{\mathbf{I}}_1 + C_{1212}\tilde{\mathbf{I}}_{23} + C_{1133}\hat{\mathbf{I}}_1 + C_{1313}\hat{\mathbf{I}}_{23} + C_{3333}\mathbf{K}. \tag{17}
$$

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

$$
C_{1122} \overset{\text{def}}{=} C_{12}, \quad C_{1212} \overset{\text{def}}{=} C_{66}, \quad C_{1133} \overset{\text{def}}{=} C_{13}, \quad C_{1313} \overset{\text{def}}{=} C_{55}, \quad C_{3333} \overset{\text{def}}{=} C_{33}. \tag{18}
$$

Координаты тензора ${}^4\mathbf{C}$ через микропараметры решетки лонсдейлита выражаются следующим образом

$$
C_{12} = \frac{8}{9}\frac{a^2}{V_0}(c_A-c_D)\frac{4c_A^2+11c_Ac_D+3c_D^2}{(c_A+2c_D)(4c_A+5c_D)}, \qquad C_{66} = \frac{4}{3}\frac{a^2}{V_0}c_D\frac{8c_A+c_D}{4c_A+5c_D},
$$
$$
C_{13} = \frac{8}{9}\frac{a^2}{V_0}c_A\frac{c_A-c_D}{c_A+2c_D}, \qquad C_{55} = \frac{4}{9}\frac{a^2}{V_0}c_D\frac{5c_A+4c_D}{c_A+2c_D}, \qquad C_{33} = \frac{8}{9}\frac{a^2}{V_0}c_A\frac{c_A+8c_D}{c_A+2c_D}, \tag{19}
$$

где c_A, c_D — жесткости межатомного взаимодействия, V_0 — объем элементарной ячейки решетки, a — расстояние между соседними атомами. Легко видеть, что упругий модуль C_{11} является линейной комбинацией модулей C_{12} и C_{66}

$$
C_{11} = C_{12} + 2C_{66}. \tag{20}
$$

3 Сравнение упругих характеристик лонсдейлита и алмаза

Как было сказано в первой части данной работы, решетки алмаза и лонсдейлита отличаются способом упаковки. Для лонсдейлита характерна двухслойная упаковка типа (...$ABAB$...), для алмаза – трехслойная типа (...$ABCABC$...), где все слои построены из одинаковых координационных тетраэдров (рис. 1). Алмаз является ортотропным материалом, то есть он имеет 3 взаимно перпендикулярные плоскости симметрии. Это хорошо показано на рисунке 5, где в качестве плоскостей симметрии выступают грани куба.

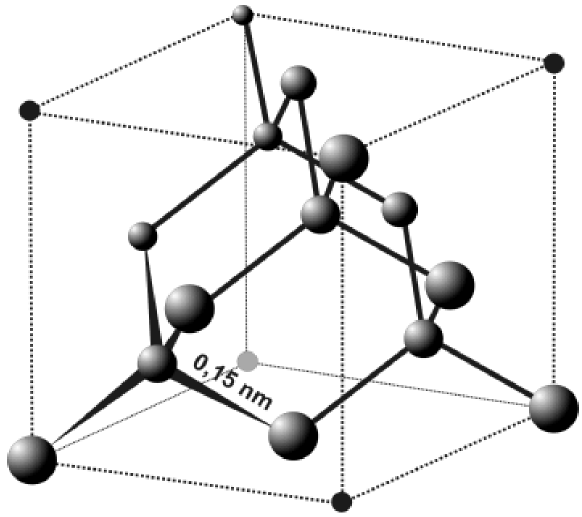

Рис. 5: Фрагмент кристаллической решетки алмаза

В работе [4] была получена следующая формула для тензора жесткости ортотропного материала

$$^4\mathbf{C} = (C_{11} - C_{12} - 2C_{66})\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k + C_{12}\mathbf{J}_1 + C_{66}\mathbf{J}_{23}, \qquad (21)$$

где

$$\mathbf{J}_1 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_n, \qquad \mathbf{J}_{23} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_n\mathbf{e}_k + \mathbf{e}_k\mathbf{e}_n\mathbf{e}_k\mathbf{e}_n.$$

Здесь $^4\mathbf{C}$ – макроскопический тензор жесткости ортотропного материала; $\mathbf{J}_1$ и $\mathbf{J}_{23}$ – изотропные тензоры 4-го ранга; C_{11}, C_{12} и C_{66} – упругие характеристики материала; $\mathbf{e}_k$ и $\mathbf{e}_n$ – вектора ортонормированного базиса. Вид () тензор жесткости будет иметь при представлении его в главном базисе. Для алмаза главным будет базис, орты которого перпендикулярны плоскостям симметрии решетки.

В работе [5] была рассмотрена модель решетки алмаза при учете моментного взаимодействия. Данная модель учитывала взаимодействие ближайших атомов посредством стержней продольной жесткости c_A и поперечной жесткости c_D. Были получены выражения для координат C_{11}, C_{12}, C_{66} тензора жесткости через жесткости c_A и c_D

$$C_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c_A + 2c_D), \qquad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{12a}(c_A - c_D), \qquad C_{66} = \frac{3\sqrt{3}}{8a}\frac{c_A c_D}{c_A + 2c_D}, \qquad (22)$$

где a – межатомное растояние.
Используя экспериментальные данные для упругих модулей алмаза (табл. 1),

C_{11}, ГПа	C_{12}, ГПа	C_{66}, ГПа	c_A, Н/м	c_D,Н/м	Источник
1076	275	519	578	285	[6]
1079	124	578	472	340	[7]
1080	125	577	473	340	[8]

Табл. 1: Экспериментальные значения упругих постоянных алмаза

по формулам

$$c_A = \frac{4\sqrt{3}a}{3}(C_{11} + 2C_{12}), \quad c_D = \frac{4\sqrt{3}a}{3}(C_{11} - C_{12}) \tag{23}$$

были получены значения жесткостей межатомных связей c_A и c_D (табл. 1).

Для сравнения упругих характеристик лонсдейлита и алмаза необходимо представить тензора жесткости каждого из материалов в базисе другого материала. Представление ортов базиса лонсдейлита в базисе алмаза имеет следующий вид

$$\mathbf{i} = \frac{1}{\sqrt{6}}\mathbf{i}^* - \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{j}^* + \frac{1}{\sqrt{6}}\mathbf{k}^*, \quad \mathbf{j} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\mathbf{i}^* + \mathbf{k}^*), \quad \mathbf{k} = -\frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{i}^* + \mathbf{j}^* + \mathbf{k}^*). \tag{24}$$

Орты базиса алмаза в базисе лонсдейлита представимы в виде

$$\mathbf{i}^* = \frac{1}{\sqrt{6}}\mathbf{i} - \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{j} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{k}, \quad \mathbf{j}^* = -\sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{k}, \quad \mathbf{k}^* = \frac{1}{\sqrt{6}}\mathbf{i} + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{j} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{k}. \tag{25}$$

Здесь $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{i}^*$, $\mathbf{j}^*$, $\mathbf{k}^*$– орты базисов лонсдейлита и алмаза соответственно. После подстановки выражений (25) в формулу (21) получим представление тензора жесткости алмаза в базисе лонсдейлита

$${}^4\mathbf{C}^D = \frac{1}{6}(C_{11}^{D_*} - C_{12}^{D_*} - 2C_{66}^{D_*})[\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_{23} + \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_{23} - \mathbf{K} + \sqrt{2}\mathbf{L}] + C_{12}^{D_*}\mathbf{J}_1 + C_{66}^{D_*}\mathbf{J}_{23}, \tag{26}$$

где

$$\mathbf{L} = \sum_{n=1}^{4}\mathbf{L}_n. \tag{27}$$

Здесь и далее отсутствие или наличие символа $'*'$ указывает на представление данного тензора в базисе лонсдейлита или алмаза соответственно. Индексы L или D у тензора информируют нас о том, что данный тензор выведен для лонсдейлита или алмаза соответственно. Например, ${}^4\mathbf{C}^{L_*}$ – тензор жесткости лонсдейлита, представленный в базисе алмаза.

$\mathbf{L}_n$-ый тензор получается путем добавления орта $\mathbf{k}$ в тензор ${}^3\tilde{\mathbf{I}}$ на позицию, соответствующую индексу n. Тензора $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_4$, к примеру, выглядят следующим образом

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{k}\,{}^3\tilde{\mathbf{I}}, \quad \mathbf{L}_4 = {}^3\tilde{\mathbf{I}}\mathbf{k}, \tag{28}$$

где

$${}^3\tilde{\mathbf{I}} = \mathbf{iii} - \mathbf{ijj} - \mathbf{jji} - \mathbf{jij}. \tag{29}$$

Кристаллические решетки лонсдейлита и алмаза обладают ковалентной природой взаимодействия между атомами углерода, для которой характерна направленность межатомных связей. Решетки имеют одинаковое межатомное расстояние $a = 0.154$ нм. Эти обстоятельства дают нам право при определении по формулам (19) числовых значений упругих модулей лонсдейлита использовать значения жесткостей межатомного взаимодействия c_A и c_D, вычисленные для алмаза. Если за основу принять данные из [8], которые дают следующие значения жесткостей межатомных связей

$$c_A = 473\ H/M, \quad c_D = 340\ H/M, \tag{30}$$

то упругие модули лонсдейлита будут иметь следующие числовые значения

$$\begin{gathered} C^L_{11} = 1188\ GPa, \ \ C^L_{12} = 91\ GPa, \ \ C^L_{66} = 549\ GPa, \\ C^L_{13} = 51\ GPa, \ \ C^L_{55} = 515\ GPa, \ \ C^L_{33} = 1228\ GPa. \end{gathered} \tag{31}$$

Приведем для сравнения числовые значения координат тензора жесткости алмаза, представленного в азисе лонсдейлита (26)

$$\begin{gathered} C^D_{11} = 1191\ GPa, \ \ C^D_{12} = 88\ GPa, \ \ C^D_{66} = 551\ GPa, \\ C^D_{13} = 51\ GPa, \ \ C^D_{55} = 514\ GPa, \ \ C^D_{33} = 1227\ GPa. \end{gathered} \tag{32}$$

Анализируя полученные значения упругих модулей лонсдейлита и алмаза, можно сделать вывод о том, что только лишь округления при определении числовых значений жесткостей c_A и c_D, а также расчетного значения $C^{D_*}_{66}$ не дают абсолютного совпадения числовых значений.

Также интересно сравнить координаты тензоров жесткости обеих решеток в базисе алмаза. Числовые значения модулей алмаза имеют следующий вид

$$C^{D_*}_{11} = 1080\ GPa, \ \ C^{D_*}_{12} = 125\ GPa, \ \ C^{D_*}_{66} = 588\ GPa. \tag{33}$$

Значения модулей лонсдейлита выглядят так

$$C^{L_*}_{11} = 1145\ GPa, \ \ C^{L_*}_{12} = 93\ GPa, \ \ C^{L_*}_{66} = 554\ GPa. \tag{34}$$

Видно, что $C^{L_*}_{11}$ больше $C^{D_*}_{11}$ на 65 ГПа, $C^{L_*}_{12}$ меньше $C^{D_*}_{12}$ на 32 ГПа, а $C^{L_*}_{66}$ меньше $C^{D_*}_{66}$ на 34 ГПа.

4 Заключение

В данной работе была рассмотрена модель кристаллической решетки лонсдейлита при учете моментного взаимодействия между частицами. Аналитически была решена система четырех тензорных уравнений для четырехатомной решетки лонсдейлита. Была установлена связь между макропараметрами C^L_{12}, C^L_{66}, C^L_{13}, C^L_{55}, C^L_{33} и микропараметрами c_A, c_D кристаллической решетки лонсдейлита в безмоментной теории упругости. С использованием числовых значений жесткостей межатомного взаимодействия c_A и c_D решетки алмаза были получены числовые значения упругих характеристик лонсдейлита. Было проведено сравнение упругих модулей лонсдейлита и алмаза. Было показано, что числовые значения модулей решоток в базисе лонсдейлита совпадают, а в базисе алмаза имеют небольшие различия.

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

$$\rho\ddot{\mathbf{u}} = \nabla\cdot\tau + \mathbf{f},$$
$$\rho\theta\cdot\ddot{\varphi} = \nabla\cdot\mu + \tau_\times + \mathbf{m}, \tag{35}$$

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

$$\tau_\times = \mathbf{0} \quad\Longleftrightarrow\quad \tau = \tau^{\mathbf{T}}. \tag{36}$$

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

$$\mathbf{A}_\times \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A}\cdot\times\mathbf{E}, \quad {}_\times\mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}\cdot\times\mathbf{A}. \tag{37}$$

Согласно определению

$$(\mathbf{abcd})_\times = \mathbf{abc}\times\mathbf{d}, \quad {}_\times(\mathbf{abcd}) = \mathbf{a}\times\mathbf{bcd}. \tag{38}$$

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

$${}_\times\mathbf{A}_\times \stackrel{\text{def}}{=} ({}_\times\mathbf{A})_\times =_\times (\mathbf{A}_\times) \quad\Longrightarrow\quad {}_\times(\mathbf{abcd})_\times = \mathbf{a}\times\mathbf{bc}\times\mathbf{d}. \tag{39}$$

5.2 Нахождение тензора жесткости эквивалентной безмоментной среды

В моментной теории сплошной среды тензор напряжений связан с деформациями соотношением

$$\tau = \mathbf{A}\cdot\cdot\nabla\mathbf{u} + \mathbf{E}\times\varphi + \mathbf{B}\cdot\cdot\nabla\varphi. \tag{40}$$

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

$$\tau = \mathbf{A}\cdot\cdot\nabla\mathbf{u} + \mathbf{A}_\times\cdot\varphi \quad\Longrightarrow\quad \tau_\times =_\times \mathbf{A}\cdot\cdot\nabla\mathbf{u} +_\times \mathbf{A}_\times\cdot\varphi. \tag{41}$$

Приравнивая $\tau_\times$ к нулю, выразим из полученного выражения угол поворота среды

$$\varphi = -{}_\times\mathbf{A}_\times^{-1}\cdot{}_\times\mathbf{A}\cdot\cdot\nabla\mathbf{u}. \tag{42}$$

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

$$\tau = \mathbf{C} \cdot \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad \mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A} - \mathbf{A}_\times \cdot_\times \mathbf{A}_\times^{-1} \cdot_\times \mathbf{A}. \tag{43}$$

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

$$\mathbf{C}_\times \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A}_\times - \mathbf{A}_\times \cdot_\times \mathbf{A}_\times^{-1} \cdot_\times \mathbf{A} - \times = \mathbf{0}. \tag{44}$$

Следовательно тензор $\mathbf{C}$ аполярный, то есть его координаты в декартовом базисе симметричны относительно перестановок 1–2 и 3–4 индексов: $C_{knpq} = C_{nkpq} = C_{knqp}$. Это означает, что тензор напряжений в формуле (32) зависит только от симметричной части тензора деформаций

$$\tau = \mathbf{C} \cdot \cdot (\nabla \mathbf{u})^{\mathbf{s}}. \tag{45}$$

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

Список литературы

[1] *Frondel C., U. B. Marvin*// Lonsdaleite, a new hexagonal polymorph of diamond, 1967. Nature 214: 587 - 589

[2] *Pan Zicheng, Sun Hong, Zhang Yi, Chen Changfeng* Harder than Diamond: Superior Indentation Strength of Wurtzite BN and Lonsdaleite, 2009. Physical Review Letters 102

[3] *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.

[4] *Кривцов А.М.* Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пос. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. - 124с.

[5] *Беринский И.Е., Двас Н.Г., Кривцов А.М., Кударова А.М., Кузькин В.А., Ле-Захаров А.А., Лобода О.С., Нейгебауэр И.И., Подольская Е.А.* Упругие и тепловые свойства кристаллов: учеб. пос. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. - 135с.

[6] *Markham H.F.* National Phisical Laboratory measurements presented by Musgrave: Diamond conf. (Reading, 1965).

[7] *McSkimin H. J. and C. Andreatch.*// J. Appl. Phys, 1972, N. 43 2944 - 2948.

[8] *John J. Gilman.* Origins of the outstanding mechanical properties of diamond.// Springer-Verlag, Mat. Res. Innovat, 2002. V. 6, c. 112 - 117.