

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

ЛИСОВЕНКО ДМИТРИЙ СЕРГЕЕВИЧ

**АУКСЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА ИЗОТРОПНЫХ
МАТЕРИАЛОВ, КРИСТАЛЛОВ И АНИЗОТРОПНЫХ
КОМПОЗИТОВ**

01.02.04 — Механика деформируемого твердого тела

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва — 2019

Оглавление

Введение	8
1. Кристаллические ауксетики	18
1.1. Продольное растяжение кристаллических стержней [1, 2]	18
1.2. Кубические кристаллы	22
1.2.1. Растяжение стержней с кубической анизотропией [1–5]	22
1.2.2. Классификация кубических кристаллов [6–10]	29
1.2.3. Связь среднего коэффициента Пуассона с модулем Юнга для кубических кристаллов. Ауксетики в среднем [11]	34
1.2.4. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов [12]	41
1.2.5. Экстремальные значения модуля сдвига кубических кристаллов [13]	50
1.3. Гексагональные кристаллы	58
1.3.1. Растяжение стержней с гексагональной анизотропией [1, 2, 4, 5, 14]	58
1.3.2. Изменчивость модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига. Экстремальные значения [1, 15–17]	60
1.3.3. Влияние давления на упругие свойства гексагональных кристаллов [18, 19]	79
1.4. Растяжение стержней с шестиконстантной ромбоэдрической кристаллической структурой [1, 2]	86

1.5.	Растяжение стержней с шестиконстантной тетрагональной кристаллической структурой [1, 2, 20]	87
1.6.	Растяжение стержней с орторомбической кристаллической структурой [1, 2, 21]	93
1.6.1.	Особенности структуры и модули упругости монокристаллов гидрофтالاتов калия, рубидия, цезия и аммония [22]	98
1.7.	Растяжение стержней с семиконстантной тетрагональной анизотропией [23]	110
1.8.	Растяжение стержней с семиконстантной ромбоэдрической анизотропией [24]	113
1.9.	Средний коэффициент Пуассона для кристаллов [25]	115
1.9.1.	Гексагональные ауксетики	116
1.9.2.	Анизотропные ауксетики	118
1.9.3.	Частные ориентации среднего по перечным направлениям коэффициента Пуассона	120
1.9.4.	Ауксетики при полном осреднении	122
1.10.	Заключение	122
2.	Нано/микротрубки из кристаллов	127
2.1.	Упругие свойства нано/микротрубок с гексагональной и 6-ти константной ромбоэдрической анизотропией [26–30]	127
2.1.1.	Невозможность однородного растяжения нано/микротрубки с гексагональной и ромбоэдрической цилиндрической анизотропией	128
2.1.2.	Растяжение цилиндрически анизотропных нано/микротрубок	130
2.2.	Упругие свойства микро/нанотрубок с кубической анизотропией [9]	138
2.2.1.	От кубических кристаллов с прямолинейной анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией	138

2.2.2.	Одноосное растяжение цилиндрически анизотропной тонкой трубки	141
2.2.3.	Невозможность радиально неоднородного растяжения нано/микротрубок из кубических и тетрагональных кристаллов при отличных от нуля нормальных напряжениях	142
2.2.4.	Радиально неоднородное растяжение цилиндрически анизотропных нано/микротрубок из кубических и тетрагональных кристаллов	144
2.3.	Упругие свойства микро/нанотрубок с шестиконстантной тетрагональной анизотропией [31]	153
2.4.	Упругие свойства микро/нанотрубок с семиконстантной тетрагональной анизотропией [23]	156
2.4.1.	От кристаллов с прямолинейной 7-ми константной тетрагональной упругостью к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией	156
2.4.2.	Неоднородное растяжение нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристаллов при нулевой хиральности	157
2.4.3.	Неоднородное растяжение хиральных нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристаллов.	160
2.5.	Упругие свойства микро/нанотрубок с семиконстантной ромбоэдрической анизотропией [24]	162
2.6.	Упругие свойства микро/нанотрубок с орторомбической анизотропией [32]	168
2.6.1.	От прямолинейно-анизотропных орторомбических кристаллов к цилиндрически анизотропным нано/микротрубкам	168
2.6.2.	Растяжение и кручение нано/микротрубок из ортомбических кристаллов	169

2.7.	Кручение цилиндрически-анизотропных нано/микротрубок из кубических материалов, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011) [33]	180
2.8.	Упругие свойства микро/нанотрубок с гексагональной анизотропией, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (100)	182
2.8.1.	От тонких пластин из гексагональных кристаллов с прямолинейной анизотропией к нанотрубкам и микротрубкам с криволинейной анизотропией	182
2.8.2.	Упругие свойства нано/микротрубок из гексагональных кристаллов.	185
2.8.3.	Численные результаты и обсуждение	189
2.9.	Упругие свойства двухслойных нано/микротрубок с кубической анизотропией [34, 35]	195
2.9.1.	От однослойных к двухслойным трубкам	195
2.9.2.	Эффективные модуль Юнга и коэффициенты Пуассона	198
2.10.	Эффект Пойнтинга для цилиндрически - анизотропных нано/микротрубок [31–33, 36–38]	206
2.10.1.	От кубических кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией	207
2.10.2.	От тетрагональных кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией	212
2.10.3.	От орторомбических кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией	216
2.10.4.	От кубических кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011)	221

2.10.5. От гексагональных кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией	223
2.11. Заключение	224
3. Слоистые композиты, содержащие ауксетики	227
3.1. Тонкие двухслойные пластины из гексагональных кристаллов [39]	227
3.1.1. Продольное растяжение двухслойной пластины из гексагональных кристаллов	227
3.1.2. Эффективные модули Юнга и коэффициенты Пуассона двухслойных пластин для различных гексагональных кристаллов (ауксетиков и неауксетиков)	230
3.2. Продольное растяжение двухслойных пластин из изотропных ауксетиков-неауксетиков и из кубических кристаллов [40]	238
3.2.1. Двухслойные пластины из кубических кристаллов	238
3.2.2. Двухслойные пластины из изотропных ауксетиков - неауксетиков	240
3.2.3. Частная ориентация кубических кристаллов . . .	244
3.3. Тонкие однородные двухслойные пластины из кубических кристаллов с различной ориентацией слоев [41]	248
3.3.1. Продольное растяжение двухслойной пластины из кубических кристаллов с различной ориентацией слоев	248
3.3.2. Результаты и обсуждение	252
3.4. Тонкие трехслойные пластины из кубических кристаллов [42]	260
3.4.1. Продольное растяжение трехслойной пластины из кубических кристаллов	260
3.4.2. Изгиб трехслойной пластины из кубических кристаллов	263

3.4.3. Результаты и обсуждение	266
3.5. Заключение	274
4. Поверхностные волны Релея и Лява при отрицательном коэффициенте Пуассона изотропных сред	278
4.1. Влияние величины и знака коэффициента Пуассона на волны Релея [43]	279
4.2. Влияние величины и знака коэффициента Пуассона на волны Лява [43]	287
4.3. Заключение	296
5. Ауксетики среди новых материалов	297
5.1. Упругие свойства фуллерита [44, 45]	298
5.2. Упругие свойства алмазоподобных фаз, состоящих из фуллереноподобных молекул [10, 45, 46]	302
5.3. Заключение	309
Основные выводы	310
Приложения	311
П.1. Таблицы	311
П.2. К экспериментальному изучению ауксетического поведения вогнутой ячеистой решетки [47–49]	366
П.2.1. Результаты и обсуждение	369
П.2.2. Заключение	373
Литература	375

Введение

В современной механике важное место занимает создание разнообразных кристаллических конструкций из материалов, имеющих нано- и микромасштабную структуру, композиционных материалов, наполненных нано/микрообъектами, и метаматериалов. Такие материалы обладают уникальными механическими свойствами. Их необычные механические свойства оказывают сильное влияние на физические характеристики. Большое внимание уделяется, в частности, ауксетикам.

Теоретические разработки в области описания и моделирования механических свойств таких материалов разнообразны и активно ведутся отечественными и зарубежными учеными. Большой вклад в исследования механических свойств ауксетиков внесли Ю.А. Баимова, В.Г. Балагуров, В.Н. Беломестных, И.Е. Беринский, С.В. Дмитриев, А.И. Епишин, А.Г. Колпаков, М.Я. Поперека, Н.Д. Паранский, Э.Г. Соболева, С.В. Шилько, К.Л. Alderson, A. Ballato, D.M. Barnett, R.H. Vaughan, A.C. Branka, K.E. Evans, J.N. Grima, H. Jopek, R.S. Lakes, T.-C. Lim, V.A. Lubarda, F. Milstein, A.N. Norris, T. Paszkiewicz, X. Ren, M. Rovatti, F. Scarpa, T. Streck, T.C.T. Ting, K.W. Wojciechowski и др. В силу анизотропной структуры ауксетиков, нано/микротрубок и нано/микроусов важное значение приобретают разработки представлений теории упругости анизотропного тела Л.А. Агальовяном, В.И. Альшицом, С.А. Амбарцумяном, Б.Д. Анниным, Н.В. Баничуком, А.Ю. Беловым, А.Н. Даринским, С.В. Кузнецовым, С.Г. Лехницким, И.М. Лифшицем, Н.И. Остросаблиным, Е.А. Подольской, В.С. Саркисяном, Ю.И. Сиротиним, М.Ю. Соколовой, П.Е. Товстиком, С.П. Токмаковой, Ю.А. Устиновым, К.Ф. Черных, М.П. Шаскольской, D.M. Barnett, S.C. Cowin, K.E. Evans, M.A. Hayes, J. Lothe, V.A. Lubarda, M.M. Mehrabadi, F. Milstein, A.N. Norris, W.P. Nye, T. Paszkiewicz, M. Rovatti, A.J.M. Spencer, A.N. Stroh, T.C.T. Ting, T.Y. Tomas, L.J. Walpole, K.W. Wojciechowski и др. Большой вклад в описание механических свойств углеродных и неуглеродных нано/микроусов и нано/микротрубок внесли Р.В. Гольдштейн, А.В. Елецкий, В.А. Еремеев, Е.А. Иванова, А.Л. Ивановский, С.Н. Коробейников, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов, В.В. Покропивный, В.М. Фомин, А.В. Ченцов, Л.А. Чернозатонский, P. Avouris, R. Bacon, T. Belytschko, J. Cumings, M.S. Dresselhaus, T.W. Ebbesen, M.R. Falvo, Y. Huang, C.Q. Ru, R.S. Ruoff, J.P. Salvetat, R. Tenne, J. Tersoff, G.G. Tibbetts, M.M.J. Treacy, C.Y. Wang, B.I. Yakobson, M.-F. Yu, P. Zhang, A. Zettle и др.

Ауксетики

В механике долгое время принималось, что у реальных изотропных упругих материалов коэффициент Пуассона ν не бывает отрицательным [50], хотя термодинамическое ограничение в 3-х мерном случае

$$-1 \leq \nu \leq 0.5$$

не требует этого. Не требует этого и ограничения

$$-1 \leq \nu \leq \frac{1}{D-1}$$

при другой размерности изотропной среды D [51].

В анизотропной упругости положительная определенность энергии деформации приводит к еще меньшим ограничениям на коэффициенты Пуассона упругих материалов в случае триклинной, моноклинной, орторомбической, тетрагональной, ромбоэдрической, гексагональной и кубической систем [52].

Повидимому первая возможность на отрицательный коэффициент Пуассона для анизотропных материалов была указана в известной монографии А. Лява [53]. Там приводился пример пиритов FeS_2 с отрицательным коэффициентом Пуассона равным $-1/7$. В 1962 году сообщалось об отрицательном коэффициенте Пуассона для кварца в интервале температур от 20 до 650°C [54]. Согласно этой работе коэффициент Пуассона может достигать значения, равного -0.6 при температуре близкой к 500°C . Позже отрицательность коэффициента Пуассона наблюдалась и в других кристаллических веществах: ферромагнитных пленках (Fe, Ni, Co и пермаллой) [55], сплаве In-Tl [56], некоторых кубических кристаллах [57–59], никелевом сплаве [60], α -кристобалите [61–64], сплавах SmS [65], цинке [66], сплаве Fe-Ga [67], цеолитах [68, 69], черном фосфоре [70] и других кристаллах [71–90]. Структурные модели, объясняющие ауксетическое поведение кристаллов, предлагались в [58] на примере ОЦК кристаллов, в [63] для α -кристобалита и в [70] для черного фосфора. На начало 2010 года в научной литературе было уже известно около 30 кристаллических ауксетиков. Анализ упругих свойств кристаллических ауксетиков способствовало решению задач об экстремальных значениях упругих характеристик (модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига) [59, 91–99] и развитие классификаций на основе упругих характеристик [100–102]. В [100] для анизотропных тел было введены понятия полные ауксетики (материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона при любой ориентации кристаллической структуры относительно оси растяжения) и неауксетики (материалы с положительным коэффициентом Пуассона при любой ориентации кристаллической структуры относительно оси растяжения). В [101] все кристаллические материалы на основе знака коэффициента Пуассона было предложено разделить на неауксетики, полные ауксетики и частичные ауксетики (материалы, которые могут иметь как отрицательные, так и положительные

значения коэффициента Пуассона в зависимости от ориентации кристаллической структуры).

В последние десятилетия наблюдается бурный рост количества теоретических и экспериментальных исследований, работ по изготовлению и применению материалов и конструкций с отрицательным коэффициентом Пуассона [103–109].

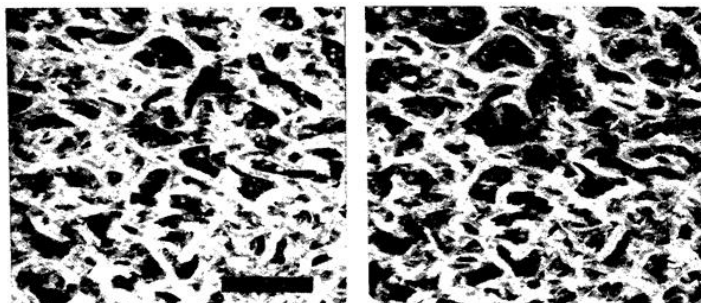


Рис. 0.1: На фотографии представлена полимерная пена с отрицательным коэффициентом Пуассона, равным -0.6 [110].

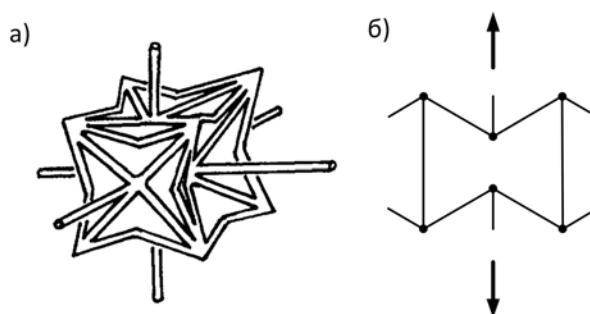


Рис. 0.2: Трехмерная (а) [110] и двумерная (б) элементарные ячейки ауксетических материалов.

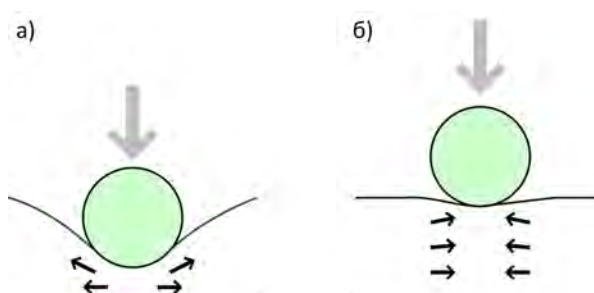


Рис. 0.3: Индентирование неауксетика (а) и ауксетика (б).

В [110] впервые было найдено экспериментально, что в металлических и полимерных пенах коэффициент Пуассона отрицателен и достигает -0.7 (см. Рис.0.1). Элементарная ячейка таких материалов успешно моделируется трехмерным многогранником с вогнутыми стенками (Рис.0.2а). Плоский аналог подобной ячейки приведен на Рис.0.2б.

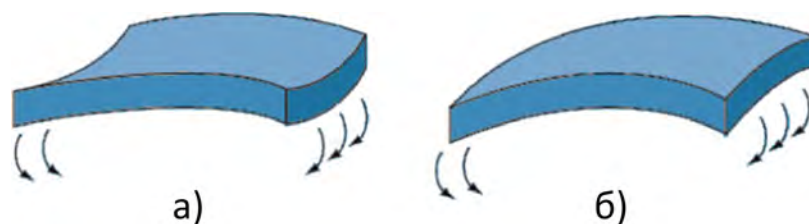


Рис. 0.4: Изгиб неауксетической (а) и ауксетической (б) пластин.

Механические свойства ауксетических материалов может существенно отличаться от свойств неауксетических материалов. Различно будут себя вести неауксетика и ауксетика при индентировании (Рис.0.3). Когда неауксетик подвергается индентированию, то под индентором материал сжимается. Чтобы компенсировать это локальное давление материал начинает растекаться перпендикулярно приложенной нагрузке. Для ауксетиков будет наблюдаться локальное сжатие материала под индентором. Таким образом, ауксетика имеют более высокое сопротивление индентированию по сравнению с обычными материалами. Также ауксетические и неауксетические пластины ведут себя по разному при изгибе, что видно из Рис.0.4. Такая разница в поведении при изгибе между ауксетиком и неауксетиком была экспериментально показана в [60] на примере монокристаллических пластин из никелевого сплава (ауксетика) и алюминиевого сплава Д16 (неауксетика).

Твердость изотропных материалов пропорциональна $E/(1 - \nu^2)$ в случае равномерного распределения давления [111]. При условии $\nu \rightarrow -1$ следует, что $1 - \nu^2 \rightarrow 0$. В итоге твердость возрастает с уменьшением коэффициента Пуассона при фиксированном модуле Юнга.

Ауксетика имеют лучшее сопротивление к разрушению, чем обычные материалы [112, 113], и имеют низкое распространение трещин и им необходимо больше энергии для раскрытия. Когда ауксетические материалы растягиваются, то они увеличивают свои размеры (происходит увеличение каждого элементарного объема этого материала). Таким образом, всякий раз, когда трещина образуется, расширение элементарного объема будет направлено на «закрытие» трещины. В работе [112] экспериментально исследовалась трещиностойкость полимерных ячеистых пен (re-entrant foams) с отрицательным коэффициентом Пуассона. В результате было показано, что прочность увеличивается с увеличением объемного сжатия, т.е. с увеличением плотности пористого материала.

Одним из направлений исследований ауксетических материалов является построение стержневых моделей и структур [103]. В 1985 г. опубликована работа [114] по построению стержневой модели с отрицательным коэффициентом Пуассона. Автор предложил двумерную стержневую модель с коэффициентом Пуассона, равным -1 (Рис.0.26). В 1985 г. опубликована работа [115], в которой предложен метод приближенного вычисления усредненных характеристик мелкоячеистых каркасных конструкций периодического строения и представлен каркас с отрицательным ко-

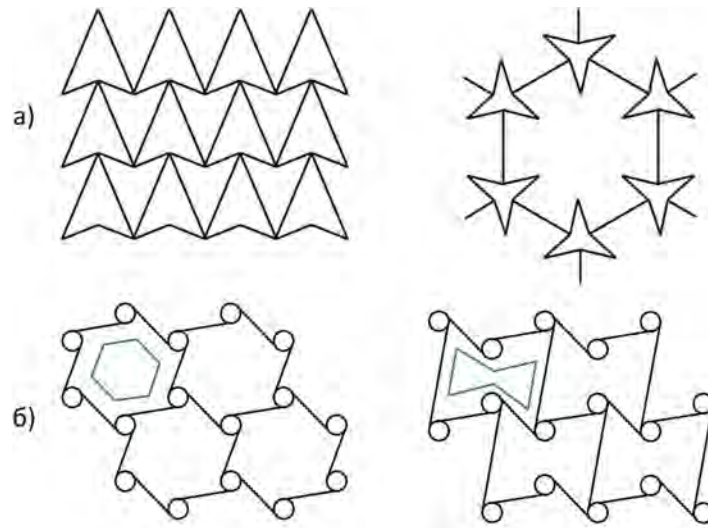


Рис. 0.5: Ауксетические сотовые (а) и хиральные (б) структуры.

эффицентом Пуассона. В работе [116] авторами проанализированы механические свойства двумерных ячеистых материалов, и проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными. Для двумерной модели, сделанной из резины, обнаружен отрицательный коэффициент Пуассона. Дальнейшее исследование ауксетических конструкций позволило создать различные метаматериалы в основе которых используются сотовые и хиральные структуры (Рис.0.5) и др.

Следующим направлением изучения ауксетиков является получение композитов с эффективным отрицательным коэффициентом Пуассона. Ауксетические свойства композитов могут получаться за счет неауксетических включений, например, армированием косоугольной укладкой волокон [117]. К этому типу ауксетических композитов относятся также ламинаты при косоугольном наложении слоев [118,119]. Другой способ получения композитов с отрицательным коэффициентом Пуассона предложен в работах [120,121], где ауксетичность достигалась за счет жесткого включения (стержневых конструкций [120], звездообразных форм [121]) и податливой матрицы.

Статьи [122–127] инициировали изучение роли ауксетиков в слоистых композитах, в которых упругое поведение становится разнообразнее. Растяжение двухслойных пластин обсуждалось прежде всего. Проведено аналитическое и численное исследование плоского эффективного модуля Юнга двухслойных пластин изотропных материалов [126]. В этой работе было показано, что наиболее существенное отклонение от предсказания правила смеси было для ауксетико-неауксетических пластин. Анализ эффективного продольного модуля Юнга изотропных двухслойных пластин был проведен в [125]. Было обнаружено, что пластины, состоящие из чередующихся ауксетических и неауксетических слоев, демонстрируют эффективный поперечный модуль Юнга, который не только превосходит обратное правило смесей, но также превосходит прямое правило смесей. Эти результаты подтвержда-

ются методом конечных элементов слоистых композитов с чередующимися слоями с отрицательными и положительными коэффициентами Пуассона [123, 124]. В [127] было показано, что эффективный поперечный модуль Юнга для ауксетико-неауктической пластины не только превосходит правило смесей, но также может превышать модуль более жесткого слоя.

В [128] слоистый композит был представлен как внешние слои из жесткого неауксетического материала и оптимизируемого двухфазного среднего слоя с ауксетиками и дан численный анализ. В [129] использовался метод конечных элементов в сочетании с алгоритмом оптимизации трехслойных пластин с двухфазным сердечником и тонкими наружными слоями из твердых материалов. Найдено, что композитная структура может обнаруживать отрицательный эффективный коэффициент Пуассона даже если все ее составляющие характеризуются положительными значениями коэффициентов Пуассона. В статье [130] для изучения коаксиальных цилиндрических ауксетических композитов из изотропных материалов использовался метод конечных элементов. Композит был представлен тремя слоями, два из которых изготовлены из одного материала, а третий - из другого. Величина отношений модулей Юнга разных составляющих сильно влияла на эффективные механические свойства композита. Изменение эффективного модуля Юнга отличалось от изменения эффективного коэффициента Пуассона. Различие оказывалось сильнее для композитов ауксетик-неауксетик. Разнообразие поведения слоистых композитов увеличивается при переходе от изотропных материалов к кристаллам, которые характеризуются реальным многообразием ауксетиков, что отражено в Главе 3.

Ауксетические материалы могут найти широкое применение. Из них можно изготавливать медицинские стенты [131, 132], гвозди [133], фильтры [134, 135], текстильные изделия [136, 137], спортивный инвентарь [138], элементы мебели [139].

Углеродные и неуглеродные нано/микротрубки

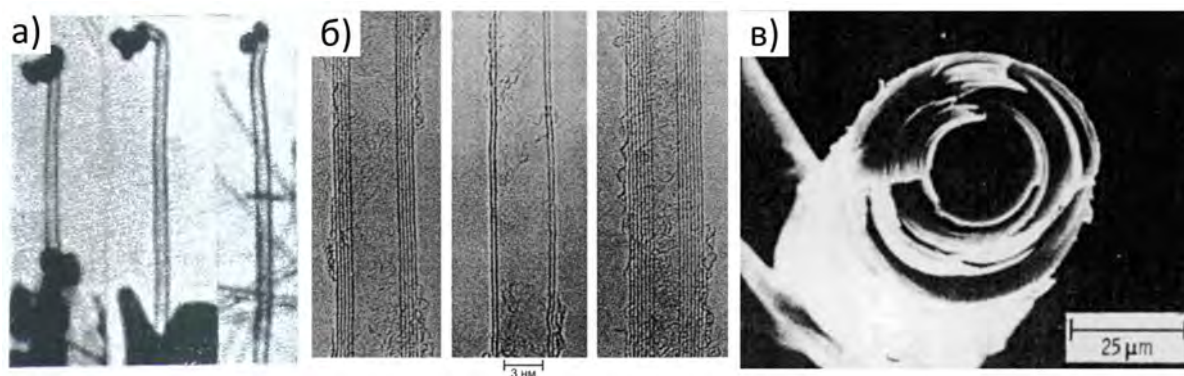


Рис. 0.6: Первые фотографии углеродных нанотрубок с диаметром порядка 100 нм [140] (а), фотографии углеродных нанотрубок с двумя, пятью и семью слоями [141] (б) и фотография углеродного микроуса [142] (в).

Впервые нанотрубки были получены в 1952 г. [140]. В этой работе Л.В. Радужкевич и В.М. Лукьянович сообщали об электронно-микроскопическом наблюдении полых волокон диаметром порядка 100 нм, полученных при термическом разложении окиси углерода на железном катализаторе (Рис.0.6а). Широкое исследование углеродных нанотрубок началось с их наблюдения в 1991 г. [141] (Рис.0.6б) и неуглеродных нанотрубок после открытия в 1992 г. – WS_2 нанотрубок [143], в 1993г. – MoS_2 нанотрубок [144], в 1995г. – BN нанотрубок [145]. В настоящее время синтезировано большое количество неуглеродных нанотрубок. Среди них широко представлены нанотрубки из металлов, металл-дихалькогенидов, окислов металлов [146–149] и др.

Различными ростовыми технологиями создано более нескольких сотен неуглеродных нанотрубок. Перспективно создание нанотрубок с контролируемыми параметрами из других наноструктур, например, на основе тонких гетеропленок на подложках. Нанотрубки могут образовываться из молекулярно тонких гетеропленок, в частности, их спонтанным сворачиванием под действием внутренних напряжений. Много различных наноструктур образовано таким закручиванием библинок из полупроводников, металлов и диэлектриков, выращенных первоначально методом молекулярно-лучевой эпитаксии с последующим использованием селективного травления промежуточных жертвенных слоев (см., например [150–155]). Также успешно реализовано закручивание в микро- и нанотрубки «одноатомных» пленок, обусловленное большим градиентам напряжений в них [156].

Родственным нанотрубкам объектом являются микроусы и нанопроволки. Длинные тонкие нити исследовались еще до открытия нанотрубок. У некоторых таких нитей, получаемых с использованием катализатора, было также обнаружено трубчатое строение [142, 147, 157–159]. Например, на Рис.0.6в приведен снимок углеродного микроуса с трубчатым строением из [142].

С момента открытия нано/микротрубок стал вопрос о моделях описывающих механические свойства и об области применимости теории упругости к их описанию. В разных работах к нанотрубкам применяют модели стержня или оболочки [148, 160]. Другой важной моделью нано/микротрубок может быть модель полого стержня, обладающего цилиндрической анизотропией. Стержни с цилиндрической анизотропией рассматривал еще Сен-Венан. Широкое развитие теории стержней с цилиндрической анизотропией получила в работах С.Г. Лехницкого, что нашло отражение в его монографии [161]. Впервые модель стержня с криволинейной цилиндрической анизотропией для описания механических свойств многослойных углеродных нанотрубок была применена в работах В.А. Городцова и Д.С. Лисовенко [26–28] (см. Главу 2).

Эффект Пойнтинга

Хорошо известный эффект Пойнтинга для изотропных материалов является эффектом второго порядка. Более ста лет назад Дж.Г. Пойнтингом было установ-

лено, что длины различных проволок увеличиваются при их упругом кручении, и удлинение пропорционально квадрату угла кручения [162, 163]. Нелинейная теория упругости изотропных сред хорошо подтверждает такой эффект [164–169]). В Главе 2 будет показано, что в случае линейно-упругих анизотропных материалов возможен линейный эффект Пойнтинга (эффект первого порядка).

В диссертации используется подход, основанный на описании механических свойств кристаллов и нано/микротрубок в рамках теории упругости анизотропного тела, пригодной для масштабов превосходящих нанометры, существенно превосходящих атомные размеры.

Научную новизну диссертации составляют следующие положения, выносимые на защиту:

Выявлено свыше **450** кристаллических ауксетиков среди **2000** кристаллов, экспериментальные данные о которых собраны в энциклопедическом справочнике Ландолт-Бернштейна (том 29а). Предложены классификационные схемы для ауксетиков из кубических и гексагональных кристаллов. Получены условия для поиска кристаллических ауксетиков и ауксетиков в среднем.

Развита аналитическая модель цилиндрически анизотропных нано/микротрубок из кристаллов различных кристаллических систем для описания деформаций растяжения и кручения. Показано, что более **1000** нано/микротрубок проявляют ауксетические свойства.

Впервые установлен линейный прямой и обратный эффект Пойнтинга для хиральных нано/микротрубок.

Решены задачи растяжения слоистых пластин и слоистых нано/микротрубок, композитов из ауксетиков и неауксетиков. Показано, что для таких композитов нарушается правило смесей, а эффективный модуль Юнга и коэффициент Пуассона могут даже превосходить модули Юнга и коэффициенты Пуассона исходных кристаллов.

Проведен сравнительный анализ поверхностных волн Релея и Лява для изотропных материалов с положительным и отрицательным коэффициентом Пуассона.

Выявлены ауксетики среди новых фуллеритов и углеродных алмазоподобных материалов.

Результаты работы представляют теоретический и практический интерес для механики, кристаллографии и материаловедения, и могут быть использованы при проектировании и разработке нано- и микроструктурных конструкций.

В **Главе 1** анализируются особенности механических свойств кристаллов с кубической, гексагональной, ромбоэдрической, тетрагональной и орторомбической анизотропией. Проводится анализ задачи растяжения усов различных кристаллических систем. Особое внимание уделяется анализу отрицательного коэффициента Пуассона усов. Выявлено большое количество монокристаллов-ауксетиков. Приводятся классификационные схемы, необходимые и достаточные условия для находж-

дения ауксетиков.

В **Главе 2** для теоретического описания механических свойств нано/микротрубок используется модель трубки с цилиндрической анизотропией и приближения Сен-Венана. Определены упругие характеристики (модуль Юнга, коэффициент Пуассона и крутильная жесткость) для нано/микротрубок с кубической, гексагональной, ромбоэдрической, тетрагональной и орторомбической анизотропией. Впервые проанализирован для таких трубок линейный эффект Пойнтинга.

В **Главе 3** рассматривается растяжение двухслойных и трехслойных пластинок из кубических и гексагональных кристаллов. Показано, что при наличии в слоистых композитах ауксетического слоя нарушается правило смесей, а также эффективный модуль Юнга и эффективный коэффициент Пуассона может быть больше модулей Юнга и коэффициентов Пуассона исходных материалов. Дан сравнительный анализ продольного эффективного коэффициента Пуассона в зависимости от вида нагрузки (растяжение и изгиб) для трехслойных пластинок из кубических кристаллов.

В **Главе 4** проведен сравнительный анализ поверхностных волн Релея и Лява для материалов с отрицательным и положительным коэффициентом Пуассона изотропных сред.

В **Главе 5** рассматриваются упругие свойства фуллеритов и углеродных алмазоподобных материалов. Среди этих углеродных материалов выявлены ауксетики.

В **Приложении** приведены экстремальные значения упругих характеристик кристаллов различных кристаллических систем и значения упругих характеристик нано/микротрубок. Также даются экспериментальные данные по изучению ауксетического поведения ячеистых конструкций.

Результаты диссертации были представлены на международных и всероссийских конференциях: Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (2011 - Н. Новгород, 2015 - Казань), International Conference Auxetics and other materials and models with «negative» characteristics and International Workshop Auxetics and related systems «Auxetics» (2011 - Польша, 2014 - Польша, 2015 - Мальта, 2016 - Польша, 2017 - Греция), Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов – DFMN» (2011, 2013, 2015, 2017 гг. - Москва), Conference on Functional and Nanostructured Materials «FNMA'12» (2012 - Греция), International Conference on Nanostructured Materials «NANO-2014» (2012 - Москва), The International Conference on Crystal Growth and Epitaxy «ICCGE-18» (2016 - Япония), Научные чтения им. член-корр. АН СССР И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов» (2016 - Москва), Первый Российский кристаллографический конгресс «От конвергенции наук к природоподобным технологиям» (2016 - Москва), International Conference on Topical Problems of Continuum Mechanics (2017 - Армения).

Основные результаты диссертации были доложены на семинарах:

- 1) Семинар по механике сплошной среды им. Л.А. Галина (руководители: академик И.Г. Горячева и Ю.Н. Радаев, ИПМех РАН).
- 2) Семинар по механике систем (руководители: академик В.Ф. Журавлев и академик Д.М. Климов, ИПМех РАН).
- 3) Семинар по проблемам механики сплошной среды (руководители: С.В. Нестеров и профессор РАН Д.В. Георгиевский, ИПМех РАН).
- 4) Семинар по механике прочности и разрушения материалов и конструкций (руководители: С.В. Кузнецов и Е.И. Шифрин, ИПМех РАН).
- 5) Семинар по механическим свойствам кристаллов (руководитель: В.И. Альшиц, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН).

Глава 1.

Кристаллические ауксетики

1.1. Продольное растяжение кристаллических стержней [1, 2]

Малые упругие деформации анизотропных материалов характеризуется линейной связью между тензором деформаций ε_{ij} и тензором напряжений σ_{ij} (законом Гука)

$$\sigma_{ij} = c_{ij\alpha\beta}\varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \varepsilon_{ij} = s_{ij\alpha\beta}\sigma_{\alpha\beta}$$

с тензорными коэффициентами жесткости $c_{ij\alpha\beta}$ и коэффициентами податливости $s_{ij\alpha\beta}$ (в дальнейшем ограничимся только коэффициентами податливости и второй формой записи закона Гука соответственно). При этом для любых упругих сред справедливы свойства симметрии тензорных коэффициентов податливости

$$s_{ij\alpha\beta} = s_{ji\alpha\beta} = s_{\alpha\beta ij}.$$

Удобной альтернативной формой записи закона Гука является матричная, при переходе к которой от тензорной объединяются пары индексов по правилу соответствия

(ij)	11	22	33	23, 32	13, 31	12, 21
(n)	1	2	3	4	5	6

Шестерки тензорных компонент ε_{ij} , $\sigma_{\alpha\beta}$ заменяются на шестикомпонентные столбцы элементов ε_n , σ_n , а переход к матрице коэффициентов податливости производится по правилу $2^p s_{ij\alpha\beta} \rightarrow s_{mn}$. Число p определяется числом индексов в паре m, n , превосходящих тройку. После этого закон Гука записывается в виде матричного соотношения [170, 171]

$$\varepsilon_m = s_{mn}\sigma_n.$$

При одноосном деформировании монокристаллического стержня (при продольном растяжении в направлении осевого единичного вектора \mathbf{n}) компоненты тензора напряжений пропорциональны силе P , действующей на единицу площади оснований стержня, и произведению компонент вектора ориентации стержня: $\sigma_{ij} = P n_i n_j$. Для скалярной характеристики относительного продольного удлинения стержня при малых деформациях имеем $\varepsilon_{\alpha\beta} n_\alpha n_\beta$ [50, 170]. Определяя модуль Юнга E как отношение растягивающей силы к относительному удлинению стержня, находим

$$E^{-1}(\mathbf{n}) = s_{ij\alpha\beta} n_i n_j n_\alpha n_\beta. \quad (1.1)$$

Относительное изменение линейных размеров стержня в поперечном направлении (в направлении единичного вектора \mathbf{m} , перпендикулярного оси стержня \mathbf{n}) описывается выражением $\varepsilon_{\alpha\beta} m_\alpha m_\beta = P s_{ij\alpha\beta} n_i n_j m_\alpha m_\beta$. Понимая под коэффициентом Пуассона ν отношение относительных изменений поперечных размеров и длины стержня с обратным знаком, получим

$$\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -E(\mathbf{n}) s_{ij\alpha\beta} n_i n_j m_\alpha m_\beta. \quad (1.2)$$

Для кристаллов всех рассматриваемых далее систем, за исключением гексагональных и ромбоэдрических, будем пользоваться декартовой системой координат с кристаллографическими осями наибольшей симметрии (с главной осью в направлении 3). В указанных исключительных случаях вместо неортогональных кристаллографических осей также используем декартовы координатные оси с высокосимметричными направлениями 1 и 3 (по-прежнему главной оси) и ортогональным к ним направлением 2 (кристаллофизические оси согласно [170]).

Помимо параметризации единичных векторов \mathbf{n} , \mathbf{m} часто используют параметризацию углов Эйлера φ , θ , ψ . Ниже будем использовать следующую последовательность поворотов кристаллографической системы координат

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда единичные вектора \mathbf{n} , \mathbf{m} могут быть записаны через углы Эйлера φ , θ , ψ в виде

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \sin \theta \\ -\cos \varphi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \cos \theta \cos \psi - \cos \varphi \sin \psi \\ \cos \varphi \cos \theta \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \\ \sin \theta \cos \psi \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Для компонент этих единичных векторов справедливы ограничения

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1, \quad m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 = 1, \quad n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3 = 0.$$

В этой главе сначала будут рассмотрены частные ориентации растягиваемых кристаллических образцов, описываемых одним углом поворота относительно кристаллографических осей:

1) направления $\mathbf{m}_{(1)} = (1, 0, 0)$, $\mathbf{m}_{(2)} = (0, -\sin \theta, \cos \theta)$, $\mathbf{n} = (0, -\sin \theta, \cos \theta)$ с главной кристаллофизической осью $(0,0,1)$ и углом поворота θ от главной оси в плоскости 23;

2) направления $\mathbf{m}_{(1)} = (0, 1, 0)$, $\mathbf{m}_{(2)} = (-\cos \varphi, 0, \sin \varphi)$, $\mathbf{n} = (\sin \varphi, 0, \cos \varphi)$ и углом поворота φ от главной оси в плоскости 13;

3) направления $\mathbf{m}_{(1)} = (0, 0, 1)$, $\mathbf{m}_{(2)} = (\sin \psi, -\cos \psi, 0)$, $\mathbf{n} = (\cos \psi, \sin \psi, 0)$ и углом поворота ψ от главной оси в плоскости 12;

4) направления $\mathbf{m}_{(1)} = 1/\sqrt{6}(1, 1, -2)$, $\mathbf{m}_{(2)} = 1/\sqrt{2}(-1, 1, 0)$, $\mathbf{n} = 1/\sqrt{3}(1, 1, 1)$ для кубических кристаллов. Направление \mathbf{n} соответствует кристаллографическому направлению $[111]$.

Затем в данной главе будут проанализированы случаи произвольных ориентаций монокристаллов.

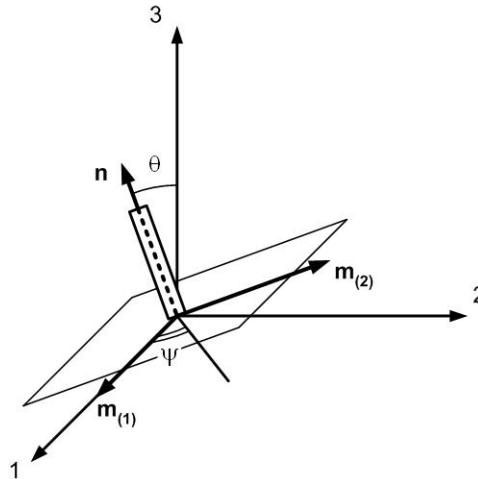


Рис. 1.1: Ориентация растягиваемого кристаллического образца, описываемая одним углом поворота от главной оси θ в плоскости 23.

Проведем анализ частной ориентации 1), которая описывается одним углом поворота от главной оси θ в плоскости 23 (Рис.1.1). Тем самым ориентация монокристалла будет характеризоваться единичным вектором вида $\mathbf{n} = (0, -\sin \theta, \cos \theta)^T$ (здесь и далее используется знак транспонирования T , превращающего строку в

столбец). Тогда поперечные направления характеризуются другим единичным вектором $\mathbf{m} = (\cos \psi, \cos \theta \sin \psi, \sin \theta \sin \psi)^T$ с дополнительным углом ψ , отсчитываемым от оси 1 в плоскости, ортогональной оси стержня. При таком наборе угловых переменных модуль Юнга будет зависеть от угла θ в соответствии с (1.1)

$$\frac{1}{E(\theta)} = s_{22} \sin^4 \theta + s_{33} \cos^4 \theta + (s_{44} + 2s_{23}) \frac{\sin^2 2\theta}{4} - (s_{24} \sin^2 \theta + s_{34} \cos^2 \theta) \sin 2\theta, \quad (1.5)$$

а квадратичная форма по компонентам поперечного вектора \mathbf{m} для коэффициента Пуассона (1.2) приводится к квадратичной форме по $\sin \psi$ и $\cos \psi$

$$\nu(\theta, \psi) = \nu_{(1)}(\theta) \cos^2 \psi + \nu_{(2)}(\theta) \sin^2 \psi + \mu(\theta) \sin \psi \cos \psi, \quad (1.6)$$

$$-\frac{\nu_{(1)}(\theta)}{E(\theta)} = s_{12} \sin^2 \theta + s_{13} \cos^2 \theta - s_{14} \sin \theta \cos \theta, \quad (1.7)$$

$$-\frac{\nu_{(2)}(\theta)}{E(\theta)} = s_{23} + 0.25(s_{22} + s_{33} - s_{44} - 2s_{23}) \sin^2 2\theta + 0.25(s_{34} - s_{24}) \sin 4\theta \quad (1.8)$$

$$-\frac{\mu(\theta)}{E(\theta)} = s_{25} \sin^3 \theta + s_{36} \cos^3 \theta + (s_{26} - s_{45}) \sin^2 \theta \cos \theta + (s_{35} - s_{46}) \sin \theta \cos^2 \theta. \quad (1.9)$$

При $\psi = 0$ функция $\nu(\theta, \psi)$ сводится к $\nu_{(1)}(\theta)$, а при $\psi = \pi/2$ становится равной $\nu_{(2)}(\theta)$. Эти две частные зависимости коэффициента Пуассона от угла θ соответствуют частным выборам взаимно ортогональных поперечных направлений $\mathbf{m}_{(1)} = (1, 0, 0)^T$, $\mathbf{m}_{(2)} = (0, \cos \theta, \sin \theta)^T$.

Квадратичная форма (1.6) становится диагональной при выполнении условия $\mu(\theta) = 0$. Для этого достаточно следующих ограничений на коэффициенты податливости

$$s_{25} = s_{26} = s_{35} = s_{36} = s_{45} = s_{46} = 0.$$

Матрица упругих коэффициентов тогда будет иметь общий вид

$$\begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & * & * \\ * & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}$$

если под звездочками подразумевать коэффициенты любой (в том числе нулевой) величины.

При выполнении подобных условий упрощившаяся зависимость коэффициента Пуассона от угла ψ (угла поворота в поперечной плоскости на Рис.1.1)

$$\nu(\theta, \psi) = \nu_{(1)}(\theta) \cos^2 \psi + \nu_{(2)}(\theta) \sin^2 \psi$$

достигает экстремумов при фиксированной ориентации стержня (фиксированном значении угла θ) только в двух случаях: $\sin \psi = 0$ или $\cos \psi = 0$. Тем самым при обсуждении экстремальных значений ν достаточно проанализировать только два частных взаимно ортогональных поперечных направления, характеризуемых единичными векторами $\mathbf{m}_{(1)}$, $\mathbf{m}_{(2)}$, что и будет сделано в дальнейшем. Вышеприведенные ограничения на структуру матрицы упругих коэффициентов оказываются выполненными для кристаллов пяти кристаллических систем. Как видно из [171] и из матриц последующих разделов этой главы такими являются кристаллы кубической, гексагональной, орторомбической и шестиконстантных ромбоэдрической (тригональной) и тетрагональной систем. Не удовлетворяют таким ограничениям кристаллы триклинной, моноклинной и семиконстантных тригональной и тетрагональной систем.

Отношение в (1.7) и модуль Юнга согласно (1.5) являются периодическими функциями с периодом π . Еще меньшим периодом $\pi/2$ характеризуется отношение в (1.8). Как можно видеть из дальнейшего, меньшим периодом обладают все эти функции в частном случае кубической системы.

Если рассмотреть теперь среднюю величину коэффициента Пуассона, выполняя осреднение квадратичной формы (1.6) по всевозможным поперечным направлениям, получим простой результат

$$\langle \nu \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \nu(\theta, \psi) d\psi = \frac{\nu_{(1)}(\theta) + \nu_{(2)}(\theta)}{2}$$

для ориентации 1). Ниже средний коэффициент Пуассона будет рассмотрен только для ориентации 1).

Следует отметить, что такой результат получается для обсуждаемой здесь ориентации растягиваемого монокристалла без какого-либо ограничения на коэффициенты податливости.

1.2. Кубические кристаллы

1.2.1. Растяжение стержней с кубической анизотропией [1–5]

Для кубических кристаллов упругие свойства определяются тремя коэффициентами податливости s_{11} , s_{12} , s_{44} , что хорошо отражает вид матрицы коэффициентов податливости

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{pmatrix}$$

На эти упругие постоянные накладываются термодинамические ограничения

$$s_{11} > 0, \quad 1 > \frac{s_{12}}{s_{11}} > -\frac{1}{2}, \quad s_{44} > 0.$$

Для угловых зависимостей модуля Юнга $E(\theta)$ и двух обсуждаемых коэффициентов Пуассона $\nu_{(1)}(\theta)$ и $\nu_{(2)}(\theta)$ растягиваемых кристаллических образцов общие выражения (1.5), (1.7), (1.8) существенно упрощаются для частных ориентаций 1), 2) и 3) (см. стр.20)

$$E(\theta) = \left(s_{11} - \frac{\Delta}{4} + \frac{\Delta \cos 4\theta}{4} \right)^{-1}, \quad (1.10)$$

$$\nu_{(1)}(\theta) = -s_{12}E(\theta), \quad (1.11)$$

$$\nu_{(2)}(\theta) = -(s_{12} + s_{11})E(\theta) + 1, \quad (1.12)$$

$$\Delta \equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}.$$

Периодичность всех этих функций с периодом $\pi/2$, симметричных относительно $\theta = \pi/4$, позволяет ограничиться угловым сектором $0 \leq \theta \leq \pi/2$ на Рис.1.2 и Рис.1.3. Экстремумы функций $E(\theta)$, $\nu_{(1)}(\theta)$ и $\nu_{(2)}(\theta)$ достигаются при значениях углов, определяемых корнями уравнения $\sin 4\theta = 0$. В указанном секторе имеются три корня $\theta = 0, \pi/4, \pi/2$, которым соответствуют пары экстремальных значений

$$E(0) = E\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{s_{11}}, \quad (1.13)$$

$$E\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{s_{11} - \Delta/2}, \quad (1.14)$$

$$\nu_{(1)}(0) = \nu_{(1)}\left(\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad (1.15)$$

$$\nu_{(1)}\left(\frac{\pi}{4}\right) = -\frac{s_{12}}{s_{11} - \Delta/2}, \quad (1.16)$$

$$\nu_{(2)}(0) = \nu_{(2)}\left(\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad (1.17)$$

$$\nu_{(2)}\left(\frac{\pi}{4}\right) = -\frac{s_{12} + \Delta/2}{s_{11} - \Delta/2}. \quad (1.18)$$

Какая из величин в каждой паре является минимальной (максимальной), зависит от знаков и величин коэффициента анизотропии Δ , который исчезает в изотропной среде, и коэффициентов податливости s_{12} . При этом разность $s_{11} - \Delta/2 =$

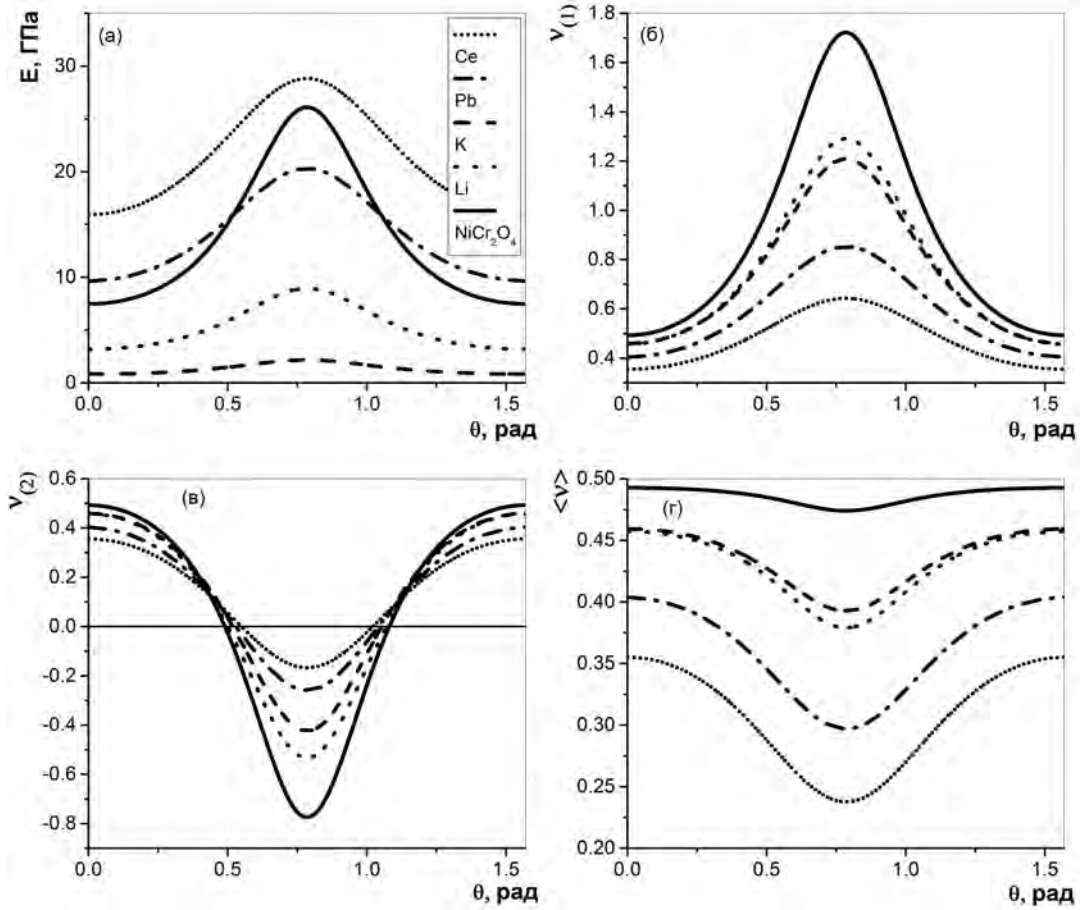


Рис. 1.2: Угловые зависимости модуля Юнга (а), коэффициентов Пуассона $\nu_{(1)}$ (б) и $\nu_{(2)}$ (в), а также среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ (г) для Ce, Pb, K, Li и NiCr_2O_4 .

$(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44})/4$ остается положительной в силу указанных выше термодинамических ограничений независимо от знака параметра анизотропии. Отсюда, в частности, следует положительность функции $E(\theta)$. Из (1.10)-(1.12) в силу термодинамических ограничений на упругие коэффициенты s_{11} , s_{12} следуют ограничения на коэффициенты Пуассона $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ вида

$$-1 < \left(1 - \frac{\Delta}{2s_{11}} \sin^2 2\theta\right) \nu_{(1)}(\theta) < \frac{1}{2},$$

$$-2 < \left(1 - \frac{\Delta}{2s_{11}} \sin^2 2\theta\right) [\nu_{(2)}(\theta) - 1] < -\frac{1}{2}.$$

Согласно экспериментальным данным для кубических кристаллов, собранным в [172], коэффициент податливости s_{12} в большинстве случаев отрицателен. Более того, если ограничиться кристаллами простых элементов, их сплавами и интерметаллическими соединениями, то неравенство $s_{12} < 0$ будет справедливо для всех таких кубических кристаллов, за исключением бария Ва. Тогда, как можно

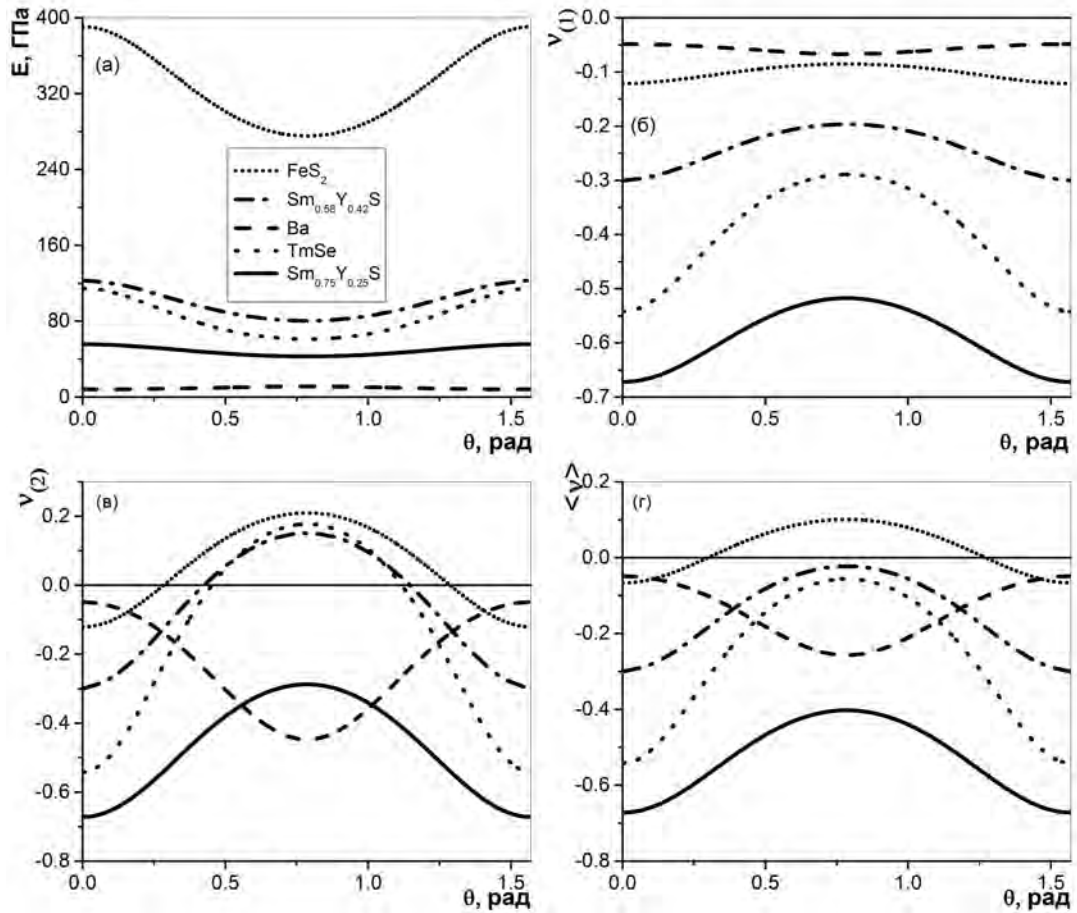


Рис. 1.3: Угловые зависимости модуля Юнга (а), коэффициентов Пуассона $\nu_{(1)}$ (б) и $\nu_{(2)}$ (в), а также среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ (г) для Fe_2S , $\text{Sm}_{0.58}\text{Y}_{0.42}\text{S}$, Ba , TmSe и $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$.

видеть из (1.10)-(1.18), коэффициент Пуассона $\nu_{(1)}(\theta)$ будет оставаться положительным в соответствии с пропорциональностью положительному модулю Юнга.

Экспериментальные данные [172] показывают также, что и коэффициент анизотропии Δ для большинства элементов и их сплавов имеет одинаковый знак, а именно, $\Delta > 0$. При справедливости обоих неравенств $s_{12} < 0$, $\Delta > 0$, как можно видеть из (1.17) и (1.18), коэффициент Пуассона $\nu_{(2)}(\theta)$ становится отрицательным ($\nu_{\min} = \nu_{(2)}(\pi/4) < 0$) в кубических кристаллах с большой анизотропией

$$\Delta > 2 |s_{12}|. \tag{1.19}$$

При этом, как ясно из (1.15)-(1.18), будем иметь $\nu_{\max} = \nu_{(1)}(\pi/4) > 0$. Главный минимум коэффициентов $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ для кубических кристаллов с $\Delta > 0$ достигается для функции $\nu_{(2)}(\theta)$.

Проверка показывает, что таких ауксетических кристаллов с большой анизотропией много (около полусотни). Это подтверждается примерами, приведенными на Рис.1.2 и в Табл.1.1, где отражены результаты для кристаллов с доста-

Таблица 1.1: Значения минимального и максимального коэффициента Пуассона (ν_{\min} и ν_{\max}), минимального и максимального среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle_{\min}$ и $\langle \nu \rangle_{\max}$, коэффициента податливости s_{12} , коэффициента анизотропии Δ и безразмерного отношения $\Delta/|s_{12}|$ для кубических кристаллов с $s_{12} < 0$.

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\langle \nu \rangle_{\max}$	s_{12} , ТПа ⁻¹	Δ , ТПа ⁻¹	$\frac{\Delta}{ s_{12} }$
NiCr ₂ O ₄	-0.77	1.72	0.47	0.49	-66.0	191.4	2.90
CuAuZn ₂	-0.72	1.64	0.46	0.49	-55.1	158.4	2.87
Li	-0.54	1.29	0.38	0.46	-144	407	2.83
AuZn (47at%Zn)	-0.52	1.38	0.43	0.48	-27.4	75.2	2.74
Na	-0.44	1.20	0.38	0.46	-250	682.5	2.73
AuZn (50at%Zn)	-0.43	1.28	0.43	0.47	-20.7	55.4	2.67
K	-0.42	1.21	0.39	0.46	-558	1507.5	2.70
Rb	-0.40	1.15	0.38	0.45	-600	1617.5	2.70
Cs	-0.36	0.83	0.23	0.38	-450	1295	2.88
Cu ₂ MnAl	-0.36	0.97	0.31	0.42	-7.80	21.1	2.71
Yb	-0.34	0.75	0.20	0.36	31.9	92.9	2.91
Ni _{0.73} Zn _{0.37} Cr ₂ O ₄	-0.30	1.14	0.42	0.47	-13.3	33.5	2.52
Ca	-0.27	0.86	0.29	0.40	-42.0	110.5	2.63
Sr	-0.26	0.85	0.29	0.40	-58.0	151.5	2.61
Th	-0.22	0.79	0.28	0.39	-10.7	27.5	2.57
AgMg	-0.20	0.80	0.30	0.40	-10.4	25.9	2.49
LiIn	-0.20	0.90	0.35	0.43	-21.1	51.7	2.45
Pb	-0.20	1.02	0.41	0.46	-43.0	102.7	2.34
Ni ₃ Al	-0.19	0.63	0.22	0.34	-3.19	8.30	2.61
Ce	-0.17	0.64	0.24	0.36	-22.3	56.2	2.52
Ni _{50.6} Al	-0.16	0.79	0.31	0.40	-4.20	10.2	2.42
Co	-0.15	0.76	0.31	0.40	-3.51	8.40	2.39
Cu	-0.13	0.82	0.34	0.42	-6.30	14.7	2.33
SiC	-0.10	0.44	0.17	0.29	-1.05	2.60	2.45
Ni ₃ Fe (73.8at%Ni)	-0.10	0.69	0.29	0.39	-3.24	7.40	2.30

точно большой ауксетичностью, а именно, с $\nu_{\min} \leq -0.1$. Кроме того для всех приведенных ауксетиков, за исключением карбида кремния SiC, $\nu_{\max} > 1/2$, что превосходит известную верхнюю границу для изотропных материалов. В таблице не включены кубические ауксетики с $\nu_{\min} > -0.1$: Tl (-0.09), CeAg (-0.09), Ag (-0.09), CuCl (-0.07), Ni (-0.07), Fe (-0.06), HgSe (-0.05), CeSn₃ (-0.05), Pd (-0.04), β -HgS (-0.04), Au(-0.03), CuBr (-0.03), HgTe (-0.03), CuI (-0.03), ZnS (-0.03), ZnSe (-0.03), LiF (-0.02), Cu₃Au (-0.01), CdTe (-0.01), Pb₃ (-0.01), LiH

(−0.01), LiD(−0.01), LaAg(−0.004). В скобках здесь указаны значения $\nu_{(2)\min}$. Как можно видеть на основе эмпирических данных Табл.1.1, для кубических ауксетиков с $s_{12} < 0$, $\Delta > 0$ имеется тенденция роста отрицательных значений коэффициента Пуассона ν_{\min} с ростом отношения $\Delta/|s_{12}|$ (за редкими исключениями). На Рис.1.2 представлены кроме зависимостей $E(\theta)$, $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ также зависимости среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ от угла ориентации деформируемого стержня.

Осредненный по всем поперечным направлениям коэффициент Пуассона, подсчитываемый согласно формуле (1.6) как полусумма $\nu_{(1)}(\theta)$ и $\nu_{(2)}(\theta)$, благодаря связям последних с модулем Юнга (1.10)-(1.12) также просто выражается через него

$$\langle \nu \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} (s_{11} + 2s_{12}) E(\theta).$$

Экстремальными значениями среднего коэффициента Пуассона будут

$$\langle \nu \rangle(0) = \langle \nu \rangle\left(\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad \langle \nu \rangle\left(\frac{\pi}{4}\right) = -\frac{4s_{12} + \Delta}{4s_{11} - 2\Delta}.$$

В рамках обсуждаемой наиболее представительной ситуации $s_{12} < 0$, $\Delta > 0$ среднее могло бы стать отрицательным только при $\Delta > 4|s_{12}|$, т.е. при ограничении в два раза более сильным, чем (1.19). Однако согласно экспериментальным данным из [172] для таких кубических ауксетиков величина коэффициента анизотропии заключена в тесные рамки неравенств

$$4|s_{12}| > \Delta > 2|s_{12}|,$$

так что средний коэффициент Пуассона для всех подобных ауксетиков положителен, т.е. в среднем они ауксетиками не являются. Это иллюстрируется Рис.1.2г, причем, как можно видеть из Табл.1.1, коэффициент $\langle \nu \rangle$ изменяется только в приближенных пределах от 0.2 до 0.5.

Другая ситуация с $s_{12} < 0$, $\Delta < 0$, которая реализуется для ниобия, ванадия, хрома, молибдена, их сплавов и целого ряда твердых растворов и бинарных соединений, здесь не представляет интереса, поскольку в силу (1.15)-(1.18) они ауксетиками не являются (оба коэффициента $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ оказываются положительными).

В ситуации $s_{12} > 0$, $\Delta < 0$ имеем особую группу ауксетиков, для которых

$$\nu_{(1)}(0) = \nu_{(1)}\left(\frac{\pi}{2}\right) = \nu_{(2)}(0) = \nu_{(2)}\left(\frac{\pi}{2}\right) < \nu_{(1)}\left(\frac{\pi}{4}\right) < 0,$$

так что в большой области углов обе функции $\nu_{(1)}(\theta)$ и $\nu_{(2)}(\theta)$ являются отрицательными. Примеры таких кристаллов приведены на Рис.1.3 и полностью собраны в Табл.1.2. Для целого ряда кристаллов, включенных в таблицу, средние коэффициенты Пуассона оказываются отрицательными при любых ориентациях растягиваемого стержня. Такую особенность до осреднения имеет кристалл $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ согласно данным, отраженным в таблицах [172]. Однако в отношении этого кристалла нет

Таблица 1.2: Значения минимального и максимального коэффициента Пуассона (ν_{\min} и ν_{\max}), минимального и максимального среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle_{\min}$ и $\langle \nu \rangle_{\max}$, коэффициента податливости s_{12} , коэффициента анизотропии Δ и безразмерного отношения $\Delta/|s_{12}|$ для кубических кристаллов с $s_{12} > 0$.

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\langle \nu \rangle_{\max}$	s_{12} , ГПа ⁻¹	Δ , ГПа ⁻¹	$\frac{\Delta}{ s_{12} }$
*Sm _{0.75} Y _{0.25} S	-0.67 -0.42	-0.29 0.07	-0.67 -0.42	-0.40 -0.10	12.1 4.30	-10.75 -10.75	0.89 2.50
TmSe	-0.54	0.18	-0.54	-0.06	4.73	-15.26	3.23
Sm _{0.7} Y _{0.3} S	-0.49	0.004	-0.49	-0.16	5.26	-10.66	2.03
Tm _{0.99} Se	-0.47	0.23	-0.47	-0.01	3.71	-14.26	3.84
*Ba	-0.45	-0.05	-0.26	-0.05	6.01	68.24	11.35
Sm _{0.58} Y _{0.42} S	-0.30	0.15	-0.30	-0.02	2.44	-8.72	3.57
Sm _{0.576} Y _{0.424} S	-0.27	0.26	-0.27	0.05	1.98	-10.57	5.34
*FeS ₂	-0.12	0.21	-0.12	0.06	0.31	-2.15	6.92
SnTe (N=1.01·10 ²⁰ см ⁻³)	-0.09	0.57	-0.09	0.27	0.90	-31.2	34.67
*USE	-0.08	0.76	-0.08	0.37	0.35	-29.9	85.43
*USb	-0.05	0.68	-0.05	0.33	0.28	-23.22	82.93
SmB ₆	-0.02	0.45	-0.02	0.22	0.04	-4.04	101
*ReO ₃	-0.01	0.59	-0.01	0.29	0.03	-6.14	204.7
GeTe-SnTe (mole20%GeTe)	-0.01	0.61	-0.01	0.30	0.10	-30.7	307
*UTe	-0.01	0.71	-0.01	0.35	0.10	-34.78	347.8

полной ясности из-за различий результатов измерений в различных работах. Для подобных случаев будем пользоваться меткой в виде звездочки *. Отметим еще, что согласно Табл.1.2, для кубических ауксетиков с $s_{12} > 0$, $\Delta < 0$ характерен рост отрицательных значений коэффициента Пуассона ν_{\min} с ростом $s_{12}/|\Delta|$ (за немногими исключениями).

Наконец, все кристаллы с $s_{12} > 0$, $\Delta > 0$ уже благодаря первому неравенству были бы ауксетиками. Удастся обнаружить лишь один такой кристалл, и это кристалл бария Ва (см. Табл.1.2). Для него как средний коэффициент Пуассона, так и коэффициенты до осреднения отрицательны. Однако и в этом случае имеются существенные разночтения между результатами различных измерений [173, 174].

В заключение рассмотрим частную ориентацию 4), при которой направление вектора \mathbf{n} совпадает с направлением [111]. Для данного направления модуль Юнга и коэффициенты Пуассона принимают постоянные значения

$$\frac{1}{E} = 3s_{11} - 2\Delta, \quad \nu_1 = \nu_2 = -\frac{3s_{12} + \Delta}{3s_{11} - 2\Delta}. \quad (1.20)$$

Как можно видеть из (1.20), коэффициент Пуассона ν при $s_{12} < 0$, $\Delta > 0$ мог бы стать отрицательным в кубических кристаллах с большой анизотропией

$$\Delta > 3|s_{12}|.$$

Однако согласно экспериментальным данным для кубических кристаллов, собранным в [172], был обнаружен один такой ауксетик – $\text{Mn}_{85.3}\text{Ni}_{8.8}\text{C}_{5.9}$ ($\Delta/|s_{12}| = 3.01$) с $\nu_1 = -0.01$. Также наибольшие значения отношения $\Delta/|s_{12}|$ наблюдаются в двух случаях: 2.92 у FePd и 2.91 у Yb .

В случае кубических кристаллов с $\Delta < 0$, $s_{12} < 0$, к которым относятся молибден, ниобий, хром, ванадий и их сплавы, и целый ряд других твердых растворов и бинарных соединений, в согласии с (1.20) отрицательность коэффициента Пуассона не наблюдается.

В ситуации кубических кристаллов с $s_{12} > 0$, $\Delta < 0$ согласно (1.20) будут обнаруживаться ауксетики при выполнении неравенства $|\Delta| < 3s_{12}$. Обнаружено всего два кристалла с $s_{12} > 0$, $\Delta < 0$, у которых наблюдается отрицательный коэффициент Пуассона: -0.34 для $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ и -0.09 для $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$. Для них отношение $|\Delta|/s_{12}$ равно 0.89 ($\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$) и 2.03 ($\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$). Для $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ известен второй набор упругих констант, при котором минимальное значение коэффициента Пуассона для ориентации в направлении [111] будет равен -0.04 .

Наконец, кристаллы с $s_{12} > 0$, $\Delta > 0$ должны быть ауксетиками. Но среди всех кубических кристаллов обнаружен лишь один такой кристалл - кристалл бария. Для него значение коэффициента Пуассона равно -0.37 .

1.2.2. Классификация кубических кристаллов [6–10]

В то время как коэффициент Пуассона для изотропных материалов в большинстве случаев является положительным, отрицательность такого коэффициента для анизотропных сред явление частое. Ниже анализируются особенности изменений коэффициентов Пуассона для кубических ауксетиков на основе больших списков упругих характеристик кристаллических материалов, приведенных в справочнике [172]. При одноосном растяжении «технические коэффициенты» упругости кристаллов типа модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν зависят от ориентации оси растяжения относительно кристаллографических осей

$$\frac{1}{E(\mathbf{n})} = s_{ij\alpha\beta}n_in_jn_\alpha n_\beta, \quad \nu(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -E(\mathbf{n})s_{ij\alpha\beta}n_in_jm_\alpha m_\beta.$$

Здесь единичный вектор \mathbf{n} направлен вдоль оси растяжения, а единичный вектор \mathbf{m} перпендикулярен \mathbf{n} . В случае кубических кристаллов упругость характеризует-

ся тремя матричными коэффициентами податливости s_{11} , s_{12} , s_{44} , и коэффициент Пуассона ν и модуль Юнга E можно записать в виде

$$\begin{aligned}\frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{s_{11}E(\mathbf{n})} &= -\frac{\delta}{2}(N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) - \Pi), \\ \frac{1}{E(\mathbf{n})} &= s_{11}\left(1 - \frac{\delta}{2}M(\mathbf{n})\right), \\ \Pi &\equiv -\frac{2s_{12}}{\Delta}, \quad \delta \equiv \frac{\Delta}{s_{11}}, \\ M(\mathbf{n}) &\equiv 4(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2), \quad N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \equiv 2(n_1^2m_1^2 + n_2^2m_2^2 + n_3^2m_3^2).\end{aligned}$$

Здесь $M(\mathbf{n})$ и $N(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ – функции только единичных взаимно ортогональных векторов \mathbf{n} и \mathbf{m} , независящие от упругих характеристик кристаллов. Размерная комбинация коэффициентов податливости $\Delta \equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}$ известна как параметр анизотропии для кубических кристаллов.

Для анализа упругих свойств кристаллов удобно использовать параметризацию трех углов Эйлера φ , θ , ψ взамен параметризации единичных векторов \mathbf{n} , \mathbf{m} со связью (1.3), (1.4). В этом случае коэффициент Пуассона оказывается зависящим от трех углов Эйлера и только двух безразмерных параметров Π , δ

$$\frac{1}{e} = 1 - \frac{\delta}{2}M(\varphi, \theta), \quad (1.21)$$

$$\frac{\nu}{e} = -\frac{\delta}{2}[N(\varphi, \theta, \psi) - \Pi], \quad (1.22)$$

$$0 \leq M \equiv \sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \sin^2 2\varphi \leq \frac{4}{3},$$

$$0 \leq N \equiv 3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta \cos^2 \psi + (\cos \theta \cos 2\varphi \cos \psi - \sin \psi)^2 \sin^2 \theta \leq 1.$$

При этом безразмерный модуль Юнга $e = Es_{11}$ зависит от двух углов Эйлера и одного безразмерного параметра δ и остается положительным в силу положительности упругой энергии кристалла.

Кристаллические ауксетика можно поделить на два типа: *полные ауксетика*, имеющие отрицательный коэффициент Пуассона при любой ориентации кристаллов, и *частичные ауксетика*, изменяющие знак коэффициента Пуассона при определенных ориентациях.

Среди кубических кристаллов, упругие характеристики которых приведены в [56, 172, 175], удалось выявить немного полных ауксетиков, собранных в Табл.П.1 (см. стр.311). При этом, из-за больших ошибок в экспериментальных результатах для коэффициентов упругости утверждение о полноте ауксетиков не всегда является достоверным. Так, согласно одним данным кристаллы Ba, Sm_{0.7}Y_{0.3}S, Sm_{0.75}Y_{0.25}S должны быть полными ауксетиками, а согласно другим относятся к частичным ауксетикам (см. Табл.П.1).

Главной особенностью частичных ауксетиков является наличие поверхности ауксетичности ($\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$), отделяющей угловую область с отрицательными значениями коэффициента Пуассона от области с положительными значениями. Из (1.22) ясно, что эта поверхность описывается уравнением

$$N(\varphi, \theta, \psi) = \Pi, \quad 0 \leq \Pi \leq 1. \quad (1.23)$$

Следовательно, она характеризуется одним безразмерным параметром Π , составленным из трех коэффициентов упругости.

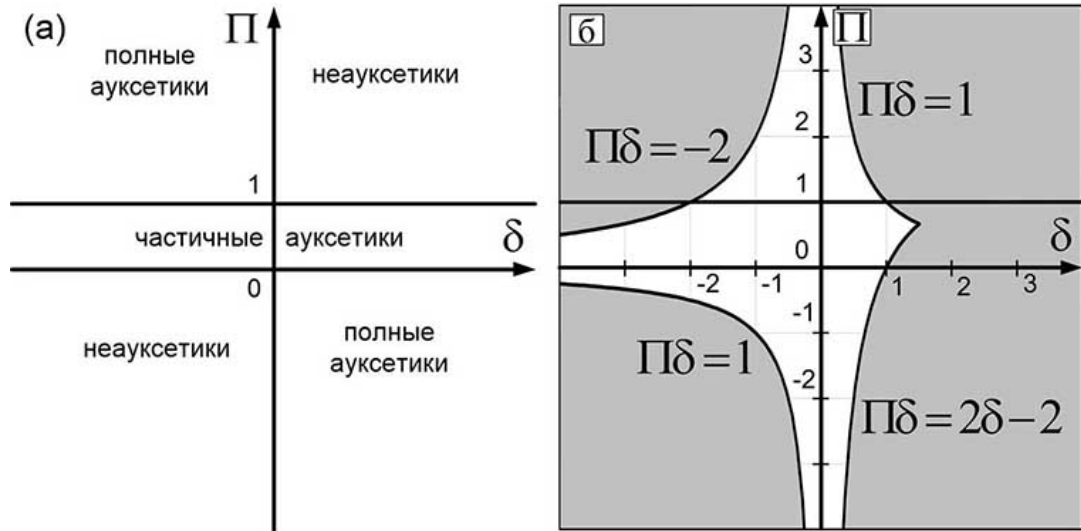


Рис. 1.4: Классификационная схема для кубических ауксетиков (а) и классификационная схема с границами устойчивости кубических кристаллов (б).

Из (1.22) также ясно, что для полных ауксетиков либо $\Pi < 0, \delta > 0$, либо $\Pi > 1, \delta < 0$ (здесь важна противоположность знаков двух безразмерных параметров и величина параметра Π), а для неауксетиков $\Pi < 0, \delta < 0$ или $\Pi > 1, \delta > 0$. Это все отражено на диаграмме Рис.1.4а. Требование положительной определенности упругой энергии накладывает следующие ограничения на упругие коэффициенты податливости

$$s_{11} > 0, \quad s_{44} > 0, \quad s_{11} > s_{12} > -0.5s_{11},$$

которые переписываются через безразмерные параметры в виде

$$s_{11} > 0, \quad \Pi\delta > 2\delta - 2, \quad 1 > \Pi\delta > -2, \quad \delta < 2.$$

Эти границы устойчивости нанесены на Рис.1.4б. Зоны кристаллической неустойчивости на этом рисунке затенены.

Анализ показал, что среди кубических кристаллов частичных ауксетиков гораздо больше, чем полных ауксетиков. Причем, наиболее представительным оказывается подкласс с $\delta > 0$ (см.: Табл.П.6-П.9, стр.313). Другой подкласс с $\delta < 0$

включает все одиннадцать кристаллов Табл.П.2-П.5 и кристалл TmSe из Табл.П.6. Упорядоченное распределение частичных аусетиков по таблицам выполнено в соответствии с величиной безразмерного параметра Π . Увеличение номера таблицы Π отвечает последовательному приросту Π через 0.1 при полном единичном росте параметра. Из таблиц видно, что наибольшее число частичных аусетиков приходится на зоны $0.7 < \Pi < 0.8$ (Табл.П.7) и $0.8 < \Pi < 0.9$ (Табл.П.8). В то же время мало частичных аусетиков приходится на зоны с малыми значениями параметра Π (при $0 < \Pi < 0.6$). В Табл.П.2-П.9 также указаны минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для всех кубических аусетиков.

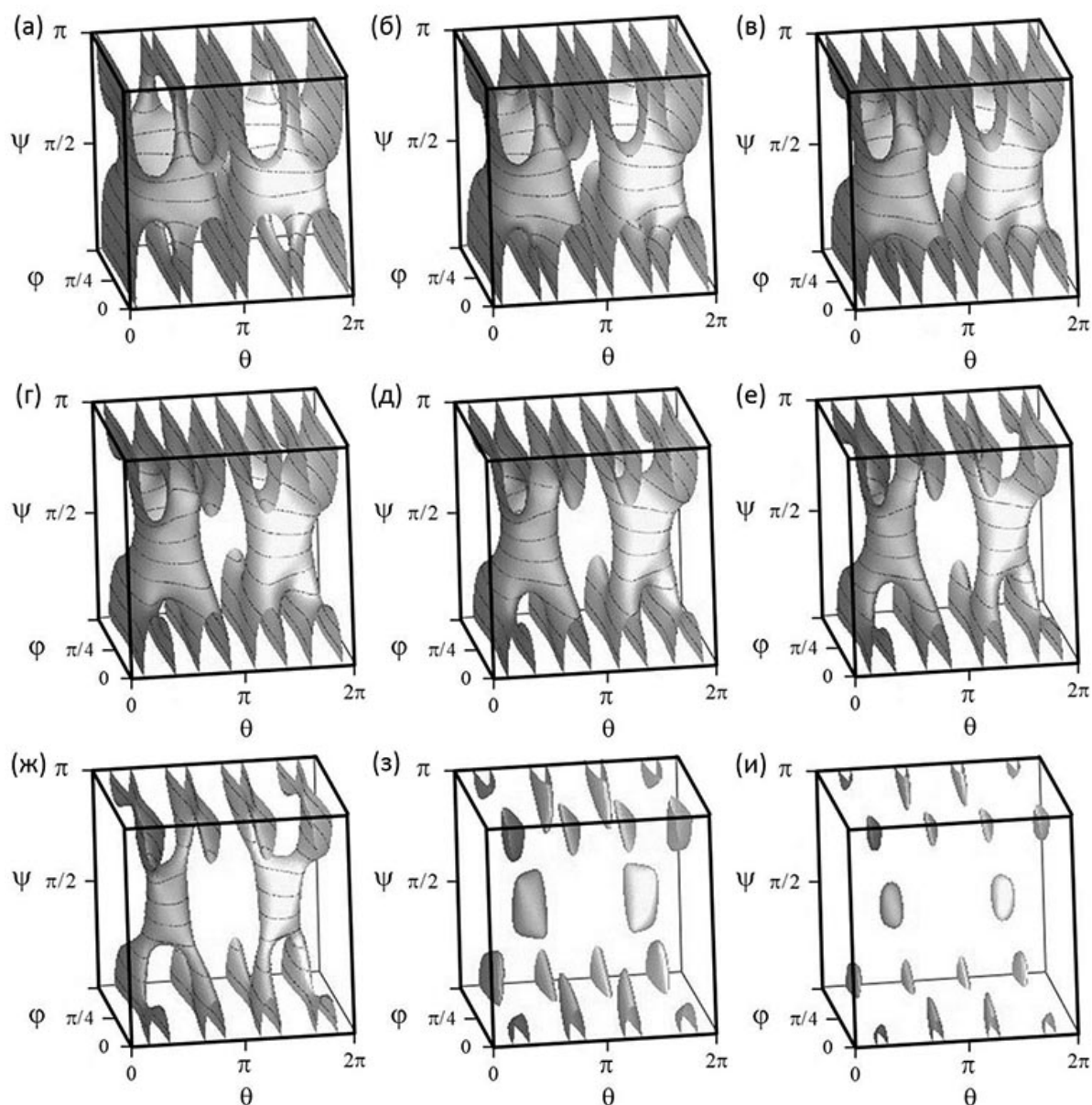


Рис. 1.5: Граница аусетичности $\nu = 0$ для кубических кристаллов с $\Pi = 0.1$ (а), $\Pi = 0.2$ (б), $\Pi = 0.3$ (в), $\Pi = 0.4$ (г), $\Pi = 0.5$ (д), $\Pi = 0.6$ (е), $\Pi = 0.7$ (ж), $\Pi = 0.8$ (з), $\Pi = 0.9$ (и).

К приведенному распределению ауксетиков в таблицах хорошо привязывается изменение формы ауксетических поверхностей при изменении величины параметра Π , отраженное на Рис.1.5. На нем представлены поверхности нулевого уровня $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ в пространстве трех углов Эйлера при различных значениях параметра Π , изменяющегося через 0.1. Изображения ограничиваются угловыми ячейками, соответствующими периодам $T_\varphi = \pi/2$, $T_\theta = 2\pi$, $T_\psi = \pi$ функции $N(\varphi, \theta, \psi)$. Совокупность фигур Рис.1.5 дает достаточно полное представление о возможных формах ауксетических поверхностей для частичных ауксетиков.

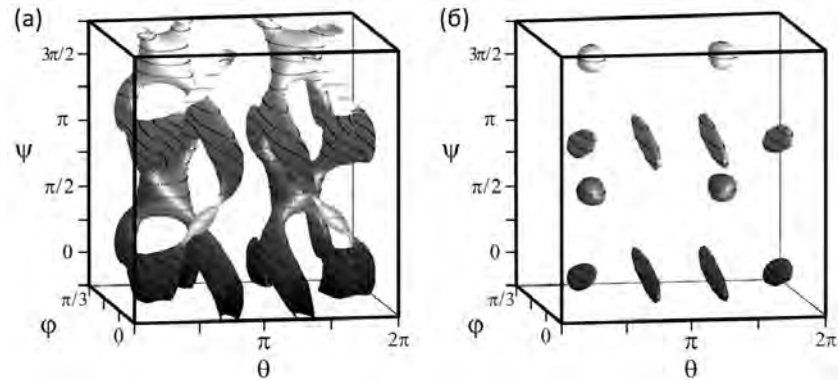


Рис. 1.6: Пример открытой и замкнутой ауксетических поверхностей при $\Pi = 0.7$ (а), $\Pi = 0.9$ (б), построенных в угловых ячейках $\varphi \in [-\pi/6, \pi/3]$, $\theta \in [0, 2\pi]$, $\psi \in [-\pi/4, 7\pi/4]$.

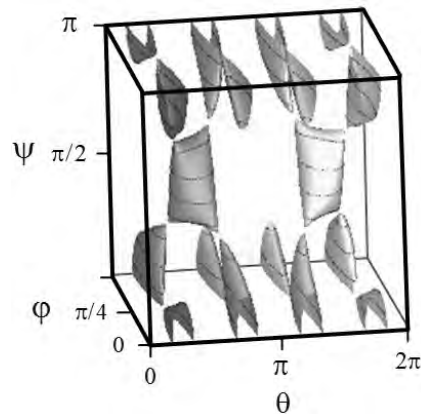


Рис. 1.7: Топологическое изменение ауксетической поверхности при критическом значении $\Pi = 0.75$.

Из Рис.1.5 можно видеть как ауксетические поверхности, имеющие при малых значениях параметра Π вид пары «открытых» поверхностей, т.е. продолжающихся непрерывно через соседние периодические ячейки за пределами $(0, T_\varphi)$, $(0, T_\theta)$, $(0, T_\psi)$, переходят в совокупность «замкнутых» поверхностей в пределе $\Pi \rightarrow 1$. Замкнутость последних и открытость первых очевидна при выходе за пределы

минимальной ячейки Рис.1.6. Найдено, что такое топологическое изменение ауксетических поверхностей происходит при критическом значении безразмерного параметра $\Pi_c \approx 0.745$. Вид ауксетической поверхности при значении параметра $\Pi = 0.75$, близком к критическому, приведен на Рис.1.7. Знак другого безразмерного параметра δ определяет по какую сторону от ауксетической поверхности находится область с отрицательным коэффициентом Пуассона. При $\delta > 0$ эта область находится внутри, а в противоположном случае снаружи от ауксетической поверхности.

В заключении проанализируем также выражения коэффициентов Пуассона для некоторых частных ориентаций, которые определяются по формулам

$$\nu_{[100],[001]} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad \nu_{[001],[110]} = -\frac{s_{12}}{s_{11} - 0.5\Delta}, \quad (1.24)$$

$$\nu_{[1\bar{1}0],[110]} = -\frac{2s_{12} + \Delta}{2s_{11} - \Delta}, \quad \nu_{(111),[111]} = -\frac{3s_{12} + \Delta}{3s_{11} - 2\Delta}. \quad (1.25)$$

Здесь и далее последние три числа в квадратных скобках указывают направления растяжения, а первые три числа в скобках - направление поперечной деформации. Данные выражения для коэффициентов Пуассона можно записать через безразмерные параметры Π и δ

$$\nu_{[100],[001]} = \frac{\Pi\delta}{2}, \quad \nu_{[001],[110]} = \frac{\Pi\delta}{2 - \delta}, \quad (1.26)$$

$$\nu_{[1\bar{1}0],[110]} = \frac{\delta(\Pi - 1)}{2 - \delta}, \quad \nu_{(111),[111]} = \frac{\delta(1.5\Pi - 1)}{3 - 2\delta}. \quad (1.27)$$

Численно-аналитический анализ этих формул с использованием термодинамических ограничений $\Pi\delta > 2\delta - 2$, $1 > \Pi\delta > -2$, $\delta < 1.5$ показывает, что при $\Pi > 0$, $0 < \delta < 1.5$:

$$\nu_{[001],[110]} > \nu_{[100],[001]} > \nu_{(111),[111]} > \nu_{[1\bar{1}0],[110]},$$

при $\Pi > 0$, $\delta < 0$:

$$\nu_{[1\bar{1}0],[110]} > \nu_{(111),[111]} > \nu_{[001],[110]} > \nu_{[100],[001]},$$

при $\Pi < 0$, $\delta < 0$:

$$\nu_{[1\bar{1}0],[110]} > \nu_{(111),[111]} > \nu_{[100],[001]} > \nu_{[001],[110]},$$

при $\Pi < 0$, $0 < \delta < 1.5$:

$$\nu_{[100],[001]} > \nu_{[001],[110]} > \nu_{(111),[111]} > \nu_{[1\bar{1}0],[110]}.$$

1.2.3. Связь среднего коэффициента Пуассона с модулем Юнга для кубических кристаллов. Ауксетики в среднем [11]

У многих кристаллических веществ такая характеристика упругости, как коэффициент Пуассона, может изменять свой знак при изменении ориентации деформируемых кристаллов. Особенно много подобных материалов обнаружено среди

кристаллов кубического типа (см. подраздел 1.2.2, стр. 29). Ниже с помощью анализа будет показано, что при осреднении по поперечным направлениям коэффициента Пуассона одноосно растягиваемых образцов количество кубических кристаллов с отрицательным коэффициентом Пуассона очень сильно снижается.

При одноосной деформации растяжения модуль Юнга E и коэффициент Пуассона ν кубических кристаллов зависят от ориентации кристалла (с параметризацией тремя углами Эйлера) следующим образом (см. подраздел 1.2.2)

$$\frac{1}{e(\varphi, \theta)} = 1 - \frac{\delta}{2} M(\varphi, \theta), \quad (1.28)$$

$$\frac{\nu(\varphi, \theta, \psi)}{e(\varphi, \theta)} = -\frac{\delta}{2} [N(\varphi, \theta, \psi) - \Pi], \quad (1.29)$$

$$M(\varphi, \theta) \equiv \sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \sin^2 2\varphi,$$

$$N(\varphi, \theta, \psi) \equiv \{3 \cos^2 \theta \cos^2 \psi + (\cos \theta \cos 2\varphi \cos \psi - \sin 2\varphi \sin \psi)^2\} \sin^2 \theta.$$

Здесь использована безразмерная форма записи с безразмерным модулем Юнга $e(\varphi, \theta) \equiv s_{11} E(\varphi, \theta)$ и двумя упругими безразмерными параметрами

$$\delta \equiv \frac{\Delta}{s_{11}}, \quad \Pi \equiv -\frac{2s_{12}}{\Delta}. \quad (1.30)$$

Через $\Delta \equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}$ обозначен коэффициент анизотропии, исчезающий при переходе к случаю изотропии. В силу положительной определенности упругой энергии имеют место ограничения на коэффициенты податливости вида $s_{11} > 0$, $1 > s_{12}/s_{11} > -0.5$, $s_{44} > 0$ и положительная определенность модуля Юнга $e(\varphi, \theta) > 0$.

Кубические кристаллы можно разделить с точки зрения знака их коэффициента Пуассона на три категории: неауксеттики, частичные ауксеттики и полные ауксеттики (см. подраздел 1.2.2). Схематически такое деление кубических кристаллов в зависимости от величины и знака упругих безразмерных параметров Π , δ представлено на Рис.1.8а. Границы области частичных ауксетиков по параметру Π определяются неравенствами $0 < \Pi < 1$, которые есть следствие неравенств

$$0 \leq N(\varphi, \theta, \psi) \leq 1, \quad (1.31)$$

$$0 \leq M(\varphi, \theta) \leq \frac{4}{3}. \quad (1.32)$$

Среди трех углов Эйлера ψ есть угол некоторого поперечного направления продольно растягиваемого кристалла. Если вместо значения коэффициента Пуассона при фиксированном поперечном направлении рассмотреть его среднее по всем поперечным направлениям, то в силу простого результата

$$\langle N \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} N(\varphi, \theta, \psi) d\psi = \frac{1}{2} M(\varphi, \theta)$$

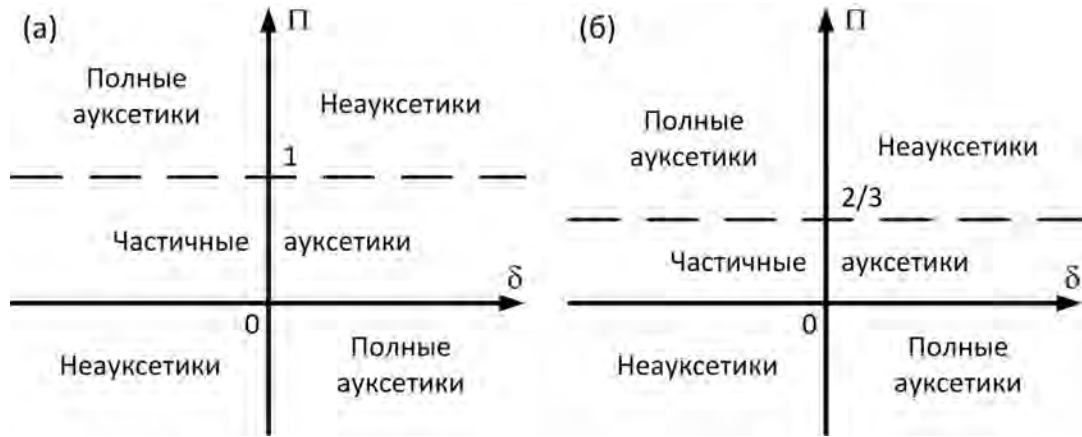


Рис. 1.8: Сравнение классификационных диаграмм для ауксетиков (а) и ауксетиков в среднем (б).

для отношения такого среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ к модулю Юнга получается соотношение, во многом аналогичное (1.29)

$$\frac{\langle \nu \rangle}{e(\varphi, \theta)} = -\frac{\delta}{2} \left[\frac{1}{2} M(\varphi, \theta) - \Pi \right]. \quad (1.33)$$

Отличие только в упрощении угловых зависимостей с заменой функции трех угловых переменных $N(\varphi, \theta, \psi)$ на функцию двух переменных $M(\varphi, \theta)/2$. В силу этого общее разбиение на три категории *ауксетиков в среднем* вполне аналогично обсуждавшемуся ранее для ауксетиков (Рис.1.8а). С учетом неравенств (1.31), (1.32) очевидна замена верхней границы по Π для *частичных в среднем ауксетиков* с $\Pi = 1$ на $\Pi = 2/3$ (Рис.1.8б). Такое сужение области *частичных в среднем ауксетиков* теперь сопровождается расширением областей *неауксетиков в среднем* и *полных в среднем ауксетиков*. На основании опубликованных в [56, 172, 175] данных не удалось обнаружить новых *полных в среднем ауксетиков* в диапазоне от $\Pi = 2/3$ до $\Pi = 1$. Вместе с тем следует отметить, что согласно некоторым экспериментальным данным из [172] кристаллы $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$ и $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ не относятся к *полным ауксетикам* (для них $\nu_{\max} = +0.004$, $\Pi = 0.987$ и $\nu_{\max} = +0.07$, $\Pi = 0.8$ соответственно). Однако все осредненные данные, как видно из Табл.1.3, характеризуют указанные кристаллы как *полные в среднем ауксетики*. При этом $\Pi < 1$ в двух обсуждаемых случаях.

Принимая во внимание формулу для модуля Юнга (1.28), соотношение для среднего коэффициента Пуассона можно переписать в виде простой линейной безразмерной связи с модулем Юнга

$$\langle \nu \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1 - \Pi\delta}{2} e(\varphi, \theta)$$

или соответственно в размерных

Таблица 1.3: Полные в среднем кубические ауксетики.

Кристаллы	δ	Π	$\langle \nu \rangle_{100}$	$\langle \nu \rangle_{110}$	$\langle \nu \rangle_{111}$
Ba	0.55	-0.176	-0.05	-0.26	-0.37
	1.05	0.737	0.39	0.26	0.125
Sm _{0.7} Y _{0.3} S	-0.86	1.369	-0.59	-0.26	-0.19
	-0.99	0.987	-0.49	-0.16	-0.10
Sm _{0.75} Y _{0.25} S	-0.70	1.656	-0.58	-0.30	-0.24
	-0.60	2.251	-0.67	-0.40	-0.34
	-1.05	0.800	-0.42	-0.10	-0.04
Sm _{0.7} La _{0.25} S [175]	-0.65	1.220	-0.40	-0.18	-0.13
Sm _{0.65} La _{0.35} S [175]	-0.05	12.800	-0.35	-0.33	-0.32
Sm _{0.75} Tm _{0.25} S [175]	-0.34	2.690	-0.46	-0.32	-0.28

$$\langle \nu \rangle = \frac{1}{2} - \frac{s_{11} + 2s_{12}}{2} E(\varphi, \theta).$$

Важно, что оба сомножителя во втором члене в правой части, как указывалось выше, являются положительными. Пользуясь двумя ограничениями на коэффициенты податливости $s_{11} > s_{12}$, $s_{11} + 2s_{12} > 0$, можно получить следующие ограничения на средний коэффициент Пуассона

$$\frac{1 - 3e(\varphi, \theta)}{2} < \langle \nu \rangle < \frac{1}{2}. \quad (1.34)$$

В силу найденной линейной связи среднего коэффициента Пуассона с модулем Юнга для кубических кристаллов они имеют одинаковые экстремальные точки, причем максимумы одного соответствуют минимумам другого. Простым анализом нулей первых производных функции $M(\varphi, \theta)$ устанавливаются экстремальные направления обеих упругих характеристик: [100], [110] и [111] - кристаллографические направления. Критические значения среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle_{100}$, $\langle \nu \rangle_{110}$, $\langle \nu \rangle_{111}$, соответствующие экстремальным точкам и точке поворота, для всех умеренных в среднем ауксетиков и полных в среднем ауксетиков указаны в Табл.1.3 и Табл.1.4. Они следующим образом выражаются через коэффициенты податливости

$$\langle \nu \rangle_{100} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad \langle \nu \rangle_{110} = \frac{\Delta + 4s_{12}}{2\Delta - 4s_{11}}, \quad (1.35)$$

$$\langle \nu \rangle_{111} = \frac{\Delta + 3s_{12}}{2\Delta - 3s_{11}} = -1 + \frac{3s_{44}}{2(s_{11} + 2s_{12} + s_{44})}. \quad (1.36)$$

Средний коэффициент Пуассона, выраженный через функцию $M(\varphi, \theta)$, имеет вид

$$\langle \nu \rangle = \frac{1}{2} \frac{2\Pi\delta - M(\varphi, \theta)\delta}{2 - M(\varphi, \theta)\delta}. \quad (1.37)$$

Таблица 1.4: Список частичных в среднем кубических ауксетиков ($0 < \Pi < 2/3$).

Кристаллы	δ	Π	$\langle \nu \rangle_{100}$	$\langle \nu \rangle_{110}$	$\langle \nu \rangle_{111}$
UTe	-4.99	0.006	-0.01	0.35	0.38
GeTe-SnTe	-3.16	0.007	-0.01	0.30	0.34
ReO ₃	-2.94	0.010	-0.01	0.29	0.33
	-3.19	-0.007	0.01	0.31	0.34
SmB ₆	-1.68	0.020	-0.02	0.22	0.26
USe	-7.04	0.023	-0.08	0.37	0.40
	-2.06	0	0	0.36	0.39
USb	-4.50	0.024	-0.05	0.33	0.36
	-4.39	-0.025	0.05	0.36	0.39
	-2.95	-0.028	0.04	0.31	0.35
Sm _{0.85} Tm _{0.15} S	-1.06	0.050	-0.03	0.15	0.19
SnTe	-3.06	0.058	-0.09	0.27	0.31
Sm _{0.90} La _{0.10} S	-1.71	0.179	-0.15	0.15	0.19
FeS ₂	-0.84	0.289	-0.12	0.06	0.10
	-0.60	-0.287	0.09	0.18	0.20
Tm _{0.99} Se	-1.79	0.520	-0.47	-0.01	0.06
TmSe	-1.75	0.620	-0.54	-0.06	0.02
Mn _{85.3} Ni _{8.8} C _{5.9}	1.34	0.664	0.44	0.33	-0.01
InTl (27at%Tl, 125 K) [56]	1.50	0.666	0.499	0.497	-0.23

В свою очередь, из этой формулы следует обратное соотношение

$$M(\varphi, \theta) = \frac{2\Pi\delta - 2\langle \nu \rangle}{\delta(1 - 2\langle \nu \rangle)}.$$

Благодаря ограничению (1.32) на функцию $M(\varphi, \theta)$ отсюда находятся неравенства для средних коэффициентов Пуассона, дополняющие неравенства (1.34),

$$\begin{aligned} \langle \nu \rangle_{111} < \langle \nu \rangle < 0.5 & \quad (\Delta > 0), \\ -1 < \langle \nu \rangle < \langle \nu \rangle_{111} & \quad (\Delta < 0). \end{aligned}$$

Положительность слагаемого в правой части выражения (1.36), обязанная неравенствам $s_{11} + 2s_{12} > 0$, $s_{44} > 0$, позволяет написать с учетом (1.34) более грубые ограничения, не зависящие от конкретных величин коэффициентов податливости и совпадающие по общему виду с известными ограничениями на коэффициент Пуассона изотропной среды,

$$-1 < \langle \nu \rangle < 0.5.$$

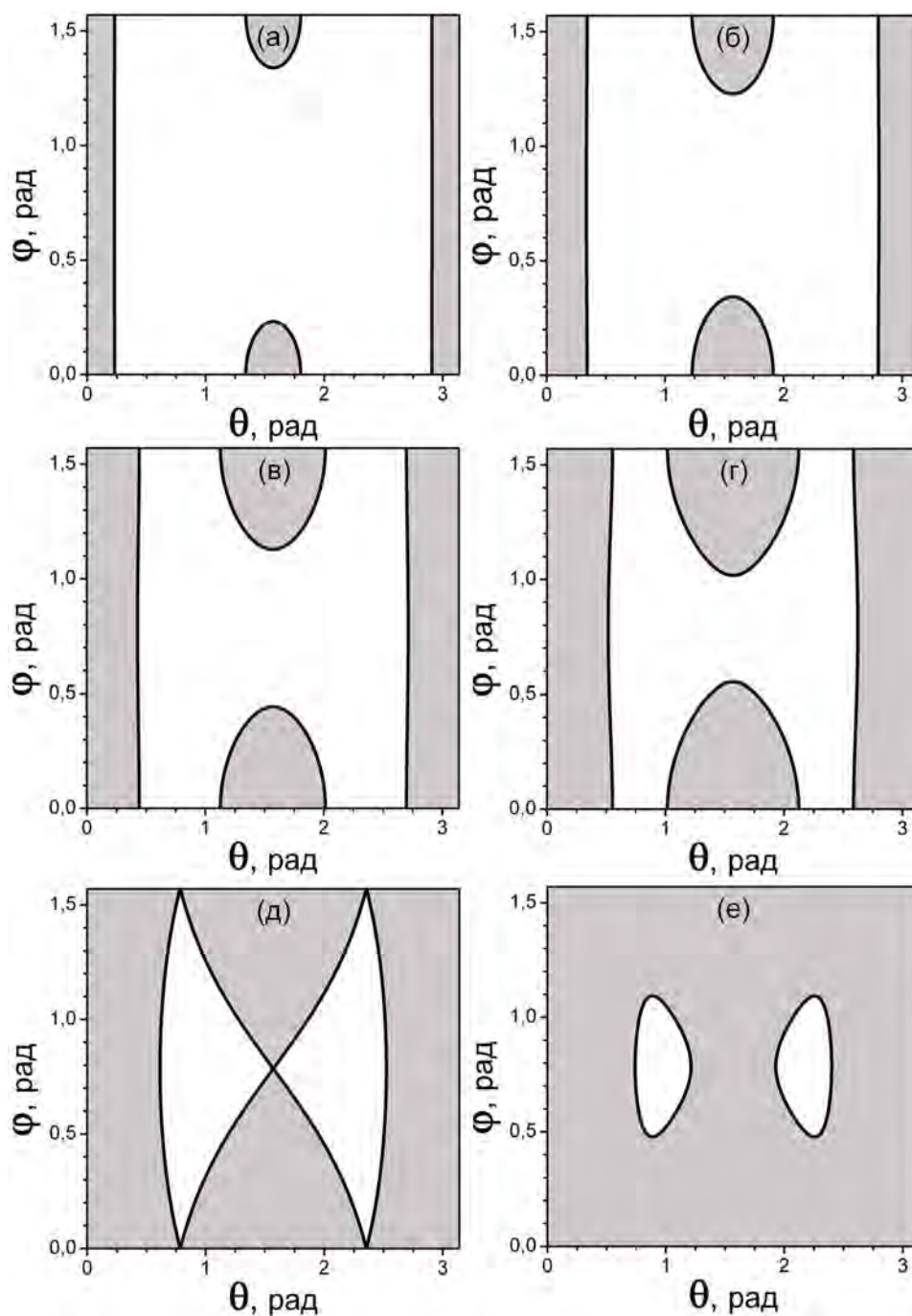


Рис. 1.9: Угловые области с отрицательными и положительными средними коэффициентами Пуассона и разделяющие их кривые $M(\varphi, \theta) = 2\Pi$ при шести различных значениях Π : 0.1 (а), 0.2 (б), 0.3 (в), 0.4 (г), 0.5 (д), 0.6 (е). Затенены области с $\delta < 0$.

В Табл.1.3 и Табл.1.4 приведены списки ауксетиков в среднем, найденных с помощью экспериментальных данных по упругим свойствам кубических кристаллов, собранных в [56, 172, 175]. Среди них обнаружено 14 умеренных в среднем (Табл.1.4) и 6 полных в среднем ауксетиков (Табл.1.3). Безразмерный модуль Юнга, как ясно уже из формулы (1.28), определяется одним безразмерным матери-

альным параметром δ , в то время как средний коэффициент Пуассона зависит от двух безразмерных материальных параметров Π , δ (см. (1.33) или (1.37)), составленных из трех коэффициентов податливости кубических кристаллов. Последнее находит отражение в Табл.1.3 и Табл.1.4 в полном соответствии с классификационными диаграммами Рис.1.8. Для пяти полных в среднем ауксетиков в Табл.1.3 имеет место $\delta < 0$, $\Pi > 2/3$, и только для бария обнаружена противоположная ситуация $\delta > 0$, $\Pi < 0$. Для большинства частичных в среднем ауксетиков (для двенадцати) в Табл.1.4 найдено также $\delta < 0$ (при этом $0 < \Pi < 2/3$), и только для двух кристаллов $\delta > 0$, а $\Pi \approx 2/3$.

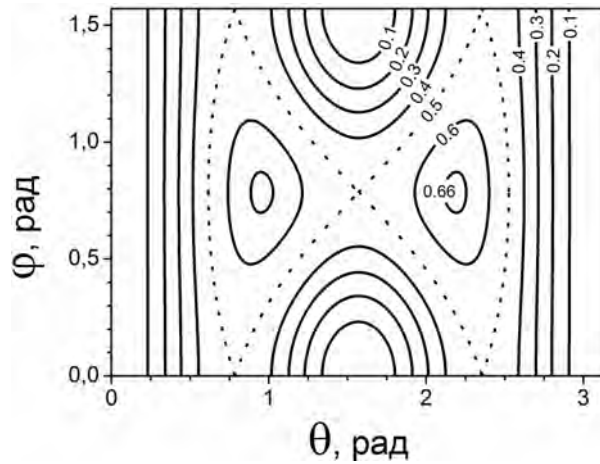


Рис. 1.10: Кривые $M(\varphi, \theta) = 2\Pi$, соответствующие границам раздела $\langle \nu \rangle = 0$ для умеренных в среднем ауксетиков, при различных значениях безразмерного упругого параметра Π : 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.66.

Частичные в среднем ауксетики характеризуются чередованием угловых областей с отрицательными и положительными значениями среднего коэффициента Пуассона. При этом упругий безразмерный параметр может принимать значения из интервала $0 < \Pi < 2/3$. Характер изменений этих областей и границ между ними отражен на Рис.1.9. На этом рисунке в угловом квадрате с размерами, соответствующими периодам $T_\varphi = \pi/2$, $T_\theta = \pi$ периодической функции $M(\varphi, \theta)$, построены при различных значениях упругого параметра Π граничные кривые $\langle \nu \rangle = 0$. На Рис.1.9 от (а) до (е) значения этого параметра изменяются через 0.1. Затененные области соответствуют областям с отрицательным коэффициентом Пуассона при $\delta < 0$. При $\delta > 0$ имеет место обратная ситуация. Все граничные кривые с $\langle \nu \rangle = 0$, отраженные на Рис.1.9, сведены вместе на Рис.1.10, делающем особенно наглядным изменение характера границ раздела при изменении величины параметра Π . Как видно из этих рисунков существует критическое значение безразмерного упругого параметра

$$\Pi_{cr} = 0.5, \tag{1.38}$$

при котором происходит перестройка граничных кривых открытого типа на замкнутый. Такое критическое значение меньше аналогичного критического значения $P_{cr} \approx 0.75$ для частичных ауксетиков без осреднения (см. подраздел 1.2.2).

1.2.4. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов [12]

Упругие свойства кубических кристаллов. В случае кубической симметрии число независимых упругих констант понижается до трех, s_{11} , s_{12} и s_{44} , которые связаны с техническими модулями упругости простыми соотношениями

$$E_0 = E_{[001]} = \frac{1}{s_{11}}, \quad \nu_0 = \nu_{[100],[001]} = -\frac{s_{12}}{s_{11}},$$

где E_0 , ν_0 – соответственно модуль Юнга, коэффициент Пуассона в кристаллографической системе координат $\langle 001 \rangle$. На величины упругих констант накладываются следующие термодинамические ограничения $s_{11} > 0$, $-1/2 < s_{12}/s_{11} < 1$, $s_{44} > 0$. Из второго ограничения следует допустимый интервал изменения коэффициента Пуассона ν_0 : $-1 < \nu_0 < 0.5$. Для описания анизотропии упругих свойств кубических кристаллов далее будем использовать безразмерный параметр $\delta = \Delta/s_{11}$, где $\Delta = s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}$. Условие $\delta > 0$ соответствует положительной упругой анизотропии, при которой $E_{[111]} > E_{[011]} > E_{[001]}$, при $\delta = 0$ материал изотропен, $E_{[111]} = E_{[011]} = E_{[001]}$, а при $\delta < 0$ анизотропия отрицательна и $E_{[111]} < E_{[011]} < E_{[001]}$ [176].

Условия отрицательности коэффициента Пуассона. Коэффициент Пуассона определяется соотношением

$$\nu_{yx} = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x}$$

где ε_x и ε_y – соответственно упругие деформации в направлении нагружения \mathbf{x} и поперечном направлении \mathbf{y} . Из закона Гука следует

$$\nu_{yx} = -\frac{s_{yyxx}}{s_{xxxx}}, \tag{1.39}$$

где s_{xxxx} и s_{yyxx} – компоненты тензора коэффициентов податливости в лабораторной системе координат xyz . Для кубического кристалла

$$s_{yyxx} = s_{12} + \Delta D(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \tag{1.40}$$

$$s_{xxxx} = s_{11} - 2\Delta P(\mathbf{x}). \tag{1.41}$$

Учитывая (1.39) – (1.41), выражение для коэффициента Пуассона можно записать в виде

$$\nu_{yx} = -\frac{s_{12} + \Delta D(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{s_{11} - 2\Delta P(\mathbf{x})}, \quad (1.42)$$

где $D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = x_1^2 y_1^2 + x_2^2 y_2^2 + x_3^2 y_3^2$ и $P(\mathbf{x}) = x_1^2 x_2^2 + x_2^2 x_3^2 + x_3^2 x_1^2$ - ориентационные функции направляющих косинусов $x_1 \dots x_3, y_1 \dots y_3$ углов между направлениями нагружения \mathbf{x} и поперечной деформации \mathbf{y} с кристаллографическими осями $\langle 001 \rangle$. Ориентационная функция $D(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ изменяется в пределах $0 \leq D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 1/2$, принимая минимальное значение 0 и максимальное значение $1/2$ соответственно при \mathbf{x} и \mathbf{y} совпадающими с взаимноперпендикулярными кубическими осями $\langle 001 \rangle$, и \mathbf{x} и \mathbf{y} совпадающими с взаимноперпендикулярными диагоналями элементарной кубической ячейки $\langle 011 \rangle$. Ориентационная функция $P(\mathbf{x})$ изменяется в интервале $0 \leq P(\mathbf{x}) \leq 1/3$ и принимает минимальное значение 0 и максимальное значение $1/3$ соответственно при \mathbf{x} совпадающим с $\langle 001 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Из (1.42) следует, что значение ν_{yx} изменяется в зависимости от ориентации осей \mathbf{x}, \mathbf{y} . При этом экстремальные значения коэффициента Пуассона, ν_{\max} и ν_{\min} , определяются упругими константами кристалла.

Знаки коэффициентов Пуассона ν_{\max} и ν_{\min} , могут быть определены из следующих соображений. Так как знаменатель в (1.39), являющийся величиной обратной модулю Юнга в направлении \mathbf{x} , $s_{xxxx} = E_x^{-1}$ всегда положителен, то знак коэффициента Пуассона ν_{yx} определяется знаком числителя s_{yyxx} , то есть $\nu_{yx} \geq 0$, если $s_{yyxx} \leq 0$, в противном случае ν_{yx} отрицателен.

Согласно (1.40) имеем $s_{yyxx} \leq 0$, если выполняются неравенство

$$s_{yyxx} = s_{12}(1 - 2D) + (s_{11} + s_{12} - s_{44}/2)D \leq 0. \quad (1.43)$$

Так как оба сомножителя в (1.43), $(1 - 2D)$ и D , неотрицательны ($0 \leq D \leq 1/2$ и $1 \geq (1 - D) \geq 0$), то кристалл всегда имеет неотрицательные значения коэффициента Пуассона ($s_{yyxx} \leq 0$) при любой ориентации \mathbf{x}, \mathbf{y} если

$$s_{12} \leq 0, \quad s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 \leq 0. \quad (1.44)$$

Такие материалы называются неауксетиками. Если имеют место обратные неравенства $s_{12} > 0, s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 > 0$, то при любой ориентации \mathbf{x}, \mathbf{y} кристалл является полным ауксетиком ($s_{yyxx} > 0$). В случае если знаки неравенства противоположны ($s_{12} < 0, s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 > 0$ или $s_{12} > 0, s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 < 0$), то кристалл является частичным ауксетиком.

Выражение для коэффициента Пуассона (1.42) имеет наиболее простой вид в переменных $\nu \equiv \nu_{yx}, \nu_0$ и δ

$$\nu = \frac{\nu_0 - \delta D(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{1 - 2\delta P(\mathbf{x})}. \quad (1.45)$$

При таком выборе переменных условия неауксетичности (1.44) могут быть записаны в виде

$$\nu_0 \geq 0, \quad \nu_0 \geq 0.5\delta. \quad (1.46)$$

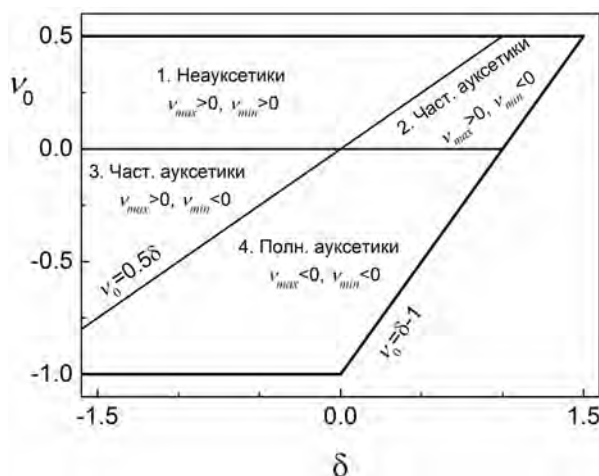


Рис. 1.11: Классификационная диаграмма кубических кристаллов $\delta - \nu_0$. Внешняя жирная линия на диаграмме ограничивает область возможных значений $-1 < \nu_0 < 0.5$ и $\delta < \nu_0 + 1$. Линии $\nu_0 = 0$ и $\nu_0 = 0.5\delta$ разделяют области различного характера ауксетичности.

Исходя из условий (1.46) может быть представлена классификационная диаграмма кубических кристаллов в координатах $\delta - \nu_0$ (Рис.1.11). Внешняя жирная линия на диаграмме ограничивает область возможных значений $-1 < \nu_0 < 0.5$ и $\delta < \nu_0 + 1$. Последнее условие следует из определения δ и условий положительности модулей податливости s_{11} и s_{44} . На диаграмме имеются четыре области, разделенные двумя линиями, описываемыми уравнениями $\nu_0 = 0$ и $\nu_0 = 0.5\delta$. В области 1, где выполняются условия $\nu_0 > 0$ и $\nu_0 > 0.5\delta$, кристалл является неауксетиком, т.е. максимальное и минимальное значения коэффициента Пуассона положительны. В областях 2 и 3, где соответственно $0 < \nu_0 < 0.5\delta$ и $0.5\delta < \nu_0 < 0$, кристалл является частичным ауксетиком, т.е. экстремальные значения коэффициента Пуассона имеют разный знак. В области 4 ($\nu_0 < 0$ и $\nu_0 < 0.5\delta$) кристалл является полным ауксетиком, т.е. оба экстремальных значения коэффициента Пуассона отрицательны.

Анализ экстремальных значений коэффициента Пуассона. Из анализа зависимости коэффициента Пуассона (1.45) следует, что для подавляющего большинства возможных \mathbf{x} , \mathbf{y} экстремальные значения коэффициента Пуассона достигаются при трех стандартных ориентациях:

- 1) Случай 0. Направления \mathbf{x} и \mathbf{y} совпадают с взаимноперпендикулярными осями $\langle 001 \rangle$. Экстремум - ν_0 .
- 2) Случай 1. Направление \mathbf{x} совпадает с диагональю элементарного куба типа $\langle 011 \rangle$, а \mathbf{y} с перпендикулярной диагональю $\langle 01\bar{1} \rangle$. Экстремум - $\nu_{01\bar{1}} \equiv \nu_{[01\bar{1}], [011]}$.
- 3) Случай 2. Направление \mathbf{x} совпадает с $\langle 011 \rangle$, а \mathbf{y} с перпендикулярным кубическим направлением $\langle 100 \rangle$. Экстремум - $\nu_{100} \equiv \nu_{[100], [011]}$.

Из формулы (1.45) для случаев 1 и 2 имеем

$$\nu_{01\bar{1}} = \frac{\nu_0 - \delta/2}{1 - \delta/2}, \quad (1.47)$$

$$\nu_{100} = \frac{\nu_0}{1 - \delta/2}. \quad (1.48)$$

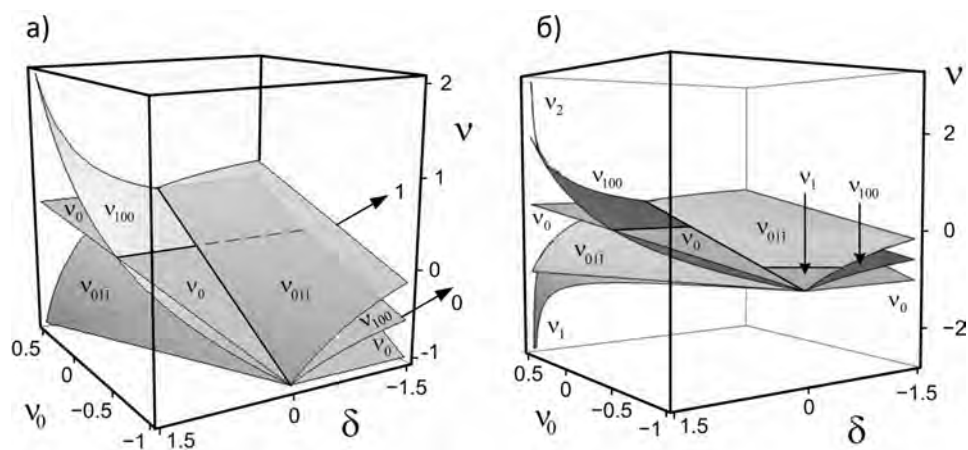


Рис. 1.12: Изменение экстремальных значений коэффициента Пуассона в зависимости от ν_0 и δ : (а) – стандартные экстремумы ν_0 , $\nu_{01\bar{1}}$, ν_{100} , (б) – стандартные и специальные экстремумы ν_1 , ν_2 .

Графики изменения значений стандартных (основных) экстремумов ν_0 , $\nu_{01\bar{1}}$, ν_{100} в зависимости от δ и ν_0 представлены на Рис.1.12а. Стрелками показаны предельные значения $\nu_{01\bar{1}} \rightarrow 1$ и $\nu_{100} \rightarrow 0$ при $\delta \rightarrow -\infty$.

Из (1.47) и (1.48), а также Рис.1.12, следует, что стандартные экстремумы ν_0 , $\nu_{01\bar{1}}$, ν_{100} являются максимумами или минимумами при следующих условиях:

- 1) $\nu_{01\bar{1}}$ - максимум при $\delta < 0$ и минимум при $\delta > 0$ (независимо от ν_0);
- 2) если $\nu_0 > 0$, то ν_{100} - минимум при $\delta < 0$ и максимум при $\delta > 0$;
- 3) если $\nu_0 < 0$, то ν_0 - минимум при $\delta < 0$ и максимум при $\delta > 0$;
- 4) при $\delta = 0$ имеем случай изотропии, т.е. все коэффициенты Пуассона равны ($\nu_{01\bar{1}} = \nu_{100} = \nu_0$).

Таблица 1.5: Изменение стандартных экстремумов коэффициента Пуассона в зависимости от знака ν_0 и δ .

		$\delta < 0$	$\delta > 0$
$\nu_0 > 0$	max	$\nu_{01\bar{1}}$	ν_{100}
	min	ν_{100}	$\nu_{01\bar{1}}$
$\nu_0 < 0$	max	$\nu_{01\bar{1}}$	ν_0
	min	ν_0	$\nu_{01\bar{1}}$

Данные условия для наглядности представлены в Табл.1.5.

В работе [59] методом множителей Лагранжа было показано, что помимо вышеуказанных стандартных случаев (0, 1, 2), когда оси \mathbf{x} , \mathbf{y} совпадают с $\langle 001 \rangle$ или $\langle 011 \rangle$, экстремальные значения коэффициента Пуассона могут также наблюдаться при специальных ориентациях, когда индексы осей \mathbf{x} , \mathbf{y} не являются целыми числами. Так при положительном δ экстремальное значение коэффициента Пуассона может в определенных условиях достигаться путем минимизации знаменателя выражения (1.45). Этот эффект наиболее ярко выражен вблизи угла ($\delta = 1.5, \nu_0 = 0.5$) стремится к нулю при $\delta \rightarrow 1.5$ и $P(\mathbf{x}) \rightarrow 1/3$, т.е. к предельному значению $P(\mathbf{x})$ при $\mathbf{x} = \langle 111 \rangle$. Физически это означает, что модуль Юнга в направлении $\langle 111 \rangle$ $E_{[111]} = [s_{11}(1 - 2\delta/3)]^{-1}$ стремится к бесконечности. Следует отметить, что при приближении к углу диаграммы ($\delta = 1.5, \nu_0 = 0.5$), т.е. при $\delta \rightarrow 1.5$ и $\nu_0 \rightarrow 0.5$ числитель в (1.45) также стремится к нулю, поскольку $D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1/3$ при $\mathbf{x} = \langle 111 \rangle$. Рассмотрение данного предельного случая, однако, показывает, что знаменатель стремится к нулю быстрее числителя и поэтому экстремальные значения коэффициента Пуассона (минимальное и максимальное) соответственно стремятся к $-\infty$ и $+\infty$.

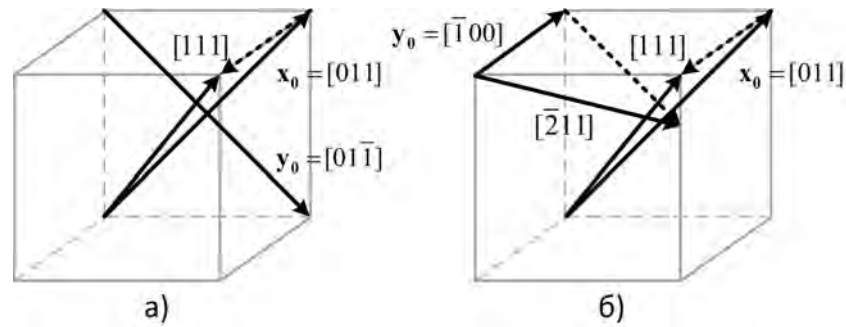


Рис. 1.13: Отклонение \mathbf{x} , \mathbf{y} от стандартных экстремальных ориентаций $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 01\bar{1} \rangle$ – Случай 1' (а) и $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 100 \rangle$ – Случай 2' (б) в специальных случаях при $\mathbf{x} \rightarrow \langle 111 \rangle$.

Достижение специальных экстремумов коэффициента Пуассона при отклонении \mathbf{x} , \mathbf{y} от стандартных экстремальных ориентаций $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 01\bar{1} \rangle$ и $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 100 \rangle$ достигается путем поворота направления \mathbf{x} : $\mathbf{x} \rightarrow \langle 111 \rangle$. Следует отметить, что при повороте $\mathbf{x} \rightarrow \langle 111 \rangle$, во втором случае, \mathbf{y} также должно отклоняться от первоначальной ориентации $\mathbf{y}_0 = \langle 01\bar{1} \rangle$ для обеспечения условия $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$, тогда как в первом случае этого не требуется. Согласно [59] отклонения \mathbf{x} , \mathbf{y} от основных экстремальных ориентаций происходят следующим образом (см. Рис.1.13)

Случай 1' (Рис.1.13а): $\mathbf{x}: [011] \rightarrow [p11] \rightarrow [111]$ $\mathbf{y}: [01\bar{1}] = \text{const}$ при $0 \leq p \leq 1$;

Случай 2' (Рис.1.13б): $\mathbf{x}: [011] \rightarrow [p11] \rightarrow [111]$ $\mathbf{y}: [\bar{1}00] \rightarrow [\bar{2}pp] \rightarrow [\bar{2}11]$ при $0 \leq p \leq 1$.

Случай 1'.

При отклонении \mathbf{x} , \mathbf{y} от $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 01\bar{1} \rangle$ изменение ориентационных функций D и P описываются следующими выражениями

$$D = \frac{1}{p^2 + 2}, \quad P = \frac{2p^2 + 1}{(p^2 + 2)^2}.$$

Подставляя эти функции в (1.45), получаем

$$\nu_1(p) = \frac{\nu_0 - \delta / (p^2 + 2)}{1 - 2\delta(2p^2 + 1) / (p^2 + 2)}. \quad (1.49)$$

При исследовании специальных экстремумов удобно воспользоваться подстановкой $\xi = p^2 + 2$, где ξ изменяется от 2 до 3. После такой подстановки формула для коэффициента Пуассона (1.49) принимает вид

$$\nu_1(\xi) = \frac{(\nu_0\xi - \delta)\xi}{A}, \quad (1.50)$$

$$A = \xi^2 - 4\delta\xi + 6\delta. \quad (1.51)$$

Следует отметить, что $A > 0$ для всех допустимых значений $\delta < 1.5$ и $2 \leq \xi \leq 3$.

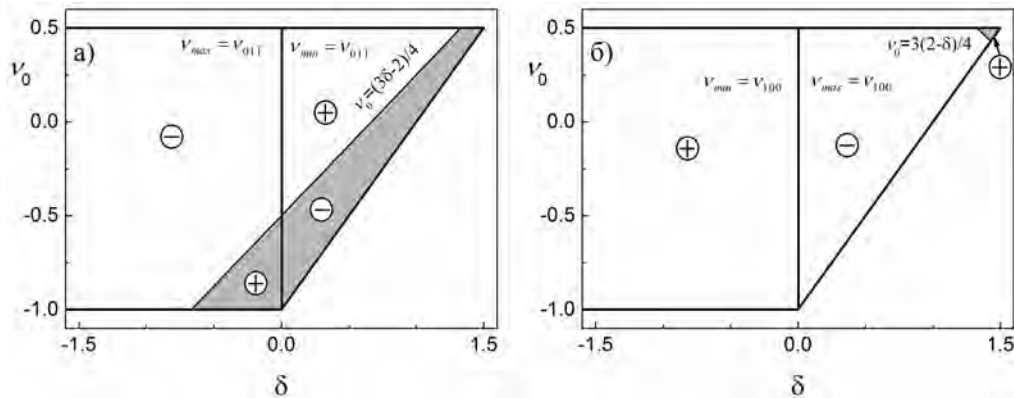


Рис. 1.14: Области положительных (помечены знаком плюс) и отрицательных (помечены знаком минус) значений производных $dv_1(\xi)/d\xi$ ($\xi = 2$) (а) и $dv_2(\xi)/d\xi$ ($\xi = 2$) (б). Области, в которых происходит отклонение от стандартных экстремальных ориентаций, закрашены серым цветом. Коэффициент Пуассона $\nu_{01\bar{1}}$ является стандартным максимумом при $\delta < 0$ и минимумом при $\delta > 0$ (независимо от ν_0); ν_{100} является стандартным экстремумом при $\nu_0 > 0$, минимумом при $\delta < 0$ и максимумом при $\delta > 0$.

Для того чтобы отклонение $\mathbf{x} \rightarrow \langle 111 \rangle$ усиливало экстремум, т.е. смещало максимум в положительную сторону либо минимум в отрицательную, значение производной $dv_1(\xi)/d\xi$ при $\xi = 2$ ($p = 0$) должно быть положительным если $\nu_{01\bar{1}}$ является стандартным максимумом или отрицательным если $\nu_{01\bar{1}}$ является стандартным минимумом. Рис.1.14 представляет диаграмму $\delta - \nu_0$ с указанием областей экстремальности $\nu_{01\bar{1}}$ и областей положительных и отрицательных значений

$d\nu_1(\xi)/d\xi(\xi = 2)$. Границы областей, где $d\nu_1(\xi)/d\xi(\xi = 2)$ изменяет знак, определяются соотношениями $\delta = 0$ и $\nu_0 = (3\delta - 2)/4$, следующими из условия $d\nu_1/d\xi = 0$ при $\xi = 2$.

Знак плюс на Рис.1.14а соответствует положительному значению $d\nu_1(\xi)/d\xi(\xi = 2)$, знак минус - отрицательному. Как было показано выше (Табл.1.5), $\nu_{01\bar{1}}$ является стандартным экстремумом при всех допустимых значениях ν_0 : максимумом при $\delta < 0$ и минимумом при $\delta > 0$. Из Рис.1.14а следует, что сформулированное выше условие отклонения ориентации выполняется при (δ, ν_0) , лежащих ниже линии $\nu_0 = (3\delta - 2)/4$, т.е. при $\nu_0 < (3\delta - 2)/4$. При этом в части этой области, расположенной слева от вертикальной линии $\delta = 0$, $d\nu_1(\xi)/d\xi(\xi = 2) > 0$ повышает стандартный максимум $\nu_{01\bar{1}}$, тогда как в другой части, расположенной справа от вертикальной линии $\delta = 0$, $d\nu_1(\xi)/d\xi(\xi = 2) < 0$ понижает стандартный минимум $\nu_{01\bar{1}}$.

Значение ξ , соответствующее экстремуму функции $\nu_1(\xi)$, следует из условия $d\nu_1(\xi)/d\xi = 0$ и имеет вид

$$\xi = \frac{-\nu_0 + \sqrt{\nu_0^2 + \delta(1/6 - 2\nu_0/3)}}{1/6 - 2\nu_0/3}. \quad (1.52)$$

Данное выражение является решением квадратного алгебраического уравнения. Выбор предкорневого знака плюс следует из условия $\xi \leq 3$ ($p \leq 1$).

Следует отметить, что в специальном случае, при $\nu_0 = 0.25$, квадратное уравнение вырождается в линейное и поэтому ξ определяется соотношением $\xi = \delta/(2\nu_0)$.
Случай 2'.

При отклонении \mathbf{x} , \mathbf{y} от $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 100 \rangle$ изменение ориентационных функций D и P описываются выражениями

$$D = \frac{3p^2}{(p^2 + 2)^2}, \quad P = \frac{2p^2 + 1}{(p^2 + 2)^2}.$$

Подставляя эти функции в (1.45), имеем

$$\nu_2(p) = \frac{\nu_0 - 3\delta p^2/(p^2 + 2)}{1 - 2\delta(2p^2 + 1)/(p^2 + 2)}.$$

Данное выражение можно также записать через ξ и A

$$\nu_2(\xi) = \frac{\nu_0 \xi^2 - 3\delta \xi + 6\delta}{A}, \quad (1.53)$$

где A определяется соотношением (1.51).

Как и в случае 1', отклонение $\mathbf{x} \rightarrow \langle 111 \rangle$ происходит если значение производной $d\nu_2(\xi)/d\xi$ при $\xi = 2$ ($p = 0$) положительно, а ν_{100} является стандартным максимумом, либо если $d\nu_2(\xi)/d\xi(\xi = 2)$ отрицательно, а ν_{100} является стандартным минимумом. Рис.1.14б представляет диаграмму $\delta - \nu_0$ с указанием областей экстремальности ν_{100} и областей положительных и отрицательных значений $d\nu_2(\xi)/d\xi(\xi = 2)$.

Границы областей, где $dv_2(\xi)/d\xi(\xi = 2)$ изменяет знак, определяются соотношениями $\delta = 0$ и $\nu_0 = 3(2 - \delta)/4$, следующими из условия $dv_2(\xi = 2)/d\xi = 0$. Как было показано выше (см. Табл.1.5), ν_{100} является стандартным экстремумом при $\nu_0 > 0$, а именно, минимумом при $\delta < 0$ и максимумом при $\delta > 0$.

Из Рис.1.14б видно, что условие отклонения удовлетворяется только в небольшой области вблизи угла ($\delta = 1.5, \nu_0 = 0.5$) при выполнении условия $\nu_0 > 3(2 - \delta)/4$. Значение ξ , соответствующее максимуму функции $\nu_2(\xi)$, следует из условия $dv_2(\xi)/d\xi = 0$ и имеет вид

$$\xi = \frac{1 - \nu_0 - \sqrt{(1 - \nu_0)^2 - \delta(1/2 - 2\nu_0/3)}}{1/2 - 2\nu_0/3}. \quad (1.54)$$

Данное выражение является решением квадратного алгебраического уравнения. Выбор предкорневого знака минус следует из условия $\xi \leq 3$ ($p \leq 1$).

Подытоживая проведенный выше анализ, можно сформулировать алгоритм расчета экстремальных значений коэффициента Пуассона кубического кристалла, при известных упругих константах s_{11} , s_{12} и s_{44} .

Алгоритм. По известным величинам s_{11} , s_{12} и s_{44} рассчитать δ и ν_0 . Проверить выполнение условий отклонения ориентаций $\nu_0 < (3\delta - 2)/4$ или $\nu_0 > (3\delta - 2)/4$. Если выполняется $\nu_0 < (3\delta - 2)/4$, то ν_1 , рассчитанное по соотношениям (1.52) при $\nu_0 \neq 0.25$, или $\xi = \delta/2\nu_0$ при $\nu_0 = 0.25$, и (1.50), является одним из экстремумов, максимумом при $\delta < 0$ и минимумом при $\delta > 0$. Если же выполняется $\nu_0 > (3\delta - 2)/4$, то ν_2 , рассчитанное по соотношениям (1.53) и (1.54) является максимумом. Во всех остальных случаях экстремумами являются ν_0 , $\nu_{01\bar{1}}$ или ν_{100} , максимумами или минимумами в зависимости от знаков ν_0 и δ (Табл.1.5).

Следует отметить, что подкоренное выражение в (1.52) может быть отрицательно, но в области специальных значений δ и ν_0 , соответствующей экстремуму ν_1 , оно положительно. Подкоренное выражение в (1.54) положительно для всех допустимых значений δ и ν_0 .

Рис.1.12б представляет рассчитанное по вышеуказанному алгоритму изменение абсолютных экстремумов коэффициента Пуассона кубических кристаллов в зависимости от значений ν_0 и δ . Видно, что при приближении к углу ($\delta = 1.5, \nu_0 = 0.5$) диаграммы $\delta - \nu_0$ коэффициенты Пуассона $\nu_{01\bar{1}}$ и ν_{100} проявляют сингулярность, $\nu_{01\bar{1}} \rightarrow -\infty$ и $\nu_{100} \rightarrow +\infty$, вследствие отклонений от стандартных экстремальных ориентаций, $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 01\bar{1} \rangle$ и $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 100 \rangle$. При этом отклонение от первой ориентации, $\mathbf{x}_0 = \langle 011 \rangle$, $\mathbf{y}_0 = \langle 01\bar{1} \rangle$, также понижает ν_1 ниже стандартного минимума $\nu_{01\bar{1}}$ в области прилегающей к границе $\nu_0 = \delta - 1$ диаграммы $\nu_0 - \delta$. Кроме того, данное отклонение повышает ν_1 выше стандартного максимума $\nu_{01\bar{1}}$ в области отрицательных значений ν_0 и δ , прилегающих к углу ($\nu_0 = -1, \delta = 0$) диаграммы $\nu_0 - \delta$. Однако численный анализ показывает, что данное превышение очень мало, разность $\Delta\nu = \nu_1 - \nu_{01\bar{1}}$ не превышает $4 \cdot 10^{-3}$.

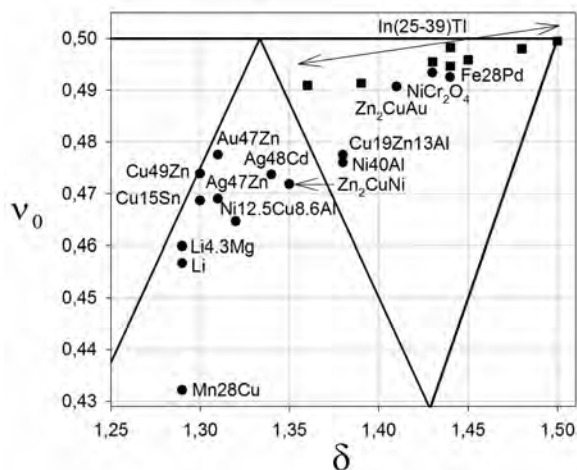


Рис. 1.15: Верхняя правая часть диаграммы $\delta - \nu_0$. Показаны типичные вещества, попадающие в области специальных экстремумов коэффициента Пуассона, случаи 1 и 2. Значения (δ, ν_0) для сплавов системы In-Tl показаны квадратными точками, для остальных – круглыми.

Экстремальные значения коэффициентов Пуассона известных кубических кристаллов. Используя полученные аналитические соотношения, были рассчитаны экстремальные значения коэффициентов Пуассона для большого числа известных кубических кристаллов (около 400 данных из справочника [172]). Только 15% из них попали в область особых значений δ и ν_0 , соответствующую случаю 1, и 4% - в спецобласть, соответствующую случаю 2. Результаты расчета для данных кристаллов представлены численно в Табл.П.10 на стр.325 и графически на Рис.1.15. Из таблицы и диаграммы $\delta - \nu_0$ видно, что величины абсолютных экстремумов $\nu_{\min} = \nu_1$ и $\nu_{\max} = \nu_2$ могут значительно отличаться от соответствующих стандартных экстремумов $\nu_{01\bar{1}}$ и ν_{100} , и это различие увеличивается по мере приближения значений (δ, ν_0) к углу диаграммы ($\delta = 1.5, \nu_0 = 0.5$). Наибольшие отклонения наблюдаются для сплавов системы In-Tl, значения (δ, ν_0) которой тем ближе к $(1.5, 0.5)$ чем ближе состав сплава к стехиометрическому In_3Tl , а температура к критической 125 К. При этом $\nu_{\min} = \nu_1$ может принимать значения меньше -1 , являющегося минимумом стандартного экстремума $\nu_{01\bar{1}}$, а $\nu_{\max} = \nu_2$ больше $+2$, являющегося максимумом стандартного экстремума ν_{100} . Следует отметить, что значение $\delta = 1.50$ для In_{27}Tl , измеренное при 125 К, уже выходит за пределы допустимых значений для кубических кристаллов ($\delta < 1.5$) и поэтому экстремальные значения коэффициента Пуассона для этого сплава не могут быть рассчитаны.

Примечательно, что из большого разнообразия рассмотренных кубических кристаллов (чистые металлы, сплавы металлов, соли, окислы, сульфиды, бориды и др.), за исключением шпинели NiCr_2O_4 , все эти кристаллы являются сплавами металлов, твердыми растворами или интерметаллидами с однофазной или двухфазной структурой.

Например, Li и его сплавы с Mg являются однофазными ОЦК твердыми растворами кристаллами в широком интервале концентраций Mg, от 0 до 75.5 % ат. [177]. Сплавы Cu-Zn, в интервале концентраций Zn 35-55 % ат., являются двухфазными сплавами (латунями) со структурой α/β , где α -фаза имеет ГЦК решетку, а β -ОЦК. При этом ОЦК решетка β -фазы имеет ориентацию, отличную от ГЦК решетки, определяемую ориентационными соотношениями Курдюмова-Закса [178]. Таким образом, данные двухфазные кристаллы, хотя и классифицированы в [172] как кубические, строго говоря, таковыми не являются. Сплав AgCd является интерметаллидом с кубической кристаллической структурой типа CsCl.

Характерно, что многие из кристаллов, представленных в Табл.П.10, являются материалами с эффектом памяти формы, обусловленным мартенситным превращением кристаллической решетки. Сплавы такого типа наблюдаются для систем Ni-Al [179], Cu-Zn [180], Cu-Zn-Ni [181], Cu-Zn-Al [182] и др. Причем, кристаллы, чьи значения (δ, ν_0) расположены вблизи угла диаграммы $\delta - \nu_0$ ($\delta = 1.5, \nu_0 = 0.5$), см. Рис.1.15, являются исключительно такими материалами. Например, интерметаллид Zn_2CuAl относится к сплавам Гейслера со стехиометрией X_2YZ и является магнитным сплавом с памятью формы [183]. Шпинель $NiCr_2O_4$ является кристаллом, решетка которого скачкообразно превращается из тетрагональной в кубическую при температуре 47°C [184]. Сплавы Fe-Pd также являются магнитными материалами с памятью формы [185]. Сплавы In-Tl являются классическими материалами с памятью формы [186], причем значения (δ, ν_0) сплава In27Tl, измеренные при температуре 125 K, равны $\delta = 1.50$ и $\nu_0 = 0.4995$, т.е. находятся в самом углу диаграммы $\delta - \nu_0$.

Характерной особенностью материалов с памятью формы является неустойчивое метастабильное состояние кристаллической решетки предшествующее ее аллотропному превращению. Согласно диаграмме фазового равновесия такое метастабильное состояние может быть достигнуто либо за счет особого химического состава, как, например, для сплавов Гейслера X_2YZ , либо при приближении к критической температуре, как для сплава In27Tl при 125 K, или к критическому давлению. Например, в работе [81] было показано, что для ионных кристаллов CuCl метастабильное состояние с экстремально высокими значениями коэффициента Пуассона достигается при повышении давления до критического значения, равного 9.75 ГПа. Согласно [187] в предпереходном метастабильном состоянии происходит ослабление связей в определенных направлениях кристаллической решетки и, как следствие, аномальное изменение упругих констант.

1.2.5. Экстремальные значения модуля сдвига кубических кристаллов [13]

В этом подразделе для кубических кристаллов дается анализ изменчивости модуля сдвига от углов ориентации кристаллических образцов на основе экспери-

ментальных данных работ, приведенных в [172], а также в [56, 175].

Модуль сдвига $G(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ в линейной упругости определяется двумя единичными векторами \mathbf{n} и \mathbf{m} [170]

$$G^{-1}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 4s_{ijkl}n_in_jn_kn_l. \quad (1.55)$$

Вектор \mathbf{n} - единичный вектор нормали к плоскости скольжения, а вектор \mathbf{m} - единичный вектор направления скольжения. Ниже вместо компонент тензора коэффициентов податливости четвертого ранга s_{ijkl} в кристаллографической системе координат будут использоваться матричные коэффициенты податливости Фойгта $s_{mn} = s_{nm}$ [171].

Модуль сдвига в частном случае кубических кристаллов принимает в вид

$$G^{-1}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = s_{44} + 2(s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44})N(\mathbf{n}, \mathbf{m}), \quad (1.56)$$

$$N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \equiv 2(n_1^2m_1^2 + n_2^2m_2^2 + n_3^2m_3^2). \quad (1.57)$$

Здесь $N(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ - функция только единичных взаимно ортогональных векторов \mathbf{n} и \mathbf{m} , независящая от упругих характеристик кристаллов.

Перепишем также модуль сдвига в виде функции от углов Эйлера. Через углы Эйлера φ, θ, ψ единичные взаимно ортогональные вектора \mathbf{n} и \mathbf{m} представляются следующим образом

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \sin \theta \\ -\cos \varphi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \cos \theta \cos \psi - \cos \varphi \sin \psi \\ \cos \varphi \cos \theta \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \\ \sin \theta \cos \psi \end{pmatrix}.$$

Для компонент этих векторов справедливы ограничения

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1, \quad (1.58)$$

$$m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 = 1, \quad (1.59)$$

$$n_1m_1 + n_2m_2 + n_3m_3 = 0. \quad (1.60)$$

Через углы Эйлера выражение модуля сдвига для кубических кристаллов (1.56) можно переписать в виде

$$G^{-1}(\varphi, \theta, \psi) = s_{44} + 2(s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44})N(\varphi, \theta, \psi),$$

$$N(\varphi, \theta, \psi) = \{3 \cos^2 \theta \cos^2 \psi + (\cos \theta \cos 2\varphi \cos \psi - \sin 2\varphi \sin \psi)^2\} \sin^2 \theta.$$

Таким образом, имеем две удобные параметризации функции N . Анализ функции $N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = N(\varphi, \theta, \psi)$ показывает, что для нее справедливы ограничения

$$0 \leq N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = N(\varphi, \theta, \psi) \leq 1. \quad (1.61)$$

Зависимость модуля сдвига от упругих коэффициентов и угловых переменных удобно представить в безразмерном виде

$$\frac{1}{s_{44}G} = 1 + (P - 1)N(\varphi, \theta, \psi),$$

$$P \equiv 2 \frac{s_{11} - s_{12}}{s_{44}} = 2 \frac{c_{44}}{c_{11} - c_{12}}.$$

Здесь приводится выражение упругого безразмерного параметра P как через коэффициенты податливости, так и коэффициенты жесткости. В силу термодинамических ограничений коэффициентов податливости $s_{11} - s_{12} > 0$, $s_{44} > 0$ параметр P оказывается неотрицательным. С учетом ограничений на функцию $N(\varphi, \theta, \psi)$ (1.61) получаем следующие ограничения на безразмерный модуль сдвига $s_{44}G$ (схематично они отражены на Рис.1.16)

$$0 < P < 1 : \quad 0 < P < \frac{1}{s_{44}G} < 1,$$

$$1 < P : \quad 1 < \frac{1}{s_{44}G} < P.$$

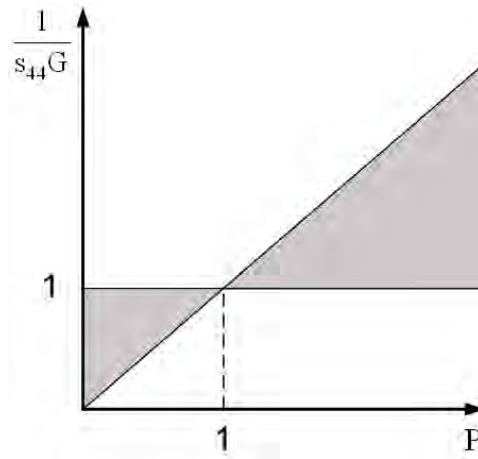


Рис. 1.16: Изменение диапазона обратных значений безразмерного модуля сдвига с изменением величины безразмерного упругого параметра P . Затемнена область возможных значений $(s_{44}G)^{-1}$.

Из таких ограничений ясно, что величиной параметра P определяется относительная величина максимального и минимального значений модуля сдвига. При $P > 1$ отношение G_{\max}/G_{\min} равняется P , а при $P < 1$ это отношение равно $1/P$. Причем, минимальное значение G_{\min} всегда остается положительным. Все это находит

Таблица 1.6: Значения коэффициента податливости s_{44} , безразмерного параметра P и максимального и минимального значений модуля сдвига для полных ауксетиков.

Кристаллы	s_{44} , ГПа ⁻¹	P	s_{44}^{-1} , ГПа	$(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$, ГПа
Ba	98.9	2.38	10.1	4.25
	105	4.15	9.52	2.29
Sm _{0.7} Y _{0.3} S	33.3	0.32	30.0	92.6
	32.3	0.34	31.0	91.1
Sm _{0.75} Y _{0.25} S	34.5	0.38	29.0	76.9
	33.3	0.35	30.0	84.7
	33.3	0.35	30.0	84.7
Sm _{0.75} La _{0.25} S [175]	35.71	0.48	28.0	58.5
Sm _{0.65} La _{0.35} S [175]	27.78	0.92	36.0	39.0
Sm _{0.75} Tm _{0.25} S [175]	27.03	0.61	37.0	60.5

Таблица 1.7: Значения коэффициента податливости s_{44} , безразмерного параметра P и максимального и минимального значений модуля сдвига для частичных ауксетиков с $0 < P < 1$.

Кристаллы	s_{44} , ГПа ⁻¹	P	s_{44}^{-1} , ГПа	$(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$, ГПа
USe	67.6	0.12	14.8	128
UTe	83.3	0.16	12.0	72.8
USb	56.2	0.17	17.8	102
TmSe	38.5	0.21	26.0	125
Tm _{0.99} Se	37	0.23	27.0	118
SnTe	81	0.23	12.3	53.8
GeTe-SnTe	80.6	0.24	12.4	52.1
ReO ₃	16.4	0.25	61.0	243
Sm _{0.90} La _{0.10} S [175]	41.67	0.33	24.0	72.6
SmB ₆	12.82	0.37	78.0	211
Sm _{0.85} Tm _{0.15} S [175]	38.46	0.48	26.0	54.5
FeS ₂	8.79	0.51	114	222

отражение в Табл.1.6-1.9. В виду слишком большого объема данных о кубических кристаллах, отраженных в справочнике [172], в этих таблицах приведены данные только о максимальных и минимальных величинах модуля сдвига для кубических ауксетиков. Эти данные упорядочены в соответствии с величиной безразмерного параметра P . В Табл.1.6 собраны результаты для полных ауксетиков. В Табл.1.7-1.9 приведены результаты для частичных ауксетиков. Причем, в Табл.1.8 и Табл.1.9

Таблица 1.8: Значения коэффициента податливости s_{44} , безразмерного параметра P и максимального и минимального значений модуля сдвига для некоторых частичных ауксетиков с $1 < P \leq 2.5$.

Кристаллы	s_{44} , ТПа ⁻¹	P	s_{44}^{-1} , ГПа	$(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$, ГПа
LiH	22	1.78	45.5	25.5
LiF	15.8	1.89	63.3	33.4
SiC	3.98	2.11	251	119
	4.29	2.20	233	106
FeCr (19.43at%Cr)	8.97	2.15	111	51.9
CuAu (80at%Au)	24.09	2.18	41.5	19.0
Ge _{0.72} Si _{0.28}	11.7	2.21	85.5	38.8
CeSn ₃	23.2	2.23	43.1	19.3
ZnSe	24.9	2.32	40.2	17.3
Ag ₆ Sn ₄ P ₁₂ Ge ₆	18.9	2.36	52.9	22.4
Sr(NO ₃) ₂	63.1	2.38	15.8	6.65
PdRh (20at%Rh)	11.08	2.40	90.3	37.6
ZnS	22.5	2.41	44.4	18.5
MgAl ₂ O ₄	6.49	2.42	154	63.7
CdTe	49.4	2.43	20.2	8.33
Fe	8.57	2.45	117	47.6
AlNi (47.5at%Ni)	9.44	2.45	106	43.3
LaAg	47.8	2.45	20.9	8.55
ZnFe ₂ O ₄	7.41	2.50	135	54.0

принято ограничение данными для больших отношений G_{\max}/G_{\min} (при $P \geq 10$) и относительно малых с $1 < P \leq 2.5$. Количество таких частичных ауксетиков составляет 63, что значительно меньше общего количества частичных ауксетиков, превосходящего 350 (см. подраздел 1.2.2, стр. 29). Рекордсменом по величине отношения $G_{\max}/G_{\min} = P$ оказался кристаллический сплав InTl. Для него при определенных условиях это отношение превосходит 10^3 .

Экстремальные направления, для которых модуль сдвига равен s_{44}^{-1} .

Анализ начнем с трех частных случаев, когда единичный вектор \mathbf{n} имеет лишь одну ненулевую компоненту $n_1^2 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$. Это соответствует $\varphi = \theta = \pi/2$ и $\mathbf{m}^T = (0, -\sin \psi, \cos \psi)$, и выполняется $N(\pi/2, \pi/2, \psi) = 0$.

2) $n_2^2 = 1$, $n_1 = n_3 = 0$. В этом случае $\varphi = 0$, $\theta = \pi/2$ и $\mathbf{m}^T = (-\sin \psi, 0, \cos \psi)$, и имеет место $N(0, \pi/2, \psi) = 0$.

3) $n_3^2 = 1$, $n_1 = n_2 = 0$. Это достигается при $\theta = 0$ без ограничений на φ . Тогда поперечный вектор имеет вид $\mathbf{m}^T = (-\sin(\varphi + \psi), \cos(\varphi + \psi), 0)$ и выполняется

Таблица 1.9: Значения коэффициента податливости s_{44} , безразмерного параметра P и максимального и минимального значений модуля сдвига для некоторых частичных ауксетиков с $P \geq 10$.

Кристаллы	s_{44} , ГПа ⁻¹	P	s_{44}^{-1} , ГПа	$(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$, ГПа
Au ₂₀ Cu ₃₃ Zn ₄₇	16.6	10.0	60.2	6.00
CuZn (46at%Zn)	12.5	10.1	80.0	7.94
β_1 -AgCd (47.9at%Cd)	19.6	11.2	51.0	4.55
InTl (39.06at%Tl)	115	11.5	8.70	0.76
Cu _{66.5} Zn _{20.8} Al _{12.7}	11.8	12.0	84.7	7.05
Au ₂₃ Cu ₃₀ Zn ₄₇	18	12.3	55.6	4.50
Cu ₂₅ Ni ₂₅ Zn ₅₀	11.4	12.4	87.7	7.10
Au ₃₀ Cu ₂₃ Zn ₄₇	17.2	12.9	58.1	4.50
Mn _{85.3} Ni _{8.8} C _{5.9}	9.78	13.6	102	7.51
InTl (35.15at%Tl)	115	14.6	8.70	0.59
Cu _{67.7} Zn _{19.4} Al _{12.9}	11.6	14.8	86.2	5.81
AlNi (60at%Ni)	8.31	15.0	120	8.01
CuAuZn ₂	18.9	17.8	52.9	2.98
InTl (30.16at%Tl)	118	22.5	8.47	0.38
NiCr ₂ O ₄	17.3	23.1	57.8	2.50
InTl (27at%Tl)	119	25.8	8.40	0.33
FePd (28at%Pd)	12.5	26.7	80.0	2.99
InTl (28.13at%Tl)	120	28.6	8.33	0.29
InTl (25at%Tl)	126	34.5	7.94	0.23

$$N(\varphi, 0, \psi) = 0.$$

В трех других частных случаях будем считать равной нулю только одну из компонент единичного вектора \mathbf{n} :

4) $n_1 = 0, n_2 \neq 0, n_3 \neq 0$. Это соответствует $\varphi = 0$. Условия $\mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = 0, N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 0$ принимают вид системы уравнений

$$\begin{cases} -m_2 \sin \theta + m_3 \cos \theta = 0 \\ m_2^2 \sin^2 \theta + m_3^2 \cos^2 \theta = 0, \end{cases}$$

имеющей только тривиальное решение $m_2 = m_3 = 0$, и тогда $\psi = \pi/2$ и $m_1 = -1$. Здесь выполняется $N(0, \theta, \pi/2) = 0$.

5) $n_2 = 0, n_1 \neq 0, n_3 \neq 0$. Это справедливо при $\varphi = \pi/2$. Аналогично предыдущему случаю две компоненты m_1, m_3 вектора \mathbf{m} обращаются в нуль, так что $\psi = \pi/2$ и $m_2 = -1$. Здесь имеет место $N(\pi/2, \theta, \pi/2) = 0$.

6) $n_3 = 0, n_1 \neq 0, n_2 \neq 0$ возможно при $\theta = \pi/2$. Аналогично предыдущему

$m_1 = m_2 = 0$, $\psi = 0$ и $m_3 = 1$. Здесь выполняется $N(\varphi, \pi/2, 0) = 0$.

Наконец, в случае

7) $n_1 \neq 0$, $n_2 \neq 0$, $n_3 \neq 0$ из условия $N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 0$ следует отсутствие нетривиального результата для вектора \mathbf{m} , и, следовательно, при этой наиболее общей ориентации \mathbf{n} экстремум s_{44}^{-1} для модуля сдвига не достижим.

Экстремальные направления, для которых модуль сдвига равен $(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$. Такая величина модуля сдвига достигается при условии $N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 1$. Повторим здесь обсуждение той же последовательности частных случаев, что и в предыдущем пункте.

В трех случаях с одной ненулевой компонентой вектора \mathbf{n} :

1) $n_1^2 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$ соответствует $\varphi = \theta = \pi/2$. При этом $N(\pi/2, \pi/2, \psi)$ обращается в нуль и тем самым достижение экстремума $(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$ невозможно.

2) $n_2^2 = 1$, $n_1 = n_3 = 0$ соответствует $\varphi = 0$, $\theta = \pi/2$, что приводит также к обращению в нуль $N(0, \pi/2, \psi)$ и невозможности достижения экстремума $(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$.

3) $n_3^2 = 1$, $n_1 = n_2 = 0$ соответствует $\theta = 0$ без ограничений на φ . Этого достаточно для обращения в нуль $N(\varphi, 0, \psi)$, что указывает на невозможность достижения экстремума $(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$.

В частных случаях, когда в нуль обращается лишь одна из компонент вектора \mathbf{n} :

4) $n_1 = 0$, $n_2 \neq 0$, $n_3 \neq 0$ соответствует $\varphi = 0$. При этом выражения векторов \mathbf{n} , \mathbf{m} примут упрощенный вид $\mathbf{n}^T = (0, -\sin \theta, \cos \theta)$, $\mathbf{m}^T = (-\sin \psi, \cos \theta \cos \psi, \sin \theta \cos \psi)$ и будем иметь

$$N(0, \theta, \psi) = \sin^2 2\theta \cos^2 \psi = 1.$$

Последнее равенство может выполняться только при $\cos^2 \psi = 1$ и $\sin^2 2\theta = 1$, и, следовательно, для $\psi = 0, \pi$; $\theta = \pi/4, 3\pi/4$. В итоге здесь

$$N\left(0, \frac{\pi}{4}, 0\right) = N\left(0, \frac{3\pi}{4}, 0\right) = N\left(0, \frac{\pi}{4}, \pi\right) = N\left(0, \frac{3\pi}{4}, \pi\right) = 1.$$

5) $n_2 = 0$, $n_1 \neq 0$, $n_3 \neq 0$ соответствует $\varphi = \pi/2$. Аналогично предыдущему случаю получаем $\mathbf{n}^T = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, $\mathbf{m}^T = (-\sin \psi, \cos \theta \cos \psi, \sin \theta \cos \psi)$ и находим точно такое же уравнение

$$N\left(\frac{\pi}{2}, \theta, \psi\right) = \sin^2 2\theta \cos^2 \psi = 1.$$

Оно дает те же решения $\psi = 0, \pi$; $\theta = \pi/4, 3\pi/4$. В итоге здесь

$$N\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4}, 0\right) = N\left(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, 0\right) = N\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4}, \pi\right) = N\left(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi\right) = 1.$$

6) $n_3 = 0, n_1 \neq 0, n_2 \neq 0$ соответствует $\theta = \pi/2$. Здесь находим $\mathbf{n}^T = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)$, $\mathbf{m}^T = (-\cos \varphi \sin \psi, -\sin \varphi \sin \psi, \cos \psi)$ и

$$N\left(\varphi, \frac{\pi}{2}, \psi\right) = \sin^2 2\varphi \cos^2 \psi = 1.$$

Последнее уравнение дает решения $\varphi = 0, \pi/2; \psi = 0, \pi$. В итоге здесь

$$N\left(0, \frac{\pi}{2}, 0\right) = N\left(0, \frac{\pi}{2}, \pi\right) = N\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \pi\right) = N\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, 0\right) = 1.$$

В более общей ситуации:

7) $n_1 \neq 0, n_2 \neq 0, n_3 \neq 0$ к трем полным ограничениям (1.58)-(1.60) добавляется еще одно

$$0.5N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = (n_1^2 m_1^2 + n_2^2 m_2^2 + n_3^2 m_3^2) = 0.5.$$

Поскольку $N(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ можно представить в виде

$$N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 1 - \{(n_1 m_2 + n_2 m_1)^2 + (n_1 m_3 + n_3 m_1)^2 + (n_2 m_3 + n_3 m_2)^2\},$$

то условие экстремальности $N(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 1$ сводится к системе трех линейных относительно m_1, m_2, m_3 уравнений

$$\begin{cases} n_1 m_2 + n_2 m_1 = 0 \\ n_1 m_3 + n_3 m_1 = 0 \\ n_2 m_3 + n_3 m_2 = 0 \end{cases}$$

Определитель этой системы, равный $D = -2n_1 n_2 n_3$, в рассматриваемом случае в нуль не обращается и, следовательно, система не имеет нетривиальных решений.

Таким образом, значение модуля сдвига s_{44}^{-1} будет максимальным в случае $P > 1$ и минимальным в случае $0 < P < 1$. Оно достигается при следующих наборах трех углов Эйлера (φ, θ, ψ) :

- при произвольном $\varphi, \theta = \pi/2$ и $\psi = 0$,
- при произвольном $\theta, \psi = \pi/2$ и $\varphi = 0, \pi/2$,
- при произвольном $\psi, \theta = \pi/2$ и $\varphi = 0, \pi/2$,
- при двух произвольных углах φ, ψ и $\theta = 0$.

При $P > 1$ значение модуля сдвига $(2s_{11} - 2s_{12})^{-1}$ оказывается минимальным, а при $0 < P < 1$ оно становится максимальным. Эти значения достигаются при следующих наборах трех углов Эйлера (φ, θ, ψ) :

$$\begin{aligned} & \left(0, \frac{\pi}{4}, 0\right), \left(0, \frac{3\pi}{4}, 0\right), \left(0, \frac{\pi}{4}, \pi\right), \left(0, \frac{3\pi}{4}, \pi\right), \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4}, 0\right), \left(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, 0\right), \\ & \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4}, \pi\right), \left(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi\right), \left(0, \frac{\pi}{2}, 0\right), \left(0, \frac{\pi}{2}, \pi\right), \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, 0\right), \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \pi\right). \end{aligned}$$

1.3. Гексагональные кристаллы

1.3.1. Растяжение стержней с гексагональной анизотропией [1, 2, 4, 5, 14]

При гексагональной симметрии упругие свойства кристаллов определяются пятью коэффициентами податливости, что наглядно иллюстрируется матрицей податливостей

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(s_{11} - s_{12}) \end{pmatrix}$$

Термодинамические ограничения на податливости при такой симметрии можно записать следующим образом: $s_{11} > 0$, $1 > s_{12}/s_{11} > 2s_{13}^2/(s_{33}s_{11}) - 1$, $s_{33} > 0$, $s_{44} > 0$.

Общие угловые зависимости (1.5), (1.7), (1.8) для $E(\theta)$, $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ в случае ориентаций 1) и 2) (см. стр.20) при этом принимают вид

$$\frac{1}{E} = \frac{s_{11} + s_{33}}{2} + \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_2}{2} \cos 2\theta - \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\theta, \quad (1.62)$$

$$-2\frac{\nu_{(1)}}{E} = (s_{13} + s_{12})(1 + \alpha \cos 2\theta), \quad (1.63)$$

$$-\frac{\nu_{(2)}}{E} = s_{13} - \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\theta, \quad (1.64)$$

$$\Delta_1 \equiv s_{44} - s_{33} + 2s_{13} - s_{11}, \quad \Delta_2 \equiv s_{33} - s_{11}, \quad \alpha \equiv \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{13} + s_{12}}.$$

Количество существенных параметров анизотропии Δ_1 , Δ_2 , α , исчезающих при переходе к изотропной среде, возрастает до трех. В рассматриваемом случае угловые зависимости для перечисленных характеристик периодичны с периодом π и симметричны относительно $\theta = \pi/2$.

При частной ориентацией 3) коэффициенты Пуассона принимают постоянное значение

$$\nu_{(1)} = -\frac{s_{13}}{s_{11}}, \quad \nu_{(2)} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}. \quad (1.65)$$

При данной ориентации отрицательный коэффициент Пуассона обнаруживается у MoS_2 (-0.28) и Zn (-0.07).

Ауксетиков среди гексагональных кристаллов, как можно видеть из Табл.1.10, не так много. Если же потребовать дополнительно выполнение условия $\nu_{\min} < -0.1$,

Таблица 1.10: Значения минимального и максимального коэффициента Пуассона (ν_{\min} и ν_{\max}), минимального и максимального среднего коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle_{\min}$ и $\langle \nu \rangle_{\max}$, коэффициентов анизотропии Δ_1 , Δ_2 и α .

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\langle \nu \rangle_{\max}$	Δ_1 , ТПа ⁻¹	Δ_2 , ТПа ⁻¹	α
MoS ₂	-0.28	0.58	0.12	0.25	21.4	17.3	2.9
C ₇ H ₁₂	-0.15	0.99	0.39	0.47	-1339	-741	-0.6
Zn	-0.07	0.85	0.17	0.39	-24.6	19.5	1.2
BeCu (2.4at%Cu)	-0.04	0.1	0.01	0.06	-0.6	-0.6	-0.8
TiB ₂	-0.03	0.54	0.24	0.41	-4.8	1.4	0.07
Be	-0.005	0.08	0.02	0.05	-0.3	-0.6	-0.7

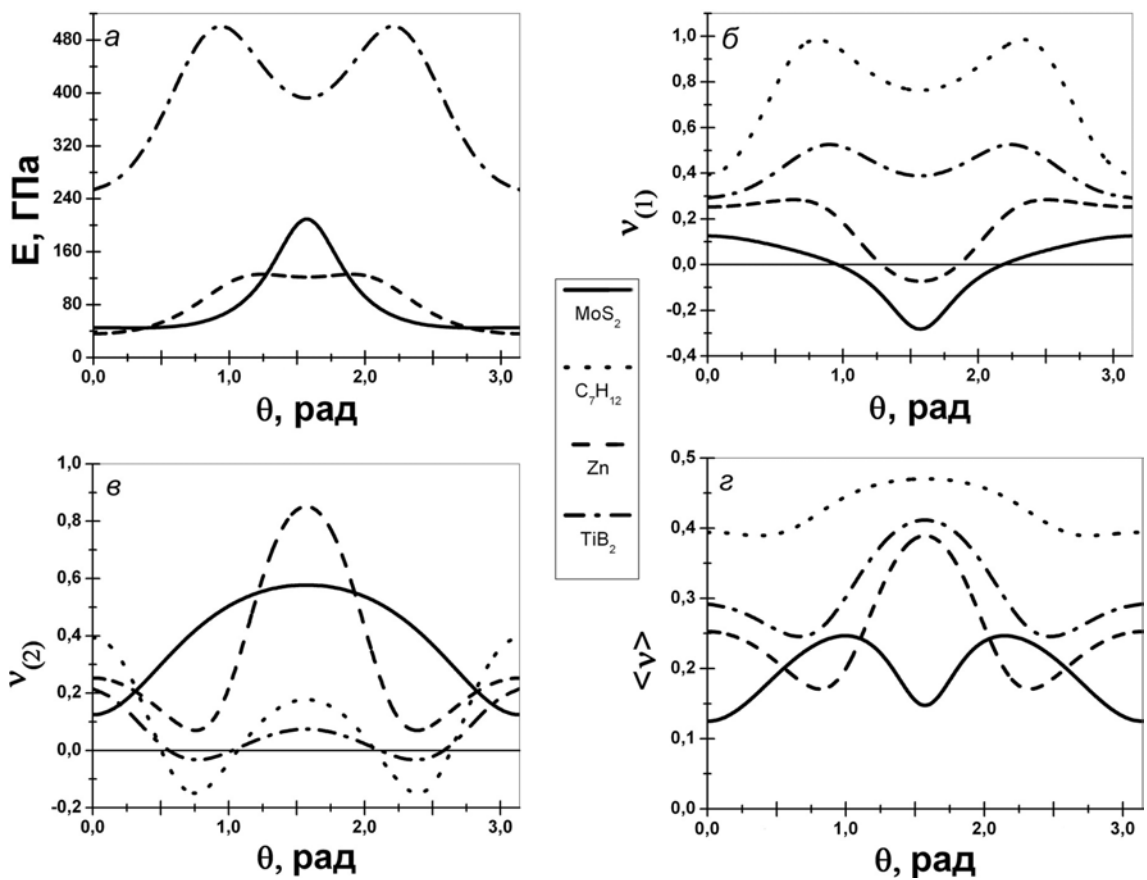


Рис. 1.17: Угловые зависимости модуля Юнга E , коэффициентов Пуассона $\nu_{(1)}$, $\nu_{(2)}$ и среднего коэффициента Пуассон $\langle \nu \rangle$ для MoS₂, C₇H₁₂, Zn и TiB₂.

то останется лишь два кристалла MoS₂ и C₇H₁₂, из которых дисульфид молибдена оказывается единственным ауксетиком среди всех изученных слоистых гексагональных кристаллов (графита, нитрида бора BN, дисульфида молибдена MoS₂, сульфида галлия GaS, селенида галлия GaSe, селенида индия InSe). Рис.1.17 отражает характер угловых зависимостей для нескольких гексагональных ауксетиков.

Угловая зависимость для модуля Юнга $C_{7H_{12}}$ на Рис.1.17а не приведена, так как он принимает слишком малые значения (от 0.7 до 1.8 ГПа по сравнению с другими ауксетиками). Отметим также, что главные минимумы коэффициентов $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ для MoS_2 , Zn достигаются на функциях $\nu_{(1)}(\theta)$, а для $C_{7H_{12}}$, $BeCu$, TiB_2 и Be - на функциях $\nu_{(2)}(\theta)$.

1.3.2. Изменчивость модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига. Экстремальные значения [1, 15–17]

Модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль сдвига для гексагональных кристаллов можно записать в виде

$$E^{-1}(\mathbf{n}) = s_{11}(1 - n_3^2)^2 + s_{33}n_3^4 + (2s_{13} + s_{44})(1 - n_3^2)n_3^2,$$

$$-\frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{E(\mathbf{n})} = s_{12}(m_1n_2 - m_2n_1)^2 + (s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44})m_3^2n_3^2 + s_{13}(m_3^2 + n_3^2),$$

$$G^{-1}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = s_{66}(m_1n_2 - m_2n_1)^2 + 4(s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44})m_3^2n_3^2 + s_{44}(m_3^2 + n_3^2).$$

Если ориентацию кристаллического стержня в кристаллографической системе координат описывать с помощью трех углов Эйлера φ , θ , ψ , то можно использовать связи между единичными векторами \mathbf{n} , \mathbf{m} и углами Эйлера φ , θ , ψ

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \sin \theta \\ -\cos \varphi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \cos \theta \cos \psi - \cos \varphi \sin \psi \\ \cos \varphi \cos \theta \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \\ \sin \theta \cos \psi \end{pmatrix}.$$

Выражения модуля Юнга E , коэффициента Пуассона ν и модуля сдвига G можно переписать с их помощью через угловые зависимости следующим образом

$$\frac{1}{s_{11}E} = 1 + (\Pi_1 - \Pi_{01} \sin^2 \theta) \cos^2 \theta, \quad (1.66)$$

$$-\frac{\nu}{s_{13}E} = 1 + (\Pi_2 \sin^2 \psi + \Pi_{02} \cos^2 \theta \cos^2 \psi) \sin^2 \theta, \quad (1.67)$$

$$\frac{1}{s_{44}G} = 1 + (\Pi_3 \sin^2 \psi + 4\Pi_{03} \cos^2 \theta \cos^2 \psi) \sin^2 \theta, \quad (1.68)$$

$$\Pi_{01} \equiv \frac{\delta}{s_{11}}, \quad \Pi_{02} \equiv \frac{\delta}{s_{13}}, \quad \Pi_{03} \equiv \frac{\delta}{s_{44}},$$

$$\Pi_1 \equiv \frac{s_{33} - s_{11}}{s_{11}}, \quad \Pi_2 \equiv \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{13}}, \quad \Pi_3 \equiv \frac{2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}}{s_{44}},$$

$$\delta \equiv s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44}.$$

Модуль Юнга гексагональных кристаллов зависит лишь от одного угла Эйлера θ (не зависит от двух других углов φ , ψ). Коэффициент Пуассона и модуль сдвига

оказываются зависящим от двух углов Эйлера θ , ψ и не зависит от третьего угла φ . Безразмерные параметры Π_{0n} , Π_n являются характеристиками степени анизотропии гексагональных кристаллов. Основываясь на термодинамических ограничениях $s_{11} > 0$, $s_{33} > 0$, накладываемых на коэффициенты податливости, находим следующее ограничение для безразмерно параметра: $\Pi_1 > -1$. Зависимости модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига являются периодическими функциями θ и ψ с периодами $T_\theta = T_\psi = \pi$.

Экстремальные значения модуля Юнга

Проанализируем экстремальные значения модуля Юнга. Необходимое условие экстремальности модуля Юнга требуют выполнения условия стационарности

$$\frac{dE(\theta)}{d\theta} = 0.$$

В результате дифференцирования выражения для модуля Юнга (1.66) по углу θ это условие дает следующее уравнение для стационарных значений

$$\sin 2\theta (2\Pi_{01} \cos^2 \theta + \Pi_1 - \Pi_{01}) = 0.$$

Решениями уравнения будут три стационарные точки $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi/2$ и θ_3 , $\cos^2 \theta_3 = (\Pi_{01} - \Pi_1)/(2\Pi_{01})$. Этим стационарным точкам соответствуют три значения модуля Юнга. Два из них имеют простой вид

$$E_1 = \frac{1}{s_{33}} = \frac{1}{s_{11}(1 + \Pi_1)}, \quad (1.69)$$

$$E_2 = \frac{1}{s_{11}}, \quad (1.70)$$

и достигаются при $\theta_1 = 0$ и $\theta_2 = \pi/2$ соответственно. Третье стационарное значение $E_3 > 0$

$$E_3 = \frac{4\Pi_{01}}{4\Pi_{01} - (\Pi_1 - \Pi_{01})^2} \frac{1}{s_{11}} \quad (1.71)$$

может достигаться при

$$\cos^2 \theta_3 = \frac{\Pi_{01} - \Pi_1}{2\Pi_{01}}.$$

Исследуем далее значения E_1 , E_2 , E_3 с точки зрения выполнения достаточного условия экстремума функции одной переменной. Если в указанных стационарных точках вторая производная модуля Юнга больше нуля, то стационарная точка является минимумом (и наоборот).

В случае стационарной точки $\theta_1 = 0$ мы имеем $E = E_1$ и

$$\frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} = \frac{2(\Pi_1 + \Pi_{01})}{s_{11}(1 + \Pi_1)^2}. \quad (1.72)$$

Тогда согласно достаточному условию экстремума функции с учетом положительности коэффициента податливости s_{11} и $(1 + \Pi_1)^2$ значение модуля Юнга E_1 будет минимумом при $\Pi_1 + \Pi_{01} > 0$ и максимумом при $\Pi_1 + \Pi_{01} < 0$. Значение E_1 соответствует растяжению в направлении $[0001]$ ($E_1 = E_{[0001]}$).

В случае стационарной точки $\theta_2 = \pi/2$ имеем $E = E_2$ и

$$\frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} = \frac{2(\Pi_{01} - \Pi_1)}{s_{11}}. \quad (1.73)$$

Модуль Юнга E_2 будет минимумом при $\Pi_{01} - \Pi_1 > 0$ и максимумом при $\Pi_{01} - \Pi_1 < 0$. Значение E_2 соответствует растяжению в направлении $[2\bar{1}\bar{1}0]$ ($E_2 = E_{[2\bar{1}\bar{1}0]}$).

Вторая производная модуля Юнга для стационарной точки θ_3 , $\cos^2 \theta_3 = (\Pi_{01} - \Pi_1)/(2\Pi_{01})$ имеет вид

$$\frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} = \frac{32\Pi_{01}(\Pi_1^2 - \Pi_{01}^2)}{s_{11}[(\Pi_1 + \Pi_{01})^2 - 4\Pi_{01}]^2}. \quad (1.74)$$

Следовательно, модуль Юнга E_3 является минимумом при $\Pi_{01}(\Pi_1^2 - \Pi_{01}^2) > 0$ и максимумом при $\Pi_{01}(\Pi_1^2 - \Pi_{01}^2) < 0$. Анализ, проведенный для 143 гексагональных кристаллов из справочника [172], показал, что у 27 кристаллов отсутствует экстремальное значение E_3 . Только два экстремальных значения E_1 и E_2 имеют, например, бериллий Be, титан Ti, таллий Tl, кадмий Cd, сплав CdMg, сплав CdZn, In₂Bi, MnAs, Mn₅Si₃, NdCo₅ (см. Табл.П.11 на стр.327).

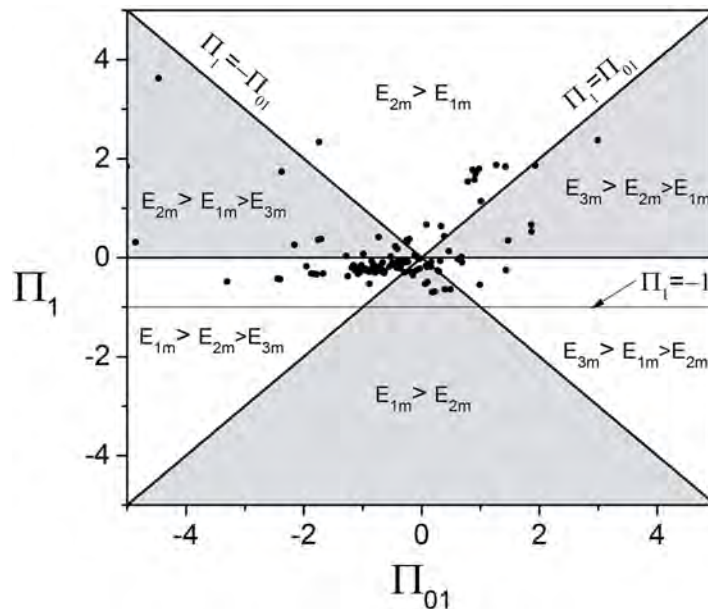


Рис. 1.18: Классификационная схема экстремальных значений модуля Юнга гексагональных кристаллов на плоскости безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 . Кружками отмечены значения безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 для 143 гексагональных кристаллов из [172].

Таблица 1.11: Экстремальные значения модулей Юнга для некоторых гексагональных кристаллов. Глобальные максимальные и минимальные значения выделены полужирным.

Кристаллы	E_1		E_2		E_3	
	ГПа		ГПа		ГПа	
Cd	28.9	min	80.6	max	-	-
Ba(NO ₂) ₂ ·H ₂ O	22.2	min	37.0	max	-	-
Cd _{0.751} Zn _{0.249}	31.4	min	87.0	max	-	-
Zn	36.1	min	122	min	126	max
BN ₃	136	min	138	min	165	max
β -LiAlSiO ₄	67.1	min	112	min	138	max
Tc	345	min	313	min	402	max
WC	826	min	595	min	827	max
LiKSO ₄	54.0	min	40.2	min	54.1	max
CeNi ₅	210	max	152	min	-	-
MnAs	108	max	38.5	min	-	-
In ₂ Bi	35.2	max	16.4	min	-	-
Mg	50.8	max	45.5	max	42.9	min
CdSe	59.5	max	43.3	max	38.9	min
CsNiCl ₃	58.5	max	30.1	max	18.8	min
MoS ₂	45.2	max	209	max	44.9	min
GaN	150	max	196	max	82.6	min
InN	82.6	max	104	max	35.5	min

На Рис.1.18 представлена классификационная схема для экстремумов модуля Юнга в зависимости от двух безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 , полученная на основе анализа формул (1.69)-(1.74). На этом рисунке точками нанесены значения безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 для 143 гексагональных кристаллов, представленных в [172]. Большинство гексагональных кристаллов находятся в интервале $-1 < \Pi_1 < 0$ и зоне с $E_{1m} > E_{2m} > E_{3m}$. На классификационной схеме выделено шесть зон с различными неравенствами между экстремальными значениями модуля Юнга E_{1m} , E_{2m} , E_{3m} . Для каждой из этих шести зон на Рис.2 приведены примеры угловых зависимостей модуля Юнга некоторых гексагональных кристаллов. В Табл.1.11 для кристаллов, представленных на Рис.1.19, даются экстремальные значения модуля Юнга. Полный список гексагональных материалов и их экстремальных значений приведены в Табл.П.11. В этой же таблице даны значение угла, при котором наблюдается экстремальное значение E_{3m} . Эти значения углов для большинства кристаллов меняются в диапазоне от 40 до 60 градусов.

Как видно из Рис.1.18 существуют две зоны, в которых отсутствует экстре-

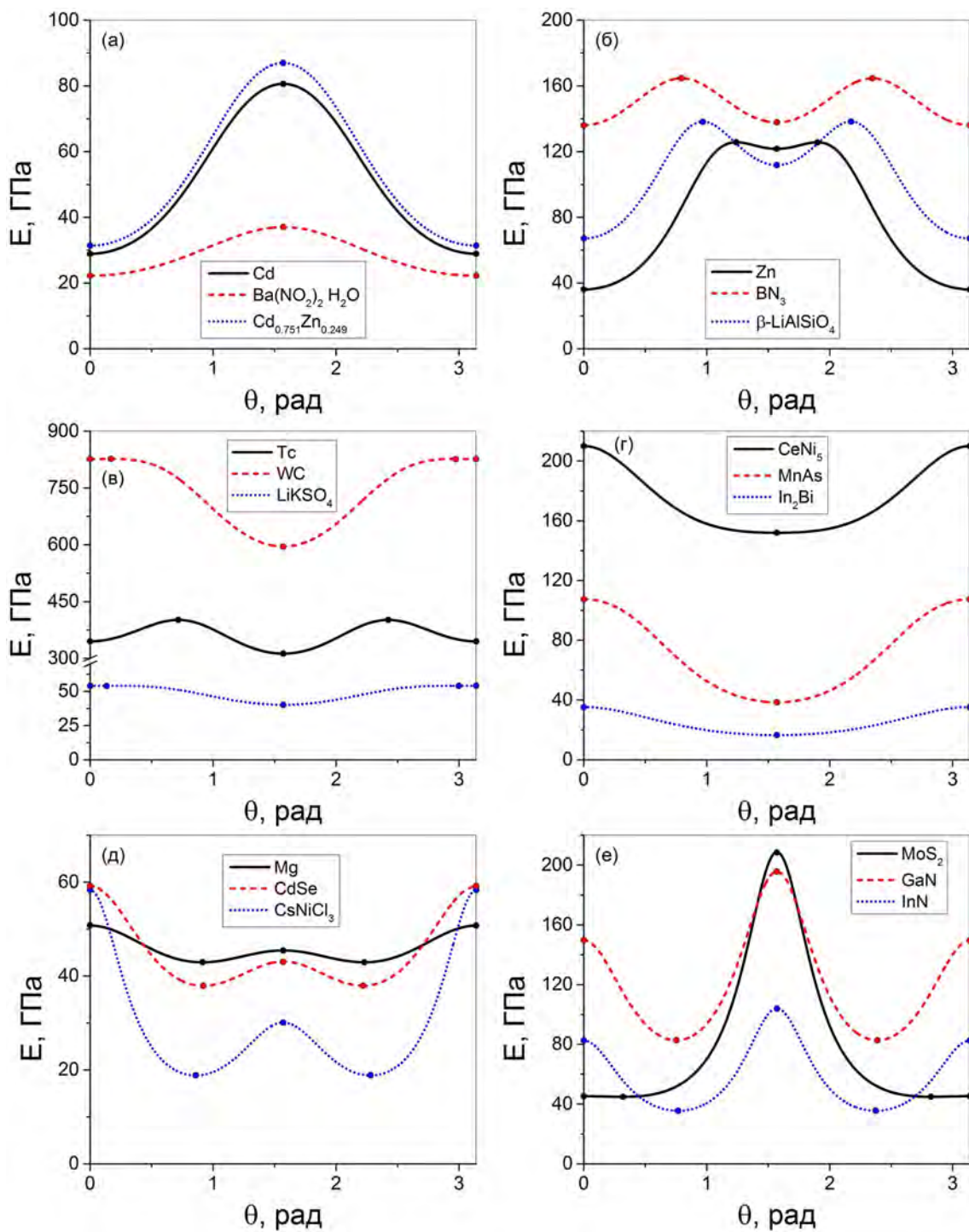


Рис. 1.19: Угловые зависимости модулей Юнга для некоторых гексагональных кристаллов, попадающих в зоны: $E_{2m} > E_{1m}$ (а), $E_{3m} > E_{2m} > E_{1m}$ (б), $E_{3m} > E_{1m} > E_{2m}$ (в), $E_{1m} > E_{2m}$ (г), $E_{1m} > E_{2m} > E_{3m}$ (д), $E_{2m} > E_{1m} > E_{3m}$ (е).

мальное значение E_{3m} . Угловые зависимости модуля Юнга для этих зон представлены на Рис.1.19а и Рис.1.19г. Материалами, у которых имеется два экстремальных значения E_{1m} и E_{2m} , являются, например, бериллий Ве и его сплавы с Си,

кадмий Cd и его сплавы с Mg или Zn, In₂Bi, MnAs, Tl и Ag₂Al. В двух зонах $E_{3m} > E_{2m} > E_{1m}$ (Рис.1.19б) и $E_{3m} > E_{1m} > E_{2m}$ (Рис.1.19в) имеет максимальное значение E_{3m} . Два других значения E_{1m} и E_{2m} являются минимальными значениями. Для кристаллов Zn и BN₃ (Рис.1.19б) значение модуля Юнга E_{1m} является глобальным минимальным значением, а E_{2m} - локальным минимумом. В случае кристаллов Tc и WC (Рис.1.19в) имеет место обратная ситуация: E_{2m} - глобальный минимум, а E_{1m} - локальный минимум. Для зон $E_{1m} > E_{2m} > E_{3m}$ (Рис.1.19д) и $E_{2m} > E_{1m} > E_{3m}$ (Рис.1.19е) значение модуля Юнга E_{3m} является глобальным минимумом, а значения E_{1m} и E_{2m} - максимумы. Значение E_{1m} будет глобальным максимумом для кристаллов Mg и CdSe (Рис.1.19д) и локальным максимумом для кристаллов MoS₂ и GaN (Рис.1.19е). В случае экстремального значения модуля Юнга E_{2m} имеет место обратная ситуация: с локальным максимумом для кристаллов Mg и CdSe и глобальным максимумом для кристаллов MoS₂ и GaN.

Наибольшая разница между максимальным и минимальным значениями модуля Юнга обнаруживается у графита ($E_{\max}/E_{\min} = 71.8$). Большая разница ($E_{\max}/E_{\min} > 5$) также выявляется у RbNiCl₃ ($E_{\max}/E_{\min} = 5.52$) и CsNiF₃ ($E_{\max}/E_{\min} = 5.72$ для одного экспериментального набора коэффициентов податливости и 10.6 для второго набора коэффициентов податливости). Максимальный модуль Юнга с $E_{\max} > 500$ ГПа обнаруживается у графита ($E_{\max} = 1020$ ГПа), WC ($E_{\max} = 827$ ГПа), SiC ($E_{\max} = 556$ ГПа), Re ($E_{\max} = 588$ ГПа) и Ru ($E_{\max} = 550$ ГПа).

Экстремальные значения коэффициента Пуассона

Проанализируем экстремальные значения коэффициента Пуассона. Выражение (1.67) для коэффициента Пуассона зависит от двух углов Эйлера. Необходимые условия экстремальности (достижения максимумов или минимумов) коэффициента Пуассона состоят в выполнении условий стационарности

$$\frac{\partial \nu(\theta, \psi)}{\partial \psi} = 0, \quad \frac{\partial \nu(\theta, \psi)}{\partial \theta} = 0.$$

В результате дифференцирования выражения для коэффициента Пуассона (1.67) по углам θ и ψ эти условия дают следующую систему уравнений для стационарных значений углов

$$\begin{cases} \sin^2 \theta \sin 2\psi (\Pi_2 - \Pi_{02} \cos^2 \theta) = 0 \\ \sin 2\theta [\Pi_1 + \Pi_{01} \cos 2\theta + \Pi_2 \sin^2 \psi (1 + \Pi_1 - \Pi_{01} \sin^4 \theta) + \\ + \Pi_{02} \cos^2 \psi (\cos 2\theta + \Pi_1 \cos^4 \theta)] = 0. \end{cases} \quad (1.75)$$

Решениями первого уравнения будут $\theta = 0$; $\psi = 0$ или $\psi = \pi/2$ и $\cos^2 \theta = \Pi_2/\Pi_{02}$. Подстановка их во второе уравнение системы (1.75) позволяет найти восемь стационарных точек.

Значение коэффициента Пуассона

$$\nu_1 = \nu_{(0001),[0001]} = -\frac{s_{13}}{s_{33}} = -\frac{s_{13}}{s_{11}(1 + \Pi_1)} \quad (1.76)$$

достигается при $\theta = 0$ и произвольном угле ψ . Данное стационарное значение соответствует растяжению в направлении $[0001]$ и поперечной деформации в плоскости (0001) .

Значения коэффициентов Пуассона

$$\nu_2 = \nu_{[2\bar{1}\bar{1}0],[01\bar{1}0]} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \quad (1.77)$$

и

$$\nu_3 = \nu_{[000\bar{1}],[01\bar{1}0]} = -\frac{s_{12}}{s_{11}} = -\frac{s_{13}(1 + \Pi_2)}{s_{11}} \quad (1.78)$$

соответствуют точкам $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$ и $\theta = \psi = \pi/2$, соответственно.

Гексагональные кристаллы имеют следующие термодинамические ограничения, накладываемые на коэффициенты податливости

$$s_{11} > 0, \quad s_{33} > 0, \quad s_{44} > 0, \quad -s_{11} < s_{12} < s_{11}, \quad s_{33}(s_{11} - s_{12}) < 2s_{13}^2.$$

Используя последние два неравенства и формулу (1.78), можно записать ограничения, накладываемые на коэффициент Пуассона ν_3 ,

$$-1 < \nu_3 < \frac{2s_{13}^2}{s_{11}s_{33}}.$$

Численный анализ верхней границы $2s_{13}^2/(s_{11}s_{33})$ для 173 гексагональных кристаллов показывает, что эти значения для большинства кристаллов находятся в интервале от 0.65 до 0.9. Наименьшее значение верхней границы обнаруживается для цинка (0.57). В то время как коэффициент Пуассона ν_3 для цинка равен -0.07 . Наименьшая разница между коэффициентом ν_3 и верхней границей $2s_{13}^2/(s_{11}s_{33})$ выявляется у C_7H_{12} (0.76 и 0.86), Tl (0.77 и 0.91), In_2Bi (0.72 и 0.90), BN_3 (0.55 и 0.69) и $CuCl$ (0.68 и 0.88).

Существование других стационарных значений возможно при выполнении определенных ограничений на безразмерные комплексы коэффициентов податливости. Дополнительные стационарные значения коэффициента Пуассона имеют следующую общую структуру

$$\nu = -\frac{s_{13}}{s_{11}} f(\Pi_1, \Pi_2, \Pi_{01}, \Pi_{02}, \psi, \cos^2 \theta).$$

При этом подходящие значения углов θ , ψ могут быть найдены среди решений системы уравнений (1.75). Два решения уравнения (1.75) при $\sin 2\psi = 0$, т.е. при $\psi = 0$ и $\psi = \pi/2$, позволяют привести второе уравнение в (1.75) к двум квадратным

уравнениям ($\cos^2 \theta$ и $\sin^2 \theta$ соответственно), решение которых позволяет получить явные формулы стационарных значений.

При $\psi = 0$ стационарные значения коэффициента Пуассона имеют вид

$$\nu_{4,5} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \frac{1 + 0.25\Pi_{02} \sin^2 2\theta}{1 + \Pi_1 \cos^2 \theta - 0.25\Pi_{01} \sin^2 2\theta} \quad (1.79)$$

при ограничениях

$$0 \leq \cos^2 \theta_{4,5} = \frac{-(\Pi_{01} + \Pi_{02}) \pm \sqrt{D_1}}{\Pi_1 \Pi_{02}} \leq 1, \quad (1.80)$$

$$D_1 = (\Pi_{01} + \Pi_{02})^2 - \Pi_1 \Pi_{02} (\Pi_1 - \Pi_{01} - \Pi_{02}) \geq 0. \quad (1.81)$$

Значение ν_4 получается если в формуле (1.80) брать знак плюс, а ν_5 - минус.

При $\psi = \pi/2$ получаются следующие ограничения

$$0 \leq \sin^2 \theta_{6,7} = \frac{-\Pi_{01} \pm \sqrt{D_2}}{\Pi_{01} \Pi_2} \leq 1, \quad (1.82)$$

$$D_2 = \Pi_{01}^2 + \Pi_{01} \Pi_2 (\Pi_1 + \Pi_{01} + \Pi_2 + \Pi_1 \Pi_2) \geq 0 \quad (1.83)$$

при которых имеют место стационарные значения коэффициента Пуассона

$$\nu_{6,7} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \frac{1 + \Pi_2 \sin^2 \theta}{1 + \Pi_1 \cos^2 \theta - 0.25\Pi_{01} \sin^2 2\theta}. \quad (1.84)$$

Третий тип решений θ, ψ получается из второго уравнения в (1.75) для

$$\cos^2 \psi = \frac{a}{b}, \quad (1.85)$$

$$a = (\Pi_1 - \Pi_{01})\Pi_{02}^2 + \Pi_2[\Pi_{02}(1 + \Pi_1 + 2\Pi_{01}) - \Pi_1(\Pi_{02}^2 + \Pi_2^2 - 2\Pi_2\Pi_{02})],$$

$$b = \Pi_{02}(\Pi_{02} - \Pi_2)(\Pi_{02} + \Pi_1\Pi_2) + \Pi_{01}\Pi_2(\Pi_{02}^2 + 2\Pi_2\Pi_{02} - \Pi_2^2),$$

при подстановке в него решения первого уравнения (1.75) вида $\cos^2 \theta = \Pi_2/\Pi_{02}$. Решение этих двух уравнений позволяет определить из (1.67) экстремальное значение коэффициента Пуассона ν_8 .

Исследуем далее значения коэффициентов Пуассона $\nu_1 - \nu_8$ с точки зрения выполнения достаточного условия экстремума функции двух переменных. Если в указанных стационарных точках из вторых производных коэффициента Пуассона

$$A = \frac{\partial^2 \nu}{\partial \theta^2}, \quad B = \frac{\partial^2 \nu}{\partial \theta \partial \psi}, \quad C = \frac{\partial^2 \nu}{\partial \psi^2}$$

образовать комбинацию

$$D = AC - B^2,$$

то при $D > 0$ достигаются экстремумы коэффициента Пуассона в соответствующей стационарной точке (максимум при $A < 0$ и $C < 0$ или минимум при $A > 0$ и $C > 0$). В случае $D < 0$ в стационарной точке экстремумы отсутствуют, а при $D = 0$ требуется дополнительный анализ [188].

Таблица 1.12: Значения коэффициентов Пуассона $\nu_1 - \nu_7$ для некоторых гексагональных кристаллов. Глобальные максимальные и минимальные значения выделены полужирным.

Крис- таллы	ν_1		ν_2		ν_3		ν_4		ν_5		ν_6		ν_7	
	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max
BN ₃	0.39	-	0.39	-	0.55	-	-	-	0.27	min	0.58	max	-	-
Cd	0.26	-	0.73	max	0.10	min	-	-	0.25	min	0.27	max	-	-
CdS	0.33	-	0.26	min	0.48	max	0.45	max	-	-	-	-	0.31	min
CdTe	0.29	-	0.22	min	0.47	max	0.44	max	-	-	-	-	0.28	min
Co	0.25	-	0.18	min	0.46	max	0.35	max	-	-	-	-	-	-
CuCl	0.36	-	0.17	min	0.68	max	0.44	max	-	-	-	-	0.36	-
Gd	0.24	-	0.21	min	0.31	max	0.29	max	-	-	-	-	0.24	min
GaN	0.37	-	0.49	-	0.18	-	0.72	max	-	-	-	-	0.13	min
GaSe	0.09	min	0.26	-	0.26	-	0.50	max	-	-	-	-	-	-
GaS	0.08	-	0.24	min	0.26	max	0.54	max	-	-	-	-	0.07	min
Hf	0.26	-	0.22	min	0.35	max	0.28	max	-	-	-	-	-	-
Ho	0.21	-	0.19	min	0.28	max	0.24	max	-	-	-	-	-	-
InN	0.41	-	0.52	-	0.22	-	0.79	max	-	-	-	-	0.12	min
Mg	0.25	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min
MoS ₂	0.12	-	0.58	max	-0.28	min	-	-	-	-	-	-	-	-
Sc	0.21	-	0.18	min	0.34	max	0.32	max	-	-	-	-	0.21	min
SiC	0.09	-	0.08	min	0.18	max	0.25	max	-	-	-	-	-	-
Tl	0.38	-	0.12	-	0.779	-	-	-	0.10	min	0.783	max	-	-
Ti	0.27	-	0.19	min	0.49	max	0.27	-	-	-	-	-	-	-
WC	0.27	-	0.20	-	0.28	-	-	-	0.15	min	0.30	max	-	-
Zn	0.25	-	0.85	max	-0.07	min	-	-	0.07	min	0.28	max	-	-
ZnO	0.32	-	0.27	min	0.44	max	0.37	max	-	-	-	-	0.32	min
ZnS	0.26	-	0.20	min	0.398	max	0.395	max	-	-	-	-	0.25	min

В случае стационарной точки с $\theta = 0$ и любым ψ имеем $\nu = \nu_1$, и комбинация коэффициентов D обращается в нуль ($D = 0$). В силу $D = 0$ требуется дополнительный анализ для каждого конкретного кристалла. Коэффициент Пуассона ν_1 будет экстремумом, например, для BaSc_xFe_{12-x}O₁₉ ($\nu_1 = \nu_{\min}$), GaSe ($\nu_1 = \nu_{\min}$), Zr-O ($\nu_1 = \nu_{\max}$) (см. Табл.П.12 на стр.332).

В случае стационарной точки $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$ мы имеем $\nu = \nu_2$ и

$$D = \frac{4s_{13}^2(\Pi_{02} - \Pi_1 + \Pi_{01})\Pi_2}{s_{11}^2},$$

$$A = -\frac{2s_{13}(\Pi_{02} - \Pi_1 + \Pi_{01})}{s_{11}}, \quad C = -\frac{2s_{13}\Pi_2}{s_{11}}.$$

Тогда согласно достаточному условию экстремума функции значение коэффициента Пуассона ν_2 будет экстремальным, если $(\Pi_{02} - \Pi_1 + \Pi_{01})\Pi_2 > 0$. Значение ν_2 будет максимумом при $s_{13}(\Pi_{02} - \Pi_1 + \Pi_{01}) > 0$ или $s_{13}\Pi_2 > 0$ и минимумом при $s_{13}(\Pi_{02} - \Pi_1 + \Pi_{01}) < 0$ или $s_{13}\Pi_2 < 0$ с учетом положительности коэффициента податливости s_{11} .

В случае стационарной точки $\theta = \psi = \pi/2$ имеем $\nu = \nu_3$ и

$$D = -\frac{4s_{13}^2 [(\Pi_{01} - \Pi_1)(1 + \Pi_2) - \Pi_2] \Pi_2}{s_{11}^2},$$

$$A = -\frac{2s_{13} [(\Pi_{01} - \Pi_1)(1 + \Pi_2) - \Pi_2]}{s_{11}}, \quad C = \frac{2s_{13}\Pi_2}{s_{11}}.$$

Значение коэффициента Пуассона ν_3 будет экстремальным, если $[(\Pi_{01} - \Pi_1)(1 + \Pi_2) - \Pi_2]\Pi_2 > 0$. Значение ν_3 является максимумом при $s_{13}[(\Pi_{01} - \Pi_1)(1 + \Pi_2) - \Pi_2] > 0$ или $s_{13}\Pi_2 < 0$ и минимумом при $s_{13}[(\Pi_{01} - \Pi_1)(1 + \Pi_2) - \Pi_2] < 0$ или $s_{13}\Pi_2 > 0$.

Для стационарных значений коэффициента Пуассона $\nu_4 - \nu_8$ вторые производные A , C и D имеют громоздкий аналитический вид. Поэтому в работе был проведен только их численный анализ для 143 гексагональных кристаллов. Результаты этого анализа представлены в Табл.1.12 и Табл.П.12 (стр.332). В этой таблице приведены значения только семи стационарных значений коэффициента Пуассона $\nu_1 - \nu_7$. Значение ν_8 пропущено, так как проведенный анализ изменчивости коэффициента Пуассона для 143 гексагональных кристаллов показал, что коэффициент ν_8 является точкой перегиба. Табл.П.12 содержит значение всех восьми стационарных значений коэффициента Пуассона. Глобальные максимальные и минимальные значения в Табл.1.12 и Табл.П.12 выделены полужирным.

С помощью численного анализа изменчивости коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов удастся выявить семь кристаллов с отрицательным минимальным коэффициентом Пуассона. Этими кристаллами являются Be ($\nu_{\min} = -0.005$), Be-Cu at 2.4% ($\nu_{\min} = -0.04$), MnAs ($\nu_{\min} = -0.04$), MoS₂ ($\nu_{\min} = -0.28$), C₇H₁₂ ($\nu_{\min} = -0.15$), TiB₂ ($\nu_{\min} = -0.03$) и Zn ($\nu_{\min} = -0.07$). На Рис.1.20 приведены поверхности коэффициента Пуассона для этих гексагональных ауксетиков. Поверхность коэффициента Пуассона для сплава BeCu не приведена, так как слабо отличается от поверхности Be. Также отрицательный коэффициент Пуассона обнаруживается у кристаллов Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂, CdS и InSe. Однако эти три кристалла имеют два (и более) экспериментальных набора коэффициентов податливости. При

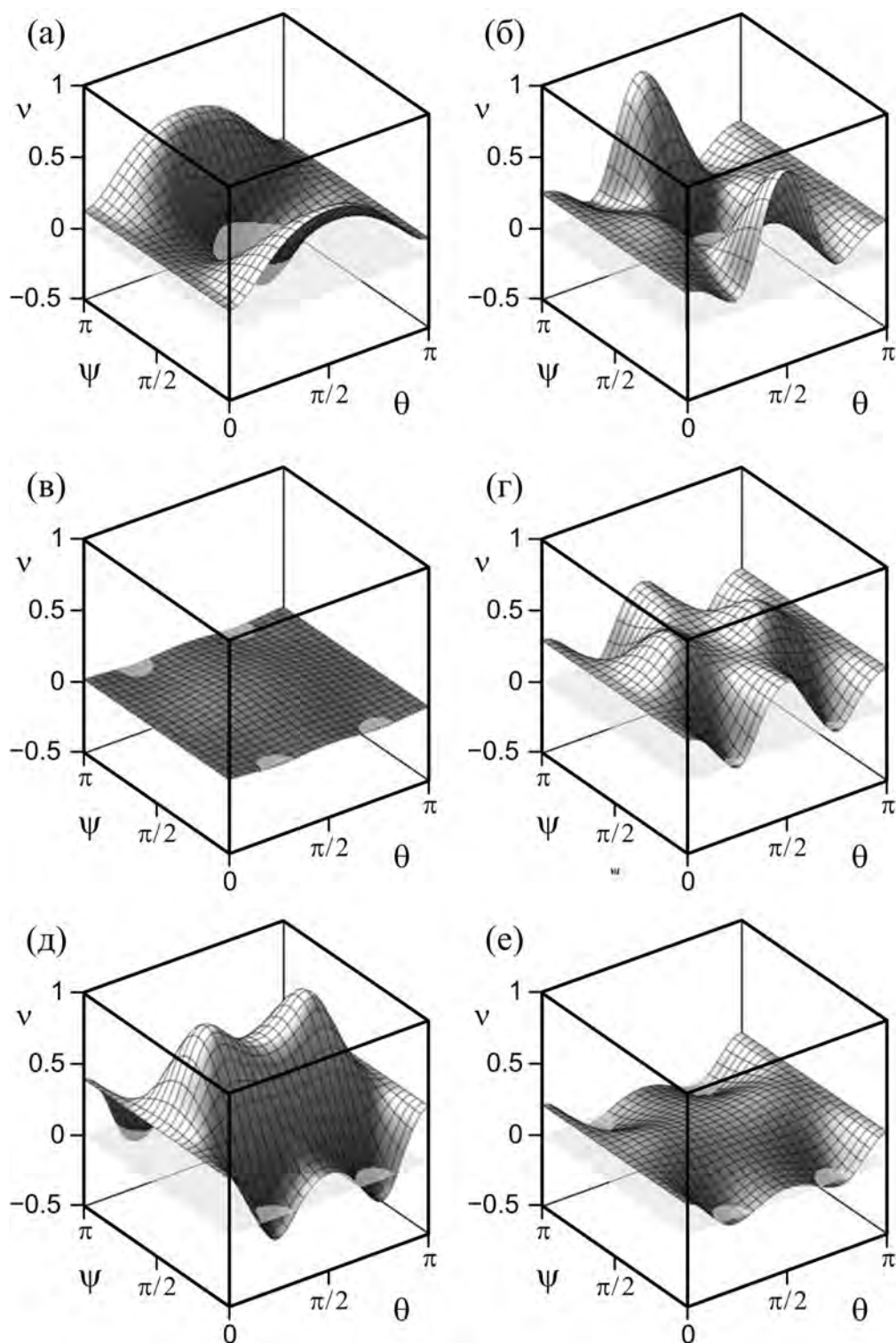


Рис. 1.20: Поверхности коэффициентов Пуассона гексагональных ауксетиков MoS_2 (а), Zn (б), Be (в), TiB_2 (г), C_7H_{12} (д) и MnAs (е).

других наборах коэффициент Пуассона оказывается положительным. Наибольшие значения коэффициента Пуассона с $\nu_{\max} \geq 0.8$ выявляются у графита ($\nu_{\max} = 0.86$), RbNiCl_3 ($\nu_{\max} = 0.84$), RbMnCl_3 ($\nu_{\max} = 0.81$) и $\text{KMg}_3\text{AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH},\text{F})_2$ ($\nu_{\max} = 0.80$).

Обнаруживается 29 кристаллов, у которых максимальное значение коэффициента Пуассона больше 0.5 (больше верхней границы для изотропных материалов). В [189] утверждается, что кадмий может иметь отрицательный коэффициент Пуассона при определенных ориентациях. Результаты из Табл.1.12 указывают на то, что это не так (коэффициент Пуассона для кадмия меняется в интервале от 0.10 и до 0.73). В работе [189] ошибка допущена при пересчете упругих констант.

Анализ стационарных значений коэффициента Пуассона, описываемых формулами (1.76) - (1.84), показывает, что коэффициенты ν_1 и ν_2 будут отрицательными при $s_{13} > 0$. Однако большинство гексагональных кристаллов имеют отрицательное значение коэффициента податливости s_{13} . Положительный коэффициент s_{13} выявляется только у одного из пяти наборов упругих констант CdS [172]. Стационарное значение коэффициента Пуассона ν_3 оказывается отрицательным при $s_{12} > 0$. Это имеет место для кристаллов MoS₂, Zn и одного из наборов упругих констант для Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂, InSe из [172]. В связи с тем, что большинство гексагональных кристаллов имеют отрицательное значение коэффициента податливости s_{13} , отрицательные коэффициенты Пуассона $\nu_{4,5}$ и $\nu_{6,7}$ будут наблюдаться при $\Pi_{02} < -4$ и $\Pi_2 < -1$ соответственно. Условие $\Pi_{02} < -4$ выполняется для гексагональных ауксетиков Be ($\Pi_{02} = -5.20$), Be-Cu at 2.4% ($\Pi_{02} = -18.33$), MnAs ($\Pi_{02} = -5.15$), C₇H₁₂ ($\Pi_{02} = -5.58$) и TiB₂ ($\Pi_{02} = -4.19$). Ауксетиков, у которых коэффициенты Пуассона $\nu_{6,7}$ отрицательны ($\Pi_2 < -1$), не обнаружено, т.к. условия (1.82) и (1.83) для этих материалов не выполняются.

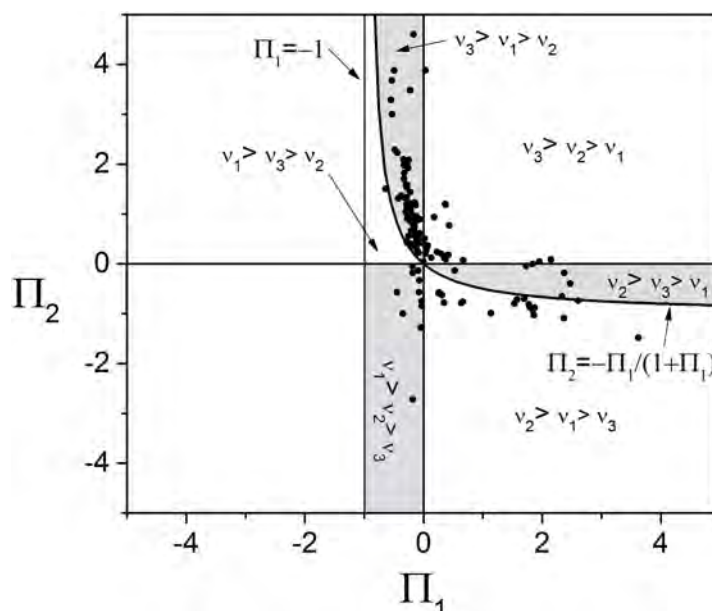


Рис. 1.21: Классификационная схема трех экстремальных значений коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов на плоскости безразмерных параметров Π_1 и Π_2 . Кружками отмечены значения безразмерных параметров Π_1 и Π_2 для 143 гексагональных кристаллов из [172].

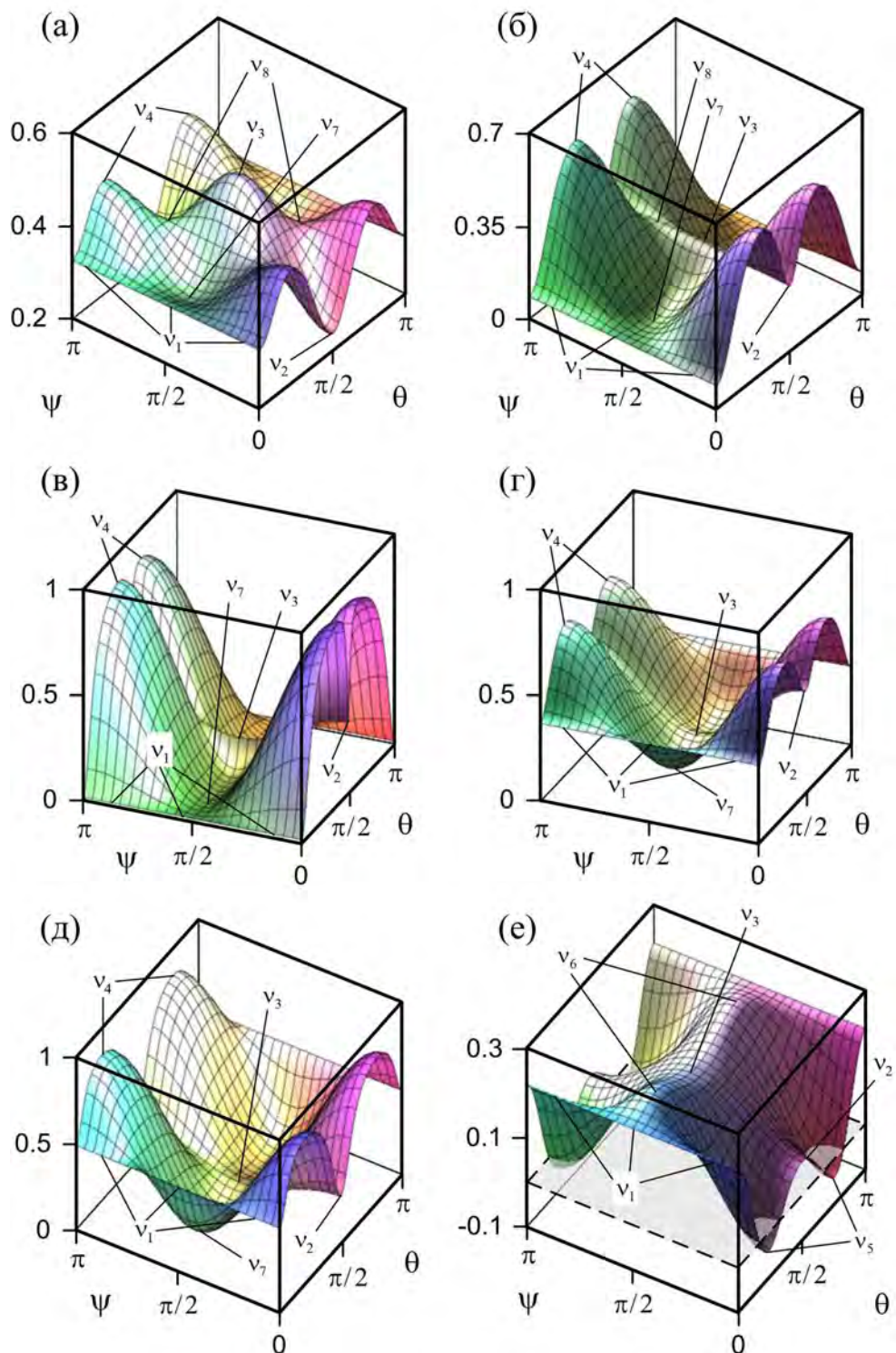


Рис. 1.22: Поверхности коэффициента Пуассона для некоторых гексагональных кристаллов, попадающих в зоны: $\nu_3 > \nu_1 > \nu_2$ (CdSe) (а), $\nu_3 > \nu_2 > \nu_1$ (GaS) (б), $\nu_2 > \nu_3 > \nu_1$ (C, графит) (в), $\nu_2 > \nu_1 > \nu_3$ (GaN) (г), $\nu_1 > \nu_2 > \nu_3$ (RbNiCl₃) (д), $\nu_1 > \nu_3 > \nu_2$ (MnAs) (е).

На Рис.1.21, основываясь на формулах (1.76) - (1.78), представлена классификационная схема для трех коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 в зависимости от двух безразмерных параметров Π_1 и Π_2 . На этом рисунке точками нанесены значения безразмерных параметров Π_1 и Π_2 для 143 гексагональных кристаллов из [172]. Как видно из рисунка большинство кристаллов находится в интервале $-1 < \Pi_1 < 0$ и $\nu_3 > \nu_1 > \nu_2$. На классификационной схеме выделено шесть зон с различными неравенствами между экстремальными значениями коэффициента Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 . Для каждой из этих зон на Рис.1.22 представлены поверхности коэффициента Пуассона $\nu(\theta, \psi)$ в случае некоторых гексагональных кристаллов.

Анализ стационарных значений коэффициентов Пуассона показывает, что если существуют коэффициенты ν_4 и ν_7 , то ν_5 и ν_6 отсутствуют (и наоборот). При этом коэффициенты Пуассона ν_4 и ν_7 являются максимумами, ν_5 и ν_6 - минимумами. Как видно из Рис.1.22 коэффициенты Пуассона ν_4 и ν_7 выявляются у кристаллов CdSe, GaS, графита, GaN, RbNiCl₃. Для кристалла CdSe коэффициенты ν_4 и ν_7 являются локальным максимумом и локальным минимумом соответственно. В случае кристаллов GaS, графита, GaN, RbNiCl₃ коэффициенты Пуассона ν_4 и ν_7 будут глобальным максимумом и глобальным минимумом. Для кристалла MnAs коэффициент Пуассона ν_5 принимает отрицательное значение и является глобальным минимумом, а ν_6 - глобальный максимум.

Экстремальные значения модуля сдвига

Проанализируем экстремальные значения модуля сдвига. Выражение (1.68) для модуля сдвига гексагональных кристаллов зависит от двух углов Эйлера. Необходимые условия экстремальности (достижения максимумов или минимумов) модуля сдвига состоят в выполнении условий стационарности

$$\begin{cases} \frac{\partial G(\theta, \psi)}{\partial \psi} = 0 \\ \frac{\partial G(\theta, \psi)}{\partial \theta} = 0 \end{cases}$$

В результате дифференцирования выражения для модуля сдвига (1.68) по углам θ и ψ эти условия дают следующую систему уравнений для стационарных значений углов

$$\begin{cases} \sin^2 \theta \sin 2\psi (\Pi_3 - 4\Pi_{03} \cos^2 \theta) = 0 \\ \sin 2\theta (\Pi_3 \sin^2 \psi + 4\Pi_{03} \cos 2\theta \cos^2 \psi) = 0 \end{cases} \quad (1.86)$$

Решениями первого уравнения будут $\theta = 0$; $\psi = 0$ или $\psi = \pi/2$ и $\cos^2 \theta = \Pi_3/(4\Pi_{03})$. Подстановка их во второе уравнение системы (1.86) позволяет найти несколько стационарных точек: $\theta = 0$ и ψ произвольное; $\psi = 0$ и $\theta = \pi/4$; $\psi = 0$ и $\theta = \pi/2$; $\psi = 0$ и $\theta = 3\pi/4$; $\psi = \pi/2$ и $\theta = \pi/2$; $\psi = \psi_0$ и $\theta = \theta_0$, $0 \leq \cos^2 \psi_0 = \Pi_3/(4\Pi_{03} - \Pi_3) \leq 1$, $0 \leq \cos^2 \theta_0 = \Pi_3/(4\Pi_{03}) \leq 1$. Этим стационарным точкам соответствуют четыре значения модуля сдвига.

Значение модуля сдвига

$$G_1 = \frac{1}{s_{44}} \quad (1.87)$$

достигается при $\theta = 0$ и любых углах ψ , а также при $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$. Это возможно для плоскости скольжения (001) и направлений скольжения $\mathbf{m} = (\cos(\varphi + \psi), \sin(\varphi + \psi), 0)^T$ и $\mathbf{n} = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)^T$, $\mathbf{m} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)^T$. Угол φ является углом поворота кристаллографической системы координат в плоскости (0001), т.е. в плоскости изотропии.

Другое значение модуля сдвига

$$G_2 = \frac{1}{s_{44}(1 + \Pi_3)} = \frac{1}{s_{66}} \quad (1.88)$$

достигается при $\theta = \psi = \pi/2$, что соответствует единичным векторам $\mathbf{n} = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)^T$, $\mathbf{m} = (0, 0, 1)^T$. Третье значение

$$G_3 = \frac{1}{s_{44}(1 + \Pi_{03})} = \frac{1}{s_{11} + s_{33} - 2s_{13}} \quad (1.89)$$

достигается при $\theta = \pi/4$, $\psi = 0$ и $\theta = 3\pi/4$, $\psi = 0$, что соответствует векторам $\mathbf{n} = (\sqrt{2}/2 \sin \varphi, -\sqrt{2}/2 \cos \varphi, \sqrt{2}/2)^T$, $\mathbf{m} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)^T$. Наконец, значение модуля сдвига

$$G_4^{-1} = s_{44} \left(1 + \Pi_3 - \frac{\Pi_3^2}{4\Pi_{03}} \right) \quad (1.90)$$

возможно в стационарных точках θ_0 , ψ_0 при $0 \leq \cos^2 \theta_0 = 0.25\Pi_3/\Pi_{03} \leq 1$, $0 \leq \cos^2 \psi_0 = \Pi_3/(4\Pi_{03} - \Pi_3) \leq 1$.

Исследуем далее значения G_1 , G_2 , G_3 , G_4 с точки зрения выполнения достаточного условия экстремума функции двух переменных (см. стр.67).

В случае стационарной точки $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$ мы имеем $G = G_1$ и

$$D = \frac{16\Pi_{03}\Pi_3}{s_{44}}, \quad A = -\frac{8\Pi_{03}}{s_{44}}. \quad (1.91)$$

Определение коэффициентов A , B , C , D представлено на стр.67. Тогда согласно достаточному условию экстремума функции с учетом положительности коэффициента податливости s_{44} значение модуля сдвига G_1 будет экстремальным, если $\Pi_3 > 0$, $\Pi_{03} > 0$ или $\Pi_3 < 0$, $\Pi_{03} < 0$. При $\Pi_{03} > 0$ ($A < 0$) значение G_1 соответствует максимуму, а при $\Pi_{03} < 0$ ($A > 0$) минимуму.

В случае стационарной точки с $\theta = 0$ и любым ψ имеем $G = G_1$, комбинация коэффициентов D обращается в нуль и

$$A = -\frac{2(4\Pi_{03}\cos^2\psi + \Pi_3\sin^2\psi)}{s_{44}}. \quad (1.92)$$

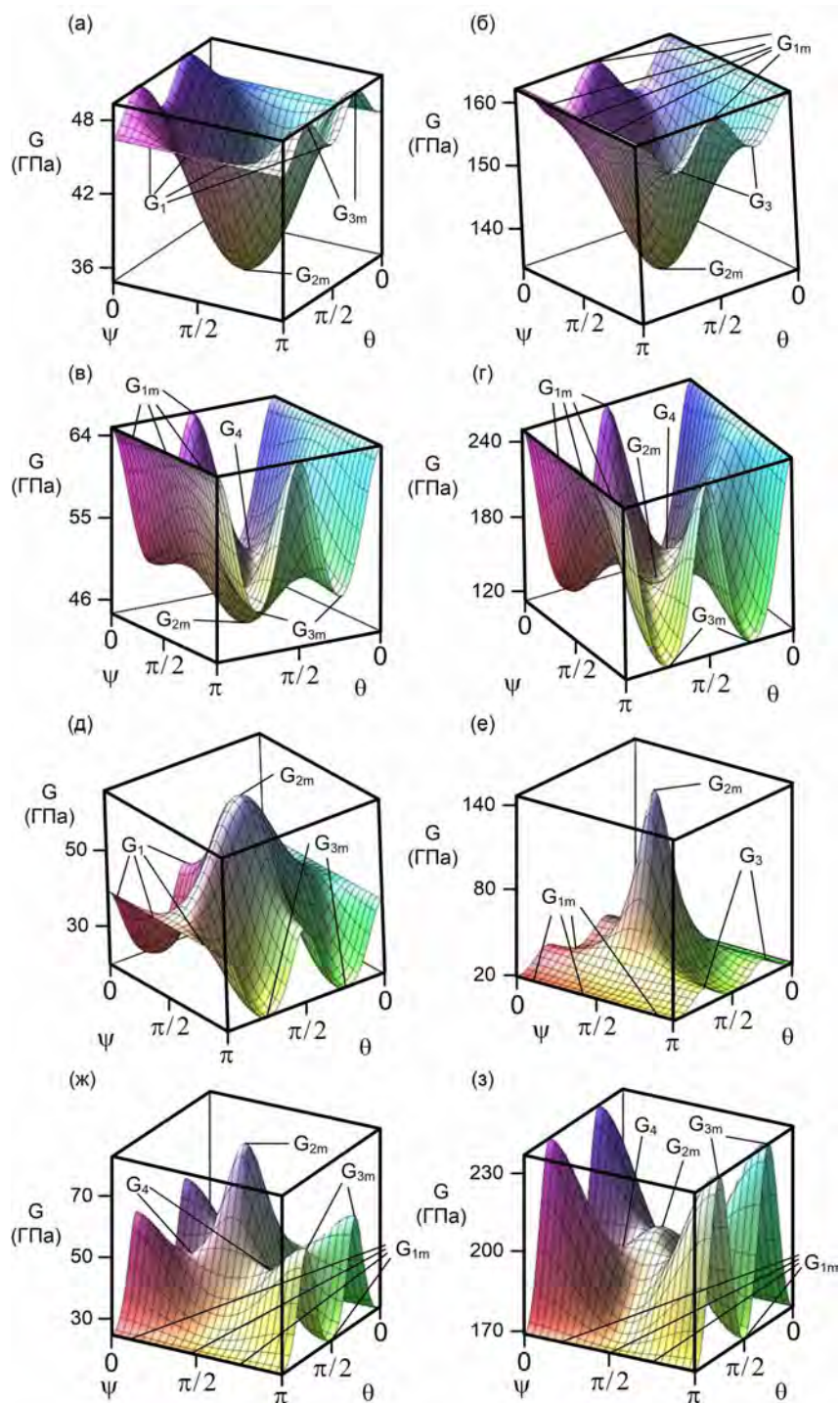


Рис. 1.23: Зависимость модуля сдвига $G(\theta, \psi)$ от двух углов ориентации гексагональных кристаллов Ti ($G_3 > \bar{G}_1 > G_2$) (а), Be ($G_1 > \bar{G}_3 > G_2$) (б), BN_3 ($G_1 > G_3 > G_2$) (в), TiB_2 ($G_1 > G_2 > G_3$) (г), Zn ($G_2 > \bar{G}_1 > G_3$) (д), MoS_2 ($G_2 > \bar{G}_3 > G_1$) (е), GaN ($G_2 > G_3 > G_1$) (ж) и SiC ($G_3 > G_2 > G_1$) (з). \bar{G}_n - значения модуля сдвига в стационарных точках, не являющихся экстремальными значениями.

Таблица 1.13: Экстремальные значения модуля сдвига для некоторых гексагональных кристаллов и значения углов θ_0, ψ_0 (в градусах), при которых достигается значение G_4 , а также значения безразмерных параметров Π_3, Π_{03} и $\alpha_3 = \Pi_{03}(2\Pi_{03} - \Pi_3)$.

Кристаллы	Π_{03}	Π_3	α_3	G_1 , ГПа	G_2 , ГПа	G_3 , ГПа	G_4 , ГПа	θ_0 град	ψ_0 град
Be	0.04	0.21	-0.005	162	134	156	-	-	-
Cd	0.23	-0.49	0.21	18.8	36.8	15.3	-	-	-
CdSe	-0.32	-0.08	0.17	13.4	14.53	19.6	14.46	75.5	75.0
Co	-0.24	0.06	0.13	70.9	66.8	93.6	-	-	-
GaN	-0.60	-0.71	0.29	24.1	83.1	59.7	48.1	56.9	49.4
GaSe	-0.54	-0.73	0.18	10.2	37.9	21.9	19.6	54.2	43.9
C (графит)	-0.88	-0.99	0.69	4	439	34.3	13.9	58.0	51.4
MnAs	0.36	1.14	-0.15	34.5	16.1	25.4	-	-	-
MoS ₂	-0.40	-0.87	-0.03	18.6	146	30.8	-	-	-
C ₇ H ₁₂	1.22	3.33	-1.09	0.91	0.21	0.41	-	-	-
SiC	-0.29	-0.17	0.12	169	204	237	198	67.2	65.2
Ti	-0.06	0.34	0.03	46.5	34.7	49.5	-	-	-
TiB ₂	1.21	0.79	1.96	250	140	113	151	66.2	63.8
Zn	0.97	-0.40	2.28	39.5	65.6	20.0	-	-	-

В силу $D = 0$ здесь требуется дополнительный анализ для каждого конкретного кристалла. Для кристаллов Be и TiB₂ на Рис.1.23б и Рис.1.23г представлены поверхности изменчивости модуля сдвига в зависимости от двух углов Эйлера θ, ψ , из которых видно, что значения G_1 при $\theta = 0$ и любом ψ являются максимальными. Для этих материалов безразмерные параметры Π_3, Π_{03} положительны (см. Табл.1.13) и соответственно A отрицательно. Для кристаллов GaN и SiC значение модуля сдвига G_1 при $\theta = 0$ будет минимальным (Рис.1.23ж и Рис.1.23з). Кристаллы GaN и SiC характеризуются отрицательными безразмерными параметрами Π_3, Π_{03} (см. Табл.1.13) и соответственно положительными значениями A . У кристаллов Zn и Ti безразмерные параметры имеют противоположные знаки (Zn - $\Pi_3 = -0.40$, $\Pi_{03} = 0.97$; Ti - $\Pi_3 = 0.34$, $\Pi_{03} = -0.06$). Поэтому A может менять знак в зависимости от величины угла ψ при $\theta = 0$. Тогда, как видно из Рис.1.23а и Рис.1.23д для кристаллов Ti и Zn, значение модуля сдвига G_1 не является экстремальным.

В случае стационарной точки $\theta = \psi = \pi/2$ имеем $G = G_2$ и

$$D = \frac{4\Pi_3^2}{s_{44}^2(1 + \Pi_3)^4} > 0, \quad A = \frac{2\Pi_3}{s_{44}(1 + \Pi_3)^2}. \quad (1.93)$$

Значение G_2 будет всегда являться экстремальным в силу положительности D . При

$\Pi_3 > 0$ A также положительно и значение G_2 является минимальным для модуля сдвига. При $\Pi_3 < 0$ справедливо $A < 0$ и обсуждаемое значение оказывается максимумом.

В случае стационарных точек $\theta = \pi/4, \psi = 0$ и $\theta = 3\pi/4, \psi = 0$ имеем $G = G_3$ и

$$D = \frac{8\Pi_{03}(2\Pi_{03} - \Pi_3)}{s_{44}^2(1 + \Pi_{03})^4}, \quad A = \frac{8\Pi_{03}}{s_{44}(1 + \Pi_{03})^2}. \quad (1.94)$$

Значение G_3 будет экстремумом при $\Pi_{03}(2\Pi_{03} - \Pi_3) > 0$ в силу положительности D . При $\Pi_{03} > 0$ оказывается $A > 0$ и значение G_3 является минимумом, а при $\Pi_{03} < 0$ ($A < 0$) максимумом.

Наконец, для $G = G_4$ при выполнении условий $0 \leq \cos^2 \theta_0 = 0.25\Pi_3/\Pi_{03} \leq 1$, $0 \leq \cos^2 \psi_0 = \Pi_3/(4\Pi_{03} - \Pi_3) \leq 1$ имеем

$$D = -\frac{512(2\Pi_{03} - \Pi_3)(4\Pi_{03} - \Pi_3)\Pi_3^2\Pi_{03}^2}{s_{44}^2(4\Pi_{03} + 4\Pi_3\Pi_{03} - \Pi_3^2)^4}, \quad (1.95)$$

$$A = \frac{32\Pi_3^2\Pi_{03}}{s_{44}(4\Pi_{03} + 4\Pi_3\Pi_{03} - \Pi_3^2)^2}. \quad (1.96)$$

Анализ, проведенный для 143 гексагональных кристаллов из справочника [172], показал, что для 43 кристаллов не возможна реализация $G = G_4$ (смотри Табл.1.13 и Табл.П.13 на стр.339). Для других ста гексагональных кристаллов комбинация коэффициентов D всегда отрицательна, т.е. G_4 не может быть экстремумом. В этих случаях G_4 соответствует точкам перегиба. Это хорошо видно на Рис.1.23в, г, ж и з. В Табл.1.13 и в Табл.П.13 даны значения углов θ_0, ψ_0 , при которых существует G_4 .

В Табл.1.13 приведены экстремальные значения модуля сдвига ряда хорошо известных материалов. Полужирным в таблице отмечены глобальные максимальные и минимальные значения модуля сдвига. Как видно из таблицы значение G_1 не является экстремумом при $\psi = 0, \theta = \pi/2$ для четырех кристаллов Cd, Co, Ti, Zn. Для этих кристаллов безразмерные параметры Π_3 и Π_{03} имеют противоположные знаки и соответственно $D < 0$. Для большинства гексагональных кристаллов значение G_2 оказывается глобальным максимумом или глобальным минимумом (см. Табл.1.13 и Табл.П.13). Для кристаллов CdSe, SiC, TiB₂, указанных в Табл.1.13, значение G_2 является локальным экстремумом. Это иллюстрирует Рис.1.23з для кристалла SiC. В Табл.1.13 присутствуют кристаллы, у которых $\Pi_{03}(2\Pi_{03} - \Pi_3) > 0$, но значения G_3 не является глобальным экстремумом. Такими будут кристаллы GaN, GaSe, C (графита). Для них значение G_3 является локальным экстремумом. Для кристалла GaN это видно из Рис.1.23ж. Полный список всех гексагональных кристаллов и их экстремальных значений представлены в Табл.П.13. Наибольшая разница между максимальным и минимальным значениями выявляется у слоистого

материала - графита ($G_{\max}/G_{\min} = 109.75$). Большое различие между максимумом и минимумом характерно также для MoS_2 .

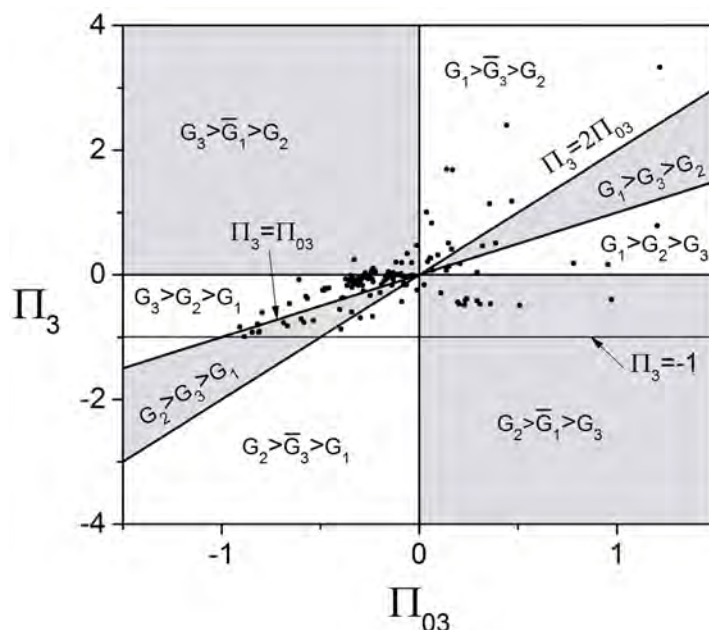


Рис. 1.24: Классификационная схема экстремальных значений модуля сдвига гексагональных кристаллов в зависимости от безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 . Кружками отмечены значения безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 для 143 гексагональных кристаллов из [172]. \bar{G}_n - значения модуля сдвига в стационарных точках, не являющихся экстремальными значениями.

На Рис.1.24 изображена классификационная схема для экстремумов модуля сдвига в зависимости от двух безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 , полученная на основе анализа формул (1.87) - (1.96) и данных из Табл.П.13. На этом рисунке точками нанесены значения безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 для всех гексагональных кристаллов из [172]. Большинство кристаллов имеют $\Pi_{03} < 0$. На классификационной схеме выделено восемь зон с различными неравенствами между G_1 , G_2 , G_3 . Для каждой из этих зон на Рис.1.24 дается по одному примеру поверхности модуля сдвига. Значения модулей в стационарных точках, не являющихся экстремальными, обозначены через \bar{G}_n .

Как видно из Рис.1.23 в четырех поверхностях отсутствует значение G_4 (Рис.1.23а,б,д,е), а на других четырех поверхностях G_4 присутствует (Рис.1.23в,г,ж и з). Это характерно не только для представленных на рисунке материалов, но и для других гексагональных материалов, попадающих в соответствующие классификационные зоны. Сравнение Рис.1.23а и Рис.1.23б показывает, что значение G_2 будет глобальным минимумом в обоих случаях, а G_3 и G_1 при $\psi = 0$, $\theta = \pi/2$ являются максимумом и точкой перегиба для Ti и точкой перегиба и максимумом для Be. В случае поверхностей модуля сдвига для VN_3 (Рис.1.23в) и TiB_2 (Рис.1.23г) значение G_1 при $\psi = 0$, $\theta = \pi/2$ соответствует глобальному максимуму. Значения

G_2 и G_3 являются минимумами (глобальный G_2 и локальный G_3 для BN_3 и локальный G_2 и глобальный G_3 для TiB_2). Сравнение поверхностей модулей сдвига для Zn (Рис.1.23д) и MoS_2 (Рис.1.23е) показывает, что G_2 будет глобальным максимумом, а G_3 и G_1 при $\psi = 0$, $\theta = \pi/2$ являются минимумом и точкой перегиба для Zn и точкой перегиба и минимумом для MoS_2 . В случае поверхностей модуля сдвига для GaN (Рис.1.23ж) и SiC (Рис.1.23з) значение G_1 при $\psi = 0$, $\theta = \pi/2$ соответствует глобальному минимуму. Значения G_2 и G_3 являются максимумами (глобальный G_2 и локальный G_3 для GaN и локальный G_2 и глобальный G_3 для SiC).

1.3.3. Влияние давления на упругие свойства гексагональных кристаллов [18, 19]

В случае изотропного начального напряжения, т.е. при давлении p , происходит изменение коэффициентов упругой жесткости с сохранением их полной фойгтовской симметрии

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{klij}.$$

Зависимость коэффициентов жесткости от давления при этом для кристаллов всех кристаллических систем имеет общий вид [190]

$$C_{ijkl} = c_{ijkl} + p(\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{jk}\delta_{il}).$$

В частном случае гексагональных кристаллов при матричной записи коэффициентов жесткости получим

$$\begin{aligned} C_{11} &= c_{11} - p, & C_{12} &= c_{12} + p, & C_{13} &= c_{13} + p, \\ C_{33} &= c_{33} - p, & C_{44} &= c_{44} - p, & C_{66} &= 0.5(c_{11} - c_{12}) - p. \end{aligned} \quad (1.97)$$

Положительная определенность энергии деформации накладывает на упругие константы следующие термодинамические ограничения

$$\begin{aligned} C_{11} &> 0, & C_{11} - C_{12} &> 0, & C_{11} + C_{12} &> 0, \\ C_{33} &> 0, & C_{44} &> 0, & C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2 &> 0. \end{aligned}$$

Используя эти неравенства и формулы (1.97), термодинамические ограничения можно записать в виде

$$\begin{aligned} c_{11} &> p, & c_{33} &> p, & c_{44} &> p, & c_{11} - c_{12} - 2p &> 0, \\ 2p^2 &+ (c_{11} + c_{12} + 4c_{13})p - (c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2) &< 0. \end{aligned} \quad (1.98)$$

С помощью этих неравенств получают ограничения на прикладываемые значения давления, при которых кристалл остается устойчивым.

Для дальнейшего анализа экстремальных значений упругих характеристик будем использовать связь между эффективными коэффициентами податливости и эффективными коэффициентами жесткости [171, 190]

$$\begin{aligned} S_{11} + S_{12} &= \frac{C_{33}}{C^2}, & S_{11} - S_{12} &= \frac{1}{C_{11} - C_{12}}, & S_{13} &= -\frac{C_{13}}{C^2}, \\ S_{33} &= \frac{C_{11} + C_{12}}{C^2}, & S_{44} &= \frac{1}{C_{44}}, & C^2 &\equiv C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2. \end{aligned}$$

Полученные в подразделе 1.3.2 формулы для экстремальных значений коэффициента Пуассона можно применять для численного анализа влияния давления на упругие свойства гексагональных кристаллов. Для этого в (1.76) - (1.84) необходимо сделать замену s_{ij} на S_{ij} .

Численный анализ поверхностей ауксетичности $\nu(\theta, \psi; p) = 0$ для гексагональных ауксетиков показывает, что топология этих поверхностей сильно зависит от модулей жесткости материалов и давления (см. Рис.1.25). Для MoS_2 зона ауксетичности находится под изображенной поверхностью ауксетичности на Рис.1.25а. При увеличении сжимающего давления зона ауксетичности будет уменьшаться. В обратной ситуации, когда увеличивается отрицательное давление, зона ауксетичности будет увеличиваться, и при давлениях $p < -38.2$ ГПа кристалл MoS_2 становится полным ауксетиком. При $p = -38.2$ ГПа обращается в нуль экстремальное значение ν_5 .

Ниже будет проведен численный анализ влияния давления для трех экстремальных значений коэффициента Пуассона ν_1, ν_2, ν_3 , т.к. эти экстремумы, в отличие от других пяти, существуют во всем диапазоне изменения давления, при которых кристалл остается устойчивым.

Формулу для экстремального значения коэффициента Пуассона ν_1 (1.76) можно записать через коэффициенты жесткости и давление в виде

$$\nu_1 = -\frac{S_{13}}{S_{33}} = \frac{C_{13}}{C_{11} + C_{12}} = \frac{c_{13} + p}{c_{11} + c_{12}}. \quad (1.99)$$

Коэффициент Пуассона ν_1 оказывается линейно зависящим от давления и обращается в нуль при $p = -c_{13}$. Для упругих констант гексагональных материалов, представленных в справочнике [172], справедлива положительность коэффициента жесткости c_{13} . В силу $c_{13} > 0$ и $(c_{11} + c_{12}) > 0$ коэффициент Пуассона ν_1 будет отрицательным при $p < -c_{13}$, т.е. при изотропном растяжении. Анализ формулы для коэффициента Пуассона ν_2 , записанной через коэффициенты жесткости и давление, показывает, что коэффициент ν_2 будет отрицательным также при $p < -c_{13}$. В случае условия $\nu_3 = 0$ значение давления находится из решения квадратного уравнения

$$3p^2 - (c_{33} - c_{12} - 4c_{13})p - (c_{12}c_{33} + 2c_{13}^2) = 0.$$

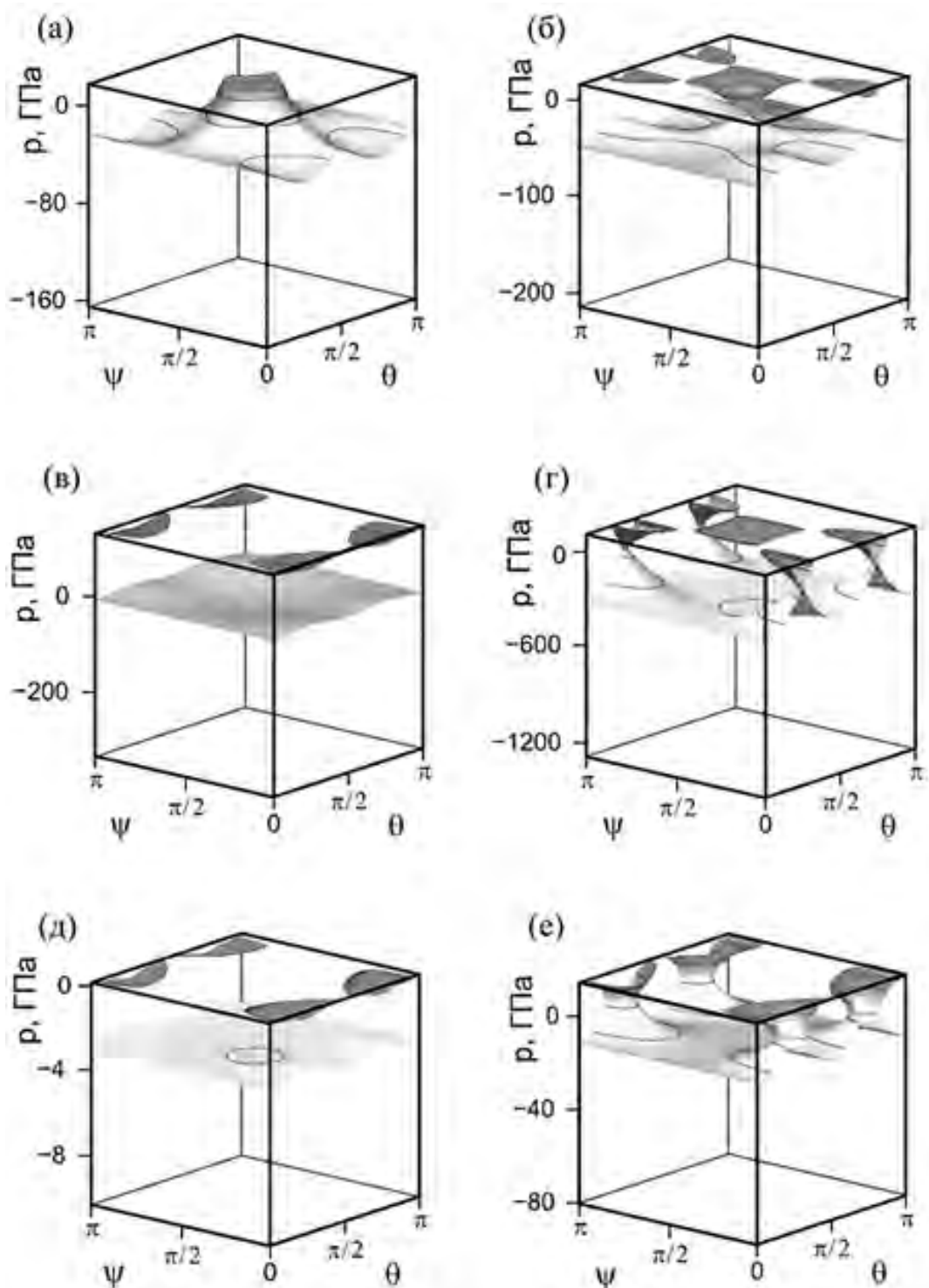


Рис. 1.25: Поверхности ауксетичности $\nu(\varphi, \theta; p) = 0$ гексагональных ауксетиков MoS_2 (а), Zn (б), Be (в), TiB_2 (г), C_7H_2 (д) и MnAs (е).

Согласно приведенному выше анализу для MoS_2 коэффициенты Пуассона ν_1 и ν_2 будут отрицательными при $p < -23$ ГПа, а коэффициент ν_3 будет оставаться отрицательным всегда. На Рис.1.26а изображены зависимости коэффициентов

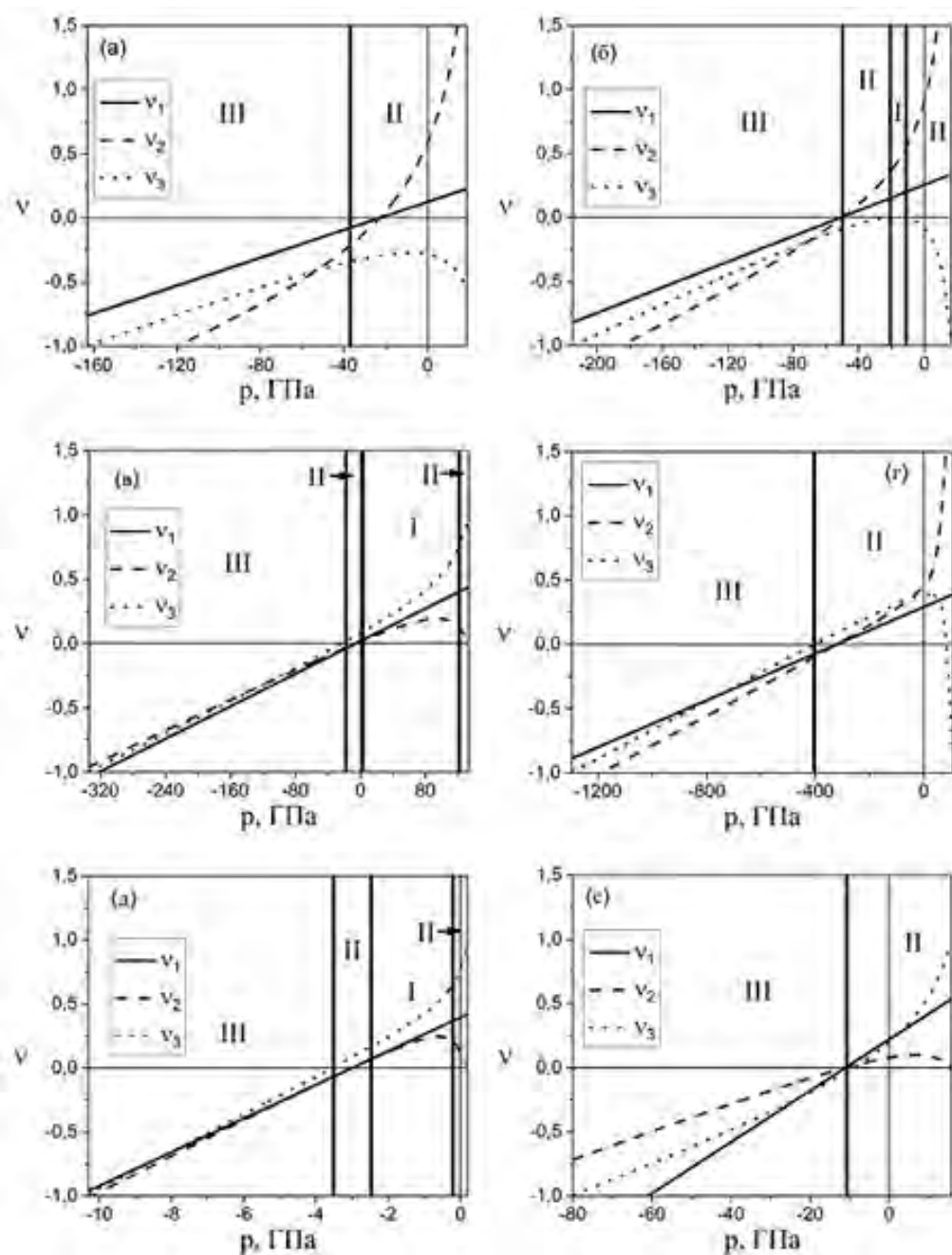


Рис. 1.26: Изменчивость коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 с изменением давления для гексагональных ауксетиков при нулевом давлении MoS₂ (а), Zn (б), Be (в), TiB₂ (г), C₇H₂ (д) и MnAs (е). Зона I соответствует отсутствию ауксетичности, зона II – частичной ауксетичности и зона III – полной ауксетичности.

Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла MoS₂ от давления в диапазоне давлений, соответствующих устойчивости кристалла. Наибольшее изменение наблюдается у коэффициента ν_2 - от $\nu_2 = -1.31$ при $p_{\min} = -163$ ГПа до $\nu_2 = 1.97$ при $p_{\max} = 18.5$ ГПа. Коэффициент ν_1 меняется в диапазоне от $\nu_1 = -0.76$ при $p_{\min} = -163$ ГПа до $\nu_1 = 0.23$ при $p_{\max} = 18.5$ ГПа. Наименьшее значение коэффициента Пуассона ν_3 по

модулю ($\nu_3 = -0.27$) соответствуют $p = -8$ ГПа. При этом значения ν_3 при p_{\min} и p_{\max} : $\nu_3 = -1$ при $p_{\min} = -163$ ГПа и $\nu_3 = -0.53$ при $p_{\max} = 18.5$ ГПа.

У кристалла Zn при увеличении сжимающего давления зона ауксетичности увеличивается (Рис.1.25б). При значениях $p > 7.59$ ГПа появляются дополнительные четыре зоны ауксетичности, связанные с тем, что становится отрицательным экстремум ν_5 . Минимальное значение коэффициента ν_5 равно -5.8 при $p = 16.5$ ГПа. В обратной ситуации, при увеличении растягивающего давления зона ауксетичности уменьшается и при давлении $p = -14$ ГПа ауксетичность исчезает. При дальнейшем увеличении растягивающего давления ауксетичность опять появится при $p = -20.7$ ГПа. Такая смена знака соответствует экстремальному значению коэффициента Пуассона ν_3 (Рис.1.26б). Из Рис.1.25б видно, что в зависимости от значений давления кристалл Zn может быть как неауксетиком, так и частичным и полным ауксетиком. Полным ауксетиком Zn станет при $p < -c_{13} = -50$ ГПа, что соответствует смене знака у экстремальных значений коэффициента Пуассона ν_1 и ν_2 . На Рис.1.26б изображены зависимости коэффициентов ν_1 , ν_2 и ν_3 от давления. Наибольшая изменчивость наблюдается у коэффициента ν_2 - от $\nu_2 = -1.19$ при $p_{\min} = -214$ ГПа до $\nu_2 = 2.91$ при $p_{\max} = 16.5$ ГПа. Границы изменчивости коэффициента Пуассона будут от $\nu_1 = -0.84$ при $p_{\min} = -214$ ГПа до $\nu_1 = 0.34$ при $p_{\max} = 16.5$ ГПа. Значения ν_3 будут равны при $p_{\min} = -214$ ГПа и $\nu_3 = 0.98$ при $p_{\max} = 16.5$ ГПа. Максимальное значение коэффициента ν_3 равно 0.002 при $p = -17.2$ ГПа.

Кристалл Be при нулевом давлении является частичным ауксетиком. При приложении сжимающего давления Be остается частичным ауксетиком до $p = 2.18$ ГПа (Рис.1.25в), когда поменяет знак экстремальное значение коэффициента Пуассона ν_5 . При дальнейшем увеличении давления до значения 121 ГПа кристалл Be остается неауксетиком, когда снова поменяет знак экстремум ν_5 . От 121 ГПа и до 133 ГПа (до границы устойчивости) кристалл Be будет частичным ауксетиком. При рассмотрении случая изотропного растяжения зона ауксетичности будет расти. Существенное увеличение зоны произойдет при $p < -c_{13} = -6$ ГПа, что будет соответствовать смене знака у экстремальных значений коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 . При дальнейшем увеличении растягивающего давления кристалл Be станет полным ауксетиком. Это произойдет при смене знака у коэффициента Пуассона ν_3 ($p = -23.2$ ГПа). Изменчивости коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 отражены на Рис.1.26в. Наибольшая изменчивость наблюдается у коэффициента ν_3 - от $\nu_3 = -1$ при $p_{\min} = -334$ ГПа до $\nu_3 = 1$ при $p_{\max} = 133$ ГПа. Границы изменчивости коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 будут от $\nu_1 = -1.04$ при $p_{\min} = -334$ ГПа до $\nu_1 = 0.44$ при $p_{\max} = 133$ ГПа и $\nu_2 = -0.96$ при $p_{\min} = -334$ ГПа до $\nu_2 = 0.002$ при $p_{\max} = 133$ ГПа. Как видно из Рис.1.26в коэффициенты Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла Be слабо отличаются при фиксированном отрицательном давлении.

При сжимающем давлении кристалл TiB₂ остается частичным ауксетиком (Рис.1.25г). При увеличении давления зона ауксетичности увеличивается. При зна-

чениях давления $p > 97$ ГПа появляется еще одна зона ауксетичности, связанная с тем, что экстремум коэффициента Пуассона ν_3 меняет знак при $p = 97$ ГПа. При увеличении давления при изотропном растяжении зона ауксетичности уменьшается до значений близких к -50 ГПа, далее зона ауксетичности начинает увеличиваться. Существенное увеличение зоны произойдет при смене знака у коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 при $p = -c_{13} = -320$ ГПа. При $p < -402$ ГПа кристалл TiB_2 станет полным ауксетиком. На Рис.1.26в изображены зависимости коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла TiB_2 . Наибольшая изменчивость наблюдается у коэффициента ν_2 - от $\nu_2 = -1.13$ при $p_{\min} = -1297$ ГПа до $\nu_2 = 2.54$ при $p_{\max} = 107$ ГПа. Границы изменчивости коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_3 будут от $\nu_1 = -0.89$ при $p_{\min} = -1297$ ГПа до $\nu_1 = 0.39$ при $p_{\max} = 107$ ГПа и от $\nu_3 = -1$ при $p_{\min} = -1297$ ГПа до $\nu_3 = -0.98$ при $p_{\max} = 107$ ГПа.

На Рис.1.25д представлена поверхность ауксетичности $\nu(\varphi, \theta; p) = 0$ для кристалла C_7H_{12} . Как видно из рисунка при увеличении сжимающего давления зона ауксетичности растёт. При увеличении отрицательного давления зона ауксетичности уменьшается и исчезает при $p = -0.16$ ГПа. При этом значении давления коэффициент Пуассона ν_5 равен нулю. В следующий раз коэффициент ν_5 равен нулю уже при $p = -2.5$ ГПа, когда кристалл C_7H_{12} снова станет частичным ауксетиком. Полным ауксетиком данный кристалл будет при $p < -3.55$ ГПа. На Рис.1.26д отражена изменчивость коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 под давлением. Наибольшая изменчивость наблюдается у коэффициента ν_3 - от $\nu_3 = -0.99$ при $p_{\min} = -10.3$ ГПа до $\nu_3 = 0.98$ при $p_{\max} = 0.2$ ГПа. Границы изменчивости коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 будут от $\nu_1 = -0.96$ при $p_{\min} = -10.3$ ГПа до $\nu_1 = 0.42$ при $p_{\max} = 0.2$ ГПа и от $\nu_2 = -1.01$ при $p_{\min} = -10.3$ ГПа до $\nu_2 = 0.01$ при $p_{\max} = 0.2$ ГПа.

У кристалла MnAs при увеличении сжимающего давления до значений близких к 4 ГПа зона ауксетичности уменьшается, а за этим значением давления начинает расти (Рис.1.25е). При увеличении отрицательных давлений зона ауксетичности всегда увеличивается. Полным ауксетиком кристалл MnAs становится при значениях $p < -c_{13} = -11$ ГПа. На Рис.1.26е отражена изменчивость коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 под давлением для кристалла MnAs . Наибольшая изменчивость наблюдается у коэффициентов ν_3 : от $\nu_3 = -1$ при $p_{\min} = -80.3$ ГПа до $\nu_3 = 1$ при $p_{\max} = 15.9$ ГПа. Границы изменчивости коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 будут от $\nu_1 = -1.39$ при $p_{\min} = -80.3$ ГПа до $\nu_1 = 0.54$ при $p_{\max} = 15.9$ ГПа и от $\nu_2 = -0.72$ при $p_{\min} = -80.3$ ГПа до $\nu_2 = 0.0003$ при $p_{\max} = 15.9$ ГПа.

Рассмотрим далее влияние давления на коэффициент Пуассона для графита и карбида кремния SiC , которые при нулевом давлении не являются ауксетиками. При положительных значениях давления данные материалы остаются неауксетиками (Рис.1.27а и Рис.1.27б), а экстремальные значения коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 увеличиваются с увеличением сжимающего давления. При изотропном растяжении оба эти кристалла могут стать ауксетиками. Графит становится частичным ауксетиком при $p < -c_{13} = -15$ ГПа при смене знака у коэффициентов

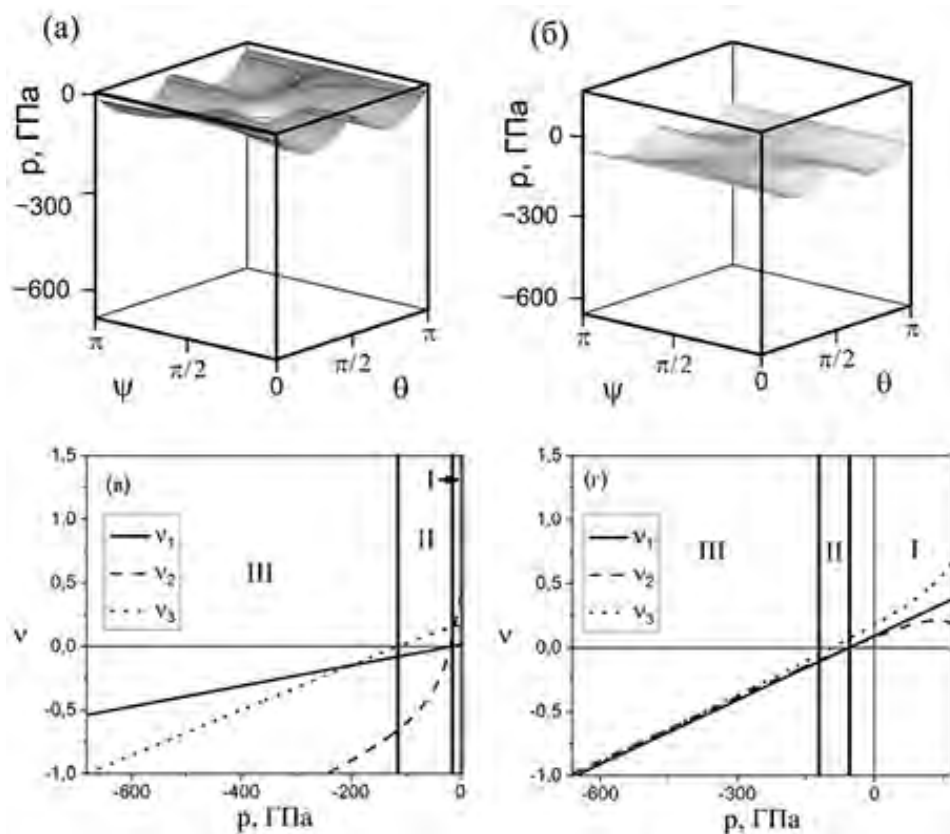


Рис. 1.27: Поверхности ауксетичности $\nu(\varphi, \theta; p) = 0$, и изменчивость коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 с изменением давления для гексагональных неауксетиков при нулевом давлении графита (а), (б) и SiC (б), (г). Зона I соответствует отсутствию ауксетичности, зона II – частичной ауксетичности и зона III – полной ауксетичности.

Пуассона ν_1 и ν_2 . Полным ауксетиком графит будет при $p < -114$ ГПа, когда коэффициент ν_3 станет отрицательным. На Рис.1.27в изображены зависимости коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла графита. Наибольшее изменение наблюдается у коэффициента ν_2 - от $\nu_2 = -1.86$ при $p_{\min} = -682$ ГПа до $\nu_2 = 0.49$ при $p_{\max} = 3.99$ ГПа. Коэффициенты ν_1 и ν_3 меняется в диапазоне от $\nu_1 = -0.54$ при $p_{\min} = -682$ ГПа до $\nu_1 = 0.02$ при $p_{\max} = 3.99$ ГПа и от $\nu_3 = -1$ при $p_{\min} = -682$ ГПа до $\nu_3 = 0.17$ при $p_{\max} = 3.99$ ГПа. Кристалл SiC становится частичным ауксетиком при $p < -c_{13} = -56$ ГПа, а при $p < -122$ ГПа - полным ауксетиком. Значение $p = -56$ ГПа соответствует смене знака у коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 , а $p = -122$ ГПа у коэффициента ν_5 . На Рис.1.27г представлены зависимости коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла SiC. Наибольшая изменчивость наблюдается у коэффициента ν_3 - от $\nu_3 = -1$ при $p_{\min} = -660$ ГПа до $\nu_3 = 0.66$ при $p_{\max} = 168$ ГПа. Границы изменчивости коэффициентов Пуассона ν_1 и ν_2 будут от $\nu_1 = -1.01$ при $p_{\min} = -660$ ГПа до $\nu_1 = 0.38$ при $p_{\max} = 168$ ГПа и от $\nu_2 = -0.99$ при $p_{\min} = -660$ ГПа до $\nu_2 = 0.19$ при $p_{\max} = 168$ ГПа.

1.4. Растяжение стержней с шестиконстантной ромбоэдрической кристаллической структурой [1, 2]

При ограничении классами симметрии с шестью константами упругости ромбоэдрической (тригональной) системы матрица коэффициентов податливости имеет вид

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & -s_{14} & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ s_{14} & -s_{14} & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 2s_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2s_{14} & 2(s_{11} - s_{12}) \end{pmatrix}$$

В этом случае справедливы термодинамические неравенства между коэффициентами податливости $s_{11} > |s_{12}|$, $1 + 2s_{13}^2 / (s_{44}s_{11}) > s_{12}/s_{11} > 2s_{13}^2 / (s_{33}s_{11}) - 1$, $s_{33} > 0$, $s_{44} > 0$, а общие угловые зависимости (1.5), (1.7), (1.8) для ориентации 1) (см. стр.20) слабо упрощаются и могут быть переписаны следующим образом

$$\frac{1}{E} = \frac{s_{11} + s_{33}}{2} + \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_2}{2} \cos 2\theta - \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\theta + \frac{s_{14}}{4} (2 \sin 2\theta - \sin 4\theta), \quad (1.100)$$

$$-2 \frac{\nu^{(1)}}{E} = (s_{13} + s_{12}) (1 + \alpha \cos 2\theta) - s_{14} \sin 2\theta, \quad (1.101)$$

$$-\frac{\nu^{(2)}}{E} = s_{13} - \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\theta + \frac{s_{14}}{4} \sin 4\theta. \quad (1.102)$$

Период для этих периодических функций равен π . Симметрия относительно $\pi/2$ в ромбоэдрическом случае из-за дополнительных членов с s_{14} нарушается (Рис.1.28).

Среди ромбоэдрических кристаллов со сложным и разнообразным поведением (его определяют три коэффициента анизотропии и коэффициент ромбоэдричности s_{14}) удается обнаружить около двух десятков ауксетиков при ориентации 1), из которых для семи выполняется условие $\nu_{\min} < -0.1$ (Табл.1.14). Причем для кристаллов NaNO_3 коэффициент Пуассона при $\theta \approx 67^\circ$ практически достигает отрицательного значения -1 . Для кристаллов мышьяка этот коэффициент изменяется от -0.71 до $+1.84$ с изменением ориентации. Отметим также, что главный максимум (минимум) у разных ромбоэдрических ауксетиков достигается для разных функций $\nu^{(1)}(\theta)$ и $\nu^{(2)}(\theta)$.

Угловые зависимости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона при частной ориентацией 2) не содержат члены с s_{14} в (1.100)-(1.102), и угловые зависимости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона становятся симметричными относительно $\pi/2$. При данной ориентации кристаллической структуры относительно направления растяжения обнаружено небольшое количество ауксетиков (Табл.1.15).

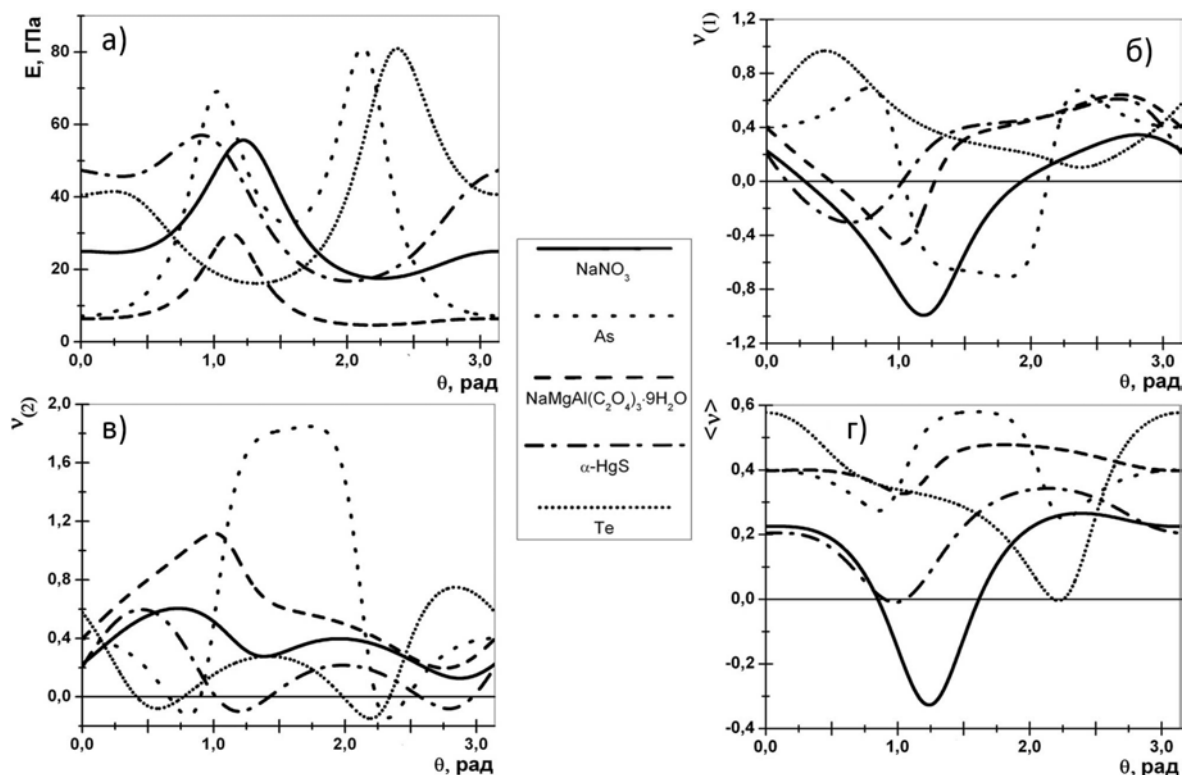


Рис. 1.28: Угловые зависимости модуля Юнга E , коэффициентов Пуассона $\nu_{(1)}$, $\nu_{(2)}$ и среднего коэффициента Пуассон $\langle \nu \rangle$ для NaNO_3 , As , $\text{NaMgAl}(\text{C}_2\text{O}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, $\alpha\text{-HgS}$ и Te .

В случае монокристаллов при частной ориентацией 3) коэффициенты Пуассона принимают постоянные значения и совпадают с (1.65). При данной ориентации кристаллической структуры относительно оси стержня обнаружено всего два кристалла с отрицательным коэффициентом Пуассона: -0.41 для NaNO_3 и -0.11 для $\text{Bi}_{1.60}\text{Sb}_{0.40}\text{Te}_3$.

1.5. Растяжение стержней с шестиконстантной тетрагональной кристаллической структурой [1, 2, 20]

При ограничении шестиконстантными упругими кристаллами тетрагональной системы матрица коэффициентов податливости выглядит подобной матрице коэффициентов податливости в гексагональной системе, за исключением отсутствия равенства между коэффициентом упругости s_{66} и разностью коэффициентов $2(s_{11} - s_{12})$,

Таблица 1.14: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для ромбоэдрических кристаллов при ориентации 1).

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\Delta_1,$ ТПа ⁻¹	$\Delta_2,$ ТПа ⁻¹	$s_{14},$ ТПа ⁻¹	α
NaNO ₃	-0.99	0.6	34.8	11.8	-26.8	-8.2
As	-0.71	1.84	-237.6	109.4	1.7	2.2
NaMgAl(C ₂ O ₄) ₃ ·9H ₂ O	-0.46	1.12	39	52	-136	0.3
BaB ₂ O ₄	-0.44	1.28	248.5	11.6	-63.97	-0.2
α -HgS	-0.32	0.62	8.2	-21.7	-32.21	-0.6
Bi _{1.60} Sb _{0.40} Te ₃	-0.31	0.85	-87.5	30.2	-15.2	1.3
Te	-0.15	0.97	-55.1	-30.1	27	-0.04
Se	-0.09	1.28	-97.1	-80.9	49	0.2
SbAs (25.5at%As)	-0.09	0.52	-19.1	11.6	-9.8	0.2
α -SiO ₂	-0.09	0.32	-5.1	-3.1	-4.47	-0.1
CaCO ₃	-0.05	0.52	3.7	5.9	9.5	0.06
α -AlPO ₄	-0.04	0.37	-6.3	-4.8	5.9	-0.2
Bi	-0.03	0.6	22.2	16	-21.2	0.2
Sb	-0.02	0.51	-19.5	13.8	-12.3	0.008
(C ₆ H ₅ CO) ₂	-0.01	0.76	677	8	94	-0.4
KBrO ₃	-0.01	0.57	-71.4	34.6	0.72	0.6

Таблица 1.15: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для ромбоэдрических кристаллов при ориентации 2).

Кристалл	ν_{\min}	ν_{\max}	$\Delta_1,$ ТПа ⁻¹	$\Delta_2,$ ТПа ⁻¹	α
As	-0.68	1.83	-237.6	109.4	2.2
NaNO ₃	-0.41	0.42	34.8	11.8	-8.2
Bi _{1.60} Sb _{0.40} Te ₃	-0.11	0.83	-87.5	30.2	1.3
KBrO ₃	-0.005	0.57	-71.4	34.6	0.6

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}$$

Поэтому и термодинамические ограничения на коэффициенты податливости также отличаются мало. Здесь имеем $s_{11} > 0$, $1 > s_{12}/s_{11} > 2s_{13}^2/(s_{33}s_{11}) - 1$, $s_{33} > 0$, $s_{44} > 0$, $s_{66} > 0$. Что касается угловых зависимостей $E(\theta)$, $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$, то они

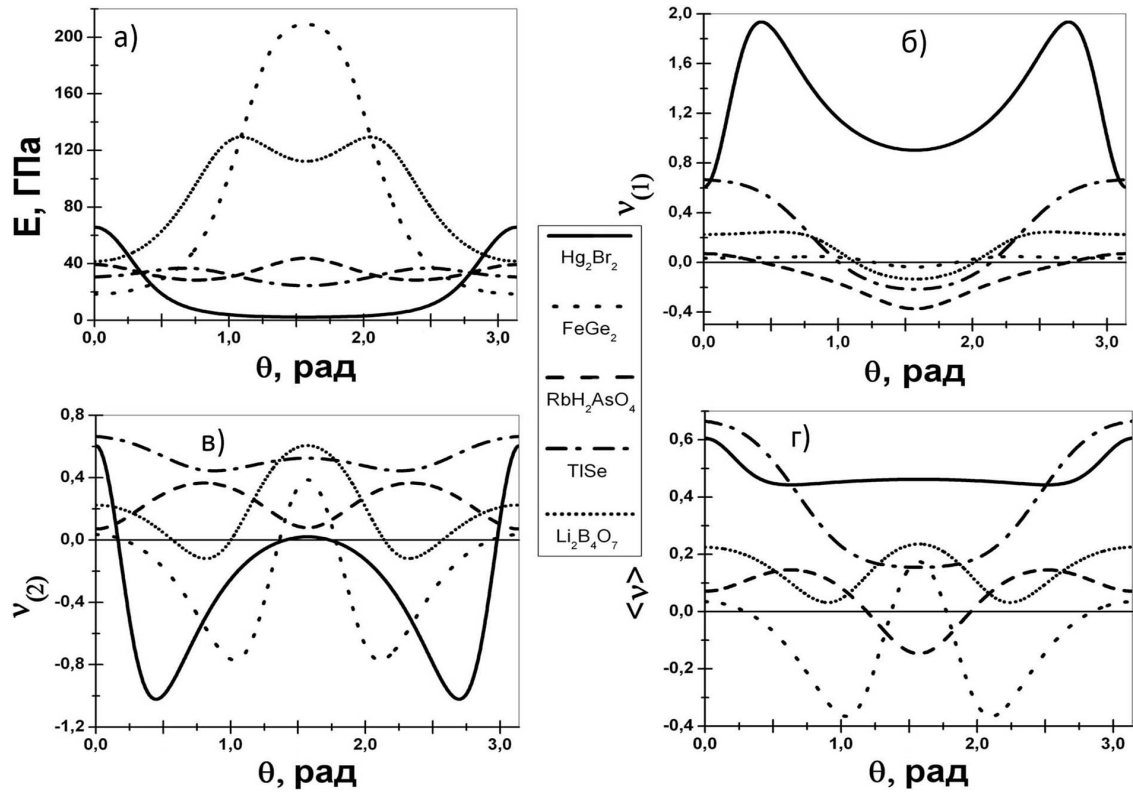


Рис. 1.29: Угловые зависимости модуля Юнга E , коэффициентов Пуассона $\nu_{(1)}$, $\nu_{(2)}$ и среднего коэффициента Пуассон $\langle \nu \rangle$ для Hg_2Br_2 , FeGe_2 , RbH_2AsO_4 , TlSe и $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$.

полностью совпадают с (1.62)-(1.64) при ориентации 1) (см. стр.20) и имеют вид

$$\frac{1}{E} = \frac{s_{11} + s_{33}}{2} + \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_2}{2} \cos 2\theta - \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\theta, \quad (1.103)$$

$$-2\frac{\nu_{(1)}}{E} = (s_{13} + s_{12})(1 + \alpha \cos 2\theta), \quad (1.104)$$

$$-\frac{\nu_{(2)}}{E} = s_{13} - \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\theta, \quad (1.105)$$

$$\Delta_1 \equiv s_{44} - s_{33} + 2s_{13} - s_{11}, \quad \Delta_2 \equiv s_{33} - s_{11}.$$

Угловые зависимости для всех характеристик здесь также периодичны с периодом π и симметричны относительно $\theta = \pi/2$ (Рис.1.29).

Для частной ориентацией 2) получаются аналогичные угловые зависимости для E , $\nu_{(1)}$, $\nu_{(2)}$, с заменой θ на φ . Количество тетрагональных ауксетиков велико. Коэффициент Пуассона более двадцати из них при некоторых ориентациях может быть меньше -0.1 (Табл.1.16). Для четырех из них средний коэффициент Пуассона может быть отрицательным. Для десятка ауксетиков $-0.1 < \nu_{\min} < 0$: CdGeAs_2 (-0.08), KD_2AsO_4 (-0.07), $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (-0.06), $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$ (-0.06), KH_2AsO_4 (-0.05), BaClF (-0.04), $\text{HgIn}_2\text{-Te}_4$ (-0.04), Sn (-0.03), LuAsO_4 (-0.02), In (-0.01). Наименьшее значения коэффициента Пуассона $\nu_{\min} = -1.02$ наблюдается у Hg_2Br_2 ,

Таблица 1.16: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для тетрагональных кристаллов при ориентациях 1) и 2).

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\langle \nu \rangle_{\max}$	$\Delta_1,$ ТПа ⁻¹	$\Delta_2,$ ТПа ⁻¹	α
Hg ₂ Br ₂	-1.02	1.93	0.44	0.61	-352.6	-437.8	-1
Hg ₂ I ₂	-0.96	1.99	0.44	0.88	-413.2	-525.4	-0.9
Hg ₂ Cl ₂	-0.91	1.74	0.42	0.47	-271	-345	-1
TeO ₂	-0.8	1.48	0.23	0.46	-94.9	-106.5	-1
FeGe ₂	-0.77	0.38	-0.37	0.18	-45.3	49.2	1.2
RbD ₂ AsO ₄	-0.41	0.42	-0.12	0.2	45.4	2.4	-2.5
RbH ₂ AsO ₄	-0.37	0.37	-0.15	0.15	44.2	2.6	-1.5
InTl (15at%Tl)	-0.35	1.26	0.45	0.48	-635	-10	-0.04
InPb (5at%Pb)	-0.3	1.17	0.43	0.48	-243	-94	-0.6
InTl (10at%Tl)	-0.29	1.21	0.46	0.49	-574	15	0.1
TlSe	-0.22	0.67	0.15	0.67	-38.6	-8.5	2.4
InBi	-0.21	0.8	0.3	0.48	-154.8	35.4	0.3
(NH ₂) ₂ CO	-0.17	0.78	0.18	0.78	-99	-31	1.9
*(K _{1/6} Na _{1/6} Sr _{1/2} Ba _{1/6}) Nb ₂ O ₆	-0.15	0.33	-0.12	0.09	4.4	1.3	-2.7
InTl (11.5at%Tl)	-0.14	1.05	0.46	0.48	-473	32	0.2
Zn[C(NH ₂) ₃] ₂ (SO ₄) ₂	-0.14	0.67	0.22	0.42	-98.7	27.4	1.5
RbH ₂ PO ₄	-0.14	0.5	0.04	0.27	47.5	5.2	4.2
Li ₂ B ₄ O ₇	-0.13	0.61	0.03	0.24	-26.2	15.1	1.6
KH ₂ PO ₄	-0.13	0.5	0.08	0.28	35.4	4.8	2.7
KD ₂ PO ₄	-0.13	0.48	0.06	0.26	35.1	4.3	3.2
NH ₄ H ₂ PO ₄	-0.12	0.66	0.27	0.32	31	25.4	1.4
InCd (3.4at%Cd)	-0.11	1.01	0.45	0.48	-360	-4	-0.04
HgI ₂	-0.11	0.8	0.25	0.35	-77	67	1.3
ND ₄ D ₂ PO ₄	-0.11	0.58	0.24	0.29	25	25	1.4

что меньше нижней границы для изотропных материалов. Также минимальное значение, близкое к -1 , выявляется у Hg₂I₂ ($\nu_{\min} = -0.96$) и Hg₂Cl₂ ($\nu_{\min} = -0.91$). Здесь так же, как и в случае ромбоэдрической системы, главный максимум (минимум) у разных ауксетиков может достигаться для разных функций $\nu_{(1)}(\theta)$ и $\nu_{(2)}(\theta)$.

В случае частной ориентации 3) E , $\nu_{(1)}$, $\nu_{(2)}$ принимают вид

$$\frac{1}{E} = s_{11} + \frac{\Delta_1}{8} - \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\psi, \quad -\frac{\nu_{(1)}}{E} = s_{13},$$

$$-\frac{\nu_{(2)}}{E} = s_{12} - \frac{\Delta_1}{8} + \frac{\Delta_1}{8} \cos 4\psi, \quad \Delta_1 \equiv s_{66} - 2s_{11} + 2s_{12}.$$

Таблица 1.17: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для тетрагональных кристаллов при ориентации 3).

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	Δ_1 , ТПа ⁻¹
InTl (15at%Tl)	-0.48	1.37	-707
InTl (10at%Tl)	-0.47	1.35	-547
In	-0.43	1.31	-306.4
InTl (11.5at%Tl)	-0.41	1.32	-431
RbD ₂ AsO ₄	-0.41	0.56	216.8
RbH ₂ AsO ₄	-0.37	0.57	203.4
InCd (3.4at%Cd)	-0.32	1.22	-436.3
TlSe	-0.22	0.53	-0.1
Hg ₂ I ₂	-0.19	0.88	-1942.5
TeO ₂	-0.18	0.91	-431.1
(NH ₂) ₂ CO	-0.17	0.82	2062
*(K _{1/6} Na _{1/6} Sr _{1/2} Ba _{1/6})Nb ₂ O ₆	-0.15	0.33	-0.6
RbH ₂ PO ₄	-0.14	0.76	252
Zn[C(NH ₂) ₃] ₂ (SO ₄) ₂	-0.14	0.67	104.1
BaTiO ₃	-0.13	1.03	-11.96
KH ₂ PO ₄	-0.13	0.65	135
KD ₂ PO ₄	-0.13	0.65	140.6
FeF ₂	-0.13	0.62	-57.9
Li ₂ B ₄ O ₇	-0.13	0.61	6.1
CoF ₂	-0.12	0.64	-53.9
NH ₄ H ₂ PO ₄	-0.12	0.6	133.8
GeO ₂	-0.12	0.47	-9.55
HgI ₂	-0.11	0.65	360.2
SnO ₂	-0.11	0.59	-18.86
ND ₄ D ₂ PO ₄	-0.11	0.59	129

Тетрагональные ауксетики при ориентации 3) собраны в Табл.5. Отметим, что при этой частной ориентации Hg₂Br₂ и Hg₂Cl₂ не являются ауксетиками (в отличие от обсуждаемых выше ориентаций кристаллической структуры относительно оси стержня), а у Hg₂I₂ минимальное значение коэффициента Пуассона отрицательно: $\nu_{\min} = -0.19$. Для десятка ауксетиков $-0.1 < \nu_{\min} < 0$: CdGeAs₂ (-0.09), AgGaS₂ (-0.07), MnF₂ (-0.07), KD₂AsO₄ (-0.07), BaClF (-0.06), NH₄H₂AsO₄ (-0.06), InBi (-0.05), ZnF₂ (-0.05), KH₂AsO₄ (-0.05), NiF₂ (-0.04), NiMgF₂ (-0.04), TiO₂ (-0.04), FeGe₂ (-0.04), LuAsO₄ (-0.02), MgF₂ (-0.01), CoPt (-0.005).

Основываясь на формулах (1.1), (1.2), формулы для модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν для тетрагональных кристаллов в общем случае имеют вид

$$E^{-1}(\mathbf{n}) = s_{11}(n_1^4 + n_2^4) + s_{33}n_3^4 + (2s_{13} + s_{44})(1 - n_3^2)n_3^2 + (2s_{12} + s_{66})n_1^2n_2^2,$$

$$-\frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{E(\mathbf{n})} = m_1^2(s_{11}n_1^2 + s_{12}n_2^2 + s_{13}n_3^2) + m_2^2(s_{12}n_1^2 + s_{11}n_2^2 + s_{13}n_3^2) +$$

$$+ m_3^2(s_{13}n_1^2 + s_{13}n_2^2 + s_{33}n_3^2) - s_{44}m_3^2n_3^2 + s_{66}m_2m_3n_2n_3,$$

Количество изученных шестиконстантных тетрагональных кристаллов достаточно велико. В справочнике [172] представлена информация об упругих свойствах 85 таких кристаллов. Численный анализ коэффициента Пуассона с использованием приведенных выше формул и данных по коэффициентам упругости из [172] показал, что среди шестиконстантных тетрагональных кристаллов около шестидесяти процентов являются частичными ауксетиками. Максимальные и минимальные значения коэффициента Пуассона и средние значения коэффициентов Пуассона

$$\langle \nu \rangle \equiv \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \nu(\varphi, \theta, \psi) \sin \theta d\theta$$

были рассчитаны для всех тетрагональных кристаллов. Экстремальные характеристики коэффициентов Пуассона для этих кристаллов были оценены методом уровня. Результаты для тетрагональных частичных ауксетиков собраны в Табл.П.14. В таблице принято обозначение s^E и s^D в случае если коэффициенты податливости измерялись при постоянном электрическом поле и постоянной электрической индукции соответственно. Из Табл.П.14 видно, что коэффициент Пуассона для некоторых тетрагональных кристаллов может быть менее -0.5 . Такими кристаллами будут FeGe_2 ($\nu_{\min} = -0.77$), Hg_2Br_2 ($\nu_{\min} = -1.02$), Hg_2Cl_2 ($\nu_{\min} = -0.91$), Hg_2I_2 ($\nu_{\min} = -0.96$), $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$ ($\nu_{\min} = -0.8$; -0.98), TeO_2 ($\nu_{\min} = -0.8$; -0.85). Согласно Табл.П.14 только один тетрагональный кристалл имеет отрицательное среднее отношение Пуассона ($\langle \nu \rangle = -0.13$).

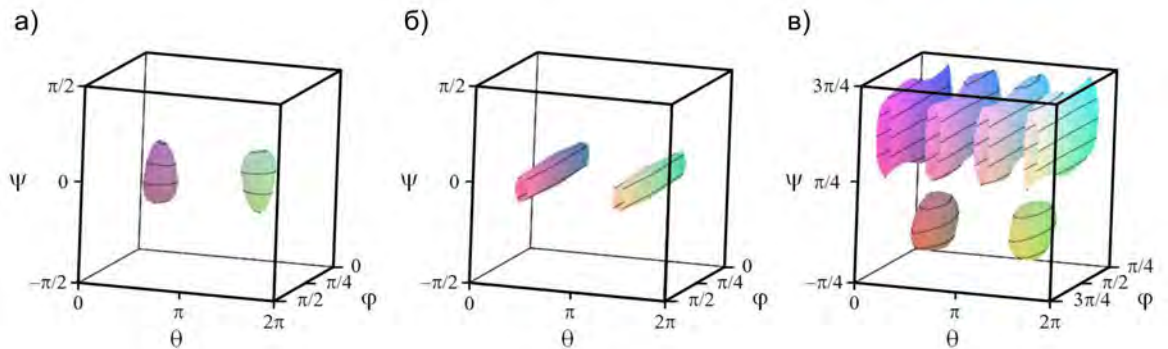


Рис. 1.30: Вид ауксетических поверхностей $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ для тетрагональных кристаллов SnO_2 (а), BaClF (б), $\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$ (в).

В случае частичных ауксетиков угловые области с отрицательным коэффициентом Пуассона отделены от областей с положительным коэффициентом ауксе-

тическими поверхностями с уравнением вида $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$. Три типа кристаллов можно выделить на основе топологической структуры таких поверхностей. Кристаллы с «закрытыми» ауксетическими поверхностями образуют наиболее обширную группу, в которую входят LuPO_4 , LuAsO_4 , KH_2AsO_4 , CdGeAs_2 , KH_2PO_4 , GeO_2 , In-Cd , In-5 at\% Pb , In-Tl , Sn , SnO_2 , TiO_2 , FeF_2 , MnF_2 , MgF_2 , ZnF_2 , CoF_2 , AgGaS_2 , $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$, $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$, $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$, CsH_2AsO_4 , RbH_2AsO_4 , RbD_2AsO_4 , RbH_2PO_4 , Hg_2Br_2 , Hg_2Cl_2 . «Открытые» поверхности имеют, например, кристаллы BaClF , FeGe_2 , Hg_2I_2 , TeO_2 , $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$. Третья наименьшая группа образована из кристаллов с ауксетической поверхностью «смешанного» типа, в состав которых входят InBi и $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$. Примеры трех различных типов поверхностей для тетрагональных кристаллов SnO_2 , BaClF , $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ показаны на Рис.1.30.

1.6. Растяжение стержней с орторомбической кристаллической структурой [1, 2, 21]

В такой системе матрица коэффициентов податливости выглядит следующим образом

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{22} & s_{23} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{23} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}$$

Тогда термодинамическими ограничениями на коэффициенты податливости будут неравенства $s_{11} > 0$, $s_{11}s_{22} > s_{12}^2$, $D > 0$, $s_{44} > 0$, $s_{55} > 0$, $s_{66} > 0$ (здесь через D обозначен определитель 3×3 верхнего левого угла матрицы $\|s_{mn}\|$). Для угловых зависимостей $E(\theta)$, $\nu_{(1)}(\theta)$, $\nu_{(2)}(\theta)$ из общих формул (1.5), (1.7), (1.8) для ориентации 1) (см. стр.20) следует

$$\begin{aligned} \frac{1}{E} &= \frac{s_{22} + s_{33}}{2} + \frac{\delta_1}{8} + \frac{\delta_2}{2} \cos 2\theta - \frac{\delta_1}{8} \cos 4\theta, \\ -2\frac{\nu_{(1)}}{E} &= (s_{13} + s_{12})(1 + \alpha \cos 2\theta), \quad -\frac{\nu_{(2)}}{E} = s_{23} - \frac{\delta_1}{8} + \frac{\delta_1}{8} \cos 4\theta, \\ \delta_1 &\equiv s_{44} - s_{33} + 2s_{23} - s_{22}, \quad \delta_2 \equiv s_{33} - s_{22}, \quad \alpha \equiv \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{13} + s_{12}}. \end{aligned}$$

При частной ориентации 2) для модуля Юнга и коэффициентов Пуассона получаем

$$\frac{1}{E} = \frac{s_{11} + s_{33}}{2} + \frac{\delta_1}{8} + \frac{\delta_2}{2} \cos 2\varphi - \frac{\delta_1}{8} \cos 4\varphi,$$

$$-2\frac{\nu^{(1)}}{E} = (s_{12} + s_{23})(1 + \alpha \cos 2\varphi), \quad -\frac{\nu^{(2)}}{E} = s_{13} - \frac{\delta_1}{8} + \frac{\delta_1}{8} \cos 4\varphi,$$

$$\delta_1 \equiv s_{55} - s_{33} + 2s_{13} - s_{11}, \quad \delta_2 \equiv s_{33} - s_{11}, \quad \alpha \equiv \frac{s_{23} - s_{12}}{s_{23} + s_{12}}.$$

Для частной ориентацией 3) имеем

$$\frac{1}{E} = \frac{s_{11} + s_{22}}{2} + \frac{\delta_1}{8} + \frac{\delta_2}{2} \cos 2\psi - \frac{\delta_1}{8} \cos 4\psi,$$

$$-2\frac{\nu^{(1)}}{E} = (s_{13} + s_{23})(1 + \alpha \cos 2\psi), \quad -\frac{\nu^{(2)}}{E} = s_{12} - \frac{\delta_1}{8} + \frac{\delta_1}{8} \cos 4\psi,$$

$$\delta_1 \equiv s_{66} - s_{11} + 2s_{13} - s_{22}, \quad \delta_2 \equiv s_{11} - s_{22}, \quad \alpha \equiv \frac{s_{13} - s_{23}}{s_{13} + s_{23}}.$$

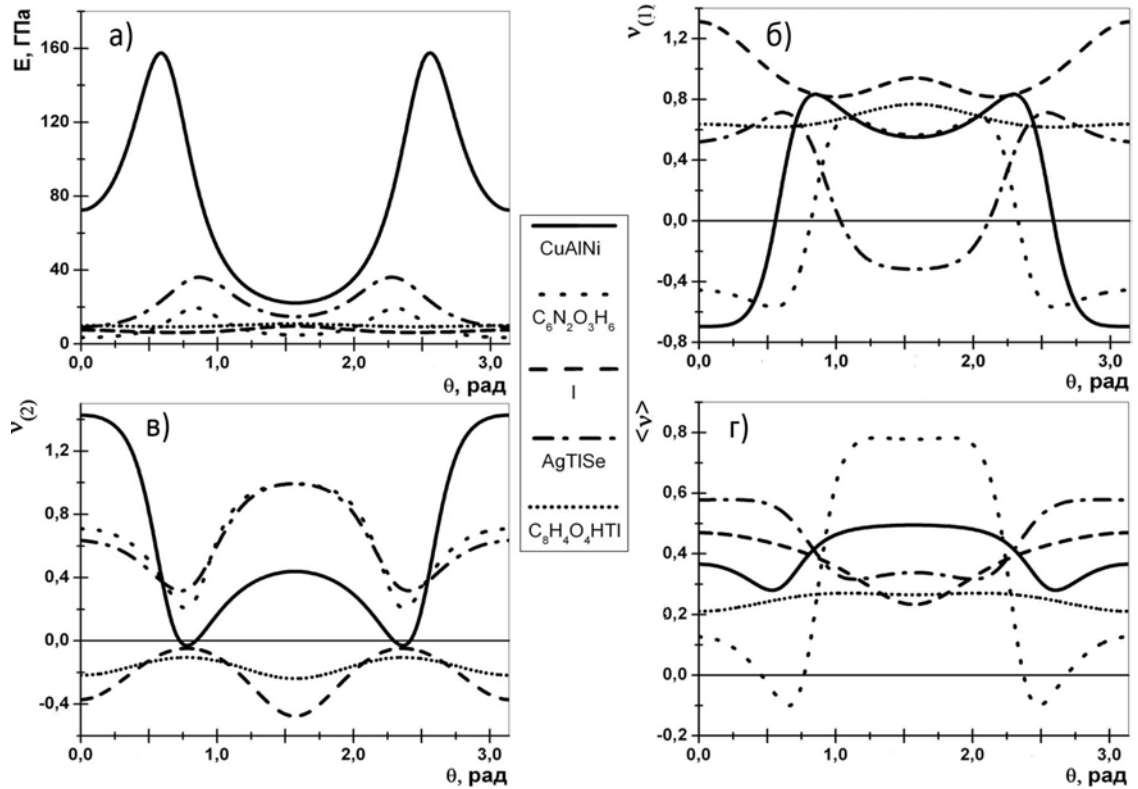


Рис. 1.31: Угловые зависимости модуля Юнга E , коэффициентов Пуассона $\nu^{(1)}$, $\nu^{(2)}$ и среднего коэффициента Пуассон $\langle \nu \rangle$ для Hg_2Br_2 , FeGe_2 , RbH_2AsO_7 , TlSe и $\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$.

Период этих функций π и они симметричны относительно $\theta = \pi/2$ (Рис.1.31).

Среди орторомбических кристаллов найдено большое количество ауксетиков. При ориентации 1) обнаружено более двадцати ауксетиков, из которых восемь имеют коэффициент Пуассона с $\nu_{\min} \leq -0.1$ (Табл.1.18). При этом кристаллы, попавшие в таблицу, характерны также тем, что для них $\nu_{\max} > 0.5$. Угловые зависимости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона $\nu^{(1)}$, $\nu^{(2)}$ и $\langle \nu \rangle$ для нескольких

Таблица 1.18: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для ромбических кристаллов при ориентации.

Кристаллы Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\langle \nu \rangle_{\max}$	$\delta_1,$ ТПа ⁻¹	$\delta_2,$ ТПа ⁻¹	α
CuAlNi (14wt%Al-3wt%Ni)	-0.7	1.42	0.28	0.49	-79.9	-31.1	-2.3
C ₆ N ₂ O ₃ H ₆	-0.57	0.99	-0.1	0.78	-764.6	81	16.3
I	-0.48	1.31	0.23	0.47	166	29	0.3
AgTlSe	-0.32	1	0.31	0.58	-247.1	39.7	2.3
C ₈ H ₄ O ₄ HTl	-0.24	0.77	0.21	0.27	42.4	9	-0.05
Iododurene	-0.17	0.82	0.3	0.42	-381.4	-165	-0.6
(CH ₃ NHCH ₂ COOH) ₃ · CaCl ₂	-0.15	0.76	0.17	0.54	-46.3	-19	-1.3
NH ₄ B ₅ O ₈ ·4H ₂ O	-0.1	0.85	0.08	0.46	358.8	-66.7	-1.1

ромбических ауксетиков приведены на Рис.1.31. В список орторомбических ауксетиков с $-0.1 < \nu_{\min} < 0$ попадают Cd(COOH)₂ (-0.08), C₆H₄COOHCOOCs (-0.07), Ni₃B (-0.04), CaCO₃ (-0.04), C₆H₄COOHCOORb (-0.04), BaMnF₄ (-0.03), TbF₃ (-0.02), α -U (-0.02), DIO₃ (-0.02), (C₆H₅)₂CO (-0.01), NaBF₄ (-0.01), C₆H₈O₇·H₂O (-0.003), HIO₃ (-0.003). И здесь разные функции $\nu_{(1)}(\theta)$ и $\nu_{(2)}(\theta)$ могут давать главные максимумы (минимумы) для разных ауксетиков.

Минимальные значения коэффициента Пуассона существенно изменяются в зависимости от ориентации кристаллической структуры относительно оси стержня (Табл.1.18-1.20). В Табл.1.18-1.20 приведены минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для орторомбических кристаллов при различных ориентациях. Например, при частной ориентации 1) имеем минимальные значения -0.57 для C₆N₂O₃H₆, а при частной ориентации 2) получаем минимальное значение равное -0.91. Также для одних ориентаций кристаллической структуры относительно оси стержня монокристаллы имеют отрицательный коэффициент Пуассона, а при другой отрицательность не обнаруживается.

Основываясь на формулах (1.1), (1.2), формулы для модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν для тетрагональных кристаллов в общем случае имеют вид

$$\begin{aligned}
 -\frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{E(\mathbf{n})} = & m_1^2 (s_{11}n_1^2 + s_{12}n_2^2 + s_{13}n_3^2) + m_2^2 (s_{12}n_1^2 + s_{22}n_2^2 + s_{23}n_3^2) + \\
 & + m_3^2 (s_{13}n_1^2 + s_{23}n_2^2 + s_{33}n_3^2) + s_{66}m_1m_2n_1n_2 + s_{55}m_1m_3n_1n_3 + \\
 & + s_{44}m_2m_3n_2n_3,
 \end{aligned} \tag{1.106}$$

Таблица 1.19: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для ромбических кристаллов при ориентации 2).

Кристалл	ν_{\min}	ν_{\max}	$\delta_1, \text{ГПа}^{-1}$	$\delta_2, \text{ГПа}^{-1}$	α
$\text{C}_6\text{N}_2\text{O}_3\text{H}_6$	-0.91	0.8	24.3	141.9	0.27
CuAlNi (14wt%Al-3wt% Ni)	-0.7	1.43	37	-5.4	-0.11
$(\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{CaCl}_2$	-0.48	0.62	-56.2	-44	-0.41
AgTlSe	-0.42	1.06	-230.7	55.6	1.94
I	-0.41	1.31	-738.3	-196	-3.04
Iododurene	-0.27	0.91	-411.2	-150	-0.57
$\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4\text{HTl}$	-0.22	0.64	-110.6	-50	-1.9
$[\text{CN}_3\text{H}_6]\text{C}_4\text{H}_6\text{NO}_4$	-0.18	0.77	-107.9	-12.5	-0.22
$\text{NH}_4\text{B}_5\text{O}_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	-0.1	0.72	228.9	-81.9	-0.87
$\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	-0.09	0.75	-81.2	4.3	-0.04
$(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COOCaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	-0.08	0.79	-80.7	81.5	0.78
$\text{C}_6\text{H}_4(\text{OH})_2$	-0.08	0.61	-178	-40	0.38
CaCO_3	-0.06	0.44	20.7	5.25	-0.12
BaMnF_4	-0.05	0.87	-51.3	16.5	1.11
$\text{Na}_2\text{CoGeO}_4$	-0.04	0.73	-18.4	-3.7	-0.27
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{CO}$	-0.02	0.55	354	35	-0.14
$\alpha\text{-U}$	-0.02	0.54	4.06	-0.12	0.37
TbF_3	-0.01	0.62	-19.12	1.82	-1.09
Hg_2Cl_2	-0.01	0.6	38.1	-22.7	-1.03
NaBF_4	-0.006	0.69	198.5	-6.04	-0.1
$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$	-0.001	0.74	240.4	-34	-0.47

$$E^{-1}(\mathbf{n}) = s_{11}n_1^4 + s_{22}n_2^4 + s_{33}n_3^4 + (2s_{12} + s_{66})n_1^2n_2^2 + (2s_{13} + s_{55})n_1^2n_3^2 + (2s_{23} + s_{44})n_2^2n_3^2. \quad (1.107)$$

В справочнике [172] представлены значения упругих постоянных для 136 орторомбических кристаллов. Частичных ауксетиков среди них оказывается 51 кристалл. Значения экстремальных значений коэффициентов Пуассона и среднего коэффициента для орторомбических ауксетиков представлены в Табл.П.15. Коэффициент Пуассона менее -0.5 выявляется у $\text{C}_6\text{N}_2\text{O}_3\text{H}_6$ ($\nu_{\min} = -0.91$), Cu-14 wt% Al 3.0 wt% Ni ($\nu_{\min} = -0.70$). Средний коэффициент Пуассона $\langle \nu \rangle$

$$\langle \nu \rangle \equiv \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \nu(\varphi, \theta, \psi) \sin \theta d\theta$$

для всех рассмотренных орторомбических кристаллов оказывается положительным.

Таблица 1.20: Минимальные и максимальные значения коэффициентов Пуассона для ромбических кристаллов при ориентации 3).

Кристалл	ν_{\min}	ν_{\max}	$\delta_1, \text{ТПа}^{-1}$	$\delta_2, \text{ТПа}^{-1}$	α
$\text{C}_6\text{N}_2\text{O}_3\text{H}_6$	-0.91	1.05	-391.7	-60.9	-4.6
CuAlNi (14wt%Al-3wt% Ni)	-0.51	1.28	-97.5	-25.7	2.9
I	-0.48	0.94	-455	225	1.79
AgTlSe	-0.42	1.07	-6.2	-15.9	-0.1
$[\text{CN}_3\text{H}_6]_2\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4$	-0.28	0.93	-710.9	14.1	0.26
$\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4\text{HTl}$	-0.24	0.77	-191	59	2.03
$(\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{CaCl}_2$	-0.11	0.76	-173.7	25	-1.91
In_4Se_3	-0.06	0.47	-6.7	25	0.54
CaCO_3	-0.06	0.44	-2.83	-6.25	-1.44
BaMnF_4	-0.05	0.87	8.1	-10.3	0
$\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$	-0.03	0.26	-9.8	4.1	0.03
LiGaO_2	-0.03	0.23	-2.9	-1.8	-0.18
$\text{NH}_4\text{B}_5\text{O}_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	-0.02	0.85	-259.4	15.18	-2.26
TbF_3	-0.02	0.62	0.7	3.8	1.05
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{CO}$	-0.02	0.55	-1484	-27	-1.08
$\alpha\text{-U}$	-0.02	0.39	-0.62	-1.82	-1.06
$\text{Tb}_2(\text{MoO}_4)_3$	-0.01	0.42	-9.1	-0.2	-0.34
NaBF_4	-0.01	0.37	12.34	-8.07	-1.04
$\text{Cd}(\text{COOH})_2$	-0.007	0.98	-243	-70	0.03
$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$	-0.001	0.74	-97.5	-37.1	-1.01

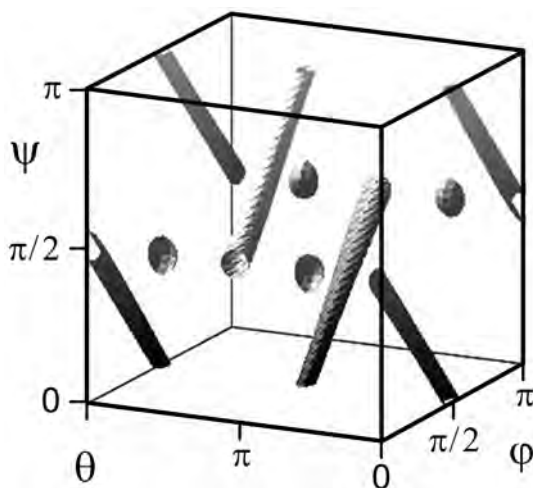


Рис. 1.32: Ауксетическая поверхность $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ для орторомбического кристалла TbF_3 .

Для орторомбических кристаллов поверхности ауксетичности имеют три типа: открытые, закрытые и смешанные. На Рис.1.32 в пространстве углов Эйлера с периодичностью $T_\varphi = \pi$, $T_\theta = 2\pi$, $T_\psi = \pi$ изображена поверхность ауксетичности $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ для кристалла TbF₃, которая разделяет положительные и отрицательные значения коэффициента Пуассона. Зона ауксетичности (зона отрицательных значений коэффициента Пуассона) находится внутри представленных поверхностей. С помощью этой поверхности можно определять углы Эйлера, т.е. направления растяжения и направления поперечной деформации, при которых будет наблюдаться положительный или отрицательный коэффициент Пуассона.

1.6.1. Особенности структуры и модули упругости монокристаллов гидрофталатов калия, рубидия, цезия и аммония [22]

Органические монокристаллы кислых солей *орто*-фталевой кислоты C₈H₅O₄X (X = K, Rb, Cs, NH₄) – гидрофталаты обладают рядом интересных физических свойств: пьезоэлектрических, оптических, рентгеноспектральных. Ниже гидрофталаты будем сокращено обозначать (GPhX). Они обладают орторомбической анизотропией [191–194] (Табл.1.21). Совершенная спайность и большая величина межплоскостного расстояния (например, для GPhNH₄ ~26 Å) обусловили применение этих кристаллов в качестве анализаторов в длинноволновой области рентгеновского спектра от 8 до 26 Å, монохроматоров в рентгеновской аппаратуре высокого разрешения – двухкристалльных вакуумных спектрометрах и микроанализаторах. Из всей серии органических монокристаллов кислых солей *орто*-фталевой кислоты GPhX выделяется кристалл GPhNH₄. При использовании этого кристалла в качестве анализатора диапазон волн мягкой и ультрамягкой области рентгеновского спектра расширяется до 43 Å [195].

Таблица 1.21: Кристаллографические характеристики гидрофталатов.

Соединение	Радиус катиона, Å	a , Å	b , Å	c , Å	V , Å ³	Ист.
GPhK	1.33	6.479	13.330	9.614	830.31	[191]
GPhRb	1.47	6.561	13.068	10.064	862.88	[192]
GPhCs	1.67	6.519	25.523	10.727	1784.81	[193]
GPhNH ₄	1.43	6.430	26.130	10.240	1720.48	[194]

В кристаллах GPhX реализуются химические связи разных типов (ионная, ван-дер-ваальсова и водородная) [196]. В [197, 198] показано, что эти кристаллы обладают значительной анизотропией механических свойств и в зависимости от направления оси сжатия по отношению к плоскости спайности могут деформиро-

ваться пластически, образовывать прослойки сброса и хрупко разрушаться. Наибольшей анизотропией механических свойств в ряду $GPhX$ обладают кристаллы $GPhNH_4$.

Целью настоящего подраздела является анализ атомной структуры гидрофталатов $C_8H_5O_4X$ ($X = K, Rb, Cs, NH_4$) по имеющимся литературным данным [191–194] и установление связи между структурой и упругими (модули Юнга и сдвига, коэффициенты Пуассона) свойствами этих кристаллов.

Структурными единицами кристаллов $GPhX$ являются щелочные катионы (катион аммония) и анионы *орто*-фталевой кислоты (Рис.1.33а). Катионы образуют гофрированные слои, параллельные плоскости *ac* (Рис.1.33б). Гофрирование возникает вследствие связывания катионов в слое либо винтовой осью 2_1 , либо центром симметрии. Расположение ионов в слое соответствует мотиву искаженной квадратной сетки (Рис.1.34а). Такая конфигурация катионов и их кислородного окружения приводит к распределению в пространстве неравноценных по длине связей катион-анион [22]. В структурах ($GPhK$ и $GPhRb$) элементарную ячейку пересекает один слой катионов, в centrosимметричных, с удвоенным параметром b ($GPhCs$ и $GPhNH_4$), - два слоя. Слои катионов разделены двойными слоями анионов *орто*-фталевой кислоты. В структурах $GPhK$ и $GPhRb$ имеется один слой, в структурах $GPhCs$ и $GPhNH_4$ - два. Гидрофильные части анионов (внешние области двойного слоя) связаны с катионами (ионная связь), а гидрофобные (внутренняя область двойного слоя) - между собой (ван-дер-ваальсово взаимодействие $C-H \dots H-C$ (на Рис.1.33 и Рис.1.34 эти связи обозначены пунктиром)).

Модуль Юнга E и модуль сдвига G в плоскостях (100), (010), (001) кристаллов $GPhX$. Для исследования упругих свойств гидрофталатов $GPhX$ были выбраны плоскости (100), (010), (001), две из которых, (010) и (001), являются плоскостями спайности.

Кристаллы $GPhX$ относятся к орторомбической сингонии и имеют девять независимых, отличных от нуля коэффициентов податливости s_{ij} ($s_{11}, s_{22}, s_{33}, s_{44}, s_{55}, s_{66}, s_{12}, s_{13}, s_{23}$). Для расчета упругих свойств значения коэффициентов податливости брали из [197], где собраны результаты по измерениям упругих коэффициентов для всего ряда гидрофталатов.

При растяжении в указанных плоскостях зависимости модуля Юнга E от угла ориентации θ (угла между направлением растяжения и кристаллографической осью) принимают вид

$$\begin{aligned} E_{(100)}^{-1}(\theta) &= s_{22} \sin^4 \theta + s_{33} \cos^4 \theta + (2s_{23} + s_{44}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta, \\ E_{(010)}^{-1}(\theta) &= s_{11} \sin^4 \theta + s_{33} \cos^4 \theta + (2s_{13} + s_{55}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta, \\ E_{(001)}^{-1}(\theta) &= s_{11} \sin^4 \theta + s_{22} \cos^4 \theta + (2s_{12} + s_{66}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta, \end{aligned} \quad (1.108)$$

где угол θ отсчитывается в плоскостях (100), (010) от направления [001] и в плос-

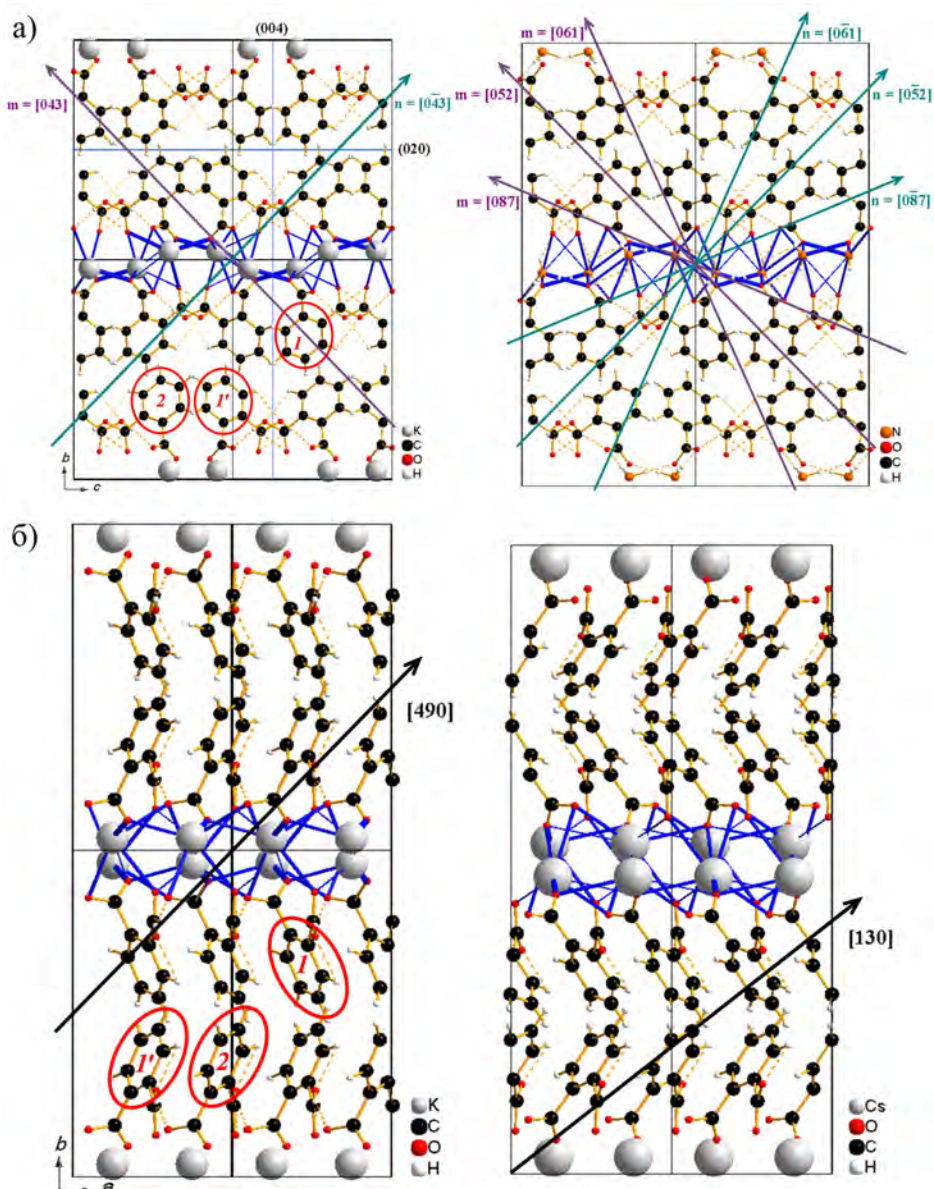


Рис. 1.33: Проекция структур GPhX на плоскости: а - (100), $X = K, NH_4$; б - (001), $X = K, Cs$. Обозначены следы плоскостей спайности, направления продольного растяжения n и поперечной деформации m при определении минимальных коэффициентов Пуассона для кристаллов GPhK и GPhNH₄, зон отрицательного коэффициента Пуассона для кристалла GPhNH₄ (а), направления растяжения при определении модулей Юнга (б). Линиями разной толщины показаны связи катион-анион: жирными линиями обозначены самые короткие связи, тонкими - самые длинные, линиями средней толщины - остальные расстояния. Штриховыми линиями отмечены водородные связи, пунктиром - взаимодействие Ван-дер-Ваальса.

кости (001) – от направления $[0\bar{1}0]$.

При сдвиге в указанных плоскостях зависимости модулей сдвига G от угла ориентации θ имеют вид

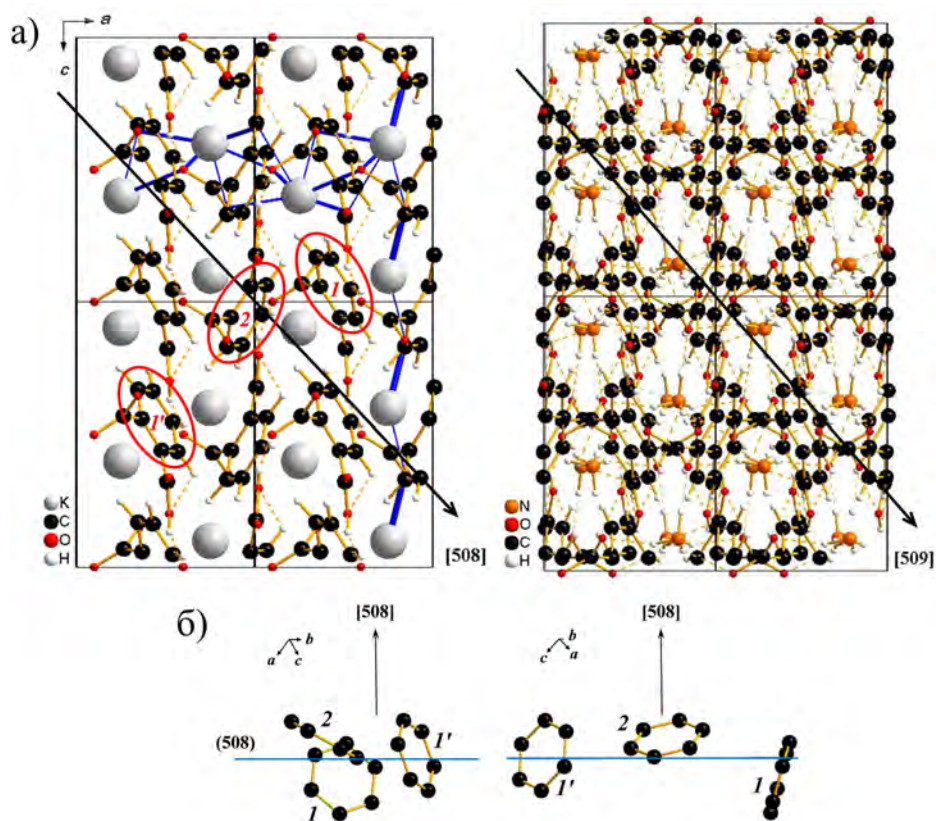


Рис. 1.34: Проекция структур GPhX на плоскости: а – (010), $X = K, NH_4$; г – расположение углеродных колец в структуре GPhK относительно направления растяжения [508] в разных ракурсах. Обозначены следы плоскостей спайности, направления продольного растяжения \mathbf{n} , направления растяжения при определении модулей Юнга (а). Линиями разной толщины показаны связи катион–анион: жирными линиями обозначены самые короткие связи, тонкими – самые длинные, линиями средней толщины – остальные расстояния. Штриховыми линиями отмечены водородные связи, пунктиром – взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Овалами на рисунках (а) и Рис.1.33 выделены углеродные кольца, изображенные на рисунке (б).

$$\begin{aligned}
 G_{(100)}^{-1} &= s_{55} \sin^2 \theta + s_{66} \cos^2 \theta, \\
 G_{(010)}^{-1} &= s_{44} \sin^2 \theta + s_{66} \cos^2 \theta, \\
 G_{(001)}^{-1} &= s_{44} \sin^2 \theta + s_{55} \cos^2 \theta,
 \end{aligned}
 \tag{1.109}$$

где угол θ отсчитывается в плоскостях (100) и (001) от направления [010] и в плоскости (010) – от направления $[\bar{1}00]$.

В Табл.1.22 приведены значения модулей Юнга, а в Табл.1.23 – значения модулей сдвига кристаллов GPhX. На Рис.1.35 представлены ориентационные зависимости модулей Юнга, а на Рис.1.36 – ориентационные зависимости модулей сдвига в исследуемых плоскостях.

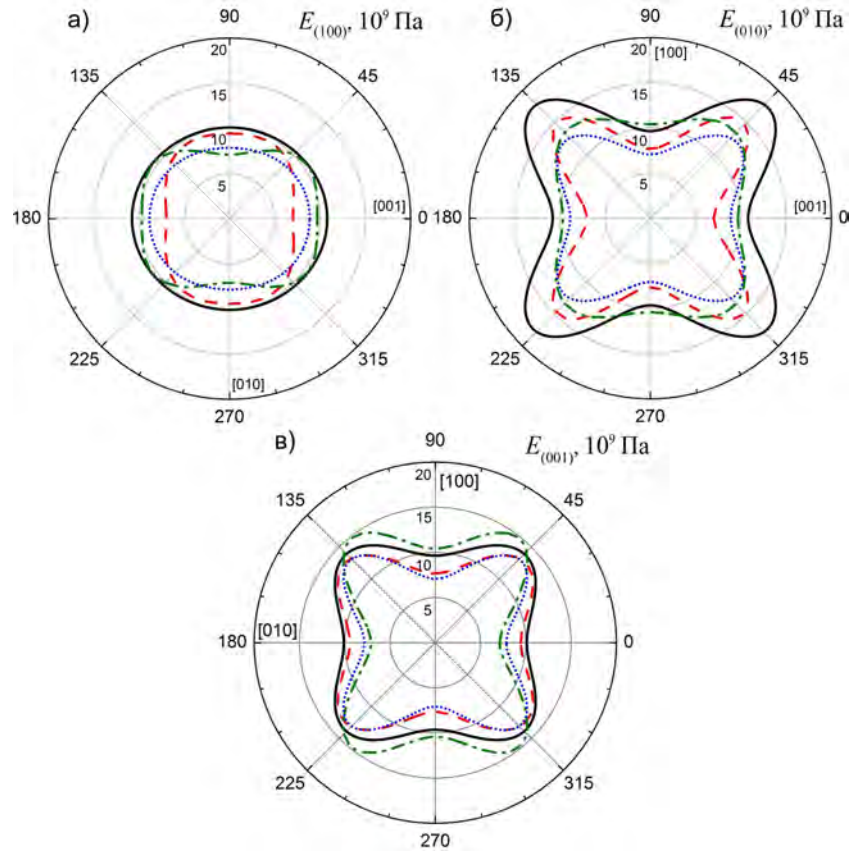


Рис. 1.35: Ориентационные зависимости модулей Юнга в плоскостях (100) (а), (010) (б), (001) (в) для кристаллов GPhK (сплошные линии), GPhRb (штриховые линии), GPhCs (штрихпунктирные линии) и GPhNH₄ (пунктирные линии).

Определение коэффициентов Пуассона. При одноосном растяжении кристаллов коэффициент Пуассона $\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ можно записать в виде (1.106), (1.107). Численный анализ коэффициентов Пуассона для четырех гидрофталатов показал, что три из них – GPhRb, GPhCs, GPhNH₄ – оказались частичными ауксетиками. Для трех бифталатов область, в которой наблюдается отрицательный коэффициент, была проанализирована при двух углах Эйлера $\varphi = 0$ и $\psi = \pi/2$. В этих условиях имеем направление растяжения

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \theta = 0: \quad \mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \theta = \pi/2: \quad \mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

направление поперечной деформации

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 0 \\ \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad \theta = 0: \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \theta = \pi/2: \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

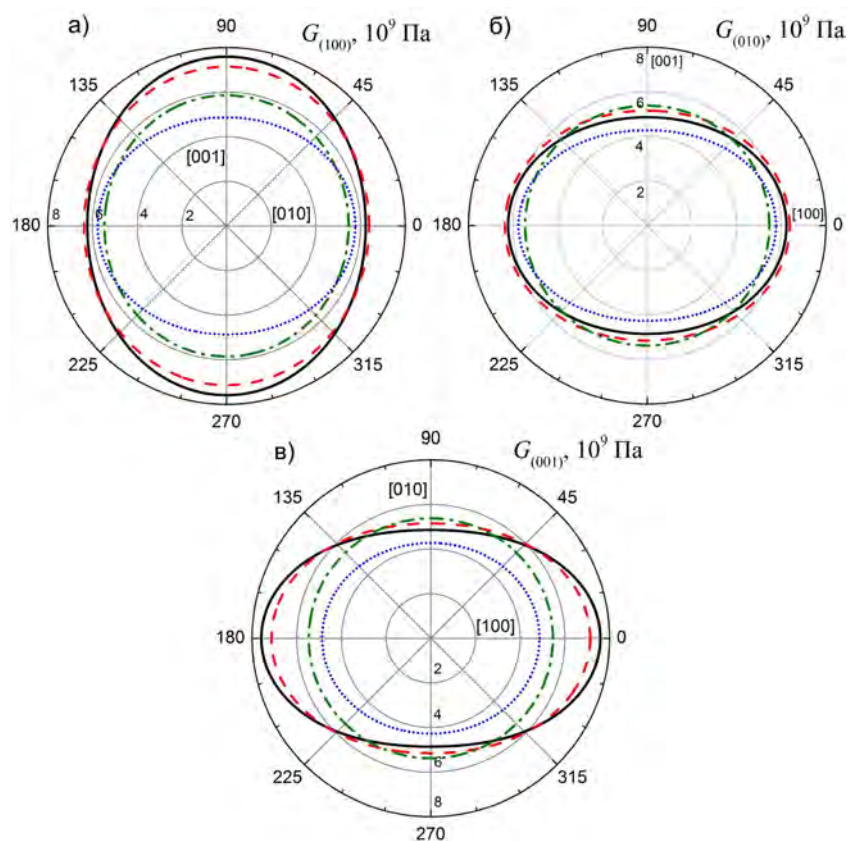


Рис. 1.36: Ориентационные зависимости модулей сдвига в плоскостях скольжения (100) (а), (010) (б), (001) (в) для кристаллов GPhK (сплошные линии), GPhRb (штриховые линии), GPhCs (штрихпунктирные линии) и GPhNH₄ (пунктирные линии).

Минимальный коэффициент Пуассона наблюдается при $\theta = \pi/4$. Следовательно, направление растяжения и направление поперечной деформации имеют вид

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}.$$

В Табл.П.16 (стр.349) представлены минимальные, максимальные и средние по всем направлениям значения коэффициентов Пуассона $\langle \nu \rangle$, а также направления растяжения и поперечной деформации, соответствующие ν_{\min} и ν_{\max} . В Табл.1.24 показаны зоны отрицательного коэффициента Пуассона в интервале углов θ и соответствующие им кристаллографические направления. На Рис.1.33а обозначены направления растяжения \mathbf{n} и поперечной деформации \mathbf{m} , для которых наблюдается минимальный коэффициент Пуассона кристаллов GPhK и GPhNH₄, и направления, определяющие зону отрицательного коэффициента Пуассона кристалла GPhNH₄.

Обсуждение результатов

Модули Юнга. Как следует из анализа Рис.1.35 и Табл.1.22, самые большие

Таблица 1.22: Значения модулей Юнга E в различных плоскостях кристаллов гидрофталатов.

(100)					
Соединение	$E_{[001]}$, ГПа	$E_{[010]}$, ГПа	$E_{[011]}$, ГПа; θ	E_{\max} , ГПа; направление; θ	E_{\max}/E_{\min}
GPhK	10.80	10.10	10.50; 36°	10.80; [001]; 0°	1.07
GPhRb	7.00	9.43	8.44; 38°	9.59; [052]; 63°	1.37
GPhCs	9.67	7.09	10.3; 23°	10.40; [032]; 33°	1.47
GPhNH ₄	8.86	7.84	8.79; 21°	8.86; [001]; 0°	1.13
(010)					
	$E_{[001]}$, ГПа	$E_{[100]}$, ГПа	$E_{[101]}$, ГПа; θ		
GPhK	10.80	9.63	13.3; 56°	17.9; [508]; 43°	1.86
GPhRb	7.00	7.65	13.8; 54°	14.8; [203]; 46°	2.12
GPhCs	9.67	10.40	12.8; 59°	13.4; [203]; 47°	1.39
GPhNH ₄	8.86	7.07	10.6; 58°	12.8; [509]; 41°	1.81
(001)					
	$E_{[010]}$, ГПа	$E_{[100]}$, ГПа	$E_{[110]}$, ГПа; θ		
GPhK	10.10	9.63	11.8; 64°	13.9; [490]; 44°	1.45
GPhRb	9.43	7.65	10.2; 63°	13.4; [490]; 41°	1.42
GPhCs	7.09	10.40	11.4; 76°	14.8; [130]; 52°	2.09
GPhNH ₄	7.84	7.07	7.80; 76°	13.2; [3 13 0]; 43°	1.86

модули Юнга наблюдаются в направлениях растяжения под углом $\theta \sim 45^\circ$, причем максимальные значения (10.8, 17.9, 13.9 ГПа) характерны для GPhK, минимальные (8.86, 12.8, 13.2 ГПа) – для GPhNH₄. Самые высокие значения модулей Юнга проявляют кристаллы при растяжении в плоскости (010) в направлениях [508] (GPhK), [203] (GPhRb и GPhCs), [509] (GPhNH₄) (Рис.1.34а). В структурах GPhX углеродные кольца в верхних и нижних слоях двойного слоя расположены под углом относительно друг друга (Рис.1.34б). На Рис.1.33 и Рис.1.34 эти кольца выделены овалами. В кристалле GPhK плоскость одного кольца (Рис.1.34б, кольцо 1 или 1') составляет с направлением [508] угол $\sim 15^\circ$. Угол между плоскостью соседнего в слое кольца 2 и тем же направлением $\sim 60^\circ$. При растяжении вдоль направления [508] в каждом слое одни кольца вытягиваются вдоль связи С–С (большая диагональ углеродного кольца), на другие действует сила, перпендикулярная плоскостям колец. Таким образом, в каждом слое анионов орто-фталевой кислоты половина углеродных колец увеличивает податливость решетки, другая уменьшает ее, что,

Таблица 1.23: Значения модулей сдвига G в различных плоскостях кристаллов гидрофталатов.

(100)			
Соединение	$G_{[010]}$, ГПа	$G_{[001]}$, ГПа	G_{\max}/G_{\min}
GPhK	6.23	7.59	1.22
GPhRb	6.38	7.14	1.12
GPhCs	5.47	5.86	1.07
GPhNH ₄	5.77	4.87	1.18
(010)			
	$G_{[001]}$, ГПа	$G_{[100]}$, ГПа	
GPhK	4.86	6.23	1.28
GPhRb	5.15	6.38	1.24
GPhCs	5.38	5.47	1.02
GPhNH ₄	4.28	5.77	1.35
(001)			
	$G_{[100]}$, ГПа	$G_{[010]}$, ГПа	
GPhK	7.59	4.86	1.56
GPhRb	7.14	5.15	1.39
GPhCs	5.86	5.38	1.09
GPhNH ₄	4.87	4.28	1.14

Таблица 1.24: Зоны отрицательного коэффициента Пуассона.

Соединение	θ_{\min} , град	n	m	θ_{\max} , град	n	m
GPhK	–	–	–	–	–	–
GPhRb	28.40	[0 $\bar{2}$ 3]	[052]	61.6	[0 $\bar{5}$ 2]	[023]
GPhCs	7.69	[0 $\bar{1}$ 3]	[0 17 1]	82.3	[0 $\bar{1}$ 71]	[013]
GPhNH ₄	24.30	[0 $\bar{8}$ 7]	[061]	65.7	[0 $\bar{6}$ 1]	[087]

вероятно, приводит к высоким значениям модуля упругости в рассматриваемом направлении. В результате замещения калия катионом большего радиуса – рубидием – увеличиваются расстояния катион–анион, усиливается искажение углеродных колец. Если разброс расстояний С–С в GPhK составляет 1.382–1.398 Å, то в GPhRb он становится 1.346–1.408 Å. Плоскость аналогичного GPhK кольца 1, большая диагональ которого сокращается до 2.753 Å, составляет с направлением растяжения [203] угол $\sim 25^\circ$. Плоскость соседнего кольца 2 – $\sim 65^\circ$.

В структурах GPhCs и GPhNH₄ параметр b увеличен почти в 2 раза, за счет центра инверсии реализуется иное расположение углеродных колец – два симметричных двойных слоя в ячейках формируют другую систему атомных плоскостей в кристаллах. В структуре GPhCs угол наклона кольца 1 к оси растяжения [203]

$\sim 15^\circ$. Плоскость соседнего кольца 2 составляет с направлением $[203]$ угол $\sim 55^\circ$. В структуре GPhCs для направления $[509]$ эти углы равны $\sim 15^\circ$ и 50° соответственно. Следует отметить, что во всех четырех структурах ориентация углеродного кольца 1 относительно направления растяжения, в котором наблюдаются максимальные модули Юнга, практически не изменяется – плоскости колец составляют с направлением растяжения угол $\sim 15^\circ$ (в структуре GPhRb этот угол $\sim 25^\circ$). Однако с изменением радиуса катиона изменяются длины связей в углеродных кольцах (разброс расстояний C–C в GPhCs и GPhNH₄ 1.387–1.413 и 1.352–1.406 Å, длина больших диагоналей 2.789 и 2.751 Å соответственно), и последовательно уменьшается угол между плоскостью кольца 2 и направлением растяжения. Самым маленьким углом (50°) характеризуется структура GPhNH₄, для которого наблюдается самое низкое значение модуля Юнга. Исключение составляет GPhRb – угол между плоскостью кольца 2 и направлением растяжения увеличивается на 5° , но увеличивается и угол наклона кольца 1 , т.е. вследствие вхождения в структуру катиона большего радиуса изменился наклон обоих колец, а угол между ними уменьшился. Вероятно, последовательное изменение при замещении катионов расположения углеродных колец относительно друг друга приводит к тому, что происходит «сближение» ориентации углеродных колец относительно исследуемого направления растяжения. Это увеличивает податливость решетки и облегчает ее деформацию, снижает модуль Юнга.

При растяжении в плоскости (001) кристаллов GPhX (Рис.1.33б) наблюдается аналогичная картина. Соседние в слое углеродные кольца ориентированы по-разному относительно направления растяжения. В ряду кристаллов $X = K-NH_4$ углы наклона колец 1 и 2 к осям растяжения составляют $\sim 15^\circ$ и 55° , 5° и 50° , 15° и 65° , 10° и 60° соответственно. Самый большой модуль Юнга наблюдается у GPhCs (14.8 ГПа). Этот кристалл характеризуется самым большим углом наклона плоскости кольца относительно направления растяжения – 65° . Различия в углах наклона углеродных колец небольшие, максимальные значения модулей Юнга в плоскости (001) близки (Табл.1.22). Разницу можно объяснить разными длинами связей катион–анион и C–C в рассматриваемых структурах. В ряду кристаллов $X = K-NH_4$ в пределах 4.5 Å разброс кратчайших связей C–C между углеродными кольцами составляет 3.387–4.462, 3.448–4.486, 3.509–4.478, 3.520–4.479 Å соответственно. Длина связей и их направленность относительно осей растяжения, вероятно, обуславливают величину модуля упругости.

При растяжении в плоскости (100) наблюдаются самые низкие (из максимальных) значения модулей Юнга. Они так же мало отличаются друг от друга, как и при растяжении кристаллов GPhX в плоскости (001) (Табл.1.22). В рассматриваемом случае углеродные кольца во всех слоях ориентированы практически одинаково (за исключением GPhCs), поэтому их деформация происходит в близких направлениях. В ряду $X = K-NH_4$ углы наклона колец в двойных слоях (Рис.1.33а) относительно осей растяжения составляют $\sim 25^\circ$ и 25° , 15° и 30° , 3° и 40° , 20° и 20°

соответственно. В кристаллах GPhCs половина углеродных колец ориентирована большой диагональю вдоль направления растяжения, другая составляет угол $\sim 40^\circ$ с ним. То есть половина колец увеличивает податливость решетки, другая половина ухудшает ее, что, вероятно, приводит к увеличению модуля Юнга.

При деформации в плоскости (100) в кристаллах GPhK и GPhNH₄ направление растяжения, в котором проявляется максимальный модуль Юнга, перпендикулярно плоскости спайности (001). Межплоскостные расстояния d_{001} в этих кристаллах составляют 9.614 и 10.240 Å соответственно. Они коррелируют с модулями Юнга – чем больше межплоскостное расстояние, тем легче растянуть кристалл, следовательно, тем меньше модуль Юнга. В кристалле GPhK наблюдается самый высокий среди исследуемых гидрофталатов модуль Юнга в направлении [001], у него самый маленький параметр c (Табл.1.21), т.е. самое короткое межплоскостное расстояние d_{001} . Самое высокое значение модуля Юнга кристалла GPhK в этом направлении можно также объяснить самыми короткими (следовательно, самыми сильными) по сравнению с другими гидрофталатами связями катион–анион. В кристаллах GPhCs наблюдается наименьший, чем в остальных кристаллах, разброс расстояний катион–анион. Самое короткое расстояние в кислородном окружении атома Cs – это 2.953 Å, что существенно превышает аналогичные расстояния 2.641, 2.799, 2.807 Å в кристаллах GPhK, GPhRb и GPhNH₄ соответственно. Несмотря на близость ионных радиусов рубидия и аммония и больший параметр c в кристалле GPhNH₄, модуль $E_{[001]}$ выше, чем для кристалла GPhRb. Это также может быть связано с действием дополнительных водородных связей, препятствующих растяжению вдоль оси [001].

Как уже было сказано выше, плоскости (010) и (001) являются плоскостями спайности в кристаллах GPhX. В кристаллах GPhCs и GPhNH₄ параметр b больше почти в 2 раза, чем в кристаллах GPhK и GPhRb, т.е. длиннее межплоскостные расстояния d_{010} . Модули Юнга $E_{[010]}$ этих кристаллов (7.09 и 7.84 ГПа) ниже, чем у GPhK и GPhRb (10.10 и 9.43 ГПа) (Табл.1.22). У кристалла GPhK самый высокий модуль Юнга в направлении [010], который также можно объяснить короткими связями К–О. В кристалле GPhNH₄ присутствует сетка дополнительных водородных связей, которая затрудняет его растяжение вдоль оси [010] по сравнению с кристаллом GPhCs.

Модули сдвига. Из анализа Рис.1.36 и Табл.1.23 следует, что практически изотропным модулем сдвига обладает кристалл GPhCs. Небольшая анизотропия наблюдается при сдвиге в плоскости (100) – вдоль оси [001] модуль $G_{[001]}$ максимальный (Рис.1.36а). Цезий – самый крупный из рассматриваемых катионов (Табл.1.21). Для него характерен самый маленький разброс расстояний катион–анион. Анизотропию в плоскости (100) можно объяснить малым разбросом этих расстояний вдоль оси [001], который затрудняет сдвиг в этом направлении. Аналогичная ситуация наблюдалась для модуля Юнга $E_{[001]}$ (Табл.1.22).

В кристаллах GPhK максимальная анизотропия модуля сдвига наблюдается

в плоскости (001) (Рис.1.36в). Самое высокое значение $G_{[100]} = 7.59$ ГПа, самое низкое $G_{[010]} = 4.86$ ГПа (Табл.1.23). У иона калия самый маленький радиус (Табл.1.21), самые короткие расстояния катион–анион. В направлении [100] самый короткий период решетки. Также сдвиг вдоль оси [100] идет перпендикулярно направлениям сил Ван-дер-Ваальса. В направлении [010] большой параметр решетки кристалла, сдвиг осуществляется вдоль действия слабых межмолекулярных сил. Это облегчает сдвиг и снижает модуль $G_{[010]}$. При сдвиге в плоскости (100) (Рис.1.36а) модуль $G_{[010]} = 6.23$ ГПа больше, чем при сдвиге в плоскости (001) ($G_{[010]} = 4.86$ ГПа), так как почти перпендикулярно направлению [010] реализуются самые короткие связи К–О 2.641 \AA (Рис.1.34а).

Аналогичная ситуация наблюдается в кристаллах GPhRb. Максимальной анизотропией и максимальным значением $G_{[100]} = 7.14$ ГПа характеризуется сдвиг в плоскости (001) (Рис.1.36в, Табл.1.23). При сдвиге в плоскости (100) (Рис.1.36а) модуль $G_{[010]} = 6.38$ ГПа больше, чем для кристаллов GPhK. Параметр b у кристаллов GPhRb меньше, чем у GPhK. Большой по размеру катион рубидия меняет систему связей таким образом, что уменьшается искажение углеродных колец и укорачиваются межмолекулярные связи. Это затрудняет сдвиг вдоль оси [010].

В кристаллах GPhNH₄ анизотропия модулей G ярче выражена при сдвиге в плоскости (010). Максимальный модуль сдвига наблюдается в направлении [100], минимальный – в направлении [001] (Рис.1.36б, Табл.1.23). У кристалла GPhNH₄ самый маленький параметр решетки. Перпендикулярно оси [100] помимо самых коротких связей N–O 2.807 \AA действует много дополнительных водородных связей, длина которых лежит в диапазоне $2.807\text{--}2.979 \text{ \AA}$. Большое количество связей препятствует сдвигу в этом направлении. Вдоль оси кристалла GPhNH₄ действуют силы Ван-дер-Ваальса, длина межмолекулярных связей превышает длину связей в других кристаллах рассматриваемого семейства. Этим можно объяснить самое низкое значение модуля сдвига в направлении [001] при скольжении в плоскости (010).

Коэффициенты Пуассона. Как было сказано выше, три гидрофталата – GPhRb, GPhCs, GPhNH₄ – оказались частичными ауксетиками (Табл.П.16). В гидрофталатах отрицательный коэффициент Пуассона возникает, вероятно, вследствие наличия в их структуре в плоскости ac гофрированного слоя катионов. Этот слой не просто гофрированный, но и слегка «скрученный» в результате действия винтовой оси 2_1 либо центра инверсии и распределения в пространстве неравноценных по длине связей катион–анион (Рис.1.33). Поперечное расширение при продольном растяжении можно объяснить моделью «разворачивания конфеты». Если края обертки не сильно закручены (рыхлые), то при растяжении фантика конфета разворачивается, края обертки расширяются. Если они сильно закручены, то при растяжении фантика обертка не разворачивается, а ее края растягиваются и сжимаются, как в случае положительного коэффициента Пуассона. Среди гидрофталатов изучаемого семейства в GPhK самые короткие связи катион–анион. Самые длинные –

в GPhCs, в GPhRb и GPhNH₄ эти расстояния сравнимы, так как ионные радиусы рубидия и аммония близки. Вероятно, перекрещенные «короткие» связи К–О не позволяют расширяться кристаллу в поперечном направлении при продольном растяжении (Рис.1.33а). В кристалле GPhK именно самые короткие связи К–О 2.641 Å (на Рис.1.33а выделены жирными линиями) составляют угол $\sim 25^\circ$ с направлениями продольного растяжения и поперечной деформации, при которых коэффициент Пуассона минимален.

В кристалле GPhRb минимальный отрицательный коэффициент Пуассона наблюдается, когда направление поперечного растяжения такое же, как и в кристалле GPhK (угол между самыми короткими перекрещенными связями и направлениями растяжения и поперечной деформации $\sim 30^\circ$). В кристаллах GPhCs и GPhNH₄ минимальный отрицательный коэффициент Пуассона реализуется, когда растягиваются связи 3.266 и 3.132 Å соответственно, а кристаллы «разбухают» вдоль связей 3.122, 3.132 и 2.914, 3.132 Å соответственно. Угол между самыми короткими перекрещенными связями и направлениями растяжения и поперечной деформации в обоих кристаллах $\sim 30^\circ$. То есть можно сказать, что во всех исследуемых кристаллах гидрофталатов минимальный коэффициент Пуассона реализуется примерно в одних и тех же условиях – существует предельный угол между самыми короткими «двойными» (перекрещенными) связями катион–анион и направлениями растяжения и поперечной деформации, который составляет $\sim 25^\circ$ – 30° .

Анализ угла θ (Табл.1.24) позволил выявить зоны (углы и кристаллографические направления), в пределах которых коэффициент Пуассона отрицательный. Для GPhCs диапазон углов (7.69° – 82.3°) шире, чем для GPhRb и GPhNH₄ (28.4° – 61.6° и 24.3° – 65.7° соответственно). Этот эффект коррелирует с диапазонами длин связей катион–анион в исследуемых структурах. В кристалле GPhCs среднее расстояние катион–анион больше, чем в кристаллах GPhRb и GPhNH₄. Зоны отрицательного коэффициента Пуассона у GPhRb и GPhNH₄ практически совпадают, но минимальные значения коэффициентов отличаются (-0.12 и -0.01 соответственно). Ионные радиусы рубидия и аммония близки, но в кристалле GPhNH₄ больше в 2 раза параметр b элементарной ячейки, меньше параметр a (объем элементарной ячейки в 2 раза больше), чем в кристалле GPhRb, присутствует система дополнительных водородных связей. Она препятствует деформации кристалла, поскольку эти водородные связи не затрагивают сцепление молекул кислоты в слоях, а участвуют в сочленении слоев анионов кислоты со слоями катионов. Во всех исследуемых кристаллах коэффициент Пуассона обращается в ноль, когда либо растяжение, либо поперечная деформация осуществляется вдоль самой короткой связи катион–анион. В кристаллах GPhRb это 2.799 Å, в GPhCs – 2.953 Å, в GPhNH₄ – 2.807 Å (Рис.1.33а).

1.7. Растяжение стержней с семиконстантной тетрагональной анизотропией [23]

В разделах, рассмотренных выше, матрица упругих коэффициентов различных видов анизотропии имела общий вид при ориентации 1)

$$\begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & * & * \\ * & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix},$$

где звездочкой обозначены не нулевые компоненты матрицы. Ниже будет рассмотрено растяжение стержней с 7-ми константной тетрагональной анизотропией. Матрица упругих коэффициентов для этих кристаллов не подчиняется приведенному выше виду ($s_{16} = -s_{26} \neq 0$).

При характеристике направления растяжения 7-ми константного тетрагонального кристалла единичным вектором \mathbf{n} и использовании поперечного единичного вектора \mathbf{m} модуль Юнга и коэффициент Пуассона могут быть выражены через компоненты этих векторов и матричные коэффициенты податливости $s_{11} = s_{22}$, s_{12} , $s_{13} = s_{23}$, s_{33} , $s_{44} = s_{55}$, s_{66} , $s_{16} = -s_{26}$ следующим образом

$$-\frac{\nu}{E} = s_{11}(n_1^2 m_1^2 + n_2^2 m_2^2) + s_{12}(n_1^2 m_2^2 + n_2^2 m_1^2) + s_{13}(n_3^2 + m_3^2 - 2n_3^2 m_3^2) + \\ + s_{33} n_3^2 m_3^2 + s_{44}(n_1 m_1 + n_2 m_2) n_3 m_3 + s_{66} n_1 n_2 m_1 m_2 + \\ + s_{16}[(n_1^2 - n_2^2) m_1 m_2 + (m_1^2 - m_2^2) n_1 n_2],$$

$$E^{-1} = s_{11}(n_1^4 + n_2^4) + s_{33} n_3^4 + (2s_{12} + s_{66}) n_1^2 n_2^2 + \\ + (2s_{13} + s_{44})(1 - n_3^2) n_3^2 + 2s_{16}(n_1^2 - n_2^2) n_1 n_2.$$

Если использовать параметризацию с помощью углов Эйлера φ , θ , ψ , то для единичных векторов \mathbf{n} и \mathbf{m} будем иметь

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \sin \theta \\ -\cos \varphi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \cos \theta \sin \psi + \cos \varphi \cos \psi \\ \cos \varphi \cos \theta \sin \psi + \sin \varphi \cos \psi \\ \sin \theta \sin \psi \end{pmatrix}.$$

и, соответственно, для модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν получим

$$\frac{1}{E} = \left(s_{11} - \frac{\delta}{2} \sin^2 2\varphi + \frac{s_{16}}{2} \sin 4\varphi \right) \sin^4 \theta + (s_{33} - (s_{33} - 2s_{13} - s_{44}) \sin^2 \theta) \cos^2 \theta,$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\nu}{E} &= A(\varphi, \theta) \cos^2 \psi + B(\varphi, \theta) \sin^2 \psi + D(\varphi, \theta) \sin \psi \cos \psi, \\
 A(\varphi, \theta) &= s_{12} \sin^2 \theta + s_{13} \cos^2 \theta + \left(\frac{\delta}{2} \sin^2 2\varphi - \frac{s_{16}}{2} \sin 4\varphi \right) \sin^2 \theta, \\
 B(\varphi, \theta) &= s_{13} + \frac{1}{4} \left(s_{33} + s_{11} - s_{44} - 2s_{13} - \frac{\delta}{2} \sin^2 2\varphi + \frac{s_{16}}{2} \sin 4\varphi \right) \sin^2 2\theta, \\
 D(\varphi, \theta) &= \left(\frac{\delta}{2} \sin 4\varphi - s_{16} \cos 4\varphi \right) \sin^2 \theta \cos \theta, \\
 \delta &= s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{66}.
 \end{aligned}$$

Модуль Юнга является периодической функцией с периодами $T_\varphi = \pi/2$, $T_\theta = \pi$, а коэффициент Пуассона имеет периоды $T_\varphi = \pi/2$, $T_\theta = 2\pi$, $T_\psi = \pi$.

Таблица 1.25: Минимальные и максимальные значения коэффициента Пуассона, а также значения коэффициента Пуассона усредненного по всем направлениям $\langle \nu \rangle$.

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
AgClO ₃	0.24	0.54	0.39
C(CH ₂ OH) ₄	0.02	0.93	0.41
C ₁₄ H ₈ O ₄	-0.50	0.20	-0.13
CaMoO ₄	0.18	0.51	0.29
CaWO ₄	0.14	0.58	0.29
InPS ₄	-0.32	0.86	0.30
	-0.17	0.68	0.27
LiBi(MoO ₄) ₂	0.16	0.55	0.32
LiY _{0.5} Tb _{0.5} F ₄	-0.64	1.41	0.38
LiYF ₄	-0.01	0.71	0.33
NaBi(MoO ₄) ₂	0.18	0.40	0.29
NaBi(WO ₄) ₂	0.13	0.52	0.30
NbO ₂	0.04	0.54	0.32
	0.04	0.54	0.32
PbMoO ₄	0.08	0.67	0.35
SrMoO ₄	0.13	0.48	0.29

Количество изученных 7-ми константных тетрагональных кристаллов, как можно видеть из данных справочника [172], мало. Оно гораздо меньше количества кристаллов других систем. Численный анализ коэффициента Пуассона на базе вышеуказанных формул и данных об упругих коэффициентах, собранных в справочнике [172], показал, что среди четырнадцати 7-ми константных тетрагональных кристаллов четыре, а именно, кристаллы LiY_{0.5}Tb_{0.5}F₄, C₁₄H₈O₄, InPS₄, LiYF₄ являются частичными ауксетиками. В Табл.1.25 сведены экстремальные и средние по

трем углам значения коэффициентов Пуассона всех 14-ти кристаллов. Экстремальные значения определялись по изменению поверхностей уровня $\nu(\varphi, \theta, \psi) = c$ при изменении величины c . Средний коэффициент Пуассона оказался отрицательным ($\langle \nu \rangle = -0.13$) только у кристалла $C_{14}H_8O_4$. У остальных тринадцати кристаллов он заключен в диапазоне от 0.27 до 0.41 (см. Табл.1.25).

Зоны угловых ориентаций частичных аусетиков, характеризующиеся отрицательными значениями коэффициента Пуассона, отделяются от зон с положительными коэффициентами поверхностью аусетичности $\nu = 0$, вид которой в соответствии с предыдущими формулами может быть описан аналитически следующим образом

$$A(\varphi, \theta) \cos^2 \psi + B(\varphi, \theta) \sin^2 \psi + D(\varphi, \theta) \sin \psi \cos \psi = 0.$$

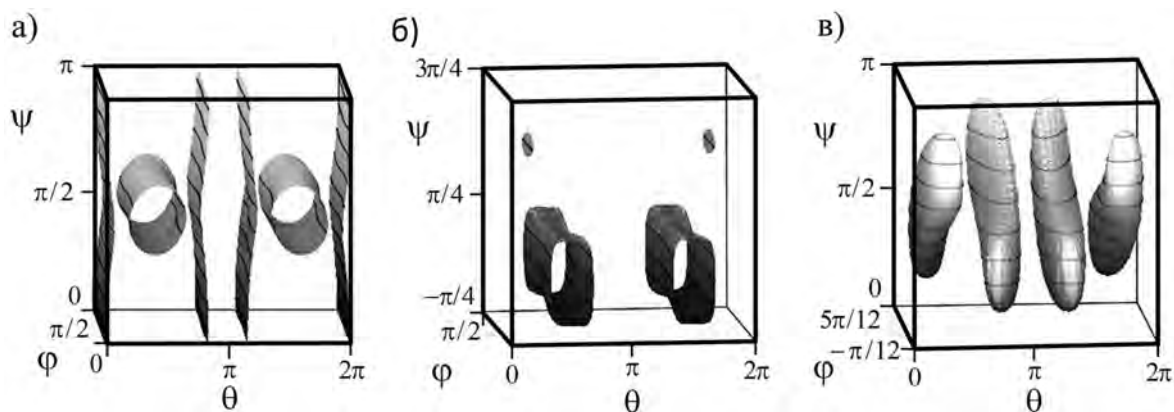


Рис. 1.37: Поверхности аусетичности $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ для $C_{14}H_8O_4$ (а), $InPS_4$ (б), $LiY_{0.5}Tb_{0.5}F_4$ (в).

Топологическая структура этой поверхности оказывается различной для разных аусетических кристаллов (Рис.1.37). Для кристалла $C_{14}H_8O_4$ аусетическая поверхность имеет открытый трубчатый характер (проходит через все ячейки угловой периодичности) и одни ее части оказываются вложенными в другие. При этом зоны угловой ориентации с отрицательным коэффициентом Пуассона располагаются между внешней и внутренними частями аусетической поверхности. Для кристалла $LiY_{0.5}Tb_{0.5}F_4$ аусетическая поверхность рассыпается на замкнутые части, замкнутость которых очевидна при учете соседних периодических угловых ячеек. В этом случае угловые зоны с отрицательным коэффициентом Пуассона находятся внутри этих замкнутых частей. Наконец, для кристалла $InPS_4$ угловые зоны с отрицательным коэффициентом Пуассона оказываются внутри как малых замкнутых, так и открытых трубкообразных частей аусетической поверхности (Рис.1.37б). Для большей наглядности ячейки периодичности на Рис.1.37 выбраны разными.

Численные оценки максимального и минимального значений модуля Юнга, полученные из анализа вышеуказанных формул для E и данных об упругих ко-

Таблица 1.26: Границы изменчивости модулей Юнга для 7-ми константных тетрагональных кристаллов в случае прямолинейной анизотропии.

Кристаллы	E_{\max}	E_{\min}	Кристаллы	E_{\max}	E_{\min}
AgClO ₃	31	23.8	LiY _{0.5} Tb _{0.5} F ₄	105	14.6
C(CH ₂ OH) ₄	26	3.48	LiYF ₄	92.4	47
C ₁₄ H ₈ O ₄	11	10.2	NaBi(MoO ₄) ₂	93.9	68.9
CaMoO ₄	138	86.4	NaBi(WO ₄) ₂	110	61.9
CaWO ₄	138	73.1	NbO ₂	355	170
InPS ₄	23.7	21.6		354	169
	29	26.1	PbMoO ₄	100	38.7
LiBi(MoO ₄) ₂	85	49.3	SrMoO ₄	116	69.9

эффицентах из [172], собраны в Табл.1.26. Из этой таблицы, в частности, можно видеть, что наименьшей изменчивостью модуля Юнга (десять процентов) при изменении ориентации обладают кристаллы InPS₄ и C₁₄H₈O₄. Не велика она и для кристалла AgClO₃ (тридцать процентов). Большим различием максимального и минимального значений модуля Юнга характеризуются кристаллы C(CH₂OH)₄ и LiY_{0.5}Tb_{0.5}F₄ (более чем в 7 раз). Для остальных девяти кристаллов имеет место различие в 1.6 - 2.6 раза. Какой-либо связи между изменчивостью модуля Юнга и отрицательностью коэффициента Пуассона для 7-ми константных тетрагональных кристаллов не обнаружено.

1.8. Растяжение стержней с семиконстантной ромбоэдрической анизотропией [24]

Матрица упругих коэффициентов для семиконстантной ромбоэдрической анизотропии также, как и семиконстантной тетрагональной анизотропии, не подчиняется виду при ориентации 1)

$$\begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & * & * \\ * & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix},$$

где звездочкой обозначены не нулевые компоненты матрицы. Для 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов матрица коэффициентов податливости имеет вид [171]

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & -s_{14} & -s_{15} & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ s_{14} & -s_{14} & 0 & s_{44} & 0 & -2s_{15} \\ s_{15} & -s_{15} & 0 & 0 & s_{44} & 2s_{14} \\ 0 & 0 & 0 & -2s_{15} & 2s_{14} & 2(s_{11} - s_{12}) \end{pmatrix}.$$

В частном случае $s_{15} = 0$ получаем матрицу коэффициентов податливости для 6-ти константных ромбоэдрических кристаллов, а при $s_{14} = s_{15} = 0$ матрицу для гексагональных кристаллов.

С использованием матричных обозначений s_{ij} выражения для модуля Юнга E (1.1) и коэффициента Пуассона ν (1.2) принимают вид

$$\begin{aligned} E^{-1}(\mathbf{n}) &= s_{11} + (2s_{13} - 2s_{11} + s_{44})n_3^2 + (s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44})n_3^4 + \\ &+ 2s_{14}[(n_1^2 - n_2^2)n_2n_3 + 2n_1^2n_2n_3] + 2s_{15}[(n_1^2 - n_2^2)n_1n_3 - 2n_1n_2^2n_3], \\ -\frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{E(\mathbf{n})} &= s_{12}(n_1m_2 - n_2m_1)^2 + s_{13}(n_3^2 + m_3^2) + (s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44})n_3^2m_3^2 + \\ &+ s_{14}[(n_1^2 - n_2^2)m_2m_3 + (m_1^2 - m_2^2)n_2n_3 + 2n_1m_1(m_2n_3 + n_2m_3)] + \\ &+ s_{15}[(n_1^2 - n_2^2)m_1m_3 + (m_1^2 - m_2^2)n_1n_3 - 2n_2m_2(n_3m_1 + n_1m_3)], \end{aligned}$$

а при параметризации направления растяжения углами Эйлера φ, θ, ψ (1.3), (1.4) модуль Юнга и коэффициент Пуассона записываются следующим образом

$$\begin{aligned} E^{-1}(\varphi, \theta) &= s_{11} \sin^4 \theta + (2s_{13} + s_{44}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta + s_{33} \cos^4 \theta - \\ &- 2 \sin^3 \theta \cos \theta [s_{14}(3 \cos \varphi - 4 \cos^3 \varphi) + s_{15}(3 \sin \varphi - 4 \sin^3 \varphi)], \\ -\frac{\nu(\varphi, \theta, \psi)}{E(\varphi, \theta)} &= A(\varphi, \theta) \cos^2 \psi + B(\varphi, \theta) \sin^2 \psi + D(\varphi, \theta) \cos \psi \sin \psi, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A(\varphi, \theta) &= s_{12} \sin^2 \theta + s_{13} \cos^2 \theta + \\ &+ [s_{14}(3 \cos \varphi - 4 \cos^3 \varphi) + s_{15}(3 \sin \varphi - 4 \sin^3 \varphi)] \cos \theta \sin \theta, \\ B(\varphi, \theta) &= s_{13} \sin^4 \theta + (s_{11} + s_{33} - s_{44}) \cos^2 \theta \sin^2 \theta - \\ &- [s_{14}(3 \cos \varphi - 4 \cos^3 \varphi) + s_{15}(3 \sin \varphi - 4 \sin^3 \varphi)] \cos 2\theta \cos \theta \sin \theta, \\ D(\varphi, \theta) &= [s_{14}(3 \sin \varphi - 4 \sin^3 \varphi) - s_{15}(3 \cos \varphi - 4 \cos^3 \varphi)](2 \sin \theta - 3 \sin^3 \theta). \end{aligned}$$

Модуль Юнга и коэффициент Пуассона являются периодическими функциями углов Эйлера с периодами $T_\varphi = 2\pi$, $T_\theta = \pi$ и $T_\psi = 2\pi$, $T_\theta = 2\pi$, $T_\psi = \pi$, соответственно.

Численный анализ этих формул с использованием экспериментальных данных по матричным коэффициентам податливости, приведенных в [172], позволяет установить, что только три из восьми 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов являются частичными ауксетиками (Табл.1.27). В таблице приведены экстремальные и осредненные по всем направлениям значения коэффициента Пуассона

Таблица 1.27: Минимальные и максимальные значения коэффициента Пуассона, а также значения коэффициента Пуассона усредненного по всем направлениям $\langle \nu \rangle$.

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$	Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
SbI ₃	-0.60	0.71	0.10	Pb _{4.7} Ba _{0.3} Ge ₃ O ₁₁	0.15	0.34	0.25
Be ₂ SiO ₄	0.22	0.37	0.28	Pb ₅ Ge ₃ O ₁₁	0.13	0.34	0.25
BiI ₃ (83 K)	0.01	0.47	0.23	Pb ₅ Ge ₃ O ₁₁ , s ^E	0.12	0.37	0.25
Ce ₂ Mg ₃ (NO ₃) ₁₂ ·24H ₂ O	0.17	0.54	0.32		0.12	0.37	0.25
CaMg(CO ₃) ₂	-0.07	0.73	0.30	MgSiO ₃	-0.02	0.51	0.25

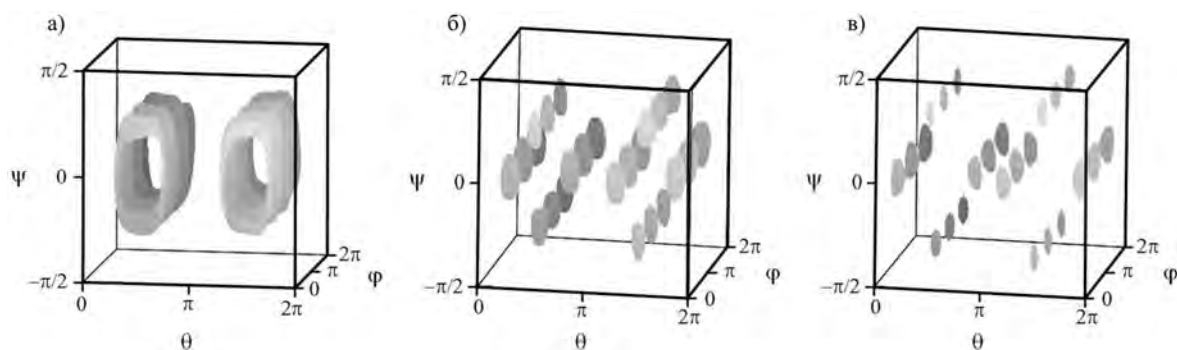


Рис. 1.38: Поверхности ауксетичности кристаллов SbI₃ (а), CaMg(CO₃)₂ (б) и MgSiO₃ (в).

кристаллов. Средние значения коэффициента Пуассона для всех кристаллов положительны и меняются в диапазоне 0.1-0.3.

Для пространственного изображения совокупностей ориентаций при которых наблюдается отрицательность коэффициента Пуассона удобно построить в пространстве углов Эйлера φ, θ, ψ ауксетические поверхности, т.е. поверхности нулевого коэффициента Пуассона, которые определяются уравнением $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$.

В рамках периодически повторяющихся угловых ячеек с периодами $T_\varphi = 2\pi, T_\theta = 2\pi, T_\psi = \pi$ такие поверхности для двух ауксетических 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов MgSiO₃ и CaMg(CO₃)₂ поверхности ауксетичности относятся к «закрытому» типу, а для ауксетического кристалла SbI₃ к «открытому» типу (Рис.1.38).

1.9. Средний коэффициент Пуассона для кристаллов [25]

Анизотропия свойств различных кристаллов опирается на разнообразие их зависимостей от ориентации кристаллических образцов относительно простейшего типа системы координат, именуемой кристаллографической. При параметризации этой ориентации тремя угловыми переменными, углами Эйлера, в случае одноос-

ной деформации растяжения кристалла наиболее простой оказывается зависимость от угла ψ , описывающая поворот кристалла в поперечной по отношению к направлению растяжения плоскости. Общая структура угловых зависимостей отношения коэффициента Пуассона $\nu(\varphi, \theta, \psi)$ к модулю Юнга $E(\varphi, \theta)$ имеет вид (см. раздел 1.1)

$$-\frac{\nu}{E} = A(\varphi, \theta) \cos^2 \psi + B(\varphi, \theta) \cos \psi \sin \psi, \quad (1.110)$$

$$A = -\left. \frac{\nu}{E} \right|_{\psi=0}, \quad B = -\left. \frac{\nu}{E} \right|_{\psi=\pi/2}, \quad D + A + B = -\left. \frac{\nu}{E} \right|_{\psi=\pi/4}.$$

При осреднении по всем поперечным направлениям получаем

$$-\langle \nu \rangle / E \equiv -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\nu}{E} d\psi = \frac{1}{2} [A(\varphi, \theta) + B(\varphi, \theta)]. \quad (1.111)$$

При полном осреднении по всем трем углам имеем

$$-\bar{\nu} \equiv -\frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \nu(\varphi, \theta, \psi) \sin \theta d\theta = \frac{1}{2} (\langle AE \rangle + \langle BE \rangle). \quad (1.112)$$

1.9.1. Гексагональные ауксетики

Наиболее простым является анализ кубических кристаллов, как наиболее симметричных. Следующим по простоте оказывается случай гексагональных кристаллов, обладающих трансверсальной изотропией, и тем самым независимостью упругих свойств от угла φ . В этом случае имеем

$$A = s_{12} \sin^2 \theta + s_{13} \cos^2 \theta, \quad (1.113)$$

$$B = s_{13} \cos^2 2\theta + Q \sin^2 \theta \cos^2 \theta, \quad (1.114)$$

$$D = 0,$$

$$\frac{1}{E} = (\sqrt{s_{11}} \sin^2 \theta - \sqrt{s_{33}} \cos^2 \theta)^2 + (s_{44} + 2s_{13} + 2\sqrt{s_{11}s_{33}}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta,$$

$$Q \equiv s_{11} + s_{33} + 2s_{13} - s_{44}.$$

Здесь положительность модуля Юнга очевидна в силу термодинамических ограничений на коэффициенты податливости гексагональных кристаллов

$$s_{11} > 0, \quad s_{33} > 0, \quad s_{44} > 0, \quad 1 > 0.5 \left(1 + \frac{s_{12}}{s_{11}} \right) > \frac{s_{13}^2}{s_{11}s_{33}}.$$

Формула для отношения коэффициента Пуассона к модулю Юнга для гексагональных кристаллов принимает вид

$$-\frac{\nu}{E} = (s_{12} \sin^2 \theta + s_{13} \cos^2 \theta) \cos^2 \psi + \left(s_{13} \cos^2 2\theta + \frac{1}{4} Q \sin^2 2\theta \right) \sin^2 \psi. \quad (1.115)$$

Три необходимые условия для полных гексагональных ауксетиков можно получить в случае трех частных направлений $\psi = \theta = 0$; $\psi = 0, \theta = \pi/2$ и $\psi = 2\theta = \pi/2$

$$s_{13} > 0, \quad s_{12} > 0, \quad Q > 0.$$

Эти условия оказываются и достаточными для полных ауксетиков. При выполнении их правая часть формулы для отношения коэффициента Пуассона и положительного модуля Юнга положительна. Такой результат был получен ранее в [98]. Противоположные неравенства

$$s_{13} < 0, \quad s_{12} < 0, \quad Q < 0 \tag{1.116}$$

аналогично обеспечивают необходимые и достаточные условия для неауксетиков. Если выполнены не все эти три неравенства, то мы будем иметь случаи частичных гексагональных ауксетиков.

Анализ экспериментальных данных по гексагональным кристаллам, собранных в справочнике [172], показал, что лишь шесть кристаллов являются частичными ауксетиками, и нет ни одного полного ауксетика. Лишь два из трех неравенств (1.116) выполняются для этих частичных ауксетиков, как ясно из Табл.1.28.

Таблица 1.28: Упругие параметры частичных гексагональных ауксетиков.

Кристаллы	s_{12} , ТПа ⁻¹	s_{13} , ТПа ⁻¹	Q , ТПа ⁻¹	$s_{12} + s_{13}$, ТПа ⁻¹	$s_{13} - s_{12}$, ТПа ⁻¹
MoS ₂	1.35	-2.76	-32.44	-1.41	-4.11
Zn	0.60	-7	-3.38	-6.4	-7.6
C ₇ H ₁₂	-1030	-240	379	-1270	790
Be	-0.28	-0.05	0.06	-0.33	0.23
BeCu (2.4at%Cu)	-0.35	-0.03	0.43	-0.38	0.32
TiB ₂	-0.99	-1.15	0.22	-2.14	-0.16
Кристаллы	$2s_{12} + 2s_{13} + Q$, ТПа ⁻¹	$s_{12} + Q$, ТПа ⁻¹	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\langle \nu \rangle_{\max}$	$\bar{\nu}$
MoS ₂	-35.26	-31.09	0.12	0.25	0.21
Zn	-16.18	-2.78	0.17	0.39	0.26
C ₇ H ₁₂	-2161	-651	0.39	0.47	0.44
Be	-0.6	-0.22	0.02	0.05	0.03
BeCu (2.4at%Cu)	-0.33	0.08	0.006	0.06	0.03
TiB ₂	-4.06	-0.77	0.24	0.41	0.32

Что касается среднего по поперечным направлениям коэффициента Пуассона для гексагональных кристаллов, то в соответствии с (1.111), (1.113)-(1.115) имеем

$$-2\frac{\langle\nu\rangle}{E} = -2\frac{\nu}{E}\Big|_{\psi=\pi/4} = s_{12}\sin^2\theta + s_{13}(\cos^2\theta + \cos^2 2\theta). \quad (1.117)$$

Здесь трем частным ориентациям $\theta = 0$, $\theta = \pi/2$, $\theta = \pi/4$ будут соответствовать необходимые условия для неауксетиков в среднем по поперечным направлениям вида

$$s_{13} < 0, \quad s_{12} + s_{13} < 0, \quad 2s_{12} + 2s_{13} + Q < 0,$$

которые выполняются для перечисленных шести частичных ауксетиков (см. Табл.1.28).

Как видно из (1.117) одним из достаточных условий для неауксетиков в среднем остаются те же условия (1.116). Для обсуждаемых кристаллов они не удовлетворяются. Однако, после перегруппировки слагаемых в выражении (1.117) оно приводится к виду

$$-2\frac{\langle\nu\rangle}{E} = s_{13}(\cos^2\theta + \cos^2 2\theta) + (s_{12} + Q\cos^2\theta)\sin^2\theta.$$

Этому выражению соответствуют достаточные условия для неауксетиков в среднем

$$s_{13} < 0, \quad s_{12} < 0, \quad s_{12} + Q < 0,$$

которые выполняются для трех частичных ауксетиков Be , C_7H_{12} , TiB_2 (см. Табл.1.28).

Другие условия

$$s_{13} + s_{12} < 0, \quad s_{13} - s_{12} < 0, \quad Q < 0$$

оказываются достаточными для отрицательности правой части соотношения (1.113), как ясно после преобразований к виду

$$-2\frac{\langle\nu\rangle}{E} = (s_{13} + s_{12})\cos^2\theta + (s_{13} - s_{12})\cos^2 2\theta + Q\cos^2\theta\sin^2\theta$$

и они выполняются для MoS_2 и Zn (см. Табл.1.28), т.е. эти кристаллы тоже не являются ауксетиками в среднем. Непосредственные вычисления подтверждают это для всех шести обсуждавшихся частичных ауксетиков. В итоге все гексагональные кристаллы из справочника [172] являются неауксетиками в среднем. В таблице приведены также минимальные и максимальные значения среднего по поперечным направлениям коэффициента Пуассона $\langle\nu\rangle$ и величины полного среднего коэффициента Пуассона $\bar{\nu}$ шести кристаллов, являющихся частичными ауксетиками до осреднения.

1.9.2. Анизотропные ауксетики

Соотношение (1.110) можно преобразовать к виду

$$-\frac{\nu}{E} = \frac{1}{2} [(A + B) + R \cos(\psi - \gamma)], \quad (1.118)$$

где

$$R = \sqrt{(A - B)^2 + D^2}, \quad \cos 2\gamma = \frac{A - B}{R}, \quad \sin 2\gamma = \frac{D}{R}.$$

Согласно (1.112) и (1.118) кристаллы будут являться полными ауксетиками если

$$A + B - R > 0$$

или

$$4AB > D^2 \quad \text{при} \quad A > 0, B > 0.$$

Для неауксетиков аналогичные условия имеют вид

$$A + B + R < 0$$

или

$$4AB > D^2 \quad \text{при} \quad A < 0, B < 0.$$

Эти условия представляют собой необходимые и достаточные условия. Такие результаты были ранее получены в [98].

Для частичных ауксетиков характерна смена знака коэффициента Пуассона при различных ориентациях. Следовательно, с учетом границы ауксетичности $\nu = 0$ для частичных ауксетиков необходимое и достаточное условие будет иметь вид

$$-R \leq A + B \leq R.$$

Аналогичный анализ можно провести и для среднего по поперечным направлениям коэффициента Пуассона. Согласно (1.111) кристаллы будут полными ауксетиками в среднем по поперечным направлениям при

$$A + B > 0. \quad (1.119)$$

Для неауксетиков в среднем по поперечным направлениям имеет место обратное неравенство

$$A + B < 0.$$

Для частичных ауксетиков в среднем по поперечным направлениям характерно условие

$$A + B = 0.$$

Представленные выше условия являются необходимыми и достаточными.

В работе [98] представлены также необходимые условия для полных ауксетиков и неауксетиков при частных ориентациях, когда кристалл растягивается в направлении кристаллографических направлений [100], [010] и [001] (формулы 4.13 и 4.14). Для частичных ауксетиков необходимые условия имеют более сложный вид при тех же самых частных ориентациях

$$\begin{aligned} -\sqrt{(s_{12} - s_{13})^2 + s_{14}^2} &\leq s_{12} + s_{13} \leq \sqrt{(s_{12} - s_{13})^2 + s_{14}^2}, \\ -\sqrt{(s_{12} - s_{23})^2 + s_{25}^2} &\leq s_{12} + s_{23} \leq \sqrt{(s_{12} - s_{23})^2 + s_{25}^2}, \\ -\sqrt{(s_{13} - s_{23})^2 + s_{36}^2} &\leq s_{13} + s_{23} \leq \sqrt{(s_{13} - s_{23})^2 + s_{36}^2}. \end{aligned}$$

1.9.3. Частные ориентации среднего по перечным направлениям коэффициента Пуассона

Ниже проведем анализ среднего по поперечным направлениям коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ для различных частных ориентаций.

Для описания коэффициента Пуассона необходимо два единичных вектора \mathbf{n} и \mathbf{m} . Единичный вектор \mathbf{n} , направлен вдоль оси растяжения, а вектор \mathbf{m} будет перпендикулярен \mathbf{n} . Через углы Эйлера φ , θ , ψ единичные взаимно ортогональные вектора \mathbf{n} и \mathbf{m} представляются следующим образом

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \sin \theta \\ -\cos \varphi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \cos \theta \cos \psi - \cos \varphi \sin \psi \\ \cos \varphi \cos \theta \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi \\ \sin \theta \cos \psi \end{pmatrix}.$$

Анализ начнем с трех частных случаев, когда единичный вектор \mathbf{n} имеет лишь одну ненулевую компоненту:

1) $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$. Это соответствует $\varphi = \theta = \pi/2$ и $\mathbf{m}^T = (0, \cos \psi, \sin \psi)$, и тогда $A = s_{12}$, $B = s_{13}$. Согласно (1.119) необходимое условие для того, чтобы кристалл был полным ауксетиком в среднем по поперечным направлениям, будет иметь вид

$$s_{12} + s_{13} > 0;$$

2) $n_2 = 1$, $n_1 = n_3 = 0$. В этом случае $\varphi = \pi$, $\theta = \pi/2$, $\mathbf{m}^T = (-\cos \psi, 0, \sin \psi)$ и необходимое условие для полных ауксетиков в среднем по поперечным направлениям принимает вид

$$s_{12} + s_{23} > 0;$$

3) $n_3 = 1, n_1 = n_2 = 0$. Это достигается при $\theta = 0$ без ограничений на φ . Тогда для полных ауксетиков в среднем по поперечным направлениям необходимое условие имеет вид

$$s_{13} + s_{23} > 0.$$

В трех других частных случаях будем считать равной нулю только одну из компонент единичного вектора \mathbf{n} :

4) $\mathbf{n}^T = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}, 0)$ и $\mathbf{m}^T = (1/\sqrt{2} \cos \psi, 1/\sqrt{2} \cos \psi, \sin \psi)$. В этом случае $\varphi = \pi/4, \theta = \pi/2$ и, следовательно, необходимое условие для полных ауксетиков в среднем по поперечным направлениям запишется в виде

$$s_{11} + s_{22} + 2s_{12} + 2s_{13} + 2s_{23} - s_{66} - 2s_{36} > 0;$$

5) $\mathbf{n}^T = (1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$ и $\mathbf{m}^T = (-1/\sqrt{2} \sin \psi, \cos \psi, 1/\sqrt{2} \sin \psi)$ соответствует $\varphi = \pi/2, \theta = \pi/4$. Аналогично предыдущему случаю получаем

$$s_{11} + s_{33} + 2s_{12} + 2s_{13} + 2s_{23} - s_{55} + 2s_{25} > 0;$$

Таблица 1.29: Ауксетика при полном осреднении по всем трем углам.

Кристаллы	$\langle \nu \rangle_{\max}$	$\langle \nu \rangle_{\min}$	$\bar{\nu}$
FeGe ₂	0.20	-0.37	-0.13
Ba	-0.05	-0.37	-0.22
	0.39	0.125	0.27
Sm _{0.7} Y _{0.3} S	-0.19	-0.59	-0.31
	-0.10	-0.49	-0.21
Sm _{0.75} Y _{0.25} S	-0.24	-0.58	-0.34
	-0.34	-0.67	-0.44
	-0.04	-0.42	-0.14
Sm _{0.75} La _{0.25} S	-0.13	-0.40	-0.21
Sm _{0.65} La _{0.35} S	-0.32	-0.35	-0.33
Sm _{0.75} Tm _{0.25} S	-0.28	-0.46	-0.34
Tm _{0.99} Se	0.06	-0.47	-0.06
TmSe	0.02	-0.54	-0.11

6) $\mathbf{n}^T = (0, -1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ и $\mathbf{m}^T = (\cos \psi, 1/\sqrt{2} \sin \psi, 1/\sqrt{2} \sin \psi)$ соответствует $\varphi = 0, \theta = \pi/4$. Здесь необходимое условие для полных ауксетиков в среднем по поперечным направлениям будет иметь вид

$$s_{22} + s_{33} + 2s_{12} + 2s_{13} + 2s_{23} - s_{44} - 2s_{14} > 0.$$

Для неауксетиков в среднем по поперечным направлениям эти условия будут иметь противоположный знак в неравенствах:

$$\begin{aligned} s_{12} + s_{13} < 0, \quad s_{12} + s_{23} < 0, \quad s_{13} + s_{23} < 0, \\ s_{11} + s_{22} + 2s_{12} + 2s_{13} + 2s_{23} - s_{66} - 2s_{36} < 0, \\ s_{11} + s_{33} + 2s_{12} + 2s_{13} + 2s_{23} - s_{55} + 2s_{25} < 0, \\ s_{22} + s_{33} + 2s_{12} + 2s_{13} + 2s_{23} - s_{44} - 2s_{14} < 0. \end{aligned}$$

1.9.4. Ауксетики при полном осреднении

Коэффициент Пуассона при полном осреднении по всем трем углам находится согласно соотношению (1.112). С помощью анализа экспериментальных данных [172, 175] удается выявить 9 ауксетиков при полном осреднении, у которых обнаруживается отрицательный средний коэффициент Пуассона $\bar{\nu}$. Это один тетрагональный кристалл FeGe_2 и восемь кубических кристаллов (Ba , $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{La}_{0.25}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$, $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$, TmSe). В Табл.1.29 для этих кристаллов представлены значения коэффициента Пуассона при полном осреднении по всем трем углам, а также максимальные и минимальные значения для среднего по поперечным направлениям коэффициента Пуассона. Как видно из Табл.1.29, имеется три кристалла, которые являются частичным ауксетиками, но после осреднения по всем трем углам становятся ауксетиками. К этим кристаллам относятся FeGe_2 , $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$ и TmSe .

1.10. Заключение

Выше было продемонстрировано, что ауксетики имеются среди кристаллов кубической, гексагональной, ромбоэдрической, тетрагональной и орторомбической систем, и количество кристаллических ауксетиков велико (**более 450**). Для многих ауксетиков максимальные значения коэффициента Пуассона превосходят величину 0.5, которая является граничным значением для изотропных материалов. В итоге проведенного анализа обнаружено также, что для кристаллов кубической и тетрагональной систем может быть превзойдена и другая граница для изотропных сред, а именно -1 : для кубических кристаллов FePd (28at%Pd) ($\nu_{\min} = -1.08$), InTl (25at%Tl) ($\nu_{\min} = -1.17$), InTl (27at%Tl) ($\nu_{\min} = -1.02$), InTl (27at%Tl, 200 K) ($\nu_{\min} = -1.98$), InTl (28.13at%Tl) ($\nu_{\min} = -1.08$); для тетрагонального кристалла Hg_2Br_2 ($\nu_{\min} = -1.02$). Наибольшее число ауксетиков обнаружено среди кубических кристаллов (**более 300**), а наименьшее среди гексагональных (семь). Если же рассмотреть только простые химические элементы из периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева, то выявляется 31 кристаллический ауксетик. Такие ауксетики представлены в Табл.1.39 и помечены желтым цветом. В этой же

таблице для кристаллических ауксетиков под химическими элементами приведены значения минимального коэффициента Пуассона. Наименьшие значения выявляются у мышьяка, лития, натрия, калия, индия, рубидия.

Все кристаллические ауксетики можно разделить на полные ауксетики (материалы, у которых коэффициент Пуассона принимает отрицательные значения при любой ориентации) и частичные ауксетики (материалы, у которых величина и знак коэффициента Пуассона зависит от ориентации). Полных ауксетиков выявлено всего четыре: $\text{Sm}_{0.75}\text{La}_{0.25}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ и $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$. Все эти кубические полные ауксетики имеют положительный коэффициент податливости s_{12} .

Основываясь на двух безразмерных параметрах Π , δ , составленных из трех коэффициентов податливости кубических кристаллов, предложена классификационная схема для кубических кристаллов (Рис.1.40а). Частичные ауксетики характеризуются величиной одного параметра Π из диапазона $0 < \Pi < 1$. С изменением безразмерного параметра Π меняется вид объемных областей с различными знаками коэффициента Пуассона и границ раздела для частичных ауксетиков. При $\Pi \simeq 0.745$ происходит топологическое изменение вида объемных областей. Неравенствам $\delta > 0$, $\Pi < 0$ и $\delta < 0$, $\Pi > 1$ соответствуют полные ауксетики, а неауксетикам $-\delta > 0$, $\Pi > 1$ и $\delta < 0$, $\Pi < 0$. На Рис.1.40б отмечены значения Π и δ для более 1100 кубических кристаллов. Как видно из этого рисунка все кубические кристаллы с $\Pi < 0$, $\delta < 0$ являются неауксетиками. Кристаллы с $s_{12} > 0$ будут либо частичными ауксетиками или полными ауксетиками. Наибольшее количество (более 300) частичных кубических ауксетиков имеют кристаллы с $0 < \Pi < 1$, $\delta > 0$.

Простота линейной связи модуля Юнга со средним коэффициентом Пуассона кубических кристаллов обеспечила простоту его анализа. Вид областей поведения ауксетического в среднем кристалла, соответствующих угловым ориентациям с отрицательным средним коэффициентом Пуассона, оказался зависящим от двух безразмерных материальных параметров Π , δ , составленных из трех коэффициентов податливости кубических кристаллов (1.30). Частичные в среднем ауксетики характеризуются величиной одного параметра Π из диапазона $0 < \Pi < 2/3$. С изменением его величины меняется вид угловых областей с различными знаками коэффициентов Пуассона и границ раздела между ними для частичных в среднем ауксетиков. Причем, существует критическое значение параметра $\Pi_{cr} = 0.5$, при котором происходит топологическое изменение структуры областей и границ. От знака другого параметра δ зависит только то, с какой стороны от границ раздела находятся угловые области с отрицательным средним коэффициентом Пуассона. Неауксетики в среднем характеризуются парными неравенствами обоих безразмерных параметров $\delta > 0$, $\Pi > 2/3$ и $\delta < 0$, $\Pi < 0$. Неравенствам $\delta > 0$, $\Pi < 0$ и $\delta < 0$, $\Pi > 2/3$ соответствуют полные в среднем ауксетики. Отметим, что в то время как количество ауксетиков, обнаруженных на основе данных по упругим коэффициентам из [172], велико (более трехсот), число найденных ауксетиков в среднем составило лишь 20

Периоды	Группы элементов														
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII							
1	H														He
2	Li -0.54	Be -0.005	B	C	N	O	F								Ne
3	Na -0.44	Mg	Al	Si	P	S	Cl								Ar
4	K -0.42	Ca -0.27	Sc	Ti	V	Cr	Mn			Fe -0.13	Co -0.15	Ni -0.07			Kr
5	Cu -0.13	Zn -0.07	Ga	Ge	As -0.71	Se -0.09	Br								
6	Rb -0.40	Sr -0.26	Y	Zr	Nb	Mo	Tc			Ru	Rh	Pd -0.04			
7	Ag -0.09	Cd	In -0.42	Sn -0.03	Sb -0.02	Te -0.15	I -0.48								Xe
8	Cs -0.36	Ba -0.29	Лантан.	Hf	Ta	W	Re			Os	Ir	Pt			
9	Au -0.03	Hg	Пл -0.09	Pb -0.20	Bi -0.03	Po	At								Rn
10	Fr	Ra	Актив.	Rf	Db	Sg	Bh			Hn	Mt				

Лантаноиды														
Актиноиды														
La	Ce -0.17	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb -0.34	Lu
Ac	Th -0.22	Pa	U -0.02	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Rm	Md	No	Lr

Рис. 1.39: Кристаллические ауксетики (помечены желтым цветом) среди простых химических элементов, представленных в периодической системе химических элементов Д.И. Менделеева. Под химическим элементом-ауксетиком указаны минимальные значения коэффициента Пуассона.

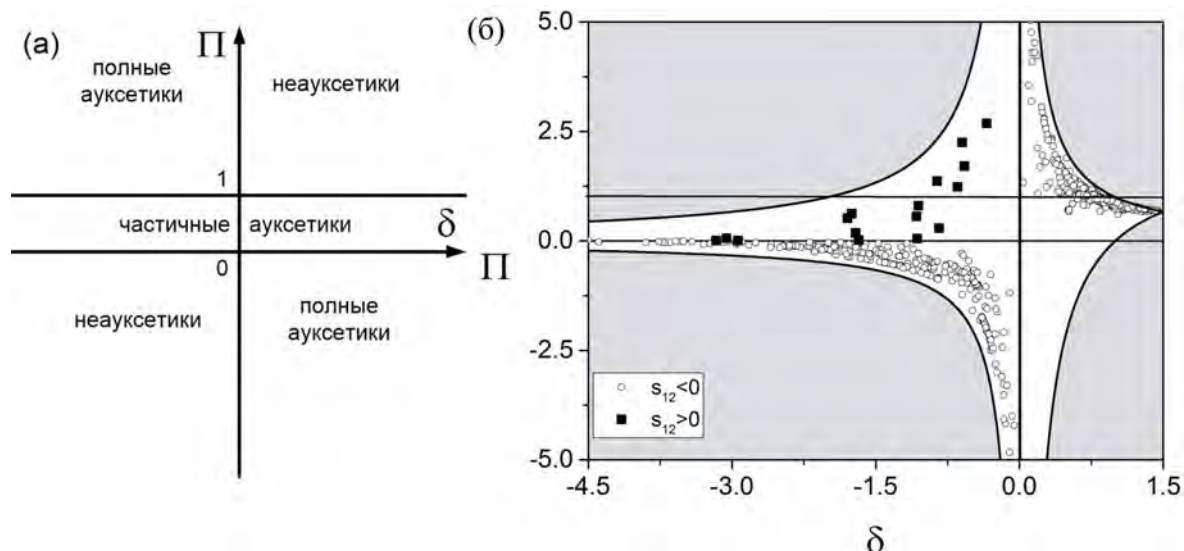


Рис. 1.40: Классификационная схема для кубических ауксетиков (а). Классификационная схема с границами устойчивости кубических кристаллов (б). Точками ($s_{12} > 0$) и квадратами ($s_{12} < 0$) отмечены значения Π и δ для более 1100 кубических кристаллов.

(из них 6 являются полными в среднем ауксетиками).

Проведен аналитический анализ изменчивости модуля Юнга, коэффициентов Пуассона и модуля сдвига для гексагональных кристаллов. Получены выражения трех стационарных значений для модуля Юнга. Два стационарных значения существует для всех гексагональных кристаллов и соответствуют значениям модуля Юнга при растяжении в направлениях $[0001]$ и $[2\bar{1}\bar{1}0]$. Третье стационарное значение имеет место, когда выполняется условие, накладываемое на комбинацию из коэффициентов податливости. Двадцать семь гексагональных кристаллов из ста сорока трех не имеют третьего экстремального значения. В результате численно-аналитического анализа предложена классификационная схема для экстремальных значений модуля Юнга в зависимости от двух безразмерных параметров.

Анализ изменчивости коэффициента Пуассона выявляет восемь стационарных значений. Три значения существуют для всех гексагональных кристаллов. Этими коэффициентами Пуассона оказываются $\nu_{(0001),[0001]}$, $\nu_{[2\bar{1}\bar{1}0],[01\bar{1}0]}$, $\nu_{[000\bar{1}],[01\bar{1}0]}$. Пять других стационарных значений имеют место при выполнении различных ограничений. Предложена классификационная схема для трех стационарных значений коэффициентов Пуассона в зависимости от двух безразмерных параметров.

Получены аналитические выражения экстремальных значений модуля сдвига для гексагональных кристаллов. На основе экспериментальных данных из справочника Ландолта-Бернстайна дан численный анализ экстремумов. Наибольшее различие между максимальным и минимальным значениями модуля сдвига обнаружено у слоистого кристалла - графита. Большие изменения между максимумом

и минимумом характерно для дисульфида молибдена. Предложена классификационная схема для экстремальных значений модуля сдвига в зависимости от двух безразмерных параметров.

Анализ влияния давления на коэффициент Пуассона гексагональных кристаллов показывает, что ауксетиками во всем диапазоне значений давлений, при которых кристалл остается устойчивым, являются кристаллы MoS_2 , TiB_2 и MnAs . Ауксетики Be , сплав BeCu , C_7H_{12} и Zn имеют одну зону неауксетичности в некотором диапазоне изменения давления. При этом у кристалла цинка зона неауксетичности мала. Глобальный минимум коэффициента Пуассона в этой области близок к нулю. Численно-аналитический анализ коэффициента Пуассона показал, что при $p = -c_{13}$ многие гексагональные кристаллы становятся частичными ауксетиками или полными ауксетиками.

В главе были проанализированы гексагональные ауксетика. Получены необходимые и достаточные условия для гексагональных ауксетиков и ауксетиков в среднем при осреднении по поперечным направлениям. Анализ гексагональных ауксетиков показывает, что формула для среднего по всем поперечным направлениям коэффициента Пуассона получается как частное условие (при $\psi = \pi/4$) из формулы для коэффициента Пуассона. Для триклинных кристаллов со средним коэффициентом Пуассона при осреднении по поперечным направлениям были получены необходимые и достаточные условия для полных ауксетиков, частичных ауксетиков и неауксетиков. Для некоторых частных ориентаций были записаны необходимые условия. Также были обнаружены девять кристаллов, у которых коэффициент Пуассона является отрицательным при осреднении по трем углам. Восемь из них являются кубическими кристаллами, а один - тетрагональный.

Глава 2.

Нано/микротрубки из кристаллов

В этой главе будут рассмотрены модели нано/микротрубок с использованием приближения цилиндрической анизотропии. Хотя структура нано/микротрубок родственна структуре кристаллов, неоднородность анизотропии трубок отражает цилиндрический характер сворачивания кристаллических слоев в них. Механическое поведение таких цилиндрически скрученных пластинок в рамках механики сплошных сред будем описывать с помощью модели криволинейно анизотропного стержня. В этой модели предполагается, что локально в цилиндрической системе координат справедлив закон Гука с теми же модулями упругости, что и в случае не искривленного кристалла [161]. Сворачивание тонких кристаллических пластин в цилиндрические трубки оказалось эффективным методом производства нано- и микротрубок из многих материалов [150–153, 199–201].

2.1. Упругие свойства нано/микротрубок с гексагональной и 6-ти константной ромбоэдрической анизотропией [26–30]

Нано/микротрубке с цилиндрической анизотропией соответствует вырезание (с последующим сворачиванием в трубку) нано/микропластины параллельно слою кристалла 12 (как показано на Рис.2.1). Такой цилиндрической анизотропии нано/микротрубки с осью z отвечает локальное соответствие $1 \rightarrow z$, $2 \rightarrow -\varphi$, $3 \rightarrow r$ между базисом кристаллической пластины и подвижным цилиндрическим базисом нано/микротрубки. В силу указанного здесь соответствия закон Гука для цилиндрически анизотропной нано/микротрубки с гексагональной и ромбоэдрической анизотропией запишется в виде

$$\begin{aligned}
 u_{zz} &= s_{11}\sigma_{zz} + s_{12}\sigma_{\varphi\varphi} + s_{13}\sigma_{rr} - s_{14}\sigma_{r\varphi}, \\
 u_{\varphi\varphi} &= s_{12}\sigma_{zz} + s_{11}\sigma_{\varphi\varphi} + s_{13}\sigma_{rr} + s_{14}\sigma_{r\varphi}, \\
 u_{rr} &= s_{13}(\sigma_{zz} + \sigma_{\varphi\varphi}) + s_{33}\sigma_{rr}, \\
 2u_{r\varphi} &= s_{44}\sigma_{r\varphi} - s_{14}(\sigma_{zz} - \sigma_{\varphi\varphi}), \\
 2u_{rz} &= s_{44}\sigma_{rz} - 2s_{14}\sigma_{\varphi z}, \quad 2u_{\varphi z} = s_{66}\sigma_{\varphi z} - 2s_{14}\sigma_{rz}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

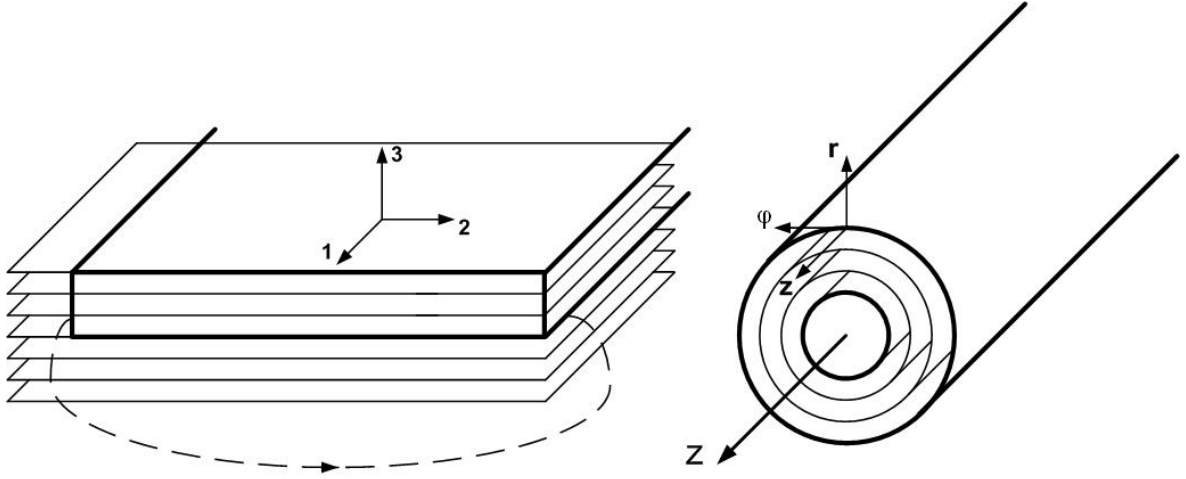


Рис. 2.1: Образование нано/микротрубки с цилиндрической анизотропией (свертывание слоистой нано/микропластины вокруг оси 1 в цилиндрическую нано/микротрубку).

2.1.1. Невозможность однородного растяжения нано/микротрубки с гексагональной и ромбоэдрической цилиндрической анизотропией

Если предположить, что при растяжении нано/микротрубки с цилиндрической анизотропией осевой силой P , приходящейся на единицу площади поперечного сечения, при отсутствии усилий на боковых поверхностях трубки распределение напряжений имеет простой однородный вид

$$\sigma_{zz} = P, \quad \sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{r\varphi} = \sigma_{rz} = \sigma_{\varphi z},$$

то по закону Гука (2.1) деформации будут также однородными

$$u_{zz} = s_{11}P, \quad u_{\varphi\varphi} = s_{12}P, \quad u_{rr} = s_{13}P, \quad 2u_{r\varphi} = -s_{14}P, \quad u_{rz} = u_{\varphi z} = 0.$$

Уравнения равновесия при этом тождественно выполняются.

Восстановим последовательными интегрированиями поле смещений по деформациям, с которыми они связаны здесь следующими дифференциальными соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r}{\partial r} = u_{rr} = s_{13}P, \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = u_{zz} = s_{11}P, \quad r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\varphi}{r} \right) = 2u_{r\varphi} = -s_{14}P, \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} = 2u_{rz} = 0, \quad \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} = 2u_{\varphi z} = 0, \\ \frac{1}{r} \left(u_r + \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} \right) = u_{\varphi\varphi} = -s_{12}P. \end{aligned}$$

При интегрировании первых двух появляются две неизвестных функции от двух пар неизвестных $U_r(\varphi, z)$, $U_z(r, \varphi)$

$$u_r = s_{13}Pr + U_r(\varphi, z), \quad u_z = s_{11}Pz + U_z(r, \varphi).$$

При интегрировании следующего соотношения для смещения u_φ возникает еще одна функция двух неизвестных $U_\varphi(\varphi, z)$

$$u_\varphi = -s_{14}Pr \ln r + \frac{\partial}{\partial \varphi} U_r(\varphi, z) + rU_\varphi(\varphi, z).$$

После подстановки полученных общих выражений для смещений в формулу, выражающую деформацию $u_{\varphi\varphi}$ через смещения получаем соотношение

$$\frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 \right) U_r(\varphi, z) + \frac{\partial}{\partial \varphi} U_\varphi(\varphi, z) = (s_{12} - s_{13})P,$$

которое рассыпается на два, приводящие к следующим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 \right) U_r(\varphi, z) &= 0, \\ U_\varphi(\varphi, z) &= (s_{12} - s_{13})P\varphi + f(z). \end{aligned}$$

Наконец, обращение в нуль сдвиговых деформаций u_{rz} и $u_{\varphi z}$ накладывает связи на искомые функции $U_r(\varphi, z)$, $U_z(r, \varphi)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} U_r(\varphi, z) &= -\frac{\partial}{\partial r} U_z(r, \varphi), \\ \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial z} U_r(\varphi, z) + r \frac{\partial}{\partial z} U_\varphi(\varphi, z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} U_z(r, \varphi) &= 0, \end{aligned}$$

которые вместе с предыдущим уравнением для $U_r(\varphi, z)$ дают

$$\begin{aligned} U_r(\varphi, z) &= zf_1(\varphi) + f_2(\varphi), \quad U_z(r, \varphi) = -rf_1(\varphi) + C_6, \\ f(z) &= C_5, \quad f_1(\varphi) = C_1 \sin \varphi + C_2 \cos \varphi, \quad f_2(\varphi) = C_3 \sin \varphi + C_4 \cos \varphi, \end{aligned}$$

где C_i – произвольные постоянные.

В итоге для смещений находим

$$\begin{aligned}
 u_r &= s_{13} Pr + z f_1(\varphi) + f_2(\varphi), \\
 u_\varphi &= (s_{12} - s_{13}) P \varphi r - s_{14} Pr \ln r + C_5 r + z \frac{\partial f_1(\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi}, \\
 u_z &= s_{11} P z - r f_1(\varphi) + C_6, \\
 f_1(\varphi) &= C_1 \sin \varphi + C_2 \cos \varphi, \quad f_2(\varphi) = C_3 \sin \varphi + C_4 \cos \varphi.
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Непригодность такого решения для полого цилиндрического стержня связана с многозначностью решения для смещений. Компонента смещения u_φ линейно зависит от угла φ , и это будет при любом выборе постоянных интегрирования C_i . Многозначность здесь не будет исчезать, пока не исчезнет разность коэффициентов податливости $s_{12} - s_{13}$. Только в гипотетическом случае $s_{12} = s_{13}$ поле смещений будет однозначным, т.е. становится возможным однородное растяжение трубы.

2.1.2. Растяжение цилиндрически анизотропных нано/микротрубок

Предполагая растяжение нано/микротрубки с локально ромбоэдрической симметрией вдоль оси z радиально неоднородным аксиально симметричным, будем полагать, что напряжения зависят от радиальной координаты. Уравнения равновесия при таком состоянии имеют вид

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma_{rr}(r)}{dr} + \frac{\sigma_{rr}(r) - \sigma_{\varphi\varphi}(r)}{r} &= 0, \\
 \frac{d\sigma_{rz}(r)}{dr} + \frac{\sigma_{rz}(r)}{r} &= 0, \quad \frac{d\sigma_{r\varphi}(r)}{dr} + 2\frac{\sigma_{r\varphi}(r)}{r} = 0.
 \end{aligned}$$

При продольном растяжении круглой трубки удельной силой P в отсутствие усилий на боковой поверхности и скручивающего момента эти уравнения дополняют краевые условия

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ri}(r)|_{r=r_0} &= 0, \quad \sigma_{ri}(r)|_{r=R_0} = 0, \\
 \int_{r_0}^{R_0} r \sigma_{zz}(r) dr &= \frac{P}{2}(R_0^2 - r_0^2), \quad \int_{r_0}^{R_0} r^2 \sigma_{\varphi z}(r) dr = 0.
 \end{aligned}$$

Решение последних двух уравнений равновесия для касательных напряжений имеют степенной вид $\sigma_{rz} = C_1 r^{-1}$, $\sigma_{r\varphi} = C_2 r^{-2}$, и с учетом краевых условий обращения в нуль на стенках трубок эти напряжения должны исчезать. В итоге имеем четыре отличных от нуля компоненты напряжений

$$\sigma_{rr} = \sigma_{rr}(r), \quad \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\varphi\varphi}(r), \quad \sigma_{zz} = \sigma_{zz}(r), \quad \sigma_{r\varphi} = \sigma_{r\varphi}(r), \quad \sigma_{rz} = \sigma_{\varphi z} = 0.$$

В силу закона Гука (2.1) будем иметь для радиального распределения деформаций

$$\begin{aligned} u_{zz}(r) &= s_{11}\sigma_{zz}(r) + s_{12}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s_{13}\sigma_{rr}(r), \\ u_{\varphi\varphi}(r) &= s_{12}\sigma_{zz}(r) + s_{11}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s_{13}\sigma_{rr}(r), \\ u_{rr}(r) &= s_{13}(\sigma_{zz}(r) + \sigma_{\varphi\varphi}(r)) + s_{33}\sigma_{rr}(r), \\ 2u_{r\varphi}(r) &= s_{14}(\sigma_{\varphi\varphi}(r) - \sigma_{zz}(r)), \quad u_{rz} = u_{\varphi z} = 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Интегрируя уравнения для компонент деформаций

$$u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad 2u_{rz} = \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}, \quad 2u_{\varphi z} = \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi},$$

получим следующие представления для трех компонент смещений

$$\begin{aligned} u_z &= u_{zz}z + U_z(r, \varphi), \quad u_r = -\frac{z^2}{2} \frac{\partial u_{zz}}{\partial r} - z \frac{\partial U_z(r, \varphi)}{\partial r} + U_r(r, \varphi), \\ u_\varphi &= -\frac{z}{r} \frac{\partial U_z(r, \varphi)}{\partial \varphi} + U_\varphi(r, \varphi). \end{aligned}$$

Здесь три функции трех цилиндрических координат свелись к трем функциям двух переменных.

Интегрирование остальных трех из шести уравнений (2.3) с учетом найденных выражений для компонент смещений позволяет установить постоянство одной из компонент деформаций

$$u_{zz} = \varepsilon = \text{const},$$

вид функции $U_z(r, \varphi)$ с точностью до трех постоянных

$$U_z(r, \varphi) = f_1(\varphi)r + C_6, \quad f_1(\varphi) = C_1 \sin \varphi + C_2 \cos \varphi$$

и три соотношения для введенных выше функций $U_r(r, \varphi)$, $U_\varphi(r, \varphi)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_r(r, \varphi)}{\partial r} &= u_{rr}, \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{U_\varphi(r, \varphi)}{r} \right) + \frac{U_r(r, \varphi)}{r} = u_{\varphi\varphi}, \\ r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{U_\varphi(r, \varphi)}{r} \right) + \frac{\partial U_r(r, \varphi)}{\partial \varphi} &= 2ru_{r\varphi}. \end{aligned}$$

В результате интегрирования первого соотношения имеем

$$U_r(r, \varphi) = \int u_{rr}(r) dr + f_2(\varphi)$$

Тогда оставшиеся два соотношения для функции $U_\varphi(r, \varphi)$ дают аналогичное представление

$$U_\varphi(r, \varphi) = 2r \int \frac{u_{r\varphi}(r)}{r} dr + \frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi}, \quad f_2(\varphi) = C_3 \sin \varphi + C_4 \cos \varphi$$

при условии совместности

$$u_{rr}(r) = \frac{d}{dr} (ru_{\varphi\varphi}(r)). \quad (2.4)$$

В итоге компоненты смещения принимают вид

$$\begin{aligned} u_r &= ru_{\varphi\varphi}(r) + zf_1(\varphi) + f_2(\varphi), \\ u_\varphi &= 2r \int dr \frac{u_{r\varphi}(r)}{r} + C_5 r + z \frac{\partial f_1(\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi}, \\ u_z &= z\varepsilon - rf_1(\varphi) + C_6, \quad u_{zz} = \varepsilon = \text{const.} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Если теперь исключить из системы соотношений (2.3) $\sigma_{zz}(r)$, а также $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$ с помощью одного из уравнений равновесия

$$\frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}(r)) = \sigma_{\varphi\varphi}(r) \quad (2.6)$$

получим в силу соотношения связи (2.4) дифференциальное уравнение для компоненты напряжений $\sigma_{rr}(r)$

$$\frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] - \frac{s_{11}s_{33} - s_{13}^2}{s_{11}^2 - s_{12}^2} \sigma_{rr} = \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{11}^2 - s_{12}^2} \varepsilon.$$

Решая это уравнение, одно из уравнений равновесия (2.6) и первое из соотношений (2.3) с учетом $u_{zz} = \varepsilon$, получим для всех компонент напряжений

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}(r) &= \frac{s_{12} - s_{13}}{S} \varepsilon + A_+ r^{-1+k} + A_- r^{-1-k}, \\ \sigma_{\varphi\varphi}(r) &= \frac{s_{12} - s_{13}}{S} \varepsilon + k (A_+ r^{-1+k} - A_- r^{-1-k}) \\ \sigma_{zz}(r) &= \frac{s_{33} - s_{11}}{S} \varepsilon - \frac{s_{13} + ks_{12}}{s_{11}} A_+ r^{-1+k} - \frac{s_{13} - ks_{12}}{s_{11}} A_- r^{-1-k}, \\ S &\equiv s_{12}^2 + s_{11}s_{33} - s_{11}^2 - s_{13}^2, \quad k \equiv \sqrt{\frac{s_{11}s_{33} - s_{13}^2}{s_{11}^2 - s_{12}^2}}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Причем A_\pm определяются исходя из условий обращения напряжения σ_{rr} в нуль на внешней и внутренней поверхностях нано/микротрубки

$$A_+ = -\frac{(s_{12} - s_{13})\varepsilon \rho^{k+1} - 1}{SR^{k-1} \rho^{2k} - 1}, \quad A_- = -\frac{(s_{12} - s_{13})\varepsilon (\rho^{k-1} - 1) \rho^{k+1}}{SR^{-k-1} \rho^{2k} - 1}. \quad (2.8)$$

Ведущие вклады в смещения u_r , u_φ (см. (2.5)) выражаются через эти же постоянные следующим образом

$$\begin{aligned}
 ru_{\varphi\varphi}(r) &= \frac{s_{12}s_{33} - s_{13}(s_{13} + s_{11} - s_{12})}{S} \varepsilon r + \\
 &+ \frac{k(s_{11}^2 - s_{12}^2) + s_{13}(s_{11} - s_{12})}{s_{11}} A_+ r^k - \frac{k(s_{11}^2 - s_{12}^2) - s_{13}(s_{11} - s_{12})}{s_{11}} A_- r^{-k}, \\
 2r \int \frac{u_{r\varphi}(r)}{r} dr &= s_{14} \frac{s_{11} + s_{12} - s_{33} - s_{13}}{S} \varepsilon r \ln r + \\
 &+ s_{14} \left\{ \frac{k(s_{11} + s_{12}) + s_{13}}{s_{11}(k-1)} A_+ r^k + \frac{k(s_{11} + s_{12}) - s_{13}}{s_{11}(k+1)} A_- r^{-k} \right\}.
 \end{aligned}$$

На торцах нано/микротрубки суммарное растягивающее усилие $P\pi R^2(\rho^2 - 1)$ складывается из напряжений $\sigma_{zz}(r)$ по всей площади основания. Используя (2.7), (2.8) получаем линейную связь силы P с величиной относительного удлинения стержня ε . Отношение P/ε определяет модуль Юнга для нано/микротрубки с гексагональной и ромбоэдрической цилиндрической анизотропией

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{s_{11}} + \frac{S_0}{s_{11}} \left\{ 2 \frac{(\rho^{k+1} - 1)^2}{(\rho^{2k} - 1)(\rho^2 - 1)} \left[\frac{s_{13} + ks_{12}}{1+k} - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{s_{13} - ks_{12}}{1-k} \left(\rho \frac{\rho^{k-1} - 1}{\rho^{k+1} - 1} \right)^2 \right] - s_{12} - s_{13} \right\}, \\
 S_0 &\equiv \frac{s_{13}^2 - s_{12}^2}{s_{11}^2 + s_{13}^2 - s_{12}^2 - s_{11}s_{33}}.
 \end{aligned}$$

Таблица 2.1: Границы изменений модуля Юнга для цилиндрических нано/микротрубок при криволинейно гексагональном и ромбоэдрическом их моделировании.

Кристаллы	E_{\min} , ГПа ($\rho \approx 1$)	E_{\max} , ГПа ($\rho \gg 1$)	Кристаллы	E_{\min} , ГПа ($\rho \approx 1$)	E_{\max} , ГПа ($\rho \gg 1$)
Графит	1020	1021	Co	195.7	200.8
MoS ₂	209	225	Ti	103.2	106.4
Zn	121.7	136.7	CuCl	18.9	21.4
C ₇ H ₁₂	0.74	0.89	WC	595.2	596.6
TiB ₂	387.6	387.9	Mg	121.7	132.4
Be	289.9	290.2	As	32.7	92.4
ZnO	127.6	128.6			

Некоторые результаты расчетов по этой формуле, использующие экспериментальные данные для упругих коэффициентов кристаллов, собранные в справочнике [172], приведены в Табл.2.1 и на Рис.2.2. Модуль Юнга оказывается минимальным для тонкостенных нано/микротрубок и монотонно растет с увеличением

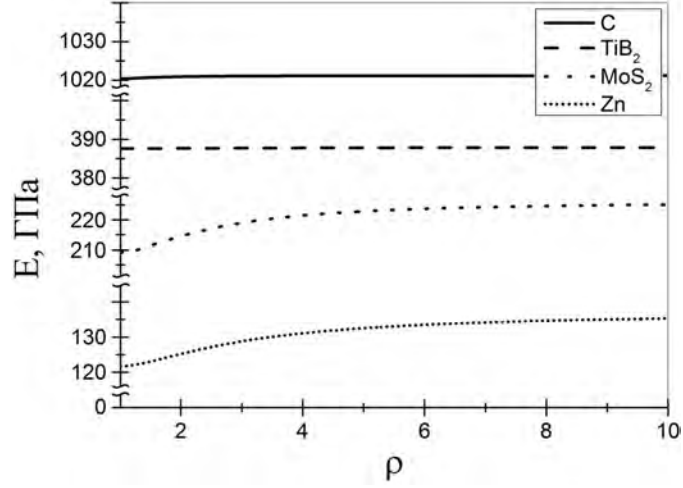


Рис. 2.2: Примеры зависимостей модулей Юнга от отношения внешнего и внутреннего радиусов nano/микротрубок из графита (C), TiB₂, MoS₂, Zn.

толщины трубки. В случае тонкостенной трубки ($\rho - 1 \ll 1$) формула для модуля Юнга с точностью до членов первого порядка малости принимает упрощенный вид

$$E = \frac{1}{s_{11}} + \frac{s_{13} - ks_{12}}{s_{11}} S_0 \frac{k-1}{2k} (\rho - 1), \quad \rho - 1 \ll 1.$$

Как видно из Табл.2.1 модуль Юнга многих nano/микротрубок очень мало отклоняется от значения $1/s_{11}$ при всех значениях параметра толщины трубок ρ . В частности, в случае углеродных nano/микро-трубок отклонение от $E = 1/s_{11} = 1020$ ГПа особенно мало (не более 0.1 %). Аномально большое различие между максимальным и минимальными значениями модуля Юнга найдено для трубок из мышьяка (см. Табл.2.1).

Важными характеристиками растягиваемых цилиндрических анизотропных nano/микротрубок являются два коэффициента Пуассона $\nu_{rz} = -u_{rr}(r)/\varepsilon$, $\nu_{\varphi z} = -u_{\varphi\varphi}(r)/\varepsilon$, которые из-за обсуждаемой неоднородности полей напряжений и деформаций оказываются изменяющимися с изменением радиальной координаты, радиуса nano/микротрубки и ее толщины

$$\begin{aligned} \nu_{rz} = & \frac{S_0}{s_{11}} \left[-s_{11} \left(s_{13} + s_{33} + s_{13} \frac{s_{11} - s_{33}}{s_{13} - s_{12}} \right) + \right. \\ & + (s_{13}^2 + ks_{12}s_{13} - ks_{11}s_{13} - s_{11}s_{33}) \frac{1 - \rho^{k+1}}{\rho^{2k} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{k-1} + \\ & \left. + (s_{13}^2 - ks_{12}s_{13} + ks_{11}s_{13} - s_{11}s_{33}) \frac{1 - \rho^{k-1}}{\rho^{2k} - 1} \left(\frac{r}{\rho r_0} \right)^{-k-1} \right], \end{aligned}$$

$$\nu_{\varphi z} = \frac{S_0}{s_{11}} \left[-s_{11} \left(s_{11} + s_{13} + s_{12} \frac{s_{11} - s_{33}}{s_{13} - s_{12}} \right) + \right. \\ \left. + (s_{12}s_{13} + ks_{12}^2 - s_{11}s_{13} - ks_{11}^2) \frac{1 - \rho^{k+1}}{\rho^{2k} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{k-1} + \right. \\ \left. + (s_{12}s_{13} - ks_{12}^2 - s_{11}s_{13} + ks_{11}^2) \frac{1 - \rho^{k+1}}{\rho^{2k} - 1} \left(\frac{r}{\rho r_0} \right)^{-k-1} \right].$$

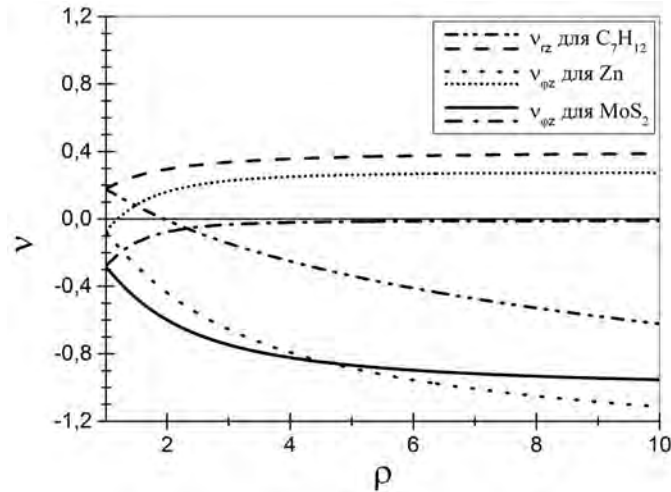


Рис. 2.3: Изменение коэффициента Пуассона $\nu_{\varphi z}$ с изменением параметра толщины трубок ρ из MoS_2 и Zn на их внутренней (при $r = r_0$) и внешней (при $r = \rho r_0$) поверхностях и коэффициента ν_{rz} на внутренней и внешней поверхностях трубки из C_7H_{12} .

Численные оценки коэффициентов Пуассона по этим формулам для цилиндрически анизотропных трубок приводят к сильно различающимся результатам. Какой-либо простой связи свойств ауксетичности у прямолинейной анизотропной кристаллической пластины и соответствующей криволинейно анизотропной трубки не может быть уже в силу однородности напряженно-деформированного состояния первой, неоднородности соответствующего состояния второй и разного числа коэффициентов Пуассона у них. Действительно было найдено, что семи прямолинейно анизотропным гексагональным ауксетикам MoS_2 , C_7H_{12} , Zn, Be, BeCu, TiB_2 , MnAs (см. подраздел 1.3.2) соответствуют лишь четыре ауксетические трубки из MoS_2 , Zn и C_7H_{12} , MnAs (Рис.2.3), а трубки из остальных трех прямолинейно анизотропных ауксетических материалов ауксетиками не являются. При этом цилиндрическая трубка из дисульфида молибдена уникальна в том отношении, что коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ отрицателен при любой толщине трубки, и среднее по площади поперечного сечения трубки $\langle \nu_{\varphi z} \rangle$ также отрицательно ($\langle \nu_{\varphi z} \rangle \leq -0.2$). Средний коэффициент Пуассона $\langle \nu_{\varphi z} \rangle$ для трубки из цинка отрицателен только при $\rho < 2$. Для

гексагональных кристаллов чаще бывает справедливо обратное. А именно, прямолинейно анизотропным неауксетикам соответствуют криволинейно анизотропные нано/микротрубки с отрицательным коэффициентом Пуассона ν_{rz} или $\nu_{\varphi z}$ при той или иной толщине трубок.

Таблица 2.2: Характеристики трубок-ауксетиков из гексагональных материалов, не являющихся ауксетиками при прямолинейно анизотропном состоянии (здесь и в других таблицах ρ_1, ρ_2 – значения величины ρ , при которых меняется знак коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$, соответственно).

Кристаллы	ν_{rz} ($\rho \approx 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho \approx 1$)	ρ_1	ρ_2
Cd	0.73	0.10	–	1.32
GaN	0.49	0.18	–	2.5
β -SiO ₂	0.28	0.06	–	1.7
InN	0.52	0.23	–	3
CdS	0.26	0.48	15	–
CdSe	0.24	0.48	11.9	–
CdTe	0.22	0.47	12.1	–
Co	0.18	0.46	10	–
Ti	0.19	0.49	8.4	–
CuCl	0.17	0.68	2.6	–
Ag ₂ Al	0.24	0.48	11.9	–
CeF ₃	0.16	0.43	11	–
CsNiF ₃	0.06	0.45	5.5	–
In ₂ Bi	0.15	0.72	2.2	–
LaF ₃	0.15	0.44	9.7	–
MgZn ₂	0.14	0.42	12.2	–

Многочисленность криволинейно анизотропных ауксетиков среди цилиндрических трубок из кристаллов гексагональных и ромбоэдрических систем демонстрируют результаты, представленные в Табл.2.2-2.4. Как видно из этих таблиц, при определенной толщине часть ауксетических нано/микротрубок меняет знак коэффициента Пуассона ν_{rz} , а другая меняет знак коэффициента Пуассона $\nu_{\varphi z}$. В Табл.2.2 отражены случаи, когда неауксетические прямолинейно анизотропные гексагональные материалы при сворачивании в трубки будут становится ауксетиками (имеются также материалы, например, графит, BN, GaSe, GaS с неотрицательными коэффициентами Пуассона в обоих состояниях). Аналогичные примеры перехода неауксетиков в ауксетики при сворачивании в трубки приведены в Табл.2.3 для ромбоэдрических кристаллов. Из Табл.2.4 также видно, что свойство ауксетичности может часто сохраняться при переходе от прямолинейно анизотропных

Таблица 2.3: Характеристики трубок-ауксетиков, соответствующих прямолинейно анизотропным ромбоэдрическим кристаллам с неотрицательным коэффициентом Пуассона (неауксетикам).

Кристаллы	ν_{rz} ($\rho \approx 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho \approx 1$)	ρ_1	ρ_2
Ag ₃ AsS ₃	0.56	0.26	–	3.7
Bi ₂ Te ₃	0.41	0.28	–	18
Cr ₂ O ₃	0.37	0.23	–	7.9
PbI ₂	0.43	0.24	–	6
FeBO ₃	0.36	0.23	–	12.3
Ti ₂ O ₃	0.48	0.14	–	1.9
V ₂ O ₃	0.43	0.04	–	1.2
Ca ₃ Ga ₂ Ge ₄ O ₁₄	0.15	0.51	5.5	–
K ₃ Cu(CN) ₄	0.24	0.42	26.2	–

Таблица 2.4: Примеры прямолинейно ромбоэдрических ауксетиков, переходящих в трубки-ауксетики и три неауксетические трубки из кристаллов CaCO₃, Sb, SbAs.

Кристаллы	ν_{rz} ($\rho \approx 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho \approx 1$)	ρ_1	ρ_2
As	1.83	–0.67	–	2.1
NaNO ₃	0.32	–0.41	–	–
KBrO ₃	0.57	0.13	–	1.7
Bi _{1.60} Sb _{0.40} Te ₃	0.83	–0.11	–	1.3
CaCO ₃	0.39	0.35	–	–
Se	0.25	0.16	–	6
α -HgS	0.10	0.42	8	–
Bi	0.46	0.30	–	22.6
Sb	0.39	0.38	–	–
SbAs (25.5at%As)	0.32	0.45	–	–
(C ₆ H ₅ CO) ₂	0.21	0.47	17.7	–
NaMgAl(C ₂ O ₄) ₃ ·9H ₂ O	0.60	0.35	–	7.1
NaN ₃	0.04	0.83	1.4	–

ромбоэдрических кристаллов к криволинейно анизотропным трубкам. В этой таблице дополнительно указаны три неауксетические трубки из CaCO₃, Sb, SbAs.

Графики зависимостей коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для некоторых гексагональных и ромбоэдрических ауксетических трубок от безразмерного параметра толщины $\rho \equiv R_0/r_0$ приведены на Рис.2.4 и Рис.2.5. На них нижние ветви кривых с участками с отрицательными числами коэффициента Пуассона соответ-

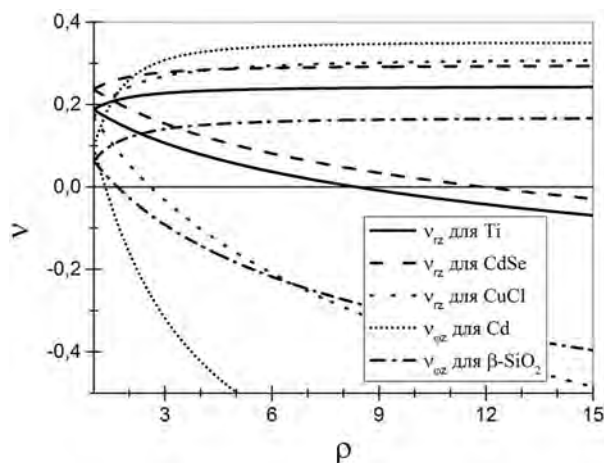


Рис. 2.4: Изменения коэффициентов Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\phi z}$ для гексагональных трубок-ауксетиков с изменением безразмерного параметра толщины ρ .

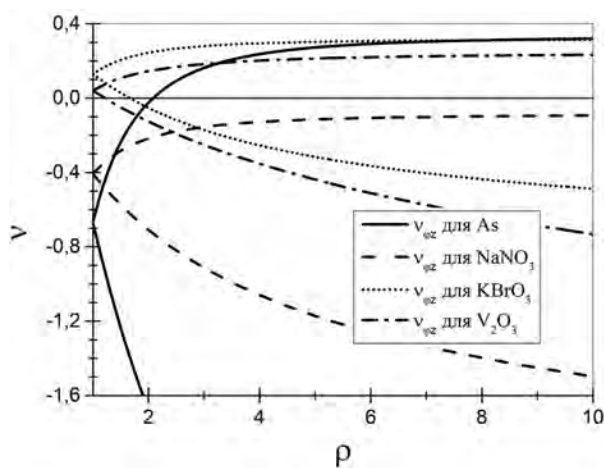


Рис. 2.5: Изменения коэффициентов Пуассона для ромбоэдрических трубок-ауксетиков.

ствуют внутренней поверхности трубок $r = r_0$, а верхние - внешним поверхностям $r = R_0 = \rho r_0$.

2.2. Упругие свойства микро/нанотрубок с кубической анизотропией [9]

2.2.1. От кубических кристаллов с прямолинейной анизотропией к nano/микротрубкам с криволинейной анизотропией

При анализе упругих свойств тонкостенных nano/микротрубок из кубических кристаллов будем применять модель полого цилиндрического стержня теории

упругости. Причем, для решения задачи о продольном растяжении криволинейно анизотропного стержня используем полуобратный метод Сен-Венана.

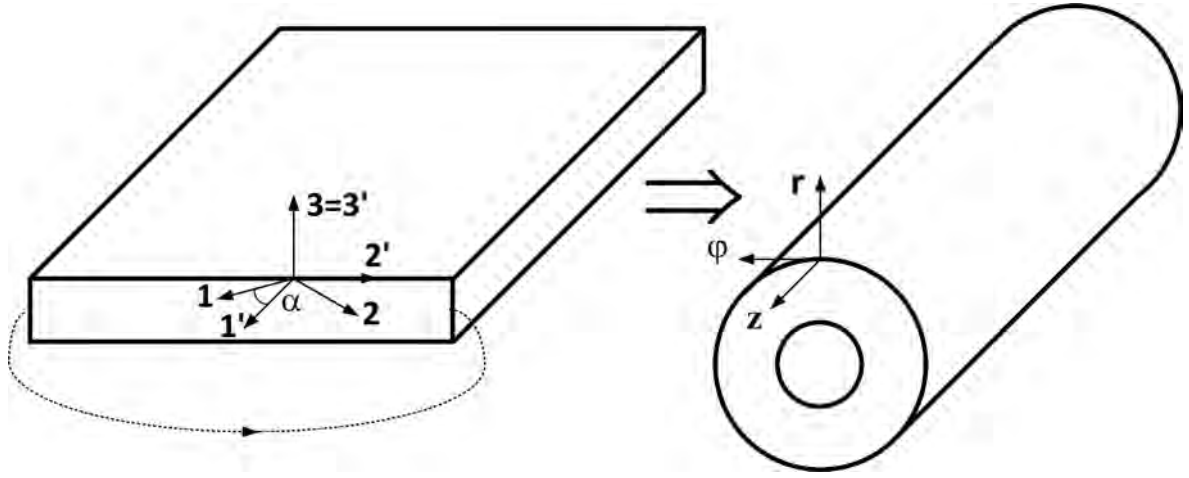


Рис. 2.6: Сворачивание кристаллической пластины вокруг оси 1' в цилиндрическую нано/микротрубку.

Будем предполагать, что кристаллическая структура сворачиваемой тонкой прямоугольной пластины такова, что нормаль к наибольшей плоскости прямоугольной пластины совпадает с кристаллографической осью 3 кубического кристалла, а нормали к двум другим плоскостям отличаются от кристаллографических осей 1,2 поворотом вокруг этой оси на угол α (Рис.2.6). Между исходным повернутым базисом прямоугольной пластины $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3$ и локальным ортогональным базисом свернутой цилиндрически анизотропной трубки $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z$ имеет место соответствие $\mathbf{e}'_1 \rightarrow \mathbf{e}_z, \mathbf{e}'_2 \rightarrow -\mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}'_3 \rightarrow \mathbf{e}_r$ (Рис.2.6). Угол α между осями 1, 1' (и 2, 2') именуется часто углом хиральности. Обсуждаемое соответствие определяет вид закона Гука для цилиндрически анизотропных нано/микротрубок.

При тензорной записи закона Гука в линейной теории упругости

$$u_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (i, j, k, l : 1, 2, 3)$$

тензорные коэффициенты податливости s_{ijkl} при повороте системы координат с базисом e_i к системе координат с базисом $e'_i = l_{i\alpha}e_\alpha$ преобразуются по формуле

$$s'_{ijkl} = l_{i\alpha}l_{j\beta}l_{k\mu}l_{l\nu}s_{\alpha\beta\mu\nu}.$$

При матричной форме записи закона Гука $\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j$ через матричные коэффициенты податливости Фойгта s_{ij} ($i, j: 1, 2, 3, 4, 5, 6$) последние преобразуются по закону

$$s'_{ij} = q_{i\alpha}q_{j\beta}s_{\alpha\beta}$$

с матрицей коэффициентов преобразования q_{ij} , выражающихся через l_{ij} следующим образом [161]

$$\|q_{ij}\| = \begin{pmatrix} l_{11}^2 & l_{12}^2 & l_{13}^2 & l_{12}l_{13} & l_{13}l_{11} & l_{12}l_{11} \\ l_{21}^2 & l_{22}^2 & l_{23}^2 & l_{23}l_{22} & l_{23}l_{21} & l_{22}l_{21} \\ l_{31}^2 & l_{32}^2 & l_{33}^2 & l_{33}l_{32} & l_{33}l_{31} & l_{32}l_{31} \\ 2l_{31}l_{21} & 2l_{32}l_{22} & 2l_{33}l_{23} & l_{33}l_{22} + l_{32}l_{23} & l_{33}l_{21} + l_{31}l_{23} & l_{31}l_{22} + l_{32}l_{21} \\ 2l_{31}l_{11} & 2l_{32}l_{12} & 2l_{33}l_{13} & l_{33}l_{12} + l_{32}l_{13} & l_{33}l_{11} + l_{31}l_{13} & l_{31}l_{12} + l_{32}l_{11} \\ 2l_{21}l_{11} & 2l_{12}l_{22} & 2l_{13}l_{23} & l_{13}l_{22} + l_{12}l_{23} & l_{13}l_{21} + l_{11}l_{23} & l_{11}l_{22} + l_{12}l_{21} \end{pmatrix}.$$

В частном случае поворота кристалла вокруг главной оси (оси 3) на угол α матрица поворота $\|l_{ij}\|$ и матрица преобразования $\|q_{ij}\|$ имеют вид

$$\|l_{ij}\| = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\|q_{ij}\| = \begin{pmatrix} \cos^2 \alpha & \sin^2 \alpha & 0 & 0 & 0 & 0.5 \sin 2\alpha \\ \sin^2 \alpha & \cos^2 \alpha & 0 & 0 & 0 & -0.5 \sin 2\alpha \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ -\sin 2\alpha & \sin 2\alpha & 0 & 0 & 0 & \cos 2\alpha \end{pmatrix}.$$

Для кубического кристалла матрица упругих коэффициентов податливости в кристаллографических координатах

$$\|s_{ij}\| = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{pmatrix}$$

в повернутой на угол α в системе координат совпадает по форме с симметричной матрицей коэффициентов податливости $\|s'_{ij}\|$ для семиконстантного тетрагонального кристалла без угла хиральности

$$\|s'_{ij}\| = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & 0 & -s'_{26} \\ s'_{12} & s'_{11} & s'_{13} & 0 & 0 & s'_{26} \\ s'_{13} & s'_{13} & s'_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 \\ -s'_{26} & s'_{26} & 0 & 0 & 0 & s'_{66} \end{pmatrix}$$

с коэффициентами податливости s'_{ij} вида в случае кубических кристаллов

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11} - 0.5\Delta \sin^2 2\alpha, & s'_{12} &= s_{12} + 0.5\Delta \sin^2 2\alpha, & s'_{26} &= 0.5\Delta \sin 4\alpha, \\ s'_{66} &= s_{44} + 2\Delta \sin^2 2\alpha, & s'_{13} &= s_{12}, & s'_{33} &= s_{11}, & s'_{44} &= s_{44}, & \Delta &= s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}. \end{aligned}$$

Частный случай нулевого угла хиральности ($\alpha = 0$) соответствует матрице $\|s_{ij}\|$.

2.2.2. Одноосное растяжение цилиндрически анизотропной тонкой трубки

Закон Гука для хиральной цилиндрически анизотропной трубки из кубического кристалла будет иметь вид

$$\begin{aligned} u_{zz} &= s'_{11}\sigma_{zz} + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13}\sigma_{rr} + s'_{26}\sigma_{\varphi z}, \\ u_{\varphi\varphi} &= s'_{12}\sigma_{zz} + s'_{11}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13}\sigma_{rr} - s'_{26}\sigma_{\varphi z}, \\ u_{rr} &= s'_{13}\sigma_{zz} + s'_{13}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{33}\sigma_{rr}, \\ 2u_{\varphi z} &= s'_{26}(\sigma_{zz} - \sigma_{\varphi\varphi}) + s'_{66}\sigma_{\varphi z}, & 2u_{rz} &= s'_{44}\sigma_{rz}, & 2u_{r\varphi} &= s'_{44}\sigma_{r\varphi}. \end{aligned}$$

При растяжении трубки удельным усилием P вдоль оси z напряженное состояние будет простым

$$\sigma_{zz} = P, \quad \sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{r\varphi} = \sigma_{rz} = \sigma_{\varphi z} = 0.$$

В силу закона Гука однородным должно быть и поле деформации

$$u_{zz} = s'_{11}P, \quad u_{rr} = s'_{13}P, \quad u_{\varphi\varphi} = s'_{12}P, \quad 2u_{\varphi z} = s'_{26}P, \quad u_{r\varphi} = u_{rz} = 0.$$

Из дифференциальных связей компонент деформации с компонентами вектора смещений

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r}{\partial r} &= u_{rr}, & \frac{\partial u_z}{\partial z} &= u_{zz}, & \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r} &= u_{\varphi\varphi}, \\ \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} &= 2u_{\varphi z} = \text{const}, & r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\varphi}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} &= 2u_{r\varphi} = 0, \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} &= 2u_{rz} = 0. \end{aligned}$$

с учетом выражения для закона Гука находим для смещений

$$\begin{aligned} u_r &= Ps'_{13}r + f_1(\varphi) + zf_2(\varphi), \\ u_\varphi &= P(s'_{12} - s'_{13})r\varphi + \frac{\partial f_1(\varphi)}{\partial \varphi} + z \frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi} + C_1r, \\ u_z &= Ps'_{11}z - rf_2(\varphi) + C_2, \\ f_1(\varphi) &= C_3 \sin \varphi + C_4 \cos \varphi, & f_2(\varphi) &= C_5 \sin \varphi + C_6 \cos \varphi, & C_i &= \text{const} \end{aligned}$$

при дополнительном ограничении

$$2u_{\varphi z} = s'_{26}P = 0.$$

Однозначным найденное поле смещений может быть только при выполнении еще одного условия

$$u_{\varphi\varphi} - u_{rr} = (s'_{13} - s'_{12})P = 0.$$

В случае криволинейно анизотропной трубки из кубического кристалла с углом хиральности α эти дополнительные условия принимают вид

$$s'_{26} = 0.5\Delta \sin 4\alpha = 0, \quad s'_{13} - s'_{12} = -0.5\Delta \sin^2 2\alpha = 0.$$

В таком виде они могут быть выполнены в вырожденном случае изотропной упругости (при $\Delta = 0$), или для кубического кристалла с нулевым углом хиральности (при $\alpha = 0$). Когда базис цилиндрически анизотропной трубки соответствует кристаллографическому базису кубического кристалла, однородное осевое растяжение имеет место и характеризуется модулем Юнга и двумя одинаковыми коэффициентами Пуассона вида

$$E \equiv \frac{\sigma_{zz}}{u_{zz}} = \frac{1}{s_{11}}, \quad \nu_{\varphi z} \equiv -\frac{u_{\varphi\varphi}}{u_{zz}} = \nu_{rz} \equiv -\frac{u_{rr}}{u_{zz}} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}.$$

2.2.3. Невозможность радиально неоднородного растяжения нано/микротрубок из кубических и тетрагональных кристаллов при отличных от нуля нормальных напряжениях

Рассмотрим теперь неоднородное растяжение цилиндрически анизотропной трубки из тетрагонального кристалла (и в кубическом, в частности). Предположим напряженное состояние радиально неоднородным с отличными от нуля нормальными напряжениями $\sigma_{rr}(r)$, $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$, $\sigma_{zz}(r)$

$$\sigma_{r\varphi} = \sigma_{rz} = \sigma_{\varphi z} = 0.$$

В таком случае уравнение равновесия сводится к дифференциальной связи

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r) = \frac{d}{dr}[r\sigma_{rr}(r)]. \quad (2.9)$$

При продольном растяжении полого круглого стержня удельной силой P в отсутствие радиальных усилий на боковых поверхностях $r = r_0$, $r = R_0$ должны выполняться условия

$$\int_{r_0}^{R_0} r \sigma_{zz}(r) dr = \frac{1}{2}(R_0^2 - r_0^2)P, \quad (2.10)$$

$$\sigma_{rr}(r)|_{r=r_0} = \sigma_{rr}(r)|_{r=R_0} = 0. \quad (2.11)$$

Закон Гука при отличных от нуля нормальных напряжениях примет вид

$$\begin{aligned} u_{zz} &= s'_{11}\sigma_{zz}(r) + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{13}\sigma_{rr}(r), \\ u_{\varphi\varphi} &= s'_{12}\sigma_{zz}(r) + s'_{11}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{13}\sigma_{rr}(r), \\ u_{rr} &= s'_{13}\sigma_{zz}(r) + s'_{13}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{33}\sigma_{rr}(r), \\ 2u_{\varphi z} &= s'_{26}[\sigma_{zz}(r) - \sigma_{\varphi\varphi}(r)], \quad u_{rz} = 0, \quad u_{r\varphi} = 0. \end{aligned}$$

Из него в силу радиальной неоднородности напряжений следует радиальная неоднородность поля деформаций. По этому полю деформаций находим поле смещений

$$\begin{aligned} u_r &= u_{\varphi\varphi}(r)r + f_1(\varphi) + zf_2(\varphi), \\ u_\varphi &= C_0rz + \frac{\partial f_1(\varphi)}{\partial \varphi} + z\frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi} + C_1r, \\ u_z &= \varepsilon z - rf_2(\varphi) + C_2, \quad C_i = \text{const}, \\ f_1(\varphi) &= C_3 \sin \varphi + C_4 \cos \varphi, \quad f_2(\varphi) = C_5 \sin \varphi + C_6 \cos \varphi. \end{aligned} \quad (2.12)$$

при следующих ограничениях

$$u_{zz}(r) = \varepsilon = \text{const}, \quad u_{rr}(r) = \frac{d}{dr} [ru_{\varphi\varphi}(r)], \quad 2u_{\varphi z}(r) = C_0r. \quad (2.13)$$

В рассматриваемом здесь случае неоднородной деформации в отличие от однородной деформации растяжения в подразделе 2.2.2 поле смещений оказывается однозначным.

Из закона Гука и соотношений (2.9), (2.13) получаем следующие выражения u_{rr} , $u_{\varphi\varphi}$ и $u_{\varphi z}$ через компоненту напряжений σ_{rr}

$$\begin{aligned} u_{rr} &= \frac{s'_{13}}{s'_{11}} \left[\varepsilon + (s'_{11} - s'_{12}) \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] + \left(s'_{33} - \frac{(s'_{13})^2}{s'_{11}} \right) \sigma_{rr}, \\ u_{rr} = \frac{d}{dr} (ru_{\varphi\varphi}) &= \frac{s'_{12}}{s'_{11}} \varepsilon + \left(s'_{11} - \frac{(s'_{12})^2}{s'_{11}} \right) \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] + \frac{s'_{13}}{s'_{11}} (s'_{11} - s'_{12}) \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}), \\ 2u_{\varphi z} = C_0r &= s'_{26} \left[\frac{1}{s'_{11}} \varepsilon - \left(1 + \frac{s'_{12}}{s'_{11}} \right) \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) - \frac{s'_{13}}{s'_{11}} \sigma_{rr} \right]. \end{aligned}$$

Разность двух первых соотношений дает дифференциальное уравнение второго порядка для напряжения σ_{rr}

$$\left(s'_{11} - \frac{(s'_{12})^2}{s'_{11}} \right) \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] - \left(s'_{33} - \frac{(s'_{13})^2}{s'_{11}} \right) \sigma_{rr} + \frac{s'_{12} - s'_{13}}{s'_{11}} \varepsilon = 0.$$

В то же время третье соотношение является уравнением первого порядка для σ_{rr} . В итоге из этих двух уравнений находим следующее простое выражение для нормального напряжения σ_{rr}

$$\sigma_{rr} = a\varepsilon + bC_0r,$$

$$a = \frac{(s'_{11} + s'_{12} - s'_{13})}{(s'_{11}s'_{33} + s'_{12}s'_{33} - 2(s'_{13})^2)}, \quad b = -\frac{(s'_{11} - s'_{12})(s'_{11} + s'_{12} - 2s'_{13})}{2s'_{26}(s'_{11}s'_{33} + s'_{12}s'_{33} - 2(s'_{13})^2)}.$$

Для такой зависимости компоненты напряжений от радиальной координаты и двух параметров ε и C_0 невозможно выполнить два условия на внутренней и внешней стенках трубки, два условия (2.11). Таким образом, при радиально неоднородном растяжении криволинейно анизотропных нано/микротрубок из кубических и тетрагональных кристаллов предположение о трех ненулевых компонентах напряжений оказывается не справедливым.

2.2.4. Радиально неоднородное растяжение цилиндрически анизотропных нано/микротрубок из кубических и тетрагональных кристаллов

Как было продемонстрировано в подразделе 2.2.2, растяжение цилиндрически анизотропных трубок из кубических кристаллов при отличии ориентации кристаллов от кристаллографической, не может быть однородным. Поэтому здесь мы будем рассматривать неоднородное растяжение. При этом ограничимся случаем радиально неоднородного напряженного состояния. Уравнения равновесия при таком состоянии имеют вид

$$\frac{d\sigma_{rr}(r)}{dr} + \frac{\sigma_{rr}(r) - \sigma_{\varphi\varphi}(r)}{r} = 0,$$

$$\frac{d\sigma_{rz}(r)}{dr} + \frac{\sigma_{rz}(r)}{r} = 0, \quad \frac{d\sigma_{r\varphi}(r)}{dr} + 2\frac{\sigma_{r\varphi}(r)}{r} = 0.$$

При продольном растяжении круглой трубки удельной силой P в отсутствие усилий на боковой поверхности и скручивающего момента эти уравнения дополняют краевые условия

$$\sigma_{ri}(r)|_{r=r_0} = 0, \quad \sigma_{ri}(r)|_{r=R_0} = 0, \quad (2.14)$$

$$\int_{r_0}^{R_0} r\sigma_{zz}(r)dr = \frac{P}{2}(R_0^2 - r_0^2), \quad \int_{r_0}^{R_0} r^2\sigma_{\varphi z}(r)dr = 0. \quad (2.15)$$

Решение последних двух уравнений равновесия для касательных напряжений имеют степенной вид $\sigma_{rz} = C_1r^{-1}$, $\sigma_{r\varphi} = C_2r^{-2}$, и с учетом краевых условий обращения в нуль на стенках трубок (2.14) эти напряжения должны исчезать.

Ненулевыми остаются только три нормальных напряжения и одно касательное (ср. подраздел 2.2.3)

$$\sigma_{rr}(r), \sigma_{\varphi\varphi}(r), \sigma_{zz}(r), \sigma_{\varphi z}(r), \quad \sigma_{r\varphi} = \sigma_{rz} = 0.$$

В таком случае закон Гука для криволинейно анизотропных цилиндрических нано/микротрубок, полученных сворачиванием пластин из тетрагонального кристалла, принимает вид

$$\begin{aligned} u_{zz} &= s'_{11}\sigma_{zz}(r) + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{13}\sigma_{rr}(r) + s'_{26}\sigma_{\varphi z}(r), \\ u_{\varphi\varphi} &= s'_{12}\sigma_{zz}(r) + s'_{11}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{13}\sigma_{rr}(r) - s'_{26}\sigma_{\varphi z}(r), \\ u_{rr} &= s'_{13}\sigma_{zz}(r) + s'_{13}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{33}\sigma_{rr}(r), \\ 2u_{\varphi z} &= s'_{26}[\sigma_{zz}(r) - \sigma_{\varphi\varphi}(r)] + s'_{66}\sigma_{\varphi z}(r), \quad u_{rz} = 0, \quad u_{r\varphi} = 0. \end{aligned}$$

Поле деформаций оказывается радиально неоднородным с четырьмя ненулевыми компонентами $u_{rr}(r)$, $u_{\varphi\varphi}(r)$, $u_{zz}(r)$, $u_{\varphi z}(r)$, и поэтому смещения имеют прежний вид (2.12) и справедливы прежние дополнительные соотношения (2.13).

Пользуясь соотношениями закона Гука, дополнительными соотношениями (2.13) и уравнением равновесия (2.9), искомыми компоненты напряжений можно выразить через одну компоненту $\sigma_{rr}(r)$

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi\varphi} &= \frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}), \\ (s'_{11}s'_{66} - (s'_{26})^2)\sigma_{zz} &= s'_{66}\varepsilon - s'_{26}C_0r - (s'_{12}s'_{66} + (s'_{26})^2)\frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}) - s'_{13}s'_{66}\sigma_{rr}, \\ (s'_{11}s'_{66} - (s'_{26})^2)\sigma_{\varphi z} &= -s'_{26}\varepsilon + s'_{11}C_0r + s'_{26}(s'_{11} + s'_{12})\frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}) + s'_{13}s'_{26}\sigma_{rr}. \end{aligned}$$

С помощью этих соотношений, второго и третьего выражений закона Гука и дифференциальной связи $u_{rr} = d(ru_{\varphi\varphi})/dr$ находим дифференциальное уравнение второго порядка для компоненты напряжений σ_{rr}

$$\begin{aligned} a_0 \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] + a_1 \sigma_{rr} + a_2 \varepsilon + a_3 C_0 r &= 0, \\ a_0 &\equiv (s'_{11} + s'_{12})(s'_{11}s'_{66} - s'_{12}s'_{66} - 2(s'_{26})^2), \quad a_1 \equiv s'_{66}(s'_{13})^2 - s'_{11}s'_{33}s'_{66} + s'_{33}(s'_{26})^2, \\ a_2 &\equiv s'_{66}s'_{12} - s'_{13}s'_{66} + (s'_{26})^2, \quad a_3 \equiv -s'_{26}(2s'_{11} + 2s'_{12} - s'_{13}). \end{aligned}$$

Это уравнение имеет степенное решение вида

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= -\frac{a_2}{a_0 + a_1}\varepsilon - \frac{a_3}{4a_0 + a_1}C_0r + A_+ \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\lambda_+} + A_- \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\lambda_-}, \quad (2.16) \\ \lambda_{\pm} &= -1 \pm k, \quad k = \sqrt{-a_1/a_0}, \end{aligned}$$

зависящее от параметрических коэффициентов ε , C_0 , A_+ , A_- . Два из них определяются из условий отсутствия нормальных напряжений σ_{rr} на внутренней (при $r = r_0$) и внешней (при $r = R_0 \equiv \rho r_0$) поверхностях трубки (2.14)

$$\begin{aligned} A_+ &= \frac{a_2}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \varepsilon + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} C_0 r_0, \\ A_- &= \frac{a_2}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \varepsilon + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} C_0 r_0. \end{aligned}$$

Используя найденное выражение для компоненты $\sigma_{rr}(r)$, получим остальные три отличные от нуля компоненты напряжений в виде

$$\sigma_{\varphi\varphi} = -\frac{a_2}{a_0 + a_1} \varepsilon - 2 \frac{a_3}{4a_0 + a_1} C_0 r + k A_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} - k A_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}, \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} S &= \left(s'_{66} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \alpha_1 \right) \varepsilon + \left(-s'_{26} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \alpha_2 \right) C_0 r - \\ &\quad - \alpha_k A_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} - \alpha_{-k} A_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi z} S &= -s'_{26} \left(1 + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \beta_1 \right) \varepsilon + \left(s'_{11} - \frac{a_3}{4a_0 + a_1} s'_{26} \beta_2 \right) C_0 r + \\ &\quad + s'_{26} \beta_k A_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + s'_{26} \beta_{-k} A_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$S \equiv s'_{11} s'_{66} - (s'_{26})^2, \quad (2.20)$$

$$\alpha_q \equiv s'_{13} s'_{66} + q(s'_{12} s'_{66} + (s'_{26})^2), \quad \beta_q \equiv s'_{13} + q(s'_{12} + s'_{11}) \quad (q = 1, 2, \pm k) \quad (2.21)$$

Интегральное краевое условие отсутствия скручивающего момента (второе из условий (2.15)) позволяет найти линейную связь между параметрами C_0 и ε

$$C_0 = \frac{M}{r_0 N} \varepsilon. \quad (2.22)$$

При этом M и N имеют вид

$$\begin{aligned} M &= s'_{26} \left\{ \frac{\rho^3 - 1}{3} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left[\beta_1 \frac{\rho^3 - 1}{3} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \beta_k \frac{(\rho^{3+\lambda_+} - 1)(\rho^{-\lambda_-} - 1)}{(3 + \lambda_+)(\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1)} - \beta_{-k} \frac{(\rho^{3+\lambda_-} - 1)(\rho^{-\lambda_+} - 1)}{(3 + \lambda_-)(\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} N &= s'_{11} \frac{\rho^4 - 1}{4} - s'_{26} \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left[\beta_2 \frac{\rho^4 - 1}{4} - \right. \\ &\quad \left. - \beta_k \frac{(\rho^{3+\lambda_+} - 1)(\rho^{1-\lambda_-} - 1)}{(3 + \lambda_+)(\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1)} - \beta_{-k} \frac{(\rho^{3+\lambda_-} - 1)(\rho^{1-\lambda_+} - 1)}{(3 + \lambda_-)(\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1)} \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Параметры A_{\pm} также оказываются линейно связанными с деформационным параметром ε

$$A_+ = a_+ \varepsilon, \quad A_- = a_- \varepsilon \quad (2.25)$$

$$a_+ = \frac{a_2}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \frac{M}{N}, \quad (2.26)$$

$$a_- = \frac{a_2}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \frac{M}{N}. \quad (2.27)$$

С помощью первого интегрального краевого условия (2.15) после этого можно найти зависимость модуля Юнга $E = P/\varepsilon$ от радиуса трубки, толщины ее стенки и упругих коэффициентов податливости

$$E = \frac{1}{S} \left[s'_{66} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \alpha_1 + \left(-s'_{26} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \alpha_2 \right) \frac{2M}{3N} \frac{\rho^3 - 1}{\rho^2 - 1} - 2\alpha_k a_+ \frac{\rho^{\lambda_+ + 2} - 1}{(\lambda_+ + 2)(\rho^2 - 1)} - 2\alpha_{-k} a_- \frac{\rho^{\lambda_- + 2} - 1}{(\lambda_- + 2)(\rho^2 - 1)} \right]. \quad (2.28)$$

По соотношениям закона Гука и выражениям для напряжений (2.16) и (2.17) - (2.21) определяются компоненты деформации $u_{\varphi\varphi}$, u_{rr} , и тем самым коэффициенты Пуассона $\nu_{rz} = -u_{rr}/\varepsilon$ и $\nu_{\varphi z} = -u_{\varphi\varphi}/\varepsilon$

$$\begin{aligned} \nu_{rz} = & -\frac{s'_{13}s'_{66}}{S} + \frac{s'_{13}s'_{26}}{S} \frac{M}{N} \left(\frac{r}{r_0} \right) + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left(s'_{13} + s'_{33} - \frac{s'_{13}}{S} \alpha_1 \right) + \\ & + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left(s'_{33} + 2s'_{13} - \frac{s'_{13}}{S} \alpha_2 \right) \frac{M}{N} \left(\frac{r}{r_0} \right) + \\ & + \left(\frac{s'_{13}}{S} \alpha_k - k s'_{13} - s'_{33} \right) a_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + \\ & + \left(\frac{s'_{13}}{S} \alpha_{-k} + k s'_{13} - s'_{33} \right) a_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \nu_{\varphi z} = & \frac{1}{S} \left[-(s'_{12}s'_{66} + (s'_{26})^2) + s'_{26}(s'_{11} + s'_{12}) \frac{M}{N} \left(\frac{r}{r_0} \right) + \right. \\ & + (s'_{11}s'_{66} - s'_{12}s'_{66} - 2(s'_{26})^2) \left[\beta_1 \frac{a_2}{a_0 + a_1} + \beta_2 \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{M}{N} \left(\frac{r}{r_0} \right) - \right. \\ & \left. \left. - \beta_k a_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} - \beta_{-k} a_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Оба коэффициента Пуассона оказываются зависящими от радиальной координаты, радиуса трубки, толщины ее стенок и коэффициентов податливости (см. (2.20) - (2.30)).

В пределе бесконечно тонкой трубки эти выражения значительно упрощаются. Большое упрощение происходит в частном случае угла хиральности $\alpha = \pi/4$. При таком угле хиральности связь между коэффициентами податливости тетрагонального кристалла s'_{ij} и кубического кристалла s_{ij} , поворачиваемого на угол хиральности, имеет следующий вид (см. подраздел 2.2.1)

$$s'_{11} = s_{11} - 0.5\Delta, \quad s'_{12} = s_{12} + 0.5\Delta, \quad s'_{13} = s_{12},$$

$$s'_{33} = s_{11}, \quad s'_{44} = s_{44}, \quad s'_{26} = 0, \quad s'_{66} = s_{44} + 2\Delta, \quad \Delta = s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}.$$

В силу этой связи результаты для модуля Юнга и коэффициентов Пуассона тонкой нано/микротрубки становятся простыми

$$E = \frac{1}{s'_{11}} = \frac{2}{2s_{11} - \Delta}, \quad \nu_{rz} = -\frac{s'_{13}}{s'_{11}} = -\frac{2s_{12}}{2s_{11} - \Delta}, \quad \nu_{\varphi z} = -\frac{s'_{12}}{s'_{11}} = -\frac{2s_{12} + \Delta}{2s_{11} - \Delta}.$$

В безразмерном виде они переписываются следующим образом

$$e \equiv \frac{E}{s_{11}} = \frac{2}{2 - \delta}, \quad \nu_{rz} = \frac{\Pi\delta}{2 - \delta}, \quad \nu_{\varphi z} = \frac{(\Pi - 1)\delta}{2 - \delta}. \quad (2.31)$$

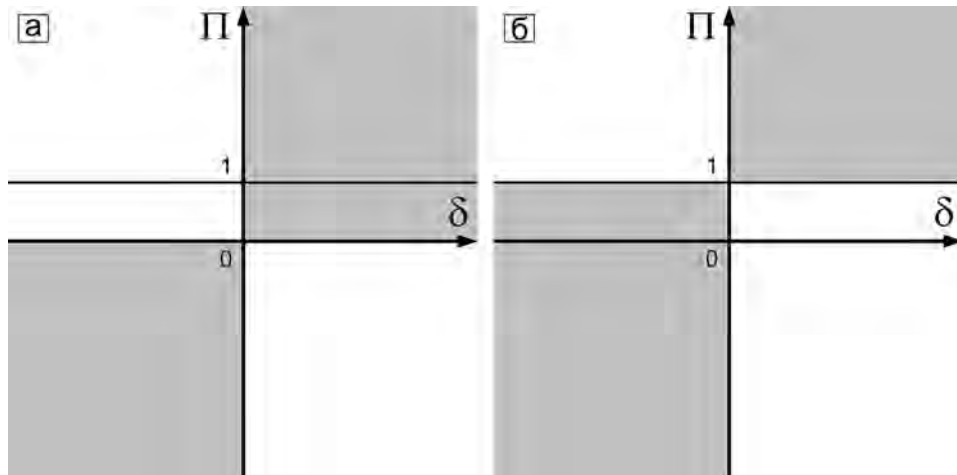


Рис. 2.7: Зоны отрицательности коэффициента Пуассона ν_{rz} и коэффициента Пуассона $\nu_{\varphi z}$ (не закрашенные области (а) и (б) соответственно) для тонких нано/микротрубок при угле хиральности $\alpha = \pi/4$.

Термодинамические ограничения $s_{11} > 0$, $\delta < 2$ (см. подраздел 1.2.2) обеспечивают положительность модуля Юнга, а для отрицательности одного из коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ при $\delta > 0$ необходимо выполнение неравенств $\Pi < 0$ и $\Pi < 1$ соответственно, а при $\delta < 0$ обратных неравенств. Наглядно это изображено на Рис.2.7, на котором затенены зоны положительности коэффициентов Пуассона. Из рисунка можно видеть, что в случае $\alpha = \pi/4$ оба коэффициента Пуассона отрицательны

при $\delta > 0$, $\Pi < 0$, а также при $\delta < 0$, $\Pi > 1$. Оба коэффициента положительны при $\delta > 0$, $\Pi > 1$ и при $\delta < 0$, $\Pi < 0$. Наконец, при $0 < \Pi < 1$ знаки двух коэффициентов противоположны, а именно, при $\delta > 0$ имеем $\nu_{rz} > 0$, $\nu_{\varphi z} < 0$, а при $\delta < 0$ будет $\nu_{rz} < 0$, $\nu_{\varphi z} > 0$.

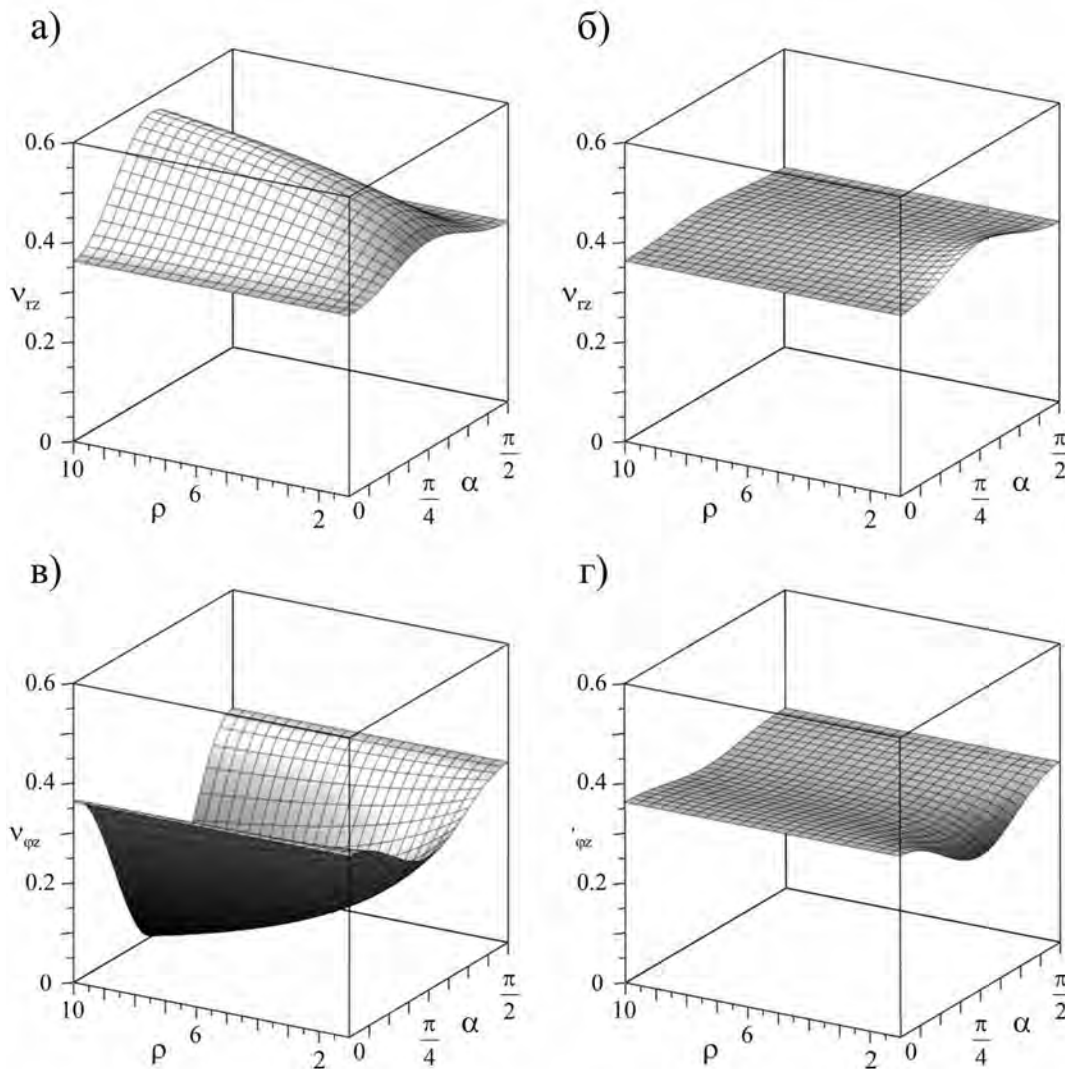


Рис. 2.8: Изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях нано/микротрубок из алюминия Al.

Численные расчеты коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для целого ряда нано/микротрубок из кубических кристаллов, используя вышеприведенные формулы (2.29), (2.30), позволили установить, что поведение практически всех трубок характеризуется сменой положительных и отрицательных значений коэффициентов Пуассона с изменением их толщин и углов хиральности, т.е. все они являются частичными ауксетиками. Например, кубические кристаллы из алюминия Al, железа Fe и соединения самария $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$, которые в условиях прямолинейной

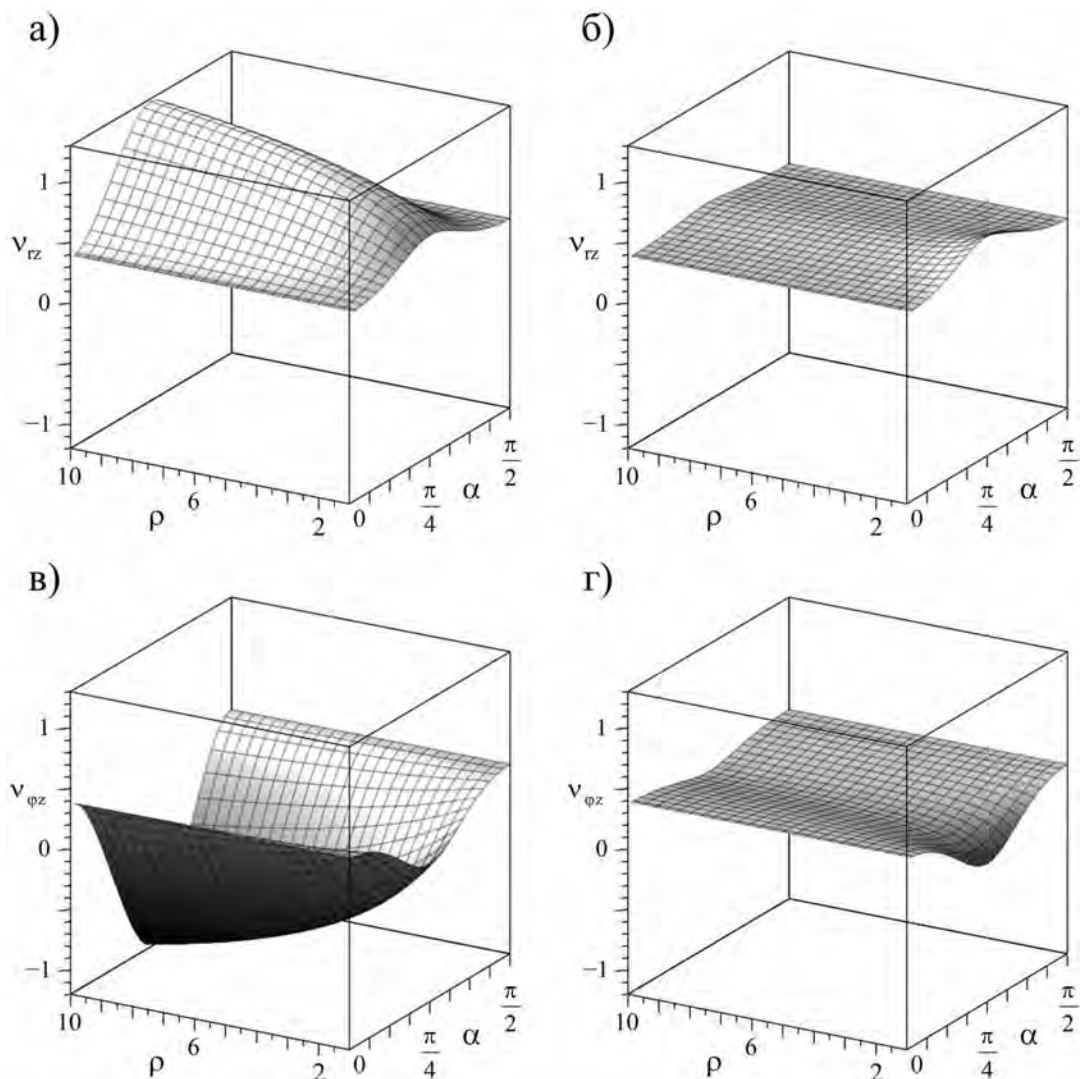


Рис. 2.9: Изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях нанотрубок из железа Fe.

анизотропии являются неауксетиком, частичным ауксетиком и полным ауксетиком, соответственно, после сворачивания в цилиндрически анизотропные трубки все оказываются частичными ауксетиками (см. Рис.2.8 - 2.10). Это верно и в отношении других проанализированных кубических кристаллов.

На Рис.2.8-2.10 показано изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ с изменением толщин и углов хиральности для трубок из Al ($\Pi = 2.795$, $\delta = 0.259$), Fe ($\Pi = 0.911$, $\delta = 0.81$) и $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ ($\Pi = 12.785$, $\delta = 0.054$). У трубок из алюминия (Рис.2.8) наблюдается смена знака коэффициента $\nu_{\varphi z}$ на внутренней поверхности трубки (при $r = r_0$). Отрицательным этот коэффициент становится при $\rho \equiv R_0/r_0 > 10$ и угле хиральности $\alpha = \pi/4$. При таком же значении угла коэффициент $\nu_{\varphi z}$ на внешней поверхности тонкой трубки положителен и возрастает с

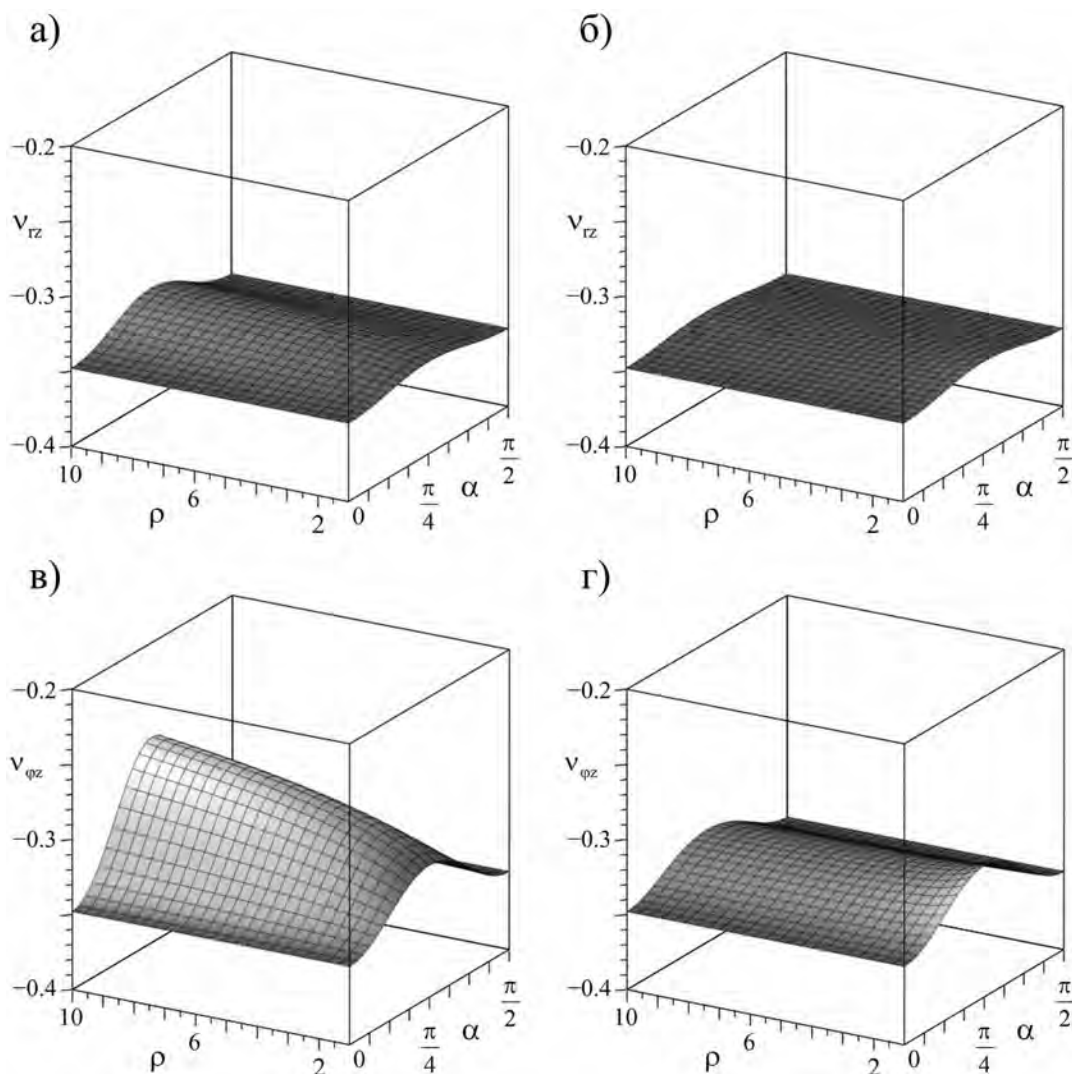


Рис. 2.10: Изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях нанотрубок из $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$.

увеличением параметра толщины ρ . В то же время коэффициент Пуассона ν_{rz} остается положительным, как на внутренней, так и на внешней поверхностях трубки.

Общий характер изменений коэффициентов Пуассона для трубок из железа (Рис.2.9) и алюминия (Рис.2.8) аналогичен. При угле хиральности $\alpha = \pi/4$ коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ на внешней поверхности отрицателен для тонкой трубки и уменьшается с увеличением параметра толщины. Уже при $\rho > 1.21$ он становится положительным. На внешней поверхности коэффициент $\nu_{\varphi z}$ в случае тонкой трубки при $\alpha = \pi/4$ принимает отрицательное значение и увеличивается с увеличением параметра толщины вплоть до смены знака.

Рис.2.10 иллюстрирует поведение коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для трубок из $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$. Трубки из этого кубического кристалла имеют отрицательные значения обоих коэффициентов Пуассона на внешней поверхности при любых углах

хиральности и параметрах толщины. В то же время они меняют знак на внутренней поверхности при больших значениях параметра толщины. Это в случае угла хиральности $\alpha = \pi/4$ происходит для коэффициента $\nu_{\varphi z}$ при параметре толщины $5.2 \cdot 10^5$, а для коэффициента ν_{rz} при еще большем значении такого параметра.

Упрощение аналитических результатов для модуля Юнга и коэффициентов Пуассона в частном случае угла хиральности $\alpha = \pi/4$ позволяет с большей простотой проанализировать поведение нано/микроотрубок из кубических кристаллов. В Табл.П.17 (стр.350) даны значения коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для тонких трубок при угле хиральности $\alpha = \pi/4$ (см. (2.31)), а также приведены величины параметра толщины, при котором происходит смена знака коэффициента Пуассона. Численные расчеты показывают, что отрицательность коэффициента Пуассона будет проявляться у всех проанализированных кристаллов.

Для кристаллов с $\Pi > 1$, $\delta > 0$ коэффициенты ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для тонкой трубки положительны и смена знака (с положительного на отрицательный) возможна для $\nu_{\varphi z}$ на внутренней поверхности. Отметим, что кубические кристаллы с $\Pi > 1$, $\delta > 0$ в случае прямолинейной анизотропии являются неауксетиками. Кристаллы с $1 > \Pi > 0$, $\delta > 0$ имеют отрицательный коэффициент Пуассона для тонкой трубки, и смена знака будет наблюдаться у $\nu_{\varphi z}$ на внешней поверхности. При этом коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ на внутренней поверхности остается отрицательным и уменьшается с увеличением параметра толщины ρ .

Среди кристаллов с $\Pi > 0$, $\delta < 0$, представленных в Табл.П.17, выделяются TmSe и Tm_{0.99}Se. Для них будет наблюдаться смена знака у двух коэффициентов Пуассона, а именно, ν_{rz} на внутренней поверхности меняет знак с отрицательного на положительный, а для $\nu_{\varphi z}$ на внешней поверхности справедлива обратная ситуация. Для остальных кристаллов с $\Pi > 0$, $\delta < 0$ смена знака имеет место только для коэффициента Пуассона ν_{rz} на внутренней поверхности.

Для кристаллов с $\Pi < 0$, $\delta < 0$ отрицательный коэффициент Пуассона наблюдается для ν_{rz} на внутренней поверхности, и при этом величина коэффициента уменьшается с увеличением параметра толщины. В случае прямолинейной анизотропии кристаллы с $\Pi < 0$, $\delta < 0$ являются неауксетиками.

Выполненный численный анализ показал, что из прямолинейно анизотропных кубических неауксетиков ZnO, Al, Pt, Ta, Ir, Si, Rh, Ge, AuGa₂, Cd_{0.55}Mn_{0.45}Te, Pb_{0.71}Sn_{0.29}Te, Li₂O, Nb, AgCl, Cr, FeTi, CeAl₂, Mo при сворачивании образуются нано/микроотрубки типа частичных ауксетиков. Такого же типа трубки соответствуют сорока одному прямолинейно анизотропному кубическому ауксетику из Табл.П.17.

2.3. Упругие свойства микро/нанотрубок с шестиконстантной тетрагональной анизотропией [31]

В частном случае поворота вокруг главной оси 6-ти константного тетрагонального кристалла (оси 3) на угол α матрица коэффициентов податливости

$$\|s_{ij}\| = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}.$$

совпадает по форме с 7-ми константной матрицы тетрагонального кристалла при нулевом угле хиральности

$$\|s'_{ij}\| = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & 0 & s'_{16} \\ s'_{12} & s'_{11} & s'_{13} & 0 & 0 & -s'_{16} \\ s'_{13} & s'_{13} & s'_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 \\ s'_{16} & -s'_{16} & 0 & 0 & 0 & s'_{66} \end{pmatrix}$$

Причем новые матричные коэффициенты податливости s'_{ij} связаны с прежними коэффициентами s_{ij} и зависят от угла поворота α следующим образом

$$\begin{aligned} s'_{11} = s'_{22} &= s_{11} - 0.5\Delta_1 \sin^2 2\alpha, & s'_{12} &= s_{12} + 0.5\Delta_1 \sin^2 2\alpha, \\ s'_{66} &= s_{66} + 2\Delta_1 \sin^2 2\alpha, & s'_{16} = -s'_{26} &= -0.5\Delta_1 \sin 4\alpha, \\ s'_{13} = s'_{23} &= s_{13}, & s'_{33} &= s_{33}, & s'_{44} = s'_{55} &= s_{44}, & \Delta_1 &= s_{11} - s_{12} - 0.5s_{66}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Далее рассмотрим растяжение цилиндрических нано/микротрубок, получаемых сворачиванием тонких пластин из таких 7-ми константных кристаллов, и будем описывать его в рамках линейной упругости с криволинейной анизотропией. Будем предполагать, что главная ось прямолинейно анизотропного кристалла (ось 3) перпендикулярна плоскости кристаллической пластины и при сворачивании пластины в круговой цилиндр она сохраняется в качестве радиальной. При этом две другие кристаллографические оси 1 и 2 повернуты вокруг главной оси на угол α еще до сворачивания пластины. Тогда между штрихованным повернутым базисом прямоугольной пластины и локальным ортогональным базисом свернутой цилиндрической нано/микротрубки будет иметь место соответствие $\mathbf{e}'_1 \rightarrow \mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}'_2 \rightarrow -\mathbf{e}_\varphi$, $\mathbf{e}'_3 \rightarrow \mathbf{e}_r$, которое наглядно иллюстрируется на Рис.2.6. В итоге результаты, изложенные в разделе 2.2, могут применяться к нано/микротрубкам из 6-ти константных тетрагональных кристаллов.

При нулевом угле хиральности ($\alpha = 0$) имеем $s'_{ij} = s_{ij}$ и численные расчеты коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ с использованием коэффициентов упругой податливости, собранных в справочнике [172], показывают, что 75 из 85 нано/микротрубок из 6-ти константных тетрагональных кристаллов являются ауксетиками. Подробно это отражает Табл.П.18 (стр.353). Как можно видеть, знак коэффициентов Пуассона зависит от толщины трубки и два коэффициента не бывают одновременно отрицательными. Ситуации с отрицательным коэффициентом $\nu_{\varphi z}$ и ν_{rz} при всех толщинах (любом ρ) отмечены в Табл.П.18 одной звездочкой. Ситуации с отрицательным обоими коэффициентом при меньших ρ и положительным при больших отмечены двумя звездочками.

Для нано/микротрубок с нулевым углом хиральности из двух кристаллов RbH_2AsO_4 и RbD_2AsO_4 коэффициент $\nu_{\varphi z}$ оказывается отрицательным при любых толщинах трубок по всему их сечению. Еще в случае семнадцати кристаллов коэффициент $\nu_{\varphi z}$ является отрицательным независимо от толщины тонких нано/микротрубок при $\rho < 1.1$ как на внутренней, так и на внешней их поверхности. Наконец, для восемнадцати трубок $\nu_{\varphi z} < 0$ в окрестности внутренней поверхности при параметрах толщины трубок ρ , больших некоторых критических значений ρ_{cr} .

Ауксетическая нано/микротрубка с нулевым углом хиральности из $(\text{K}_{1/6}\text{Na}_{1/6}\text{Sr}_{1/2}\text{Ba}_{1/6})\text{Nb}_2\text{O}_6$ с коэффициентом податливости при постоянной электрической индукцией (s^D) обнаруживает $\nu_{rz} < 0$ на внутренней и внешней поверхностях при параметрах толщины $\rho < \rho_{cr} = 7.26$, а при $\rho > \rho_{cr}$ только у внешней поверхности трубки (Рис.2.11). Для нано/микротрубки из $\text{Pb}_{0.346}\text{Ba}_{0.59}\text{Na}_{0.036}\text{Li}_{0.028}\text{-Nb}_2\text{O}_6$ при фиксированной электрической индукции (s^E) таким разделяющим значением параметра толщины оказывается $\rho_{cr} = 19.4$. Все другие трубки из 6-ти константных тетрагональных кристаллов с $\alpha = 0$ всегда имеют положительный коэффициент Пуассона ν_{rz} на внешних поверхностях, а для 30-ти таких трубок коэффициент ν_{rz} оказывается отрицательным у внутренних поверхностей при параметрах толщины, больших определенных значений ρ_{cr} .

Аналогичная Табл.П.19 была составлена для хиральных нано/микротрубок с углом хиральности $\alpha = \pi/4$. При такой хиральности оба коэффициента Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$, по-прежнему, не бывают одновременно отрицательными, но 73 нано/микротрубки обнаруживают тот или иной отрицательный коэффициент Пуассона. Трубки из кристалла $\text{Pb}_{0.346}\text{Ba}_{0.59}\text{Na}_{0.036}\text{Li}_{0.028}\text{-Nb}_2\text{O}_6$ с упругими коэффициентами податливостью s^E характеризуются отрицательным коэффициентом Пуассона ν_{rz} на обеих поверхностях при любых толщинах трубок. Кристалл $(\text{K}_{1/6}\text{Na}_{1/6}\text{Sr}_{1/2}\text{Ba}_{1/6})\text{Nb}_2\text{O}_6$ при упругих коэффициентах податливости с фиксированной электрической индукцией образует нано/микротрубку с $\nu_{rz} < 0$ на обеих поверхностях при $\rho < 8.29$. Для 24 других нано/микротрубок с $\alpha = \pi/4$ коэффициент ν_{rz} становится отрицательным на внутренней поверхности при параметрах толщины, превышающих те или иные критические значения, в то время как на внешней поверхности он остается положительным.

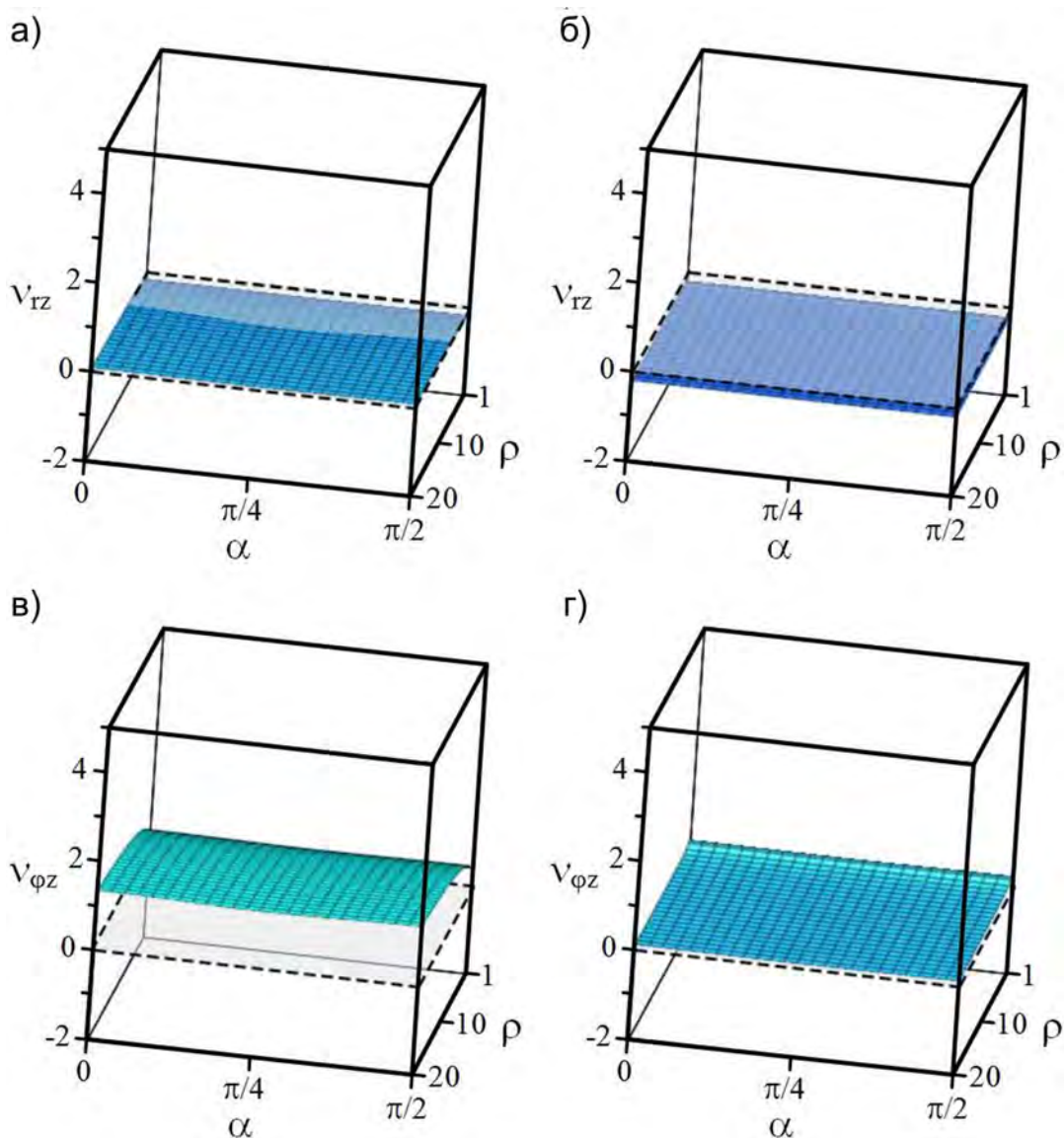


Рис. 2.11: Зависимости коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и коэффициентов $\nu_{\phi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях от параметра толщины ρ и угла хиральности α для нано/микротрубок из $(K_{1/6}Na_{1/6}Sr_{1/2}Ba_{1/6})Nb_2O_6$.

Из Табл.П.19 с $\alpha = \pi/4$ видно, что 18 хиральных нано/микротрубок всегда имеют положительный коэффициент Пуассона $\nu_{\phi z}$ на внешней поверхности, и отрицательный на внутренней при параметрах толщины, превышающих критические значения. Наконец 24 трубки обнаруживают отрицательный коэффициент $\nu_{\phi z}$ на внутренней поверхности при любых толщинах трубки, а также на внешней поверхности при параметрах толщины, меньших критических значений.

Численные результаты для модулей Юнга для тонких ($\rho = 1.01$) и относительно толстых ($\rho = 10$) нано/микротрубок с нулевым углом хиральности $\alpha = 0$ и углом хиральности $\alpha = \pi/4$ собраны в Табл.П.20. На Рис.2.12 представлены зависи-

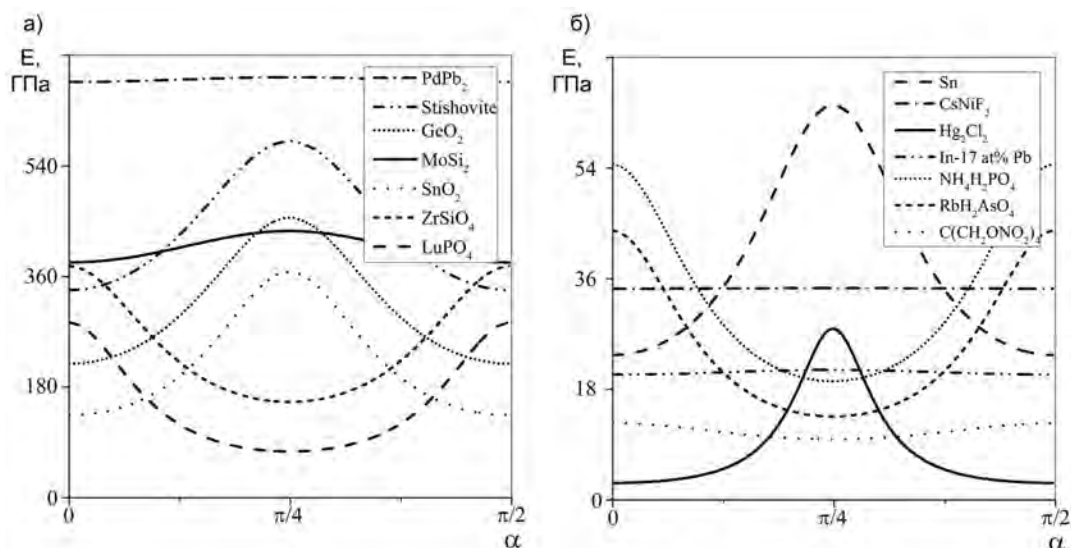


Рис. 2.12: Изменчивость модуля Юнга E в зависимости от угла хиральности α для тонких трубок ($\rho = 1.01$) с большими (а) и малыми (б) значениями модулей Юнга.

мости модуля Юнга от величины угла хиральности для некоторых тонких трубок, имеющих малые или большие значения модуля Юнга.

2.4. Упругие свойства микро/нанотрубок с семиконстантной тетрагональной анизотропией [23]

2.4.1. От кристаллов с прямолинейной 7-ми константной тетрагональной упругостью к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией

При использовании матричной формы записи закона Гука $\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j$ симметричные матричные коэффициенты податливости s_{ij} преобразуются с помощью соответствующей несимметричной матрицы $\|q_{ij}\|$

$$s'_{ij} = q_{i\alpha}q_{j\beta}s_{\alpha\beta}$$

с матричными коэффициентами, нелинейным образом связанными с коэффициентами l_{ij} [161]. В частном случае поворота вокруг главной оси кристалла (оси 3) на угол α матрица тетрагонального кристалла $\|s_{ij}\|$ не меняет общего вида 7-ми константной матрицы

$$\|s'_{ij}\| = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & 0 & s'_{16} \\ s'_{12} & s'_{11} & s'_{13} & 0 & 0 & -s'_{16} \\ s'_{13} & s'_{13} & s'_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 \\ s'_{16} & -s'_{16} & 0 & 0 & 0 & s'_{66} \end{pmatrix}$$

с матричными коэффициентами податливости s'_{ij} , линейно зависящими от s_{ij} и нелинейно от угла поворота α следующим образом

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11} - 0.5\delta \sin^2 2\alpha + 0.5s_{16} \sin 4\alpha, \\ s'_{12} &= s_{12} + 0.5\delta \sin^2 2\alpha - 0.5s_{16} \sin 4\alpha, \\ s'_{66} &= s_{66} + 2\delta \sin^2 2\alpha - 2s_{16} \sin 4\alpha, \\ s'_{16} &= s_{16} \cos 4\alpha - 0.5\delta \sin 4\alpha, \\ s'_{13} &= s_{13}, \quad s'_{33} = s_{33}, \quad s'_{44} = s_{44}, \\ \delta &\equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{66}. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Будем предполагать, что главная ось прямолинейно анизотропного кристалла (ось 3) перпендикулярна плоскости тонкой кристаллической пластины и при сворачивании пластины в круговой цилиндр эта ось переходит в радиальную. При этом две другие кристаллографические оси 1 и 2 поворачиваются вокруг главной оси на угол α еще до сворачивания пластины. Тогда между повернутым базисом исходной прямоугольной пластины $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3$ и локальным ортогональным базисом свернутой цилиндрической нано/микротрубки $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z$ будет иметь место соответствие $\mathbf{e}'_1 \rightarrow \mathbf{e}_z, \mathbf{e}'_2 \rightarrow -\mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}'_3 \rightarrow \mathbf{e}_r$, которое наглядно иллюстрируется на Рис.2.6 (стр.139). В итоге результаты, изложенные в разделе 2.2, могут применяться к нано/микротрубкам из 7-ми константных тетрагональных кристаллов.

2.4.2. Неоднородное растяжение нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристаллов при нулевой хиральности

В ситуации с нулевым углом хиральности имеет место упрощение формул предыдущего подраздела, заключающееся в замене s'_{ij} на s_{ij} . Численные расчеты по таким формулам коэффициентов Пуассона ν_{rz} (2.29) и $\nu_{\varphi z}$ (2.30) выявили десять нано/микротрубок с цилиндрической анизотропией, имеющих тот или иной отрицательный коэффициент Пуассона, что составляет больше половины всех рассмотренных 7-ми константных тетрагональных кристаллов. Это также превосходит количество ауксетиков с прямолинейной анизотропией, равное четырем (см. раздел 1.7). Причем прямолинейно анизотропные ауксетики остаются ауксетиками и для криволинейно анизотропных нано/микротрубок из тех же материалов.

Таблица 2.5: Значения коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для тонкостенных 7-ми константных тетрагональных нано/микротрубок и критические значения параметра толщины ρ для смены знака этих коэффициентов на внутренней и внешней поверхностях при нулевом угле хиральности.

Кристаллы	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_0 при $\nu_{rz} = 0$		ρ_0 при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
AgClO ₃	0.36	0.44	–	–	–	–
C(CH ₂ OH) ₄	0.16	0.79	2.20 и 40	–	–	–
C ₁₄ H ₈ O ₄	0.11	–0.48	–	–	–	–
CaMoO ₄	0.21	0.42	110	–	–	–
CaWO ₄	0.18	0.45	54.4	–	–	–
InPS ₄	0.86	–0.32	–	–	–	2.00
	0.68	–0.16	–	–	–	1.60
LiBi(MoO ₄) ₂	0.26	0.39	–	–	–	–
LiY _{0.5} Tb _{0.5} F ₄	0.12	0.64	10.6	–	–	–
LiYF ₄	0.18	0.47	11.4	–	–	–
NaBi(MoO ₄) ₂	0.31	0.34	–	–	–	–
NaBi(WO ₄) ₂	0.18	0.45	–	–	–	–
NbO ₂	0.43	0.03	–	–	1.20	–
	0.21	0.54	6	–	–	–
PbMoO ₄	0.24	0.57	60.6	–	–	–
SrMoO ₄	0.25	0.43	238	–	–	–

В Табл.2.5 приведены численные значения коэффициентов Пуассона для всех нехиральных тонкостенных нано/микротрубок ($\rho - 1 \ll 1$) из 7-ми константных тетрагональных кристаллов, а также критические значения параметра толщины ρ , при которых меняется знак коэффициента Пуассона на внутренней и внешней поверхностях нано/микротрубок. Согласно результатам, собранным в таблице, у каждой ауксетической нано/микротрубки отрицательным бывает только один из двух коэффициентов Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$. В частности для нано/микротрубок из кристаллов C(CH₂OH)₄, CaMoO₄, CaWO₄, LiY_{0.5}Tb_{0.5}F₄, LiYF₄, PbMoO₄, SrMoO₄ отрицательным может быть только коэффициент ν_{rz} и только на внутренней поверхности нано/микротрубки. Кроме того, для подобных тонкостенных трубок он всегда положителен. Отметим немонотонность изменений коэффициента Пуассона ν_{rz} в случае кристалла C(CH₂OH)₄. Положительный при малых ρ , он становится отрицательным в интервале $2.2 < \rho < 40$ (достигая минимального значения $\nu_{rz} = 0.05$ при $\rho = 5.7$), а затем меняет знак снова на положительный. Положительный коэффициент $\nu_{\varphi z}$ также меняется на внутренней поверхности немонотонным образом, достигая максимума при том же значении параметра толщины $\rho = 5.7$.

Коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ оказался отрицательным у нано/микроотрубок из двух кристаллов InPS_4 , $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{O}_4$. Для $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{O}_4$ на обеих (внутренней и внешней) поверхностях трубок при любом параметре их толщины ρ , а в случае InPS_4 всегда на внутренней поверхности и при $\rho < 1.6$ (или $\rho < 2$ при другом экспериментальном наборе упругих констант) на внешней поверхности трубок. Для кристаллов InPS_4 , $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{O}_4$ коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ оказывается отрицательным в тонкостенных трубок. Что касается нано/микроотрубок из NbO_2 , то при одном экспериментальном наборе упругих констант из [172] должен быть отрицательным коэффициент Пуассона на внутренней поверхности трубок при $\rho > 6$, а при другом наборе ожидается отрицательность на внутренней поверхности при $\rho > 1.2$ (см. Табл.2.5).

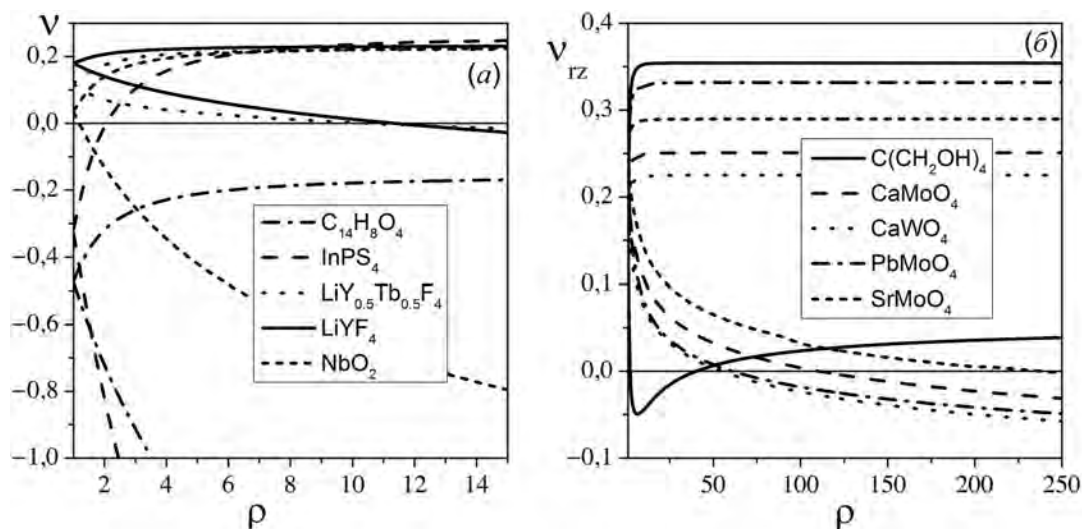


Рис. 2.13: Изменения коэффициентов Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ на внутренней и внешней поверхностях нано/микроотрубок из материалов, у которых смена знака коэффициента Пуассона наблюдается при $\rho < 15$ (а) и при больших значениях ρ (б).

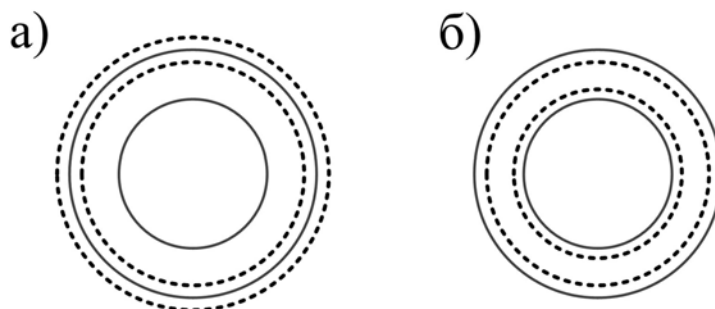


Рис. 2.14: Схематическое изменение поведения поперечного сечения нано/микроотрубки из InPS_4 при $\rho = 1.5$ (а) и $\rho = 6$ (б).

Общий характер зависимостей коэффициентов Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (нижние ветви кривых) и внешней (верхние ветви кривых) поверхностях нано/микроотрубок с нулевым углом хиральности от параметра толщины ρ отражен

на Рис.2.13, состоящем из двух графиков (а) и (б) (ср. с данными Табл.2.5). На Рис.2.13а собраны результаты для нано/микротрубок, обладающих отрицательными коэффициентами Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ при значениях параметра толщины, меньших пятнадцати. На Рис.2.13б отражены случаи с изменением знака коэффициента Пуассона ν_{rz} при больших значениях параметра толщины (для $C(SH_2OH)_4$ имеет место изменение знака также при $\rho > 2.2$) и с небольшими отрицательными значениями коэффициента Пуассона. Из Рис.2.13 также видно, что имеет место более быстрое изменение коэффициентов Пуассона на внутренних поверхностях нано/микротрубок при не слишком малых значениях параметра толщины.

На Рис.2.14 показано схематическое изменение поведения поперечного сечения нано/микротрубок из $InPS_4$ при различных параметрах толщины. Сплошной линией изображены границы внешней и внутренней поверхностей трубок до их растяжения, а пунктирной линией – после растяжения. Здесь при $\rho = 1.5$ коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ оказывается равным 0.59 на внутренней и -0.11 на внешней поверхностях, а коэффициент ν_{rz} на обеих поверхностях положителен (на внутренней поверхности 1.04, а на внешней поверхности 0.73). При $\rho = 6$ коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ на внешней поверхности принимает положительное значение 0.20, а на внутренней поверхности уменьшается по сравнению со значением при $\rho = 1.5$ и становится равным -1.89 . Коэффициент Пуассона ν_{rz} на внутренней и внешней поверхностях равен 1.89 и 0.52, соответственно.

2.4.3. Неоднородное растяжение хиральных нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристаллов.

Численные оценки, основанные на списках экспериментальных коэффициентов упругости кристаллов в [172], показывают, что все хиральные нано/микротрубки из 7-ми константных тетрагональных кристаллов могут иметь отрицательные коэффициенты Пуассона (ср. предыдущий раздел). В этом случае из четырех кристаллов получают частично ауксетические нано/микротрубки благодаря влиянию дополнительного параметра, угла хиральности.

На Рис.2.15-2.17 показаны примеры изменчивости коэффициентов Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ для нано/микротрубок при изменении параметров ρ , α . Для трубок из $LiYF_4$ (Рис.2.16) коэффициент Пуассона ν_{rz} на внутренней поверхности может быть отрицательным в рассматриваемом диапазоне параметров. Для трубок из $LiBi(MoO_4)_2$ (Рис.2.15) как ν_{rz} , так и $\nu_{\varphi z}$ могут становиться отрицательными на внутренней поверхности. В случае $\alpha = \pi/8$ коэффициент $\nu_{rz} < 0$ при $\rho > 6.3$, а для $\alpha = 13\pi/32$ коэффициент $\nu_{\varphi z} < 0$ при $\rho > 12.1$. Для трубок из $C_{14}H_8O_4$ (Рис.2.17) коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$ оказывается отрицательным как на внутренней, так и на внешней поверхностях при любых значениях параметров ρ , α . Обращает на себя внимание сильная изменчивость коэффициента $\nu_{\varphi z}$ указанных типов трубок на их внутренней поверхности.

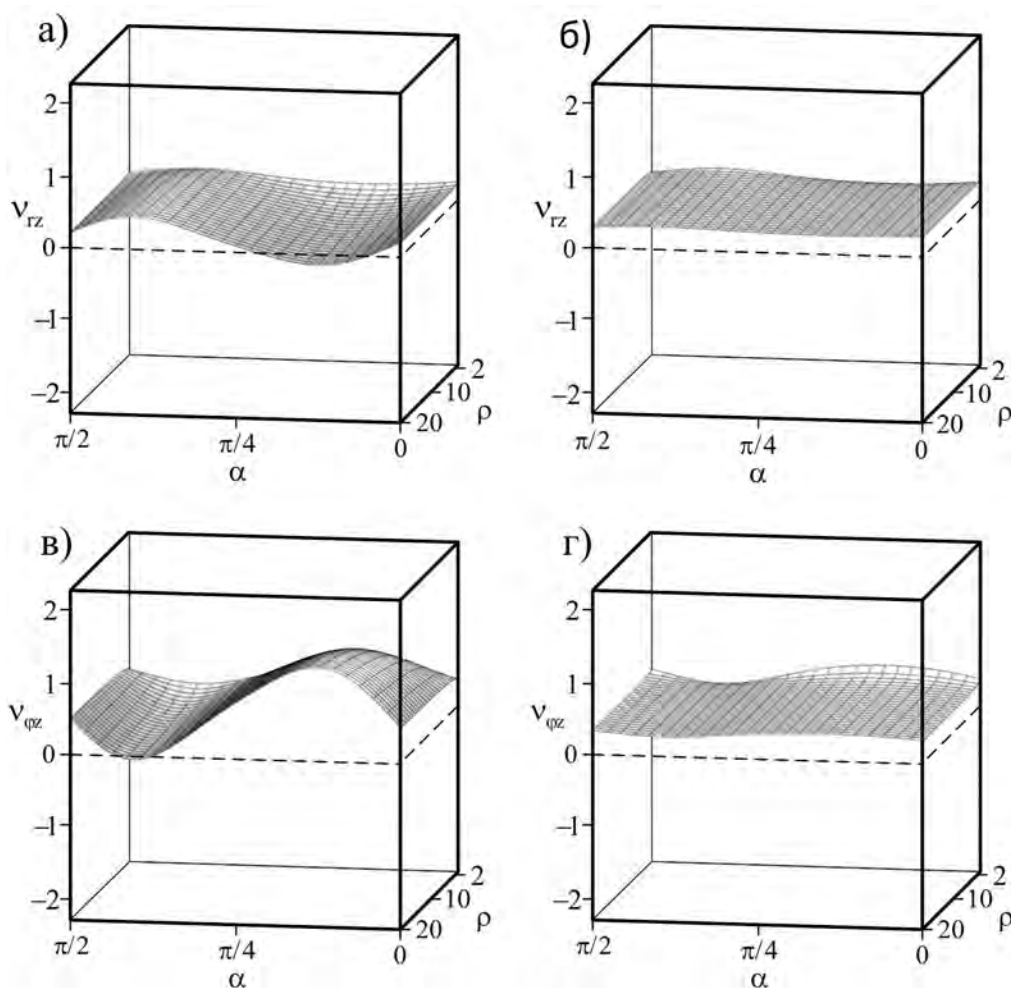


Рис. 2.15: Изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях хиральных нано/микротрубок из $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$.

Численные оценки модуля Юнга для тонкостенной нано/микротрубки показывают, что он может меняться в разы в зависимости от величины угла хиральности. Наибольшее отношение между максимальным и минимальным значениями модуля Юнга наблюдается у нано/микротрубок из $\text{C}(\text{CH}_2\text{OH})_4$ ($E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 7.47$) и $\text{LiY}_{0.5}\text{Tb}_{0.5}\text{F}_4$ ($E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 7.19$). Наименьшее изменение выявляется у $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{O}_4$ ($E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 1.08$) и InPS_4 ($E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 1.10$ и $E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 1.11$ для второго экспериментального набора упругих констант). На Рис.2.18 показано поведение модуля Юнга в функции от угла хиральности для тонкостенных нано/микротрубок ($\rho = 1.01$). Если рассмотреть изменение модуля Юнга в функции от параметра толщины при фиксированном угле хиральности, то он увеличивается по сравнению со случаем тонкостенной трубки. Для большинства материалов увеличение не превосходит 10 %.

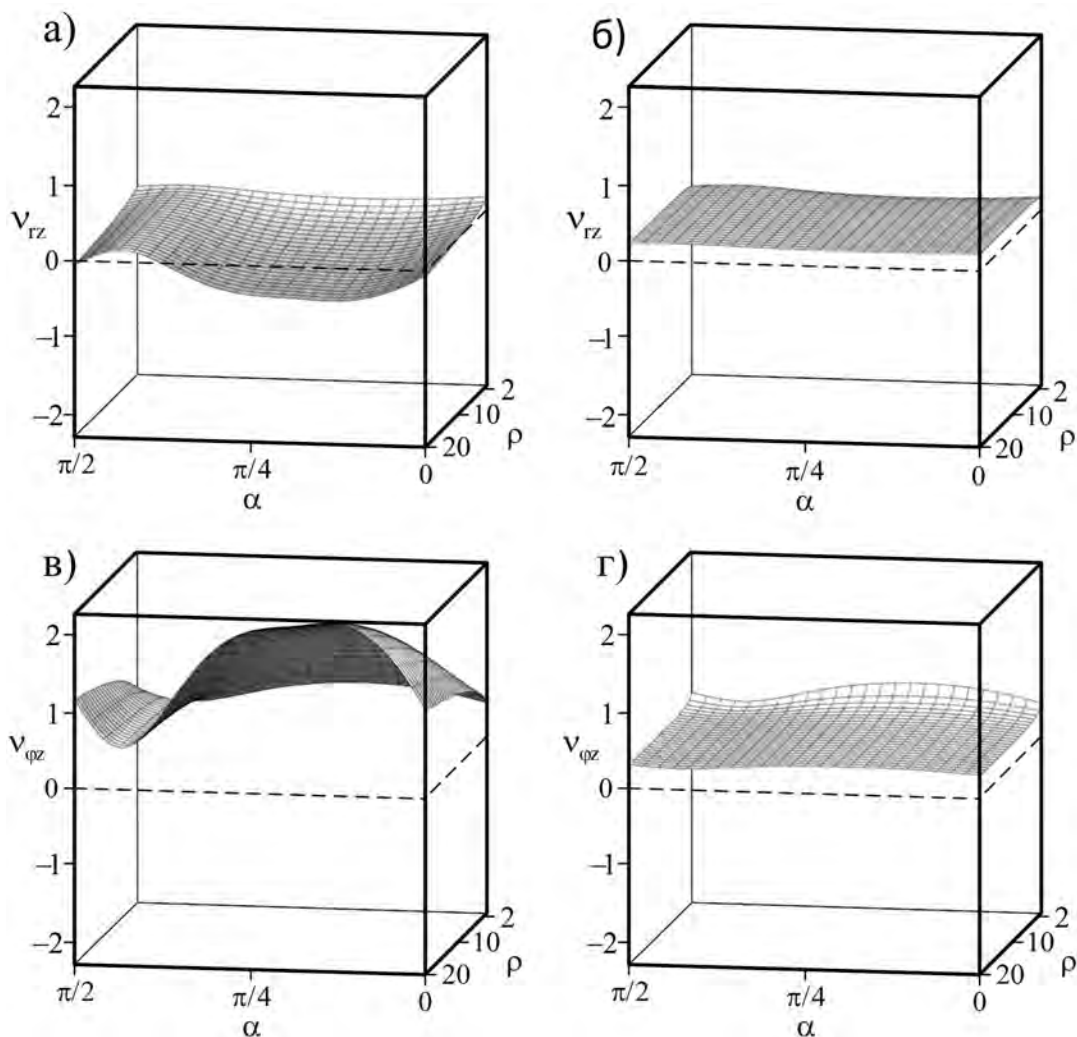


Рис. 2.16: Изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях хиральных нано/микротрубок из LiYF_4 .

2.5. Упругие свойства микро/нанотрубок с семиконстантной ромбоэдрической анизотропией [24]

Прямолинейно-анизотропной пластине при сворачивании соответствует криволинейно анизотропная трубка. Предположим, что перед сворачиванием 7-ми константного ромбоэдрического кристалла он поворачивается вокруг главной оси (оси 3) на угол χ . Это приводит к следующему изменению лишь двух матричных коэффициентов податливости s_{14} , s_{15} на s'_{14} , s'_{15}

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11}, & s'_{12} &= s_{12}, & s'_{13} &= s_{13}, & s'_{33} &= s_{33}, \\ s'_{44} &= s'_{55} = s_{44} = s_{55}, & s'_{66} &= s_{66} = 2(s_{11} - s_{12}), \end{aligned}$$

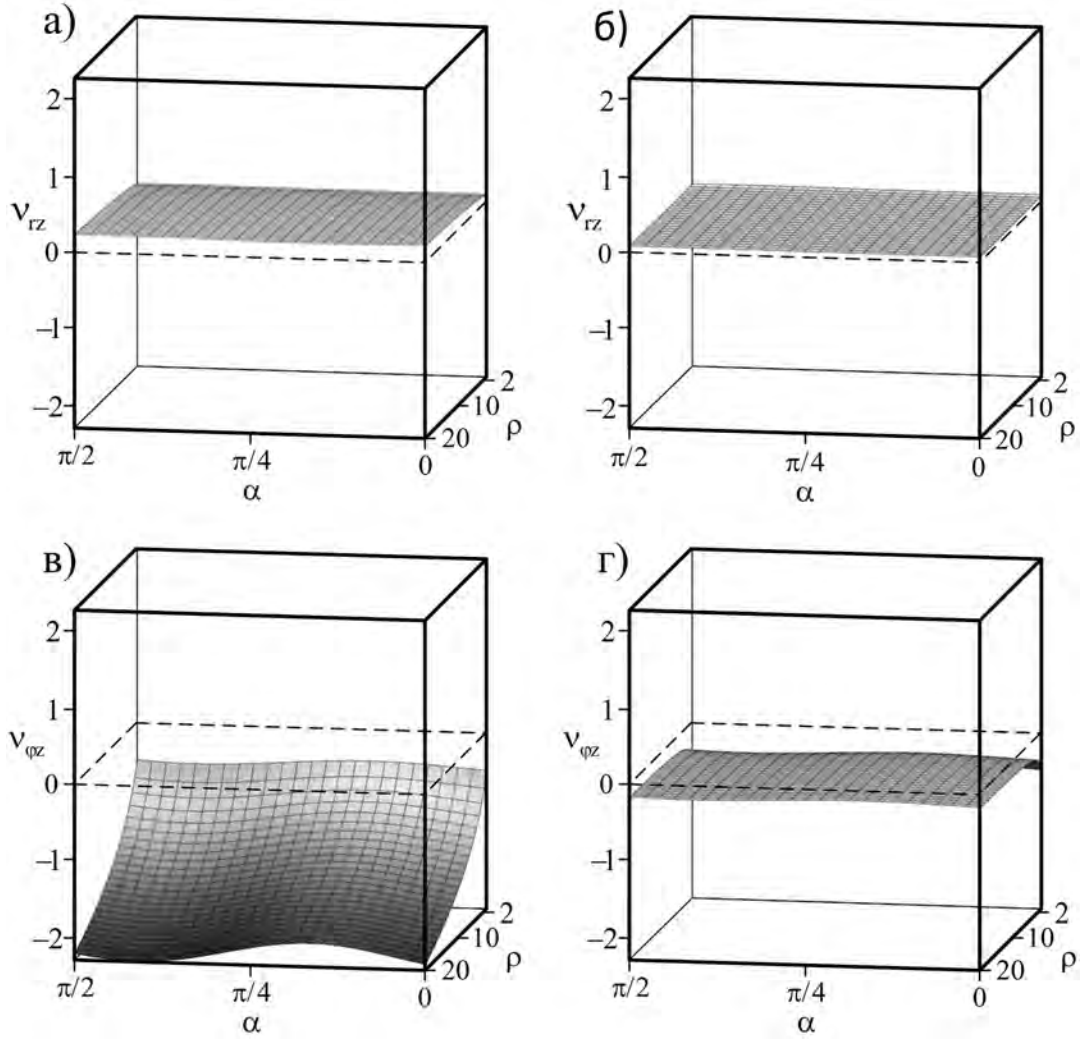


Рис. 2.17: Изменение коэффициентов Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях хиральных нано/микротрубок из $C_{14}H_8O_4$.

$$\begin{aligned} s'_{14} &= s_{14}(4 \cos^3 \chi - 3 \cos \chi) + s_{15}(4 \sin^3 \chi - 3 \sin \chi), \\ s'_{15} &= s_{15}(4 \cos^3 \chi - 3 \cos \chi) - s_{14}(4 \sin^3 \chi - 3 \sin \chi). \end{aligned}$$

Повернутой таким образом пластине будет соответствовать трубка с цилиндрически анизотропной упругостью, характеризуемой законом Гука вида

$$\begin{aligned} u_{zz} &= s_{11}\sigma_{zz} + s_{12}\sigma_{\varphi\varphi} + s_{13}\sigma_{rr} - s_{14}\sigma_{r\varphi} + s_{15}\sigma_{rz}, \\ u_{\varphi\varphi} &= s_{12}\sigma_{zz} + s_{11}\sigma_{\varphi\varphi} + s_{13}\sigma_{rr} + s_{14}\sigma_{r\varphi} - s_{15}\sigma_{rz}, \\ u_{rr} &= s_{13}(\sigma_{zz} + \sigma_{\varphi\varphi}) + s_{33}\sigma_{rr}, \quad 2u_{rz} = s'_{15}(\sigma_{zz} - \sigma_{\varphi\varphi}) + s_{44}\sigma_{r\varphi} - 2s'_{14}\sigma_{\varphi z}, \\ -2u_{r\varphi} &= s'_{14}(\sigma_{zz} - \sigma_{\varphi\varphi}) - s_{44}\sigma_{r\varphi} + 2s'_{15}\sigma_{\varphi z}, \quad -2u_{\varphi z} = 2s'_{15}\sigma_{r\varphi} + 2s'_{14}\sigma_{rz} - s_{66}\sigma_{\varphi z}. \end{aligned}$$

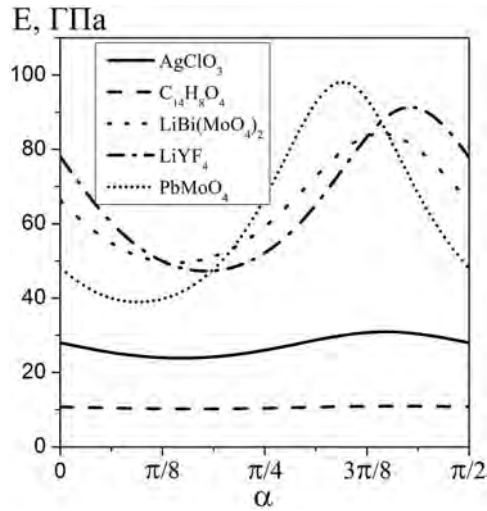


Рис. 2.18: Изменение модуля Юнга от угла хиральности при фиксированном параметре толщины $\rho = 1.01$.

Если рассматривать задачу о продольном растяжении полой круглой трубки под действием удельной силы P при отсутствии скручивающего момента и отсутствии напряжений на боковых поверхностях внутреннего радиуса r_0 и внешнего радиуса $R_0 = \rho r_0$

$$PS = \int \sigma_{zz} dS, \quad M_z = \int \sigma_{\varphi z} r dS = 0,$$

$$\sigma_{rr}|_{r=r_0} = \sigma_{rr}|_{r=R_0} = 0, \quad \sigma_{rz}|_{r=r_0} = \sigma_{rz}|_{r=R_0} = 0, \quad \sigma_{r\varphi}|_{r=r_0} = \sigma_{r\varphi}|_{r=R_0} = 0,$$

то в предположении об осесимметричном радиально-неоднородном распределении напряжений внутри трубки из краевых условий на боковых поверхностях и уравнений равновесия следует

$$\sigma_{r\varphi}(r) = 0, \quad \sigma_{rz}(r) = 0.$$

Это упрощает вышеприведенные соотношения закона Гука. Получающееся из них радиально-неоднородное поле деформаций $u_{rr}(r)$, $u_{\varphi\varphi}(r)$, $u_{zz}(r)$, $u_{r\varphi}(r)$, $u_{rz}(r)$, $u_{\varphi z}(r)$ приводит к однозначным смещениям при дополнительных ограничениях

$$u_{zz}(r) = \varepsilon, \quad u_{\varphi z}(r) = \tau \frac{r}{2},$$

$$\varepsilon = \text{const}, \quad \tau = \text{const}, \quad u_{rr}(r) = \frac{d}{dr} (r u_{\varphi\varphi}(r)),$$

которые вместе с уравнением равновесия и законом Гука позволяют определить радиальное напряжение

$$\sigma_{rr}(r) = \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{11}^2 + s_{13}^2 - s_{12}^2 - s_{11}s_{33}} \varepsilon + \varepsilon \sum_{\pm} A_{\pm} r^{\lambda_{\pm}},$$

$$\lambda_{\pm} = -1 \pm k, \quad k \equiv \sqrt{\frac{s_{11}s_{33} - s_{13}^2}{s_{11}^2 - s_{12}^2}}.$$

и аналогично другие компоненты напряжений $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$, $\sigma_{zz}(r)$, $\sigma_{\varphi z}(r)$. При этом для сдвигового напряжения получается

$$\sigma_{\varphi z}(r) = \tau \frac{r}{2(s_{11} - s_{12})},$$

так что в отсутствие крутящего момента оно исчезает вместе с углом кручения τ .

Для коэффициентов A_+ , A_- из условий отсутствия нормального напряжения σ_{rr} на внутренней и внешней поверхностях трубки находим

$$A_{\pm} = \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{11}^2 + s_{13}^2 - s_{12}^2 - s_{11}s_{33}} \sum_{\pm} \frac{1 - \rho^{-\lambda_{\mp}}}{\rho^{\lambda_{\pm} - \lambda_{\mp}} - 1}.$$

Модуль Юнга $E = P/\varepsilon$ определяется по распределению напряжения $\sigma_{zz}(r)$ из интегрального краевого условия

$$E = \frac{1}{s_{11}} \left(1 - \frac{s_{13}^2 - s_{12}^2}{s_{11}^2 + s_{13}^2 - s_{12}^2 - s_{11}s_{33}} - 2 \sum_{\pm} \frac{s_{13} \pm k s_{12}}{\lambda_{\pm} + 2} A_{\pm} \frac{\rho^{\lambda_{\pm} + 2} - 1}{\rho^2 - 1} \right).$$

Коэффициенты Пуассона определяются по отношениям поперечных деформаций к продольным $-u_{rr}/u_{zz} = \nu_{rz}$, $-u_{\varphi\varphi}/u_{zz} = \nu_{\varphi z}$, и оказываются зависящими от коэффициентов податливости s_{ij} , безразмерной радиальной координаты r/r_0 и отношения внешнего и внутреннего радиусов ρ

$$\nu_{rz} = -\frac{1}{s_{11}} \left[s_{13} + \alpha_1 \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{11}^2 + s_{13}^2 - s_{12}^2 - s_{11}s_{33}} + \sum_{\pm} \alpha_{\pm k} A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}} \right],$$

$$\nu_{\varphi z} = -\frac{1}{s_{11}} \left[s_{12} + \beta_1 \frac{s_{13} - s_{12}}{s_{11}^2 + s_{13}^2 - s_{12}^2 - s_{11}s_{33}} + \sum_{\pm} \beta_{\pm k} A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}} \right].$$

Здесь

$$\alpha_q \equiv s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + q s_{13}(s_{11} - s_{12}), \quad \beta_q \equiv q(s_{11}^2 - s_{12}^2) + s_{13}(s_{11} - s_{12}), \quad q = 1, \pm k.$$

В случае задачи кручения нано/микротрубок линейная радиальная зависимость сдвигового напряжения $\sigma_{\varphi z}(r)$ приводит к простому результату для крутильной жесткости

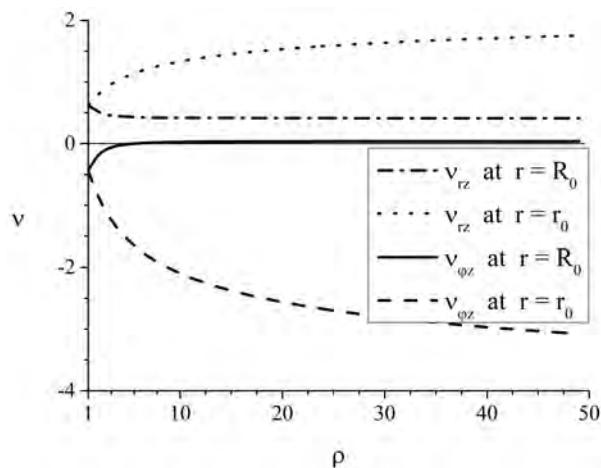


Рис. 2.19: Зависимость величины коэффициентов Пуассона от величины параметра толщины для нано/микротрубок из кристалла SbI_3 .

Таблица 2.6: Коэффициенты Пуассона нано/микротрубок с семиконстантной ромбоэдрической цилиндрической анизотропией.

Трубки из кристаллов	ν_{rz}	$\nu_{\varphi z}$	ρ_{cr} ДЛЯ ν_{rz}		ρ_{cr} ДЛЯ $\nu_{\varphi z}$	
	$\rho - 1 \ll 1$	$\rho - 1 \ll 1$	$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
SbI_3	0.62	-0.44	-	-	-	5.44
Be_2SiO_4	0.23	0.34	-	-	-	-
BiI_3 (83K)	0.31	0.10	-	-	2.08	-
$Ce_2Mg_3(NO_3)_{12} \cdot 24H_2O$	0.27	0.37	-	-	-	-
$CaMg(CO_3)_2$	0.33	0.34	-	-	-	-
$Pb_{4.7}Ba_{0.3}Ge_3O_{11}$	0.15	0.34	33.1	-	-	-
$Pb_5Ge_3O_{11}$	0.13	0.34	24.0	-	-	-
$Pb_5Ge_3O_{11}, s^E$	0.12	0.36	16.5	-	-	-
	0.12	0.36	16.4	-	-	-
$MgSiO_3$	0.12	0.37	24.9	-	-	-

$$C = \frac{M_z}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int \sigma_{\varphi r}(r) r dS = \alpha r_0^4 (\rho^4 - 1), \quad \alpha \equiv \frac{\pi}{4(s_{11} - s_{12})}.$$

Результаты численных оценок коэффициентов Пуассона для нано/микротрубок, использовавших экспериментальные данные по коэффициентам податливости ромбоэдрических кристаллов из [172], представлены в Табл.2.6. На основе результатов по величинам коэффициентов Пуассона тонкостенных трубок ($\rho - 1 \ll 1$) и критическим значениям параметра толщины ρ_{cr} , при которых коэффициент Пуассона имеет нулевую величину, можно видеть, что шесть трубок являются ауксетиками. Рис.2.19 иллюстрирует изменение коэффициентов Пуассона с изменением параметра толщины.

Таблица 2.7: Модуль Юнга нано/микротрубок с семиконстантной ромбоэдрической анизотропией.

Трубки из кристаллов	E , ГПа		Трубки из кристаллов	E , ГПа	
	$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$		$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$
SbI_3	9.45	11.7	$\text{Pb}_{4.7}\text{Ba}_{0.3}\text{Ge}_3\text{O}_{11}$	56.8	57.3
Be_2SiO_4	260	261	$\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$	57.1	57.7
BiI_3 (83K)	25.1	25.3	$\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}, s^E$	56.5	57.3
$\text{Ce}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12} \cdot 24\text{H}_2\text{O}$	15.9	15.9		55.7	56.5
$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$	142	142	MgSiO_3	385	390

В Табл.2.7 приведены численные значения модуля Юнга для тонкостенных трубок ($\rho - 1 \ll 1$) и для толстостенных трубок с отношением внешнего и внутреннего диаметров $\rho = 10$. Влияние параметра толщины на модуль Юнга 7-ми константных ромбоэдрических нано/микротрубок невелико. Значение модуля Юнга при $\rho = 10$ лишь на проценты и доли процентов превышает таковые в случае тонкостенных трубок. Наибольшими значениями модуля Юнга для нано/микротрубок (с $E_{\min} > 250$ ГПа) обладают трубки из кристаллов Be_2SiO_4 и MgSiO_3 .

Таблица 2.8: Параметр жесткости кручения α для 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов.

Трубки из кристаллов	α , ГПа	Трубки из кристаллов	α , ГПа
SbI_3	13.3	$\text{Pb}_{4.7}\text{Ba}_{0.3}\text{Ge}_3\text{O}_{11}$	33.4
Be_2SiO_4	153	$\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$	33.6
BiI_3 (83K)	18.0	$\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}, s^E$	32.6
$\text{Ce}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12} \cdot 24\text{H}_2\text{O}$	9.13		32.2
$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$	83.2	MgSiO_3	220

В Табл.2.8 приведены численные значения коэффициента α , характеризующего крутильную жесткость нано/микротрубок из 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов. Из этой таблицы ясно, что наибольшей крутильной жесткостью должны обладать нано/микротрубки из кристаллов Be_2SiO_4 и MgSiO_3 .

2.6. Упругие свойства микро/нанотрубок с орторомбической анизотропией [32]

2.6.1. От прямолинейно-анизотропных орторомбических кристаллов к цилиндрически анизотропным нано/микротрубкам

Будем предполагать, что главная кристаллографическая ось орторомбического кристалла тонкой пластины (ось 3) является перпендикулярной плоскости пластины. Пусть пластина сворачивается в цилиндрическую трубку так, что ось 3 переходит в радиальную ось трубки, а другая кристаллографическая ось, повернутая в плоскости пластины на угол χ , соответствует продольной оси трубки (см. Рис.2.6). Образующаяся криволинейно-анизотропная трубка в силу отклонения ее оси от кристаллографического направления на хиральный угол χ обладает меньшей симметрией, чем исходный кристалл. Ее симметрия соответствует симметрии кристалла моноклинной системы с матрицей коэффициентов податливости вида

$$\|s'_{ij}\| = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & 0 & s'_{16} \\ s'_{12} & s'_{22} & s'_{23} & 0 & 0 & s'_{26} \\ s'_{13} & s'_{23} & s'_{33} & 0 & 0 & s'_{36} \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & s'_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{45} & s'_{55} & 0 \\ s'_{16} & s'_{26} & s'_{36} & 0 & 0 & s'_{66} \end{pmatrix}.$$

Тринадцать коэффициентов податливости s'_{11} , s'_{12} , s'_{22} , s'_{13} , s'_{23} , s'_{33} , s'_{44} , s'_{55} , s'_{66} , s'_{45} , s'_{16} , s'_{26} , s'_{36} зависят от хирального угла χ и исходных девяти коэффициентов податливости s_{ij} следующим образом

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11} + \delta_2 \sin^4 \chi - 2\delta_1 \sin^2 \chi \cos^2 \chi, & s'_{22} &= s_{22} - \delta_2 \sin^4 \chi - 2\delta_1 \sin^2 \chi \cos^2 \chi, \\ s'_{33} &= s_{33}, & s'_{12} &= s_{12} + (2\delta_1 + \delta_2) \sin^2 \chi \cos^2 \chi, & s'_{13} &= s_{13} + (s_{23} - s_{13}) \sin^2 \chi, \\ s'_{23} &= s_{23} + (s_{13} - s_{23}) \sin^2 \chi, & s'_{44} &= s_{44} + (s_{55} - s_{44}) \sin^2 \chi, \\ s'_{55} &= s_{55} + (s_{44} - s_{55}) \sin^2 \chi, & 2s'_{45} &= (s_{44} - s_{55}) \sin 2\chi, \\ s'_{36} &= (s_{23} - s_{13}) \sin 2\chi, & s'_{16} &= (-\delta_1 \cos 2\chi + \delta_2 \sin^2 \chi) \sin 2\chi, \\ s'_{26} &= (\delta_1 \cos 2\chi + \delta_2 \cos^2 \chi) \sin 2\chi, & s'_{66} &= s_{66} + (2\delta_1 + \delta_2) \sin^2 2\chi, \\ 2\delta_1 &\equiv 2s_{11} - 2s_{12} - s_{66}, & \delta_2 &\equiv s_{22} - s_{11}. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Из этих формул очевидна периодичность s'_{11} , s'_{22} , s'_{13} , s'_{23} , s'_{44} , s'_{55} по χ с периодом π и периодичность s'_{12} , s'_{16} , s'_{26} , s'_{36} , s'_{45} , s'_{66} по χ с периодом $\pi/2$.

Криволинейно - анизотропная упругость нано/микротрубок при этом характеризуется уравнениями линейного закона Гука вида

$$\begin{aligned}
 u_{zz} &= s'_{11}\sigma_{zz} + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13}\sigma_{rr} - s'_{16}\sigma_{\varphi z}, \\
 u_{\varphi\varphi} &= s'_{12}\sigma_{zz} + s'_{22}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{23}\sigma_{rr} - s'_{26}\sigma_{\varphi z}, \\
 u_{rr} &= s'_{13}\sigma_{zz} + s'_{23}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{33}\sigma_{rr} - s'_{36}\sigma_{\varphi z}, \\
 2u_{\varphi z} &= s'_{66}\sigma_{\varphi z} - s'_{16}\sigma_{zz} - s'_{26}\sigma_{\varphi\varphi} - s'_{36}\sigma_{rr}, \\
 2u_{rz} &= s'_{55}\sigma_{rz} - s'_{45}\sigma_{\varphi r}, \quad 2u_{r\varphi} = -s'_{45}\sigma_{rz} + s'_{44}\sigma_{\varphi r}.
 \end{aligned}$$

2.6.2. Растяжение и кручение нано/микротрубок из ортомбических кристаллов

Рассмотрим задачу о растяжении и кручении криволинейно - анизотропной полой нано/микротрубки из орторомбического кристалла. Пусть на торцах трубки граничные условия задаются в осредненном (интегральном) смысле Сен-Венана, а именно, с помощью полной растягивающей силой P_z и крутящим моментом M_z

$$P_z = \int \sigma_{zz} dS, \quad M_z = \int \sigma_{\varphi z} r dS. \quad (2.35)$$

На боковых поверхностях (внутренней при $r = r_0$ и внешней при $r = R_0 = r_0\rho$) предполагаются условия отсутствия напряжений σ_{rz} , $\sigma_{r\varphi}$.

В предположении об осесимметричном радиально-неоднородном напряженном состоянии $\sigma_{rr}(r)$, $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$, $\sigma_{zz}(r)$, $\sigma_{r\varphi}(r)$, $\sigma_{rz}(r)$, $\sigma_{\varphi z}(r)$ уравнения равновесия принимают вид

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r) = \frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}(r)), \quad (2.36)$$

$$\frac{d}{dr}(r\sigma_{rz}(r)) = 0, \quad \frac{d}{dr}(r^2\sigma_{r\varphi}(r)) = 0. \quad (2.37)$$

Из двух уравнений (2.37) и нулевых краевых условий для $\sigma_{rz}(r)$ и $\sigma_{r\varphi}(r)$ на боковых поверхностях трубки следует

$$\sigma_{r\varphi}(r) = \sigma_{rz}(r) = 0.$$

Это свою очередь приводит к упрощению уравнений закона Гука, содержащих теперь три нормальных напряжения $\sigma_{rr}(r)$, $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$, $\sigma_{zz}(r)$ и одно сдвиговое напряжение $\sigma_{\varphi z}(r)$,

$$\begin{aligned}
 u_{zz}(r) &= s'_{11}\sigma_{zz}(r) + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{13}\sigma_{rr}(r) - s'_{16}\sigma_{\varphi z}(r), \\
 u_{\varphi\varphi}(r) &= s'_{12}\sigma_{zz}(r) + s'_{22}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{23}\sigma_{rr}(r) - s'_{26}\sigma_{\varphi z}(r), \\
 u_{rr}(r) &= s'_{13}\sigma_{zz}(r) + s'_{23}\sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{33}\sigma_{rr}(r) - s'_{36}\sigma_{\varphi z}(r) \\
 2u_{\varphi z}(r) &= s'_{66}\sigma_{\varphi z}(r) - s'_{16}\sigma_{zz}(r) - s'_{26}\sigma_{\varphi\varphi}(r) - s'_{36}\sigma_{rr}(r), \\
 u_{rz} &= 0, \quad u_{r\varphi} = 0.
 \end{aligned} \quad (2.38)$$

Деформации также оказываются радиально-неоднородными согласно этим уравнениям. Они позволяют в соответствии с дифференциальными связями со смещениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r(r, \varphi, z)}{\partial r} &= u_{rr}(r), & \frac{\partial u_z(r, \varphi, z)}{\partial z} &= u_{zz}(r), \\ \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi(r, \varphi, z)}{\partial \varphi} + \frac{u_r(r, \varphi, z)}{r} &= u_{\varphi\varphi}(r), & \frac{1}{r} \frac{\partial u_r(r, \varphi, z)}{\partial \varphi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\varphi(r, \varphi, z)}{r} \right) &= 0, \\ \frac{\partial u_\varphi(r, \varphi, z)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z(r, \varphi, z)}{\partial \varphi} &= 2u_{\varphi z}(r), & \frac{\partial u_r(r, \varphi, z)}{\partial z} + \frac{\partial u_z(r, \varphi, z)}{\partial r} &= 0 \end{aligned}$$

получить однозначные смещения при выполнении следующих ограничений

$$\begin{aligned} u_{rr}(r) &= \varepsilon, & u_{zz}(r) &= \frac{d}{dr}(ru_{\varphi\varphi}(r)), & 2u_{\varphi z}(r) &= \tau r, \\ \varepsilon &= \text{const}, & \tau &= \text{const}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Условия (2.39) вместе с уравнением равновесия (2.36) и уравнениями закона Гука (2.38) позволяют выразить все искомые напряжения через одну компоненту $\sigma_{rr}(r)$, которая удовлетворяет дифференциальному уравнению второго порядка

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} (r \sigma_{rr}(r)) \right) = a_0 \sigma_{rr}(r) + a_1 (1 - a_0) \varepsilon + a_2 (4 - a_0) \tau r. \quad (2.40)$$

Здесь a_0, a_1, a_2 представляют собой комбинации из девяти эффективных коэффициентов податливости $s'_{11}, s'_{12}, s'_{22}, s'_{13}, s'_{33}, s'_{16}, s'_{26}, s'_{36}, s'_{66}$

$$\begin{aligned} a_0 &\equiv \frac{t_{11}t_{33} - t_{13}^2}{t_{11}t_{22} - t_{12}^2}, & a_1 &\equiv \frac{t_{13} - t_{12}}{t_{11}(t_{22} - t_{33}) + t_{13}^2 - t_{12}^2}, \\ a_2 &\equiv \frac{1}{s'_{66}} \frac{s'_{16}(t_{13} - 2t_{12}) + (2s'_{26} - s'_{36})t_{11}}{t_{11}(4t_{22} - t_{33}) + t_{13}^2 - 4t_{12}^2}, & t_{mn} &\equiv s'_{mn} - \frac{s'_{m6}s'_{n6}}{s'_{66}}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Решение уравнения (2.40) для компоненты напряжения $\sigma_{rr}(r)$ имеет степенной вид

$$\sigma_{rr}(r) = a_1 \varepsilon + a_2 \tau r_0 \left(\frac{r}{r_0} \right) + \sum_{\pm} A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}, \quad \lambda_{\pm} = -1 \pm \sqrt{a_0}. \quad (2.42)$$

Остальные компоненты напряжений имеют аналогичную структуру. Пользуясь уравнением равновесия (2.36), законом Гука (2.38) и дополнительными условиями, находим

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi\varphi}(r) &= a_1 \varepsilon + 2a_2 \tau r_0 \left(\frac{r}{r_0} \right) + \sum_{\pm} (1 + \lambda_{\pm}) A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}, \\ t_{11} \sigma_{zz}(r) &= [1 - a_1(t_{12} + t_{13})] \varepsilon + \left[\frac{s'_{16}}{s'_{66}} - a_2(2t_{12} + t_{13}) \right] \tau r_0 \left(\frac{r}{r_0} \right) - \\ &\quad - \sum_{\pm} [t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_{\pm})] A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned}
 s'_{66}\sigma_{\varphi z}(r) &= \left[\frac{s'_{16}}{t_{11}} + a_1 \left(s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \varepsilon + \\
 &+ \left[1 + \frac{(s'_{16})^2}{s'_{66}t_{11}} + a_2 \left(2s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \tau r_0 \left(\frac{r}{r_0} \right) + \\
 &+ \sum_{\pm} \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}.
 \end{aligned}$$

Полученные степенные представления компонент напряжений содержат четыре параметра ε , τ , A_+ , A_- . Отсутствие напряжений на внутренней и внешней стенках цилиндрических трубок позволяют выразить A_+ , A_- через два ε , τ следующим образом

$$A_+ = a_1 \frac{\rho^{\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \varepsilon + a_2 \frac{\rho^{\lambda_-} - \rho}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \tau r_0, \quad A_- = a_1 \frac{1 - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \varepsilon + a_2 \frac{\rho - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \tau r_0. \quad (2.44)$$

Здесь $\rho = R_0/r_0$ характеризует отношение внешнего радиуса цилиндра к внутреннему радиусу.

При ограничении случаем продольного растяжения нано/микротрубок свободным от крутящего момента ($M_z = 0$) получаем линейную связь между ε и τ . Интегрирование $r\sigma_{\varphi z}(r)$ по площади торцевого сечения и приравнивание результата нулю дает

$$\begin{aligned}
 \tau r_0 &= \Lambda \varepsilon, \quad \Lambda = -\frac{\Lambda_1}{\Lambda_2}, \quad (2.45) \\
 \Lambda_1 &= \frac{s'_{16}}{t_{11}} \frac{\rho^3 - 1}{3} + a_1 \left\{ \left(s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \frac{\rho^3 - 1}{3} + \right. \\
 &+ \sum_{\pm} \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] \frac{\rho^{\lambda_{\pm}+3} - 1}{\lambda_{\pm} + 3} \frac{\rho^{\lambda_{\mp}} - 1}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}} \left. \right\}, \\
 \Lambda_2 &= \left(1 + \frac{(s'_{16})^2}{s'_{66}t_{11}} \right) \frac{\rho^4 - 1}{4} + a_2 \left\{ \left(2s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \frac{\rho^4 - 1}{4} + \right. \\
 &+ \sum_{\pm} \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] \frac{\rho^{\lambda_{\pm}+3} - 1}{\lambda_{\pm} + 3} \frac{\rho^{\lambda_{\mp}} - \rho}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}} \left. \right\}.
 \end{aligned}$$

Здесь (см. также (2.34), (2.41), (2.42)) безразмерный коэффициент пропорциональности Λ зависит от относительной толщины стенки трубки $\rho - 1$, безразмерных комбинаций семи коэффициентов податливости s_{11} , s_{12} , s_{22} , s_{13} , s_{23} , s_{33} , s_{66} и угла хиральности χ . При этом зависимость от угла хиральности является нечетной. В частности, при $\chi = 0$ связь между продольной деформацией и углом кручения исчезает.

Модуль Юнга можно теперь найти как отношение удельной продольной силы P_z/S к продольной деформации ε . Продольная сила получается согласно (2.35) интегрированием напряжения $\sigma_{zz}(r)$ по площади поперечного сечения трубки. Используя (2.43) - (2.45), находим

$$E = \frac{1}{t_{11}} - a_1 \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} + \frac{2}{3} \Lambda \left(\frac{s'_{16}}{s'_{66} t_{11}} - a_2 \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \frac{\rho^3 - 1}{\rho^2 - 1} - 2 \sum_{\pm} \frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_{\pm})}{t_{11}} \frac{a_1(\rho^{\lambda_{\mp}} - 1) + \Lambda a_2(\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}})} \frac{\rho^{\lambda_{\pm} + 2} - 1}{\lambda_{\pm} + 2}.$$

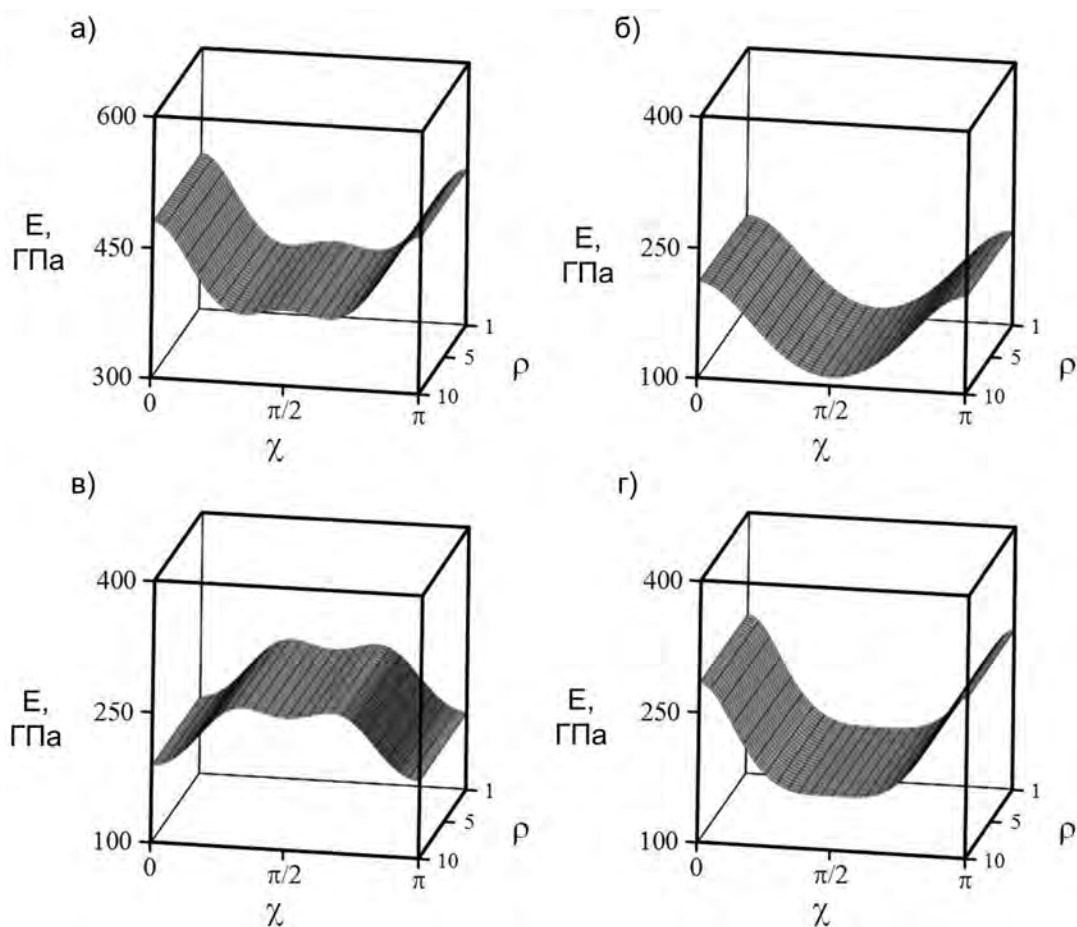


Рис. 2.20: Поверхности модулей Юнга для нано/микротрубок из монокристаллов BeAl_2O_4 (а), Fe_2SiO_4 (б), Al_2SiO_5 (в), Mg_2GeO_4 (г).

Детальные численные расчеты модулей Юнга нано/микротрубок всех орторомбических кристаллов из [172] указывают на сильную их зависимость от угла хиральности χ . Это иллюстрирует Рис.2.20, отражающий зависимости модулей Юнга от указанных параметров для частных случаев нано/микротрубок из кристаллов BeAl_2O_4 (а), Fe_2SiO_4 , synthetic (б), Al_2SiO_5 (andalusite) (в), Mg_2GeO_4 (г), а также Табл.2.9, в которой собраны результаты для тонкостенные нано/микротрубок с

Таблица 2.9: Модули Юнга большой величины ($E_{\max} > 200$ ГПа) для тонкостенных ($\rho - 1 \ll 1$) нано/микротрубок из орторомбических кристаллов при углах хиральности $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$.

Трубки из кристаллов	E (ГПа), $\chi=0$	E (ГПа), $\chi = \pi/2$
BeAl2O4	478	386
(Fe,Mg) ₂ (Al,Fe ³⁺) ₉ O ₆ SiO ₄ (O,OH) ₂	313	73
Mg ₂ SiO ₄	297	171
(Mg ₉₂ Fe ₈) ₂ SiO ₄	292	170
(Mg _{92.71} Fe _{7.24} Mn _{0.04}) ₂ SiO ₄	292	170
(Mg ₉₃ F ₇) ₂ SiO ₄	291	167
(Mg ₈₉ Fe ₁₁ La _{0.1} Ni _{0.4} Mn _{0.1}) ₂ SiO ₄	286	164
Mg ₂ GeO ₄	282	161
Ni ₂ SiO ₄	270	175
Al ₂ SiO ₅ (Silimanite)	242	153
Co ₂ SiO ₄	240	138
Al(F,OH) ₂ SiO ₄	226	283
Fe ₂ SiO ₄ (synthetic), s^S	207	110
Fe ₂ SiO ₄	207	110
	204	120
CaB ₂ Si ₂ O ₄ (Datolite)	201	140
CaB ₂ Si ₂ O ₄	117	208
Al ₂ SiO ₅ (Andalusite)	108	251

максимальной величиной модуля Юнга, превосходящей 200 ГПа при $\chi = 0$ и/или $\chi = \pi/2$. Зависимости такого вида являются типичными. С увеличением масштабного параметра ρ имеет место монотонный рост модуля Юнга нано/микротрубок. При этом около одной трети всех нано/микротрубок обнаруживают более чем двукратное изменение модуля Юнга при изменении ρ от 1.01 до 10. Для десятка нано/микротрубок при таком изменении параметра толщины модуль Юнга меняется более чем в четыре раза, как видно из Табл.2.10.

Пользуясь законом Гука (2.38), формулами для компонент напряжений (2.42), (2.43) и соотношением (2.45), можно получить следующие выражения для радиального коэффициента Пуассона $\nu_{rz} = -u_{zz}(r)/\varepsilon$ и углового коэффициента Пуассона $\nu_{\varphi z} = -u_{\varphi\varphi}(r)/\varepsilon$

Таблица 2.10: Минимальные и максимальные значения модуля Юнга нано/микротрубок из орторомбических кристаллов с $E_{\max}/E_{\min} > 4$ при $1.01 \leq \rho \leq 10$ и $0 \leq \chi \leq \pi/2$.

Трубки из кристаллов	E_{\min} (ГПа)	ρ_{\min}	χ_{\min}	E_{\max} (ГПа)	ρ_{\max}	χ_{\max}
$(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COO}\cdot(\text{CH})_2(\text{COOH})_2$	2.92	1.01	0.26π	37.0	10	0.00
$\text{SC}(\text{NH}_2)_2$	2.09	1.01	0.24π	24.7	10	0.5π
	2.39	1.01	0.24π	23.8	10	0.5π
Cu-14 wt% Al-3.0 wt% Ni	22.3	1.01	0.5π	168	10	0.2π
CaSO_4	32.4	1.01	0.24π	175	10	0.5π
$\text{Ca}(\text{COOH})_2$	11.8	1.01	0.5π	53.2	10	0.23π
I	3.05	1.01	0.00	50.9	10	0.34π
$(\text{Fe,Mg})_2(\text{Al,Fe}^{3+})_9\text{O}_6\text{SiO}_4(\text{O,OH})_2$	73.0	1.01	0.5π	313	10	0.00
$\text{Cd}(\text{COOH})_2$	8.06	1.01	0.5π	33.9	10	0.21π
$(\text{CD})_4\text{N}_2$	4.88	1.01	0.29π	19.7	10	0.00

$$\begin{aligned}
 -\nu_{rz} = & \frac{t_{13}}{t_{11}} + a_1 \left(t_{23} + t_{33} - t_{13} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) + \\
 & + \Lambda \left[\frac{s'_{16}t_{13}}{s'_{66}t_{11}} - \frac{s'_{36}}{s'_{66}} + a_2 \left(2t_{23} + t_{33} - t_{13} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \left(\frac{r}{r_0} \right) + \\
 & + \sum_{\pm} \left[t_{33} - \frac{t_{13}^2}{t_{11}} + \left(t_{23} - \frac{t_{13}t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] \frac{a_1(\rho^{\lambda_{\mp}} - 1) + \Lambda a_2(\rho^{\lambda_{\mp}} - \rho)}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -\nu_{\varphi z} = & \frac{t_{12}}{t_{11}} + a_1 \left(t_{22} + t_{23} - t_{12} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) + \\
 & + \Lambda \left[\frac{s'_{16}t_{12}}{s'_{66}t_{11}} - \frac{s'_{26}}{s'_{66}} + a_2 \left(2t_{22} + t_{23} - t_{12} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \left(\frac{r}{r_0} \right) + \\
 & + \sum_{\pm} \left[t_{23} - \frac{t_{12}t_{13}}{t_{11}} + \left(t_{22} - \frac{t_{12}^2}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] \frac{a_1(\rho^{\lambda_{\mp}} - 1) + \Lambda a_2(\rho^{\lambda_{\mp}} - \rho)}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}.
 \end{aligned}$$

Оба коэффициента Пуассона оказываются зависящими от радиальной координаты r , относительной толщины стенок полых трубок $(\rho - 1)$, коэффициентов податливости s_{ij} и угла хиральности χ .

Численные расчеты коэффициентов Пуассона для нано/микротрубок из орторомбических кристаллов были выполнены с использованием приведенных формул и экспериментальных данных об упругих постоянных таких кристаллов, собранных в справочнике [172]. На Рис.2.21 изображены поверхности коэффициентов Пуассона для нано/микротрубок из PbBr_2 в зависимости от параметра толщины

Таблица 2.11: Коэффициенты Пуассона тонкостенных нано/микротрубок из орторомбических кристаллов при нулевом угле хиральности, и критические значения отношения радиусов ρ_{cr} для ауксетических трубок в диапазоне параметра толщины $1 < \rho < 2$.

Трубки из кристаллов	ν_{rz}	$\nu_{\varphi z}$	ρ_{cr} ДЛЯ ν_{rz}		ρ_{cr} ДЛЯ $\nu_{\varphi z}$	
	при $\rho - 1 \ll 1$		при $r = r_0$	при $r = R_0$	при $r = r_0$	при $r = R_0$
$\text{NH}_4\text{B}_5\text{O}_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	-0.02	0.72	-	1.80	-	-
BaMnF_4, s^E	0.87	-0.05	-	-	-	1.11
$\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_2$	0.07	0.60	1.33	-	-	-
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{CO}$	-0.02	0.55	-	1.13	-	-
$(\text{CH}_3)\text{NCH}_2\text{COO} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	0.07	0.74	1.42	-	-	-
$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.00	0.74	-	1.01	-	-
$\text{C}_6\text{H}_4(\text{NO}_2)_2$	0.01	0.55	1.21	-	-	-
In_4Se_3	0.47	0.00	-	-	1.02	-
HIO_3	0.40	0.01	-	-	1.05	-
	0.51	0.05	-	-	1.25	-
DIO_3	0.51	0.05	-	-	1.25	-
<i>N</i> -Isopropylcarbazole	-0.16	0.82	-	1.86	-	-
PbBr_2	0.55	0.09	-	-	1.40	-
LiHSeO_3	0.39	0.11	-	-	1.89	-
NaBF_4 (293 K)	-0.01	0.34	-	1.16	-	-
$[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{ZnCl}_4$	0.09	0.55	1.95	-	-	-
$\text{SC}(\text{NH}_2)_2$	0.39	0.07	-	-	1.46	-
	0.37	0.02	-	-	1.13	-
$(\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{CaCl}_2$	-0.07	0.52	-	1.98	-	-
$\alpha\text{-U}$	-0.02	0.24	-	1.42	-	-

и угла хиральности. Численный анализ показал, что наибольшее изменение значений коэффициентов Пуассона наблюдается на внутренней поверхности трубок. В частном случае нулевого угла хиральности ($\chi = 0$) количество ауксетических нано/микротрубок из орторомбических кристаллов оказалось превосходящим более, чем вдвое количество ауксетиков среди прямолинейно-анизотропных орторомбических кристаллов. При этом число нано/микротрубок с отрицательным угловым коэффициентом Пуассона $\nu_{\varphi z}$ сопоставимо с числом трубок с отрицательным радиальным коэффициентом Пуассона ν_{rz} . Не обнаружено случаев с отрицательными обоими коэффициентами одновременно. При угле хиральности $\chi = \pi/2$ ауксетиков среди нано/микротрубок становится еще на десяток больше. В этом случае также не обнаружено ауксетических нано/микротрубок с $\nu_{rz} < 0$ и $\nu_{\varphi z} < 0$ одновременно.

Таблица 2.12: Коэффициенты Пуассона тонкостенных нано/микротрубок из орторомбических кристаллов при ненулевом угле хиральности $\chi = \pi/2$, и критические значения отношения радиусов ρ_{cr} для ауксетических трубок в диапазоне параметра толщины $1 < \rho < 2$.

Трубки из кристаллов	ν_{rz}	$\nu_{\varphi z}$	ρ_{cr} ДЛЯ ν_{rz}		ρ_{cr} ДЛЯ $\nu_{\varphi z}$	
	при $\rho - 1 \ll 1$		при $r = r_0$	при $r = R_0$	при $r = r_0$	при $r = R_0$
BaMnF ₄ , s^E	0.53	-0.03	-	-	-	1.11
(CH ₃)NCH ₂ COO·CaCl ₂ ·2H ₂ O	0.68	0.09	-	-	1.30	-
Ca(COOH) ₂	0.09	0.46	1.87	-	-	-
C ₁₂ H ₉ N-C ₆ H ₃ (NO ₂) ₃ , s^D	0.49	0.09	-	-	1.52	-
C ₈ SCN	0.01	0.40	1.12	-	-	-
C ₅ H ₁₀ ClNO	0.06	0.58	1.81	-	-	-
In ₄ Se ₃	0.34	0.01	-	-	1.05	-
HIO ₃	0.38	0.01	-	-	1.04	-
	0.34	0.04	-	-	1.30	-
DIO ₃	0.34	0.04	-	-	1.30	-
PbBr ₂	0.47	0.11	-	-	1.67	-
LiGaO ₂ , s^E	0.22	0.05	-	-	1.76	-
C ₆ H ₄ COOHCOOK	0.06	0.38	1.69	-	-	-
KB ₅ O ₈ ·4H ₂ O	0.82	0.14	-	-	1.47	-
AgTlSe	1.00	-0.32	-	-	-	1.82
(Fe,Mg) ₂ (Al,Fe ³⁺) ₉ O ₆ SiO ₄ (O,OH) ₂	0.85	0.04	-	-	1.11	-
TbF ₃	-0.02	0.59	-	1.11	-	-
Tb ₂ (MoO ₄) ₃ , s^E	0.42	0.12	-	-	1.85	-

В Табл.2.11 из 115 ауксетических нано/микротрубок нулевой хиральности приведены лишь те, для которых отрицательность коэффициентов Пуассона проявляется в диапазоне $1 < \rho < 2$. В ней показаны значения ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для тонкостенных трубок с $\rho - 1 \ll 1$ и критические значения параметра толщины ρ_{cr} , характеризующие смену знака коэффициентов Пуассона на внутренней и внешней поверхностях трубок. Несколько другой список ауксетических трубок ненулевой хиральности ($\chi = \pi/2$) приведен при том же условии $1 < \rho < 2$ в виде Табл.2.12.

Рассмотрим теперь случай кручения нано/микротрубок под действием крутящего момента M_z в отсутствие продольной растягивающей силы ($P_z = 0$). Интегрирование $\sigma_{zz}(r)$ по площади торцевого сечения трубки и приравнивание результата нулю дает следующее соотношение связи угла кручения τ и продольной деформации ε

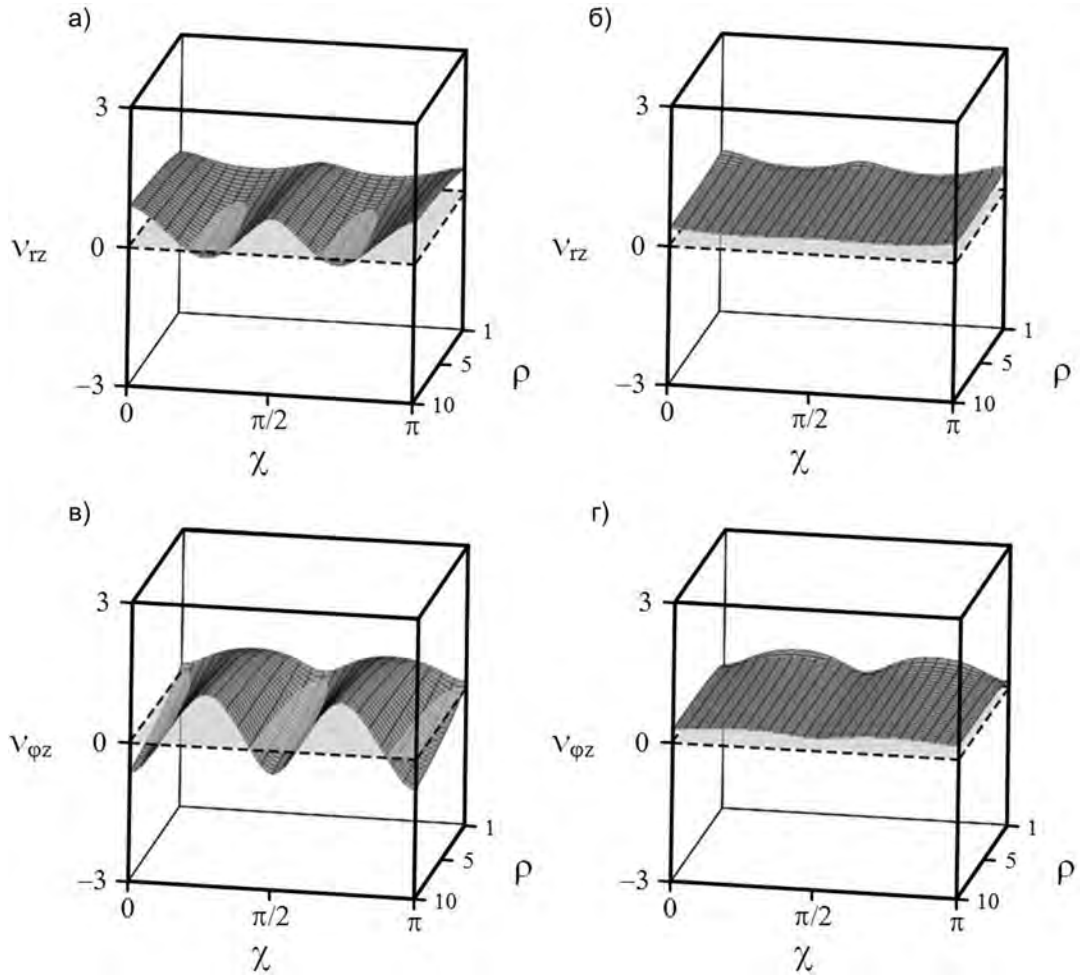


Рис. 2.21: Поверхности коэффициента Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и $\nu_{\varphi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях для нано/микротрубок из PbBr_2 .

$$\varepsilon = \Gamma \tau r_0, \quad \Gamma = -\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2}, \quad (2.46)$$

$$\Gamma_1 = \left[\frac{s'_{16}}{s'_{66}} - a_2(t_{13} + 2t_{12}) \right] \frac{\rho^3 - 1}{3} - a_2 \sum_{\pm} [t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_{\pm})] \frac{\rho^{\lambda_{\pm}+2} - 1}{\lambda_{\pm} + 2} \frac{\rho^{\lambda_{\mp}} - \rho}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}},$$

$$\Gamma_2 = [1 - a_1(t_{12} + t_{13})] \frac{\rho^2 - 1}{2} - a_1 \sum_{\pm} [t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_{\pm})] \frac{\rho^{\lambda_{\pm}+2} - 1}{\lambda_{\pm} + 2} \frac{\rho^{\lambda_{\mp}} - 1}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}}.$$

Безразмерный коэффициент пропорциональности Γ зависит от относительной толщины стенки трубки $\rho - 1$, безразмерных комбинаций семи коэффициентов податливости s_{11} , s_{12} , s_{22} , s_{13} , s_{23} , s_{33} , s_{66} и угла хиральности χ . Зависимость от угла хиральности является нечетной и, в частности, при $\chi = 0$ связь между продольной деформацией и углом кручения исчезает.

Интегрирование сдвигового напряжения $\sigma_{\varphi z}(r)r$ по площади торца трубки с учетом линейной связи (2.46) позволяет в соответствии с интегральным краевым

Таблица 2.13: Нано/микротрубки из орторомбических кристаллов с отношением жесткостей C/C_0 больше 2 и меньше 0.5 при $1 < \rho < 10$.

Трубки из кристаллов	C/C_0	Трубки из кристаллов	C/C_0
$(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COO}\cdot(\text{CH})_2(\text{COOH})_2$	11.8	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{ClNO}_4$	0.47
$\text{SC}(\text{NH}_2)_2$	9.19	$\text{C}_6\text{H}_4(\text{NO}_2)_2$	0.44
	11.9	La_2CuO_4	0.42
CaSO_4	6.07	NIPC	0.42
$\text{CH}_3\text{COOLi}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3.60	NH_4ClO_4	0.40
PbBr_2	3.15	$\text{Na}_2\text{CoGeO}_4, s^D$	0.39
$\text{C}_{10}\text{H}_6(\text{CH}_2)_2$ (1)	3.01	AgNO_3	0.35
$(\text{CD})_4\text{N}_2$	2.95	$\text{Sr}(\text{COOH})^2$	0.32
NaNO_2	2.89	$\text{C}_6\text{N}_2\text{O}_3\text{H}_6$	0.32
$(\text{Fe,Mn})\text{WO}_4$	2.18	I	0.27
PbCl_2	2.11	$\text{Cd}(\text{COOH})_2$	0.25
$(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COO}\cdot\text{CaCl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$	2.07	$\text{NH}_4\text{B}_5\text{O}_8\cdot 4\text{H}_2\text{O}$	0.22
$\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4\text{HTI}$	0.50	Iododurene	0.22
$\text{C}_6\text{H}_4\text{COOHCOOCs}$	0.49	$(\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{COOH})_3\cdot\text{CaCl}_2$	0.19
$\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$	0.47	$\text{Ca}(\text{COOH})_2$	0.17
$\text{C}_6\text{H}_4\text{COOHCOORb}$	0.46	$[\text{CN}_3\text{H}_6]_2\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4$	0.16
	0.48	Cu-14 wt% Al-3.0 wt% Ni	0.14

условием (2.35) получить зависимость крутильной жесткости $C = M_z/\tau$ от внутреннего радиуса полой трубки r_0 , отношения внутреннего и внешнего радиусов ρ , семи упругих коэффициентов податливости кристалла $s_{11}, s_{12}, s_{22}, s_{13}, s_{23}, s_{33}, s_{66}$ и угла хиральности трубки χ (в виде комбинаций s'_{ij} вида (2.34))

$$\begin{aligned}
 C = & \frac{2\pi}{s'_{66}} r_0^4 \left\{ \Gamma \left[\frac{s'_{16}}{t_{11}} + a_1 \left(s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \frac{\rho^3 - 1}{3} + \right. \\
 & + \left[1 + \frac{(s'_{16})^2}{s'_{66} t_{11}} + a_2 \left(s'_{36} + 2s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{13} + 2t_{12}}{t_{11}} \right) \right] \frac{\rho^4 - 1}{4} + \\
 & \left. + \sum_{\pm} \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] \Omega_{\pm} \frac{\rho^{\lambda_{\pm}+3} - 1}{\lambda_{\pm} + 3} \right\}, \\
 \Omega_{\pm} \equiv & \frac{a_2(\rho^{\lambda_{\mp}} - \rho) + \Gamma a_1(\rho^{\lambda_{\mp}} - 1)}{\rho^{\lambda_{\pm}} - \rho^{\lambda_{\mp}}}.
 \end{aligned}$$

При нулевом угле хиральности этот результат для крутильной жесткости принимает очень простой вид

$$C_0 \equiv C|_{\chi=0} = \frac{\pi}{2s_{66}} r_0^4 (\rho^4 - 1).$$

Хиральность отсутствует в пределе изотропной среды и тогда справедлива последняя формула с $s_{66} = 1/\mu$, где μ – один из двух коэффициентов Ламе.

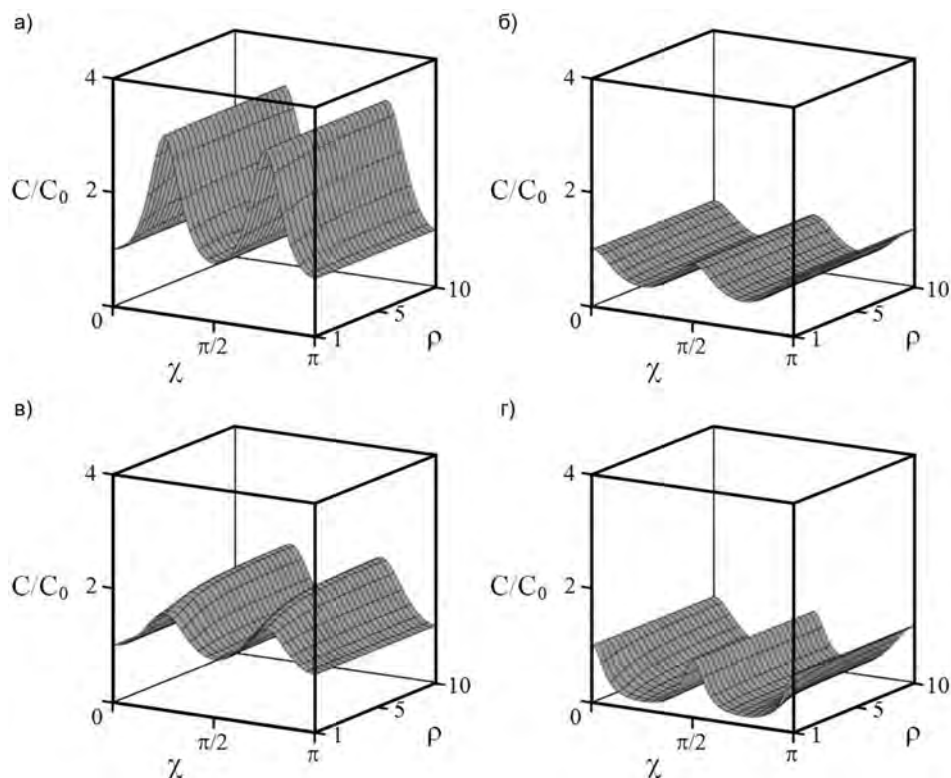


Рис. 2.22: Зависимость C/C_0 угла хиральности χ и параметра толщины ρ для нано/микротрубок из орторомбических кристаллов PbBr_2 (а), $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (б), $(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COO}\cdot\text{CaCl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (в) и $\text{Cu-14 wt\% Al-3.0 wt\% Ni}$ (г).

Безразмерное отношение крутильных жесткостей C/C_0 оказывается не зависящим от радиуса нано/микротрубок, но может зависеть от безразмерных комбинаций коэффициентов податливости, угла хиральности χ и отношения внешнего и внутреннего радиусов ρ . Численный анализ C/C_0 показал, что все орторомбические кристаллы можно поделить на две большие группы с $C/C_0 < 1$ (71 материал) и $C/C_0 > 1$ (57 материал). Выявлено два материала (LiHSeO_3 и $\text{NaH}_2\text{PO}_4\cdot 2\text{H}_2\text{O}$), у которых безразмерное отношение крутильных жесткостей C/C_0 может быть как больше единицы, так и меньше в зависимости от угла хиральности. Для подавляющего большинства материалов при фиксированном угле хиральности безразмерное отношение крутильных жесткостей слабо увеличивается с ростом ρ , но при этом наблюдается сильная зависимость от угла хиральности. На Рис.2.22 даны примеры рассчитанных зависимостей отношения C/C_0 от χ и ρ для трубок из орторомбических кристаллов PbBr_2 , $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COONCaCl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Cu-14 wt\% Al-3.0 wt\% Ni alloy}$. В Табл.2.13 представлены те тонкие нано/микротрубки, для которых безразмерное отношение $C/C_0 > 2$ или $C/C_0 < 0.5$.

2.7. Кручение цилиндрически-анизотропных нано/микроотрубок из кубических материалов, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011) [33]

Будем предполагать, что кристаллическая пластина с ориентацией (011) сворачивается в цилиндрическую трубку так, что ось, перпендикулярная плоскости (011), переходит в радиальную ось трубки, а другая кристаллографическая ось, повернутая в плоскости пластины на угол χ , соответствует продольной оси трубки. Образующаяся криволинейно-анизотропная трубка в силу отклонения ее оси от кристаллографического направления на хиральный угол χ обладает меньшей симметрией, чем исходный кристалл. Ее симметрия соответствует симметрии кристалла моноклинной системы с тринадцатью модулями податливости s'_{11} , s'_{12} , s'_{22} , s'_{13} , s'_{23} , s'_{33} , s'_{44} , s'_{55} , s'_{66} , s'_{45} , s'_{16} , s'_{26} , s'_{36} , зависящими от угла хиральности χ и исходных трех модулей податливости кубического кристалла s_{ij} следующим образом

$$\begin{aligned}
 s'_{11} &= s_{11} - 2\Delta \sin^2 \chi \cos^2 \chi - 0.5\Delta \sin^4 \chi, & s'_{45} &= \Delta \sin 2\chi, \\
 s'_{22} &= s_{11} - 2\Delta \sin^2 \chi \cos^2 \chi - 0.5\Delta \cos^4 \chi, & s'_{36} &= 0.5\Delta \sin 2\chi, \\
 s'_{33} &= s_{11} - 0.5\Delta, & s'_{12} &= s_{12} + 1.5\Delta \sin^2 \chi \cos^2 \chi, \\
 s'_{13} &= s_{12} + 0.5\Delta \sin^2 \chi, & s'_{23} &= s_{12} + 0.5\Delta \cos^2 \chi, \\
 s'_{44} &= s_{44} + 2\Delta \cos^2 \chi, & s'_{55} &= s_{44} + 2\Delta \sin^2 \chi, \\
 s'_{16} &= 0.5\Delta \sin 2\chi(1 - 3\cos^2 \chi), & s'_{66} &= s_{44} + 1.5\Delta \sin^2 2\chi, \\
 s'_{26} &= 0.5\Delta \sin 2\chi(1 - 3\sin^2 \chi), & 2\Delta &\equiv 2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}.
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Из этих формул очевидна периодичность s'_{ij} по χ с периодом π . В итоге при рассмотрении задачи кручения нано/микроотрубок из кубических материалов, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011), можно воспользоваться результатами из раздела 2.6.

Безразмерное отношение крутильных жесткостей C/C_0 зависит от безразмерных комбинаций коэффициентов податливости, угла хиральности χ и отношения внешнего и внутреннего радиусов ρ . Численный анализ с использованием экспериментальных данных из [172] проводился для трубок из кубических материалов, представленный в Табл.П.17 (стр.350). Для большинства материалов изменчивость безразмерного отношения крутильных жесткостей оказывалась всегда больше единицы. Для кристаллов Yb, TmSe и Tm_{0.99}Se безразмерное отношение крутильных жесткостей может быть меньше единицы для тонкостенных трубок. На Рис.2.23 даны примеры рассчитанных зависимостей отношения C/C_0 от χ и ρ для трубок из кубических кристаллов Tm_{0.99}Se с отрицательным коэффициентом анизотропии $\Delta = -14.26 \text{ ТПа}^{-1} < 0$ и Cu с положительным коэффициентом анизотропии $\Delta = 14.65 \text{ ТПа}^{-1} > 0$. Как видно из рисунков в большом угловом диапазоне от-

ношения C/C_0 слабо увеличиваются при увеличении параметра толщины трубок. Наибольший рост C/C_0 наблюдается при углах близких к $5\pi/16$ и $11\pi/16$.

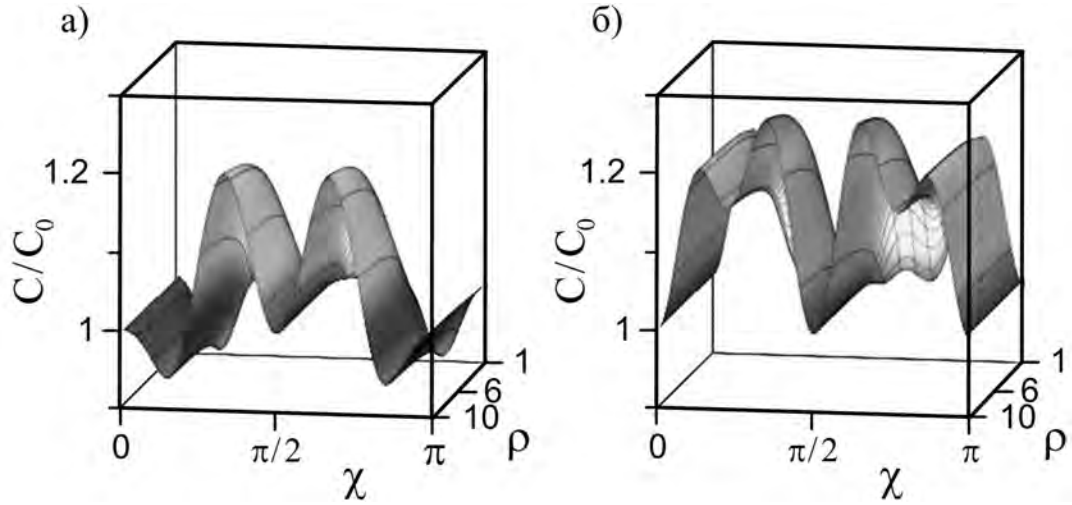


Рис. 2.23: Зависимости отношения жесткостей C/C_0 от угла хиральности χ и параметра толщины ρ для нано/микротрубок из кубических кристаллов $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$ (а) и Cu (б).

Рассмотрим ниже случай кручения нано/микротрубок под действием крутящего момента M_z в отсутствие продольной растягивающей силы ($P_z = 0$). Интегрирование $\sigma_{zz}(r)$ по площади торцевого сечения трубки и приравнивание результата нулю дает следующее соотношение связи угла кручения τ и продольной деформации ε

$$\varepsilon = \Gamma \tau r_0.$$

Безразмерный коэффициент пропорциональности Γ зависит от относительной толщины стенки трубки $(\rho - 1)$, безразмерных комбинаций трех коэффициентов податливости s_{11} , s_{12} , s_{44} и угла хиральности χ . Зависимость от угла хиральности является нечетной и, на пример, при $\chi = 0$ связь между продольной деформацией и углом кручения исчезает.

Следует отметить различия между нано/микротрубками, полученными сворачиванием кристаллических плоскостей (001) и (011). На Рис.2.24 дано сравнение безразмерного отношения крутильных жесткостей C/C_0 для нано/микротрубок, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (001) и (011) из кубических кристаллов $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$ (с отрицательным коэффициентом анизотропии) и Cu (с положительным коэффициентом анизотропии). На этом рисунке сплошной и пунктирной линиям соответствуют значения C/C_0 для нано/микротрубки из меди, полученной сворачиванием кристаллической плоскости (001) и (011) соответственно, штрих-пунктирная линия соответствует C/C_0 для нано/микротрубки из $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$. Из Рис.2.24 видно, что безразмерное отношение крутильных жесткостей C/C_0 для

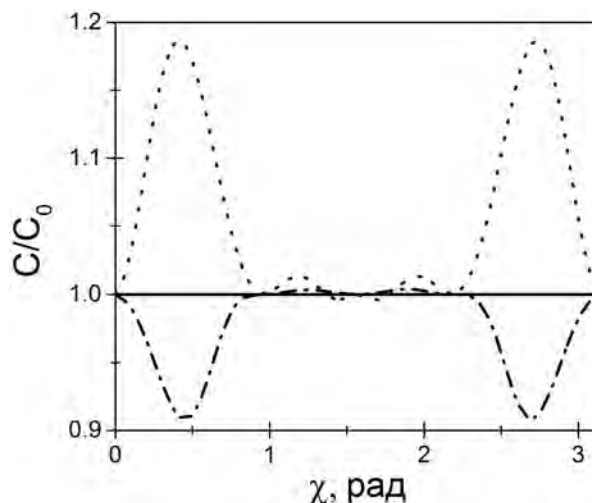


Рис. 2.24: Зависимости отношения жесткостей C/C_0 от угла хиральности χ для нано/микротрубок из кубических кристаллов $Tm_{0.99}Se$ (а) и Cu (б). Сплошная линия – нано/микротрубка из меди и $Tm_{0.99}Se$ с плоскостью (001), пунктирная линия – нано/микротрубка из меди с плоскостью (011), штрих-пунктирная линия – нано/микротрубка из $Tm_{0.99}Se$ с плоскостью (011).

тонкостенных нано/микротрубок из $Tm_{0.99}Se$ и Cu , полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (001), слабо отличается от единицы. Зависимость C/C_0 для нано/микротрубки из $Tm_{0.99}Se$ на Рис.2.24 практически совпадает с зависимостью C/C_0 для нано/микротрубки из Cu . В случае тонкостенных трубок, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (011), безразмерное отношение крутильных жесткостей C/C_0 может существенно отличаться от единицы.

2.8. Упругие свойства микро/нанотрубок с гексагональной анизотропией, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (100)

2.8.1. От тонких пластин из гексагональных кристаллов с прямолинейной анизотропией к нанотрубкам и микротрубкам с криволинейной анизотропией

Пусть края тонкой прямоугольной пластины из гексагонального кристалла соответствуют осям 1,2,3 декартовой системы координат, главная плоскость пластины отвечает кристаллографическим осям 2,3, а ось 3 совпадает с главной кристаллографической осью 6-го порядка. Тогда пластина, сворачиваемая в полую цилиндрическую трубку с осью z параллельно оси 3, сохранит упругую изотропию в поперечном сечении трубки (и ее оснований, в частности). Однако, если пред-

варительно повернуть кристалл вокруг оси 1 на хиральный угол χ , то трубка не будет иметь такую простую упругую симметрию. Тензорные коэффициенты податливости s_{ijkl} , связывающие тензор деформации с тензором напряжения в линейном законе Гука [161], преобразуются тогда следующим образом

$$s'_{\alpha\beta\mu\nu} = l_{\alpha i} l_{\beta j} l_{\mu k} l_{\nu l} s_{ijkl},$$

$$\|l_{ij}\| \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \chi & \sin \chi \\ 0 & -\sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix}. \quad (2.48)$$

Как обычно (см. [171] или подраздел 2.2.1) используем замену тензорных коэффициентов податливости на матричные. Для соответствующих матричных коэффициентов податливости s'_{ij} получим

$$\begin{aligned} s'_{15} = s'_{25} = s'_{35} = s'_{45} = s'_{16} = s'_{26} = s'_{36} = s'_{46} &= 0, \\ s'_{ji} = s'_{ij}, \quad s'_{11} = s_{11}, \quad s'_{14} &= (s_{13} - s_{12}) \sin 2\chi, \\ s'_{12} = s_{12} \cos^2 \chi + s_{13} \sin^2 \chi, \quad s'_{13} &= s_{13} \cos^2 \chi + s_{12} \sin^2 \chi, \\ s'_{22} = s_{11} \cos^4 \chi + s_{33} \sin^4 \chi + (s_{44} + 2s_{13}) \sin^2 \chi \cos^2 \chi, \\ s'_{23} = (s_{11} + s_{33} - s_{44}) \cos^2 \chi \sin^2 \chi + s_{13} (\cos^4 \chi + \sin^4 \chi), \\ s'_{24} = (s_{33} \sin^2 \chi - s_{11} \cos^2 \chi) \sin 2\chi + 0.25(2s_{13} + s_{44}) \sin 4\chi, \\ s'_{34} = (s_{33} \cos^2 \chi - s_{11} \sin^2 \chi) \sin 2\chi - 0.25(2s_{13} + s_{44}) \sin 4\chi, \\ s'_{33} = s_{11} \sin^4 \chi + s_{33} \cos^4 \chi + (s_{44} + 2s_{13}) \sin^2 \chi \cos^2 \chi, \\ s'_{44} = (s_{33} + s_{11} - 2s_{13}) \sin^2 2\chi + s_{44} \cos^2 2\chi, \quad s'_{55} = s_{44} \cos^2 \chi + 2(s_{11} - s_{12}) \sin^2 \chi, \\ s'_{56} = [s_{44} - 2(s_{11} - s_{12})] \sin \chi \cos \chi, \quad s'_{66} = s_{44} \sin^2 \chi + 2(s_{11} - s_{12}) \cos^2 \chi. \end{aligned}$$

Коэффициенты податливости $s'_{11}, s'_{12}, s'_{13}, s'_{22}, s'_{23}, s'_{33}, s'_{44}, s'_{55}, s'_{66}$ являются четными функциями χ , в то время как $s'_{14}, s'_{24}, s'_{34}, s'_{56}$ - нечетные функции.

Соответствие между осями сворачиваемой пластины 1', 2', 3' и локальными цилиндрическими координатами трубки будет 1' \leftrightarrow r , 2' \leftrightarrow φ , 3' \leftrightarrow z . Закон Гука для цилиндрически анизотропной трубки примет вид

$$\begin{aligned} u_{rr} &= s'_{11} \sigma_{rr} + s'_{12} \sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13} \sigma_{zz} + s'_{14} \sigma_{\varphi z}, \\ u_{\varphi\varphi} &= s'_{12} \sigma_{rr} + s'_{22} \sigma_{\varphi\varphi} + s'_{23} \sigma_{zz} + s'_{24} \sigma_{\varphi z}, \\ u_{zz} &= s'_{13} \sigma_{rr} + s'_{23} \sigma_{\varphi\varphi} + s'_{33} \sigma_{zz} + s'_{34} \sigma_{\varphi z}, \\ 2u_{\varphi z} &= s'_{14} \sigma_{rr} + s'_{24} \sigma_{\varphi\varphi} + s'_{34} \sigma_{zz} + s'_{44} \sigma_{\varphi z}, \\ 2u_{rz} &= s'_{55} \sigma_{rz} + s'_{56} \sigma_{r\varphi}, \quad 2u_{r\varphi} = s'_{56} \sigma_{rz} + s'_{66} \sigma_{r\varphi}. \end{aligned}$$

В предположении радиальной неоднородности уравнения равновесия имеют простой вид обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d}{dr}[r\sigma_{rr}(r)] = \sigma_{\varphi\varphi}(r), \quad \frac{d}{dr}[r\sigma_{rz}(r)] = 0, \quad \frac{d}{dr}[r^2\sigma_{r\varphi}(r)] = 0.$$

В отсутствие поверхностных сил на внешней (при $r = R_0$) и внутренней (при $r = r_0$) стенках трубки с учетом уравнений равновесия два сдвиговых напряжения будут отсутствовать во всем объеме трубки

$$\sigma_{rz}(r) = 0, \quad \sigma_{r\varphi}(r) = 0.$$

С учетом последних соотношений закон Гука несколько упрощается, и тогда три нормальных напряжения $\sigma_{rr}(r)$, $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$, $\sigma_{zz}(r)$ и одно касательное напряжение $\sigma_{\varphi z}(r)$ обеспечивают радиально-неоднородные деформации $u_{rr}(r)$, $u_{\varphi\varphi}(r)$, $u_{zz}(r)$, $u_{\varphi z}(r)$, $u_{rz}(r) = 0$, $u_{r\varphi}(r) = 0$. Выражения вектора смещений находятся с помощью уравнений равновесия, линейных уравнений закона Гука, дифференциальных связей компонент деформаций и смещений и граничных условий. Требование однозначности смещений приводит к дополнительным ограничениям

$$u_{rr}(r) = \frac{d}{dr}[ru_{\varphi\varphi}(r)], \quad u_{zz}(r) = \varepsilon, \quad 2u_{\varphi z}(r) = \tau r, \\ \varepsilon = \text{const}, \quad \tau = \text{const}.$$

Отметим, что в случае любых (нелинейных, в частности) определяющих уравнений вид смещений был найден с использованием уравнений совместности в [202, 203]. Пользуясь вышеприведенными ограничениями, линейные уравнения закона Гука и уравнениями равновесия, можно получить для нормального напряжения $\sigma_{rr}(r)$ линейное дифференциальное уравнение второго порядка

$$a_0 \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] + a_1 \sigma_{rr} + a_2 \varepsilon + a_3 r \tau = 0.$$

Здесь и далее используем следующие обозначения

$$a_0 = t_{22}, \quad a_1 = -t_{11}, \quad a_2 = \frac{\bar{s}_{23} - \bar{s}_{13}}{\bar{s}_{33}}, \quad s'_{44} a_3 = 2q_{24} - q_{14}, \\ \bar{s}_{ij} = s'_{ij} - \frac{s'_{i4} s'_{j4}}{s'_{44}}, \quad t_{ij} = \bar{s}_{ij} - \frac{\bar{s}_{i3} \bar{s}_{j3}}{\bar{s}_{33}}, \quad q_{ij} = s'_{ij} - \frac{\bar{s}_{i3}}{\bar{s}_{33}} s'_{j3}.$$

Уравнение для нормального напряжения $\sigma_{rr}(r)$ имеет степенное решение вида

$$\sigma_{rr} = -\frac{a_2}{a_0 + a_1} \varepsilon - \frac{a_3}{4a_0 + a_1} r \tau + A_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + A_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}, \\ \lambda_{\pm} = -1 \pm \sqrt{-\frac{a_1}{a_0}}.$$

Два из четырех параметрических коэффициентов ε , τ , A_+ , A_- определяется из условий отсутствия нормальных напряжений $\sigma_{rr}(r)$ на внутренней и внешней (при $r = R_0 \equiv \rho r_0$) поверхностях трубки

$$A_+ = \frac{a_2}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \varepsilon + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1 - \lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} r_0 \tau,$$

$$A_- = \frac{a_2}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \varepsilon + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1 - \lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} r_0 \tau.$$

Аналогичную структуру, как это следует из соотношений закона Гука, имеют нормальное напряжение $\sigma_{zz}(r)$ и касательное напряжение $\sigma_{\varphi z}(r)$

$$\begin{aligned} \bar{s}_{33} \sigma_{zz}(r) = & \left(1 + (\bar{s}_{13} + \bar{s}_{23}) \frac{a_2}{a_0 + a_1} \right) \varepsilon - \\ & - \left(\frac{s'_{34}}{s'_{44}} - (\bar{s}_{13} + 2\bar{s}_{23}) \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \right) r \tau - \\ & - (\bar{s}_{13} + (1 + \lambda_+) \bar{s}_{23}) A_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} - (\bar{s}_{13} + (1 + \lambda_-) \bar{s}_{23}) A_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} s'_{44} \sigma_{\varphi z} = & \left(-\frac{s'_{34}}{\bar{s}_{33}} + (q_{14} + q_{24}) \frac{a_2}{a_0 + a_1} \right) \varepsilon + \\ & + \left(1 + \frac{(s'_{34})^2}{s'_{44} \bar{s}_{33}} + (q_{14} + 2q_{24}) \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \right) r \tau - \\ & - (q_{14} + (1 + \lambda_+) q_{24}) A_+ \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} - (q_{14} + (1 + \lambda_-) q_{24}) A_- \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-}. \end{aligned}$$

2.8.2. Упругие свойства нано/микротрубок из гексагональных кристаллов.

Интегрированием по сечению трубки нормального напряжения $\sigma_{zz}(r)$ находим следующее выражение для удельной растягивающей силы

$$P = \frac{1}{S} \int \sigma_{zz}(r) dS = \frac{2}{R_0^2 - r_0^2} \int_{r_0}^{R_0} r \sigma_{zz}(r) dr = m_{11} \varepsilon + m_{12} r_0 \tau. \quad (2.49)$$

Здесь для коэффициентных функций m_{11} , m_{12} имеем

$$\begin{aligned} \bar{s}_{33} m_{11} = & 1 + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left\{ \bar{s}_{13} + \bar{s}_{23} - \right. \\ & - [\bar{s}_{13} + (1 + \lambda_+) \bar{s}_{23}] \frac{2(\rho^{-\lambda_-} - 1)(\rho^{\lambda_+ + 2} - 1)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1)(\lambda_+ + 2)} - \\ & \left. - [\bar{s}_{13} + (1 + \lambda_-) \bar{s}_{23}] \frac{2(\rho^{-\lambda_+} - 1)(\rho^{\lambda_- + 2} - 1)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1)(\lambda_- + 2)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\begin{aligned}
 \bar{s}_{33}m_{12} = & -\frac{2s'_{34}\rho^3 - 1}{3s'_{44}\rho^2 - 1} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left\{ \frac{2}{3} (\bar{s}_{13} + 2\bar{s}_{23}) \frac{\rho^3 - 1}{\rho^2 - 1} \right. \\
 & - [\bar{s}_{13} + (1 + \lambda_+)\bar{s}_{23}] \frac{2(\rho^{1-\lambda_-} - 1)(\rho^{\lambda_++2} - 1)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_+-\lambda_-} - 1)(\lambda_+ + 2)} - \\
 & \left. - [\bar{s}_{13} + (1 + \lambda_-)\bar{s}_{23}] \frac{2(\rho^{1-\lambda_+} - 1)(\rho^{\lambda_-+2} - 1)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_--\lambda_+} - 1)(\lambda_- + 2)} \right\}. \quad (2.51)
 \end{aligned}$$

Используя выражение для сдвигового напряжения $\sigma_{\varphi z}(r)$, аналогично найдем линейную зависимость крутящего момента от параметров ε и τ

$$\begin{aligned}
 M = \int \sigma_{\varphi z}(r)rdS = 2\pi \int_{r_0}^{R_0} r^2\sigma_{\varphi z}(r)dr = m_{21}\varepsilon + m_{22}r_0\tau, \\
 \frac{s'_{44}}{2\pi r_0^3}m_{21} = & -\frac{s'_{34}\rho^3 - 1}{\bar{s}_{33}} \frac{\rho^3 - 1}{3} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left\{ (q_{14} + q_{24}) \frac{\rho^3 - 1}{3} - \right. \\
 & - [q_{14} + (1 + \lambda_+)q_{24}] \frac{(\rho^{-\lambda_-} - 1)(\rho^{\lambda_++3} - 1)}{(\rho^{\lambda_+-\lambda_-} - 1)(\lambda_+ + 3)} - \\
 & \left. - [q_{14} + (1 + \lambda_-)q_{24}] \frac{(\rho^{-\lambda_+} - 1)(\rho^{\lambda_-+3} - 1)}{(\rho^{\lambda_--\lambda_+} - 1)(\lambda_- + 3)} \right\}, \quad (2.52)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{s'_{44}}{2\pi r_0^3}m_{22} = & \left[1 + \frac{(s'_{34})^2}{s'_{44}\bar{s}_{33}} \right] \frac{\rho^4 - 1}{4} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left\{ (q_{14} + 2q_{24}) \frac{\rho^4 - 1}{4} - \right. \\
 & - [q_{14} + (1 + \lambda_+)q_{24}] \frac{(\rho^{1-\lambda_-} - 1)(\rho^{\lambda_++3} - 1)}{(\rho^{\lambda_+-\lambda_-} - 1)(\lambda_+ + 3)} - \\
 & \left. - [q_{14} + (1 + \lambda_-)q_{24}] \frac{(\rho^{1-\lambda_+} - 1)(\rho^{\lambda_-+3} - 1)}{(\rho^{\lambda_--\lambda_+} - 1)(\lambda_- + 3)} \right\}. \quad (2.53)
 \end{aligned}$$

Таким образом, получены общие линейные связи деформации растяжения ε и угол кручения τ с растягивающим усилием P и крутящим моментом M , приложенными к трубке. В частном случае отсутствия растягивающего усилия ($P = 0$), тем не менее, происходит наряду с кручением изменение длины трубки в соответствии с линейной связью вида

$$\varepsilon = \Gamma r_0\tau, \quad \Gamma = -\frac{m_{12}}{m_{11}}. \quad (2.54)$$

По крутящему моменту определяем крутильную жесткость

$$C = \frac{M}{\tau} = \frac{m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}}{m_{11}}r_0, \quad C_0 \equiv C|_{\varepsilon=0} = \frac{\pi r_0^4}{2s_{44}}(\rho^4 - 1). \quad (2.55)$$

В отсутствие крутящего момента ($M = 0$) не исчезает угол кручения τ , который определяется по деформации растяжения

$$r_0\tau = \Lambda\varepsilon, \quad \Lambda = -\frac{m_{21}}{m_{22}}. \quad (2.56)$$

Модуль Юнга находится следующим образом

$$E = \frac{P}{\varepsilon} = \frac{m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}}{m_{22}}. \quad (2.57)$$

Нетрудно убедиться, что при изменении знака угла хиральности χ коэффициенты m_{12} , m_{21} меняют знак, а другая пара коэффициентов m_{11} , m_{22} знака не меняет.

Соотношения закона Гука позволяют получить по напряжениям поперечные нормальные деформации $u_{rr}(r)$, $u_{\varphi\varphi}(r)$

$$\begin{aligned} u_{rr}(r) = \varepsilon \left\{ \frac{\bar{s}_{13}}{\bar{s}_{33}} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left[-T_1 + T_1^+ \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + \right. \right. \\ \left. \left. + T_1^- \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right\} + r_0\tau \left\{ \frac{q_{14}}{s'_{44}} \frac{r}{r_0} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left[-(T_1 + t_{12}) \frac{r}{r_0} + \right. \right. \\ \left. \left. + T_1^+ \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + T_1^- \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right\}, \\ u_{\varphi\varphi}(r) = \varepsilon \left\{ \frac{\bar{s}_{23}}{\bar{s}_{33}} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left[-T_2 + T_2^+ \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + \right. \right. \\ \left. \left. + T_2^- \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right\} + r_0\tau \left\{ \frac{q_{24}}{s'_{44}} \frac{r}{r_0} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left[-(T_2 + t_{22}) \frac{r}{r_0} + \right. \right. \\ \left. \left. + T_2^+ (t_{12} + (1 + \lambda_+)t_{22}) \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + T_2^- \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Здесь и далее используются сокращения

$$\begin{aligned} T_1 &\equiv t_{11} + t_{12}, & T_1^\pm &\equiv T_1 + \lambda_\pm t_{12}, \\ T_2 &\equiv t_{12} + t_{22}, & T_2^\pm &\equiv T_2 + \lambda_\pm t_{22} \end{aligned} \quad (2.58)$$

В частном случае растяжения трубки в отсутствие крутящего момента ($M = 0$) поперечные нормальные деформации определяют выражения для коэффициентов Пуассона $\nu_{rz} = -u_{rr}(r)/\varepsilon$, $\nu_{\varphi z} = -u_{\varphi\varphi}(r)/\varepsilon$

$$\begin{aligned} -\nu_{rz} = \frac{\bar{s}_{13}}{\bar{s}_{33}} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left[-T_1 + T_1^+ \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + \right. \\ \left. + T_1^- \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] - \frac{m_{21}}{m_{22}} \left\{ \frac{q_{14}}{s'_{44}} \frac{r}{r_0} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left[-(T_1 + t_{12}) \frac{r}{r_0} + \right. \right. \\ \left. \left. + T_1^+ \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + T_1^- \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

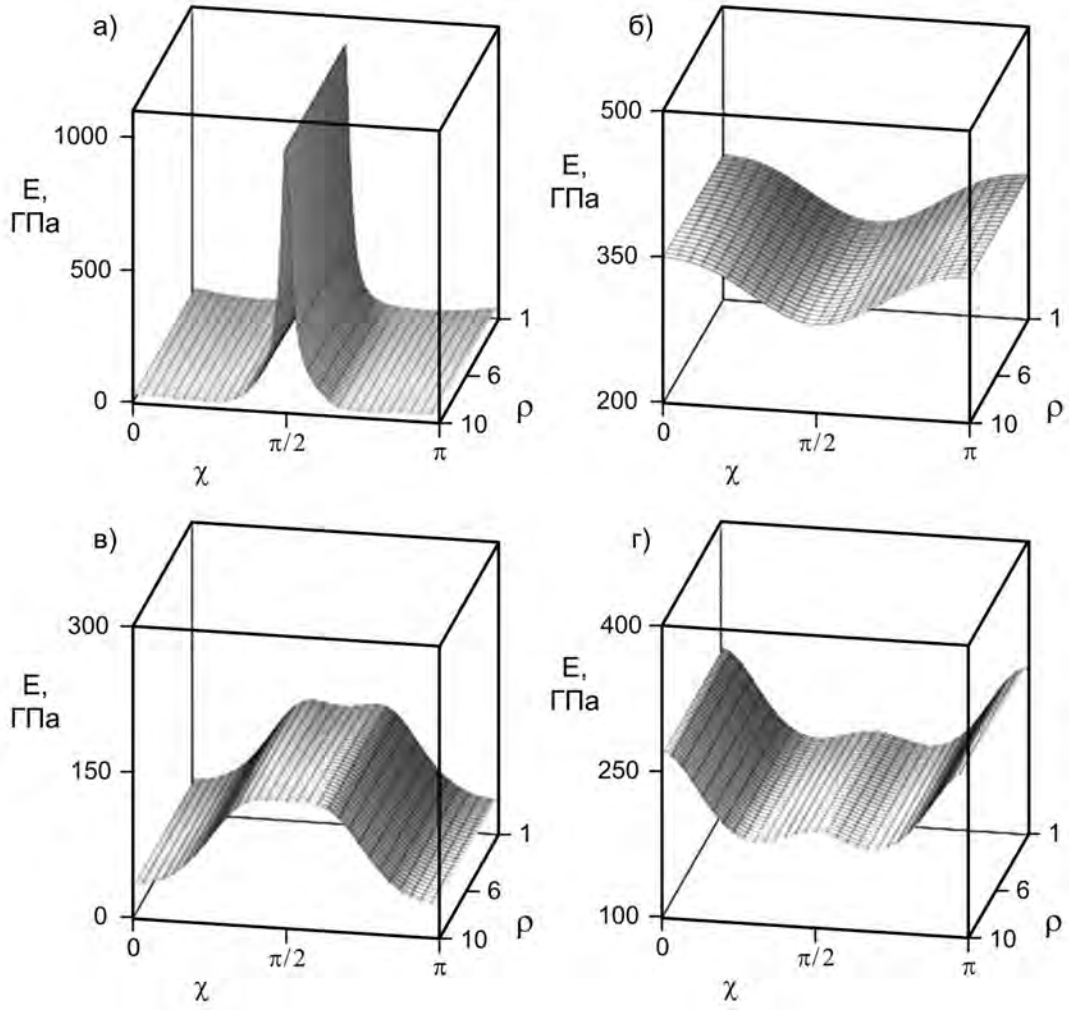


Рис. 2.25: Изменчивость модулей Юнга с изменением угла хиральности χ и отношения внешнего и внутреннего радиусов ρ для трубок из гексагональных кристаллов графита, бериллия, цинка и кобальта.

$$\begin{aligned}
 -\nu_{\varphi z} = & \frac{\bar{s}_{23}}{\bar{s}_{33}} + \frac{a_2}{a_0 + a_1} \left[-T_2 + T_2^+ \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + \right. \\
 & \left. + T_2^- \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] - \frac{m_{21}}{m_{22}} \left\{ \frac{q_{24}}{s'_{44}} \frac{r}{r_0} + \frac{a_3}{4a_0 + a_1} \left[-(T_2 + t_{22}) \frac{r}{r_0} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + T_2^+ \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + T_2^- \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-} \right] \right\}. \quad (2.60)
 \end{aligned}$$

Четность коэффициентов s'_{44} , \bar{s}_{13} , \bar{s}_{23} , \bar{s}_{33} , t_{11} , t_{12} , t_{22} , a_0 , a_1 , a_2 , λ_+ , λ_- , m_{11} , m_{22} и нечетность q_{14} , q_{24} , a_3 , m_{12} , m_{21} относительно изменения знака угла χ показывает, что коэффициенты Пуассона не меняют знака при изменении знака угла хиральности. Имеет место также симметрия относительно $\chi = \pi/2$.

В частном случае нулевой хиральности получается $m_{12} = 0$, $m_{21} = 0$, так что отсутствует связь удлинения ε с углом кручения τ . Тем самым тогда нет ни

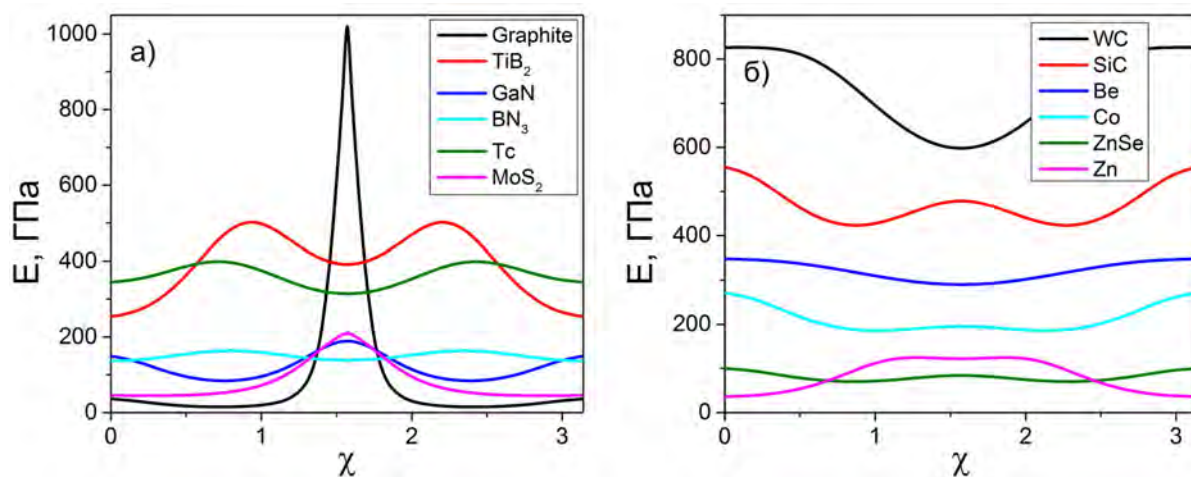


Рис. 2.26: Зависимость модулей Юнга от угла хиральности для тонкостенных ($\rho = 1.1$) трубок из некоторого набора жестких гексагональных кристаллов.

прямого, ни обратного эффектов Пойнтинга. Коэффициенты Пуассона при этом принимают вид

$$\nu_{rz} = \nu_{\varphi z} = -\frac{s_{13}}{s_{33}}. \tag{2.61}$$

2.8.3. Численные результаты и обсуждение

Полученные формулы используем для численного анализа механических свойств нано/микротрубок из многочисленных гексагональных кристаллов, экспериментальные упругие характеристики которых отражены в справочнике [172].

Модули Юнга хиральных трубок из конкретных гексагональных кристаллов согласно формулам (2.57) и предшествующим формулам зависят от отношений внешних и внутренних радиусов трубок ρ и углов хиральности χ . Численные оценки указывают на более сильную зависимость от угла хиральности, чем от удельной толщины стенок трубок $\rho - 1 = (R_0 - r_0)/r_0$. Некоторую иллюстрацию этого дает Рис.2.25, на котором представлена изменчивость модуля Юнга от обоих аргументов для трубок из гексагональных кристаллов графита (C), Be, Zn, Co. Он показывает, что изменение модуля Юнга с изменением масштабного фактора является действительно малым. Зависимости от угла хиральности гораздо более существенны. Примеры зависимостей модуля Юнга от угла хиральности для тонкостенных трубок (при $\rho = 1.1$) из различных достаточно жестких кристаллов показаны на Рис.2.26. Как видно из этого рисунка наибольшие значения и наибольшая изменчивость характерны для трубок из таких гексагональных кристаллов, как графит и карбид вольфрама. Большие изменения модулей Юнга имеют место также у трубок из кристаллов Zn, MoS₂, GaN, TiB₂, SiC.

Расчеты радиального и углового коэффициентов Пуассона $\nu_{rz}(r)$, $\nu_{\varphi z}(r)$ по

Таблица 2.14: Коэффициенты Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ для тонкостенных ($\rho = 1.01$) трубок из гексагональных кристаллов и критические величины параметра толщины стенок ρ_{cr} , при которых ν_{rz} или $\nu_{\varphi z}$ обращаются в нуль на внешней ($r = R_0$) и внутренней ($r = r_0$) поверхностях трубок, при $\chi = \pi/2$.

Трубки-ауксетики из кристаллов	ν_{rz} $\rho = 1.01$	$\nu_{\varphi z}$ $\rho = 1.01$	ρ_{cr}			
			ν_{rz}		$\nu_{\varphi z}$	
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
Be	0.08	0.01	–	–	1.47	–
C (графит)	0.16	0.34	511	–	–	–
Cd	0.10	0.74	1.98	–	–	–
CdTe	0.47	0.22	–	–	3.61	–
CeF ₃	0.43	0.16	–	–	2.52	–
CeNi ₅	0.41	0.21	–	–	4.87	–
Co	0.46	0.18	–	64.4	2.75	–
CuCl	0.68	0.17			1.76	
GaN	0.18	0.49	4.50	–	–	–
Hf	0.35	0.22			9.55	
In ₂ Bi	0.72	0.15			1.60	
InN	0.22	0.52	4.70	–	–	–
LaF ₃	0.44	0.14			2.24	
Mg	0.35	0.23			9.83	
MnAs	0.19	0.08	–	–	3.24	
Mn ₅ Si ₃	0.49	0.11	–	–	1.64	–
MoS ₂	–0.28	0.58	–	–	–	133
Nd	0.40	0.16			2.88	
NbF ₃	0.44	0.15			2.40	
C ₇ H ₁₂	0.77	0.17	–	–	1.68	–
Pr	0.43	0.14			2.25	
PrF ₃	0.45	0.15			2.17	
Re	0.38	0.19			4.19	
SiC	0.18	0.08	–	–	3.50	–
β -AgI	0.56	0.24	–	–	3.04	–
Ti	0.49	0.19	–	–	2.65	–
Zn	–0.07	0.85	–	1.93	–	–
ZnSe	0.19	–	–	5.75	–	
α -ZnS	0.19	–	–	3.60	–	
ZnTe	0.20	–	–	6.22	–	
α -Zr	0.24	–	–	7.63	–	

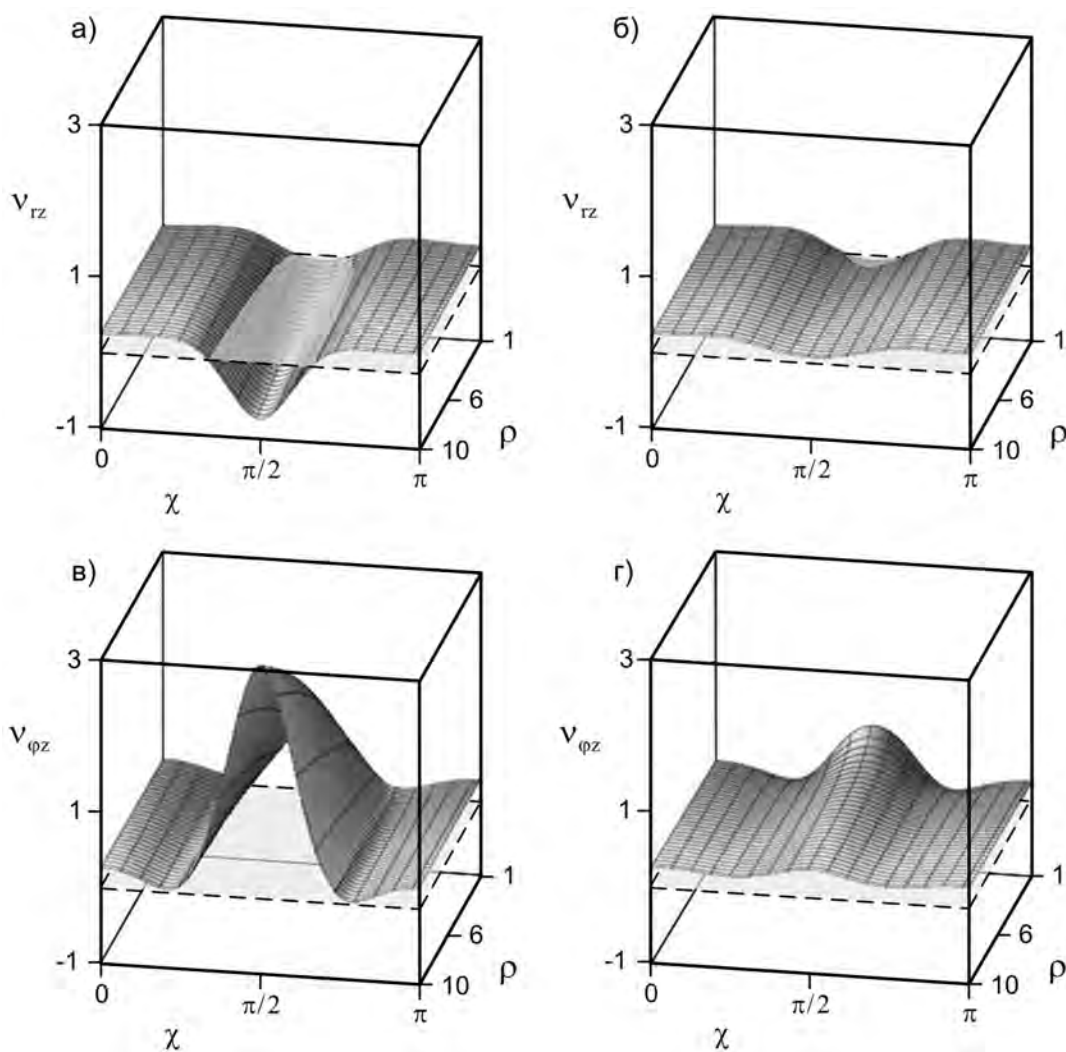


Рис. 2.27: Изменчивость радиального коэффициента Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и углового коэффициента Пуассона $\nu_{\phi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях трубки из цинка.

формулам (2.58)-(2.60) показывают, что они могут становиться для многих трубок отрицательными в некоторых радиальных областях стенок трубок в том или ином диапазоне углов хиральности и масштабного параметра ρ . Такие трубки являются ауксетиками, но прямой связи между трубками-ауксетиками и ауксетичностью соответствующих прямолинейно-анизотропных кристаллов не наблюдается. Коэффициенты Пуассона $\nu_{rz}, \nu_{\phi z}$ ряда тонкостенных (с $\rho = 1.01$) трубок-ауксетиков из гексагональных кристаллов при $\chi = \pi/2$ показаны в Табл.2.14. Здесь только в двух случаях кристаллов цинка и дисульфида молибдена и только радиальный коэффициент Пуассона ν_{rz} оказывается отрицательным. Ауксетичность остальных трубок становится ясной из результатов для критических величин безразмерного масштабного параметра $\rho = \rho_{cr}$. При указанных значениях коэффициенты Пуассона ν_{rz} или $\nu_{\phi z}$ обращаются в нуль на внутренней (при $r = r_0$) или внешней (при $r = R_0$) поверх-

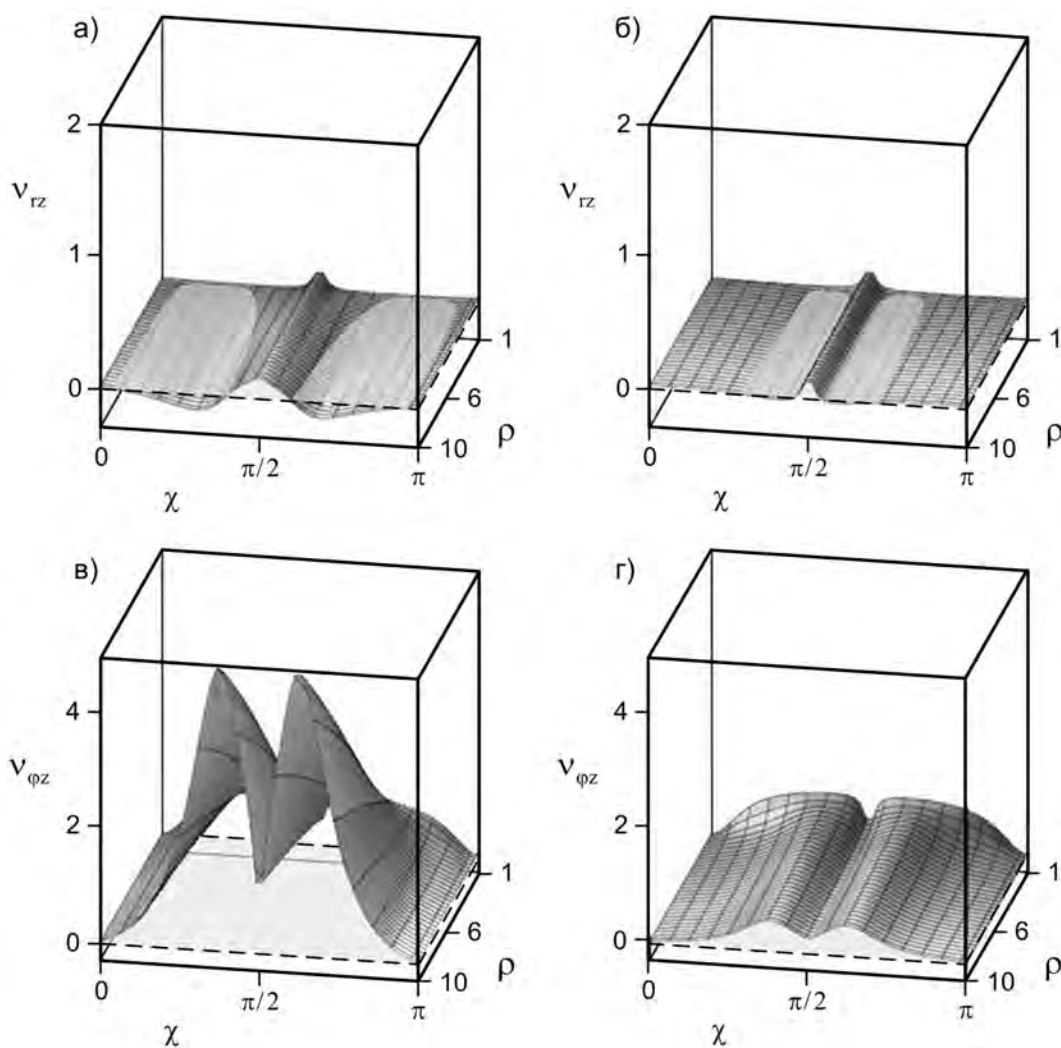


Рис. 2.28: Изменчивость радиального коэффициента Пуассона ν_{rz} на внутренней (а) и внешней (б) поверхностях и углового коэффициента Пуассона $\nu_{\phi z}$ на внутренней (в) и внешней (г) поверхностях трубки из графита.

ностях трубок. Полная картина изменения коэффициентов Пуассона с изменением угла хиральности в диапазоне $0 \leq \chi \leq \pi$ и безразмерного масштабного параметра в диапазоне $1 < \rho < 10$ на внутренней и внешней поверхностях представлена на Рис.2.27 и Рис.2.28 для трубок из цинка и графита соответственно. В случае других кристаллов картина во многом аналогична. Вид радиальных распределений коэффициентов Пуассона в сечениях стенок трубок из той же пары кристаллов цинка и графита дается на Рис.2.29. Распределения для цинка построены при $\chi = \pi/2$ в случаях трубок, внешний радиус которых в два и в десять раз превосходит внутренний радиус. Распределения для графита в трубках таких же размеров построены при $\chi = \pi/4$. Очевидно, что трубки из таких кристаллов при определенных углах хиральности и $\rho = 10$ являются ауксетиками, поскольку коэффициент Пуассона ν_{rz} принимает отрицательные значения при приближении к внутренней стенке.

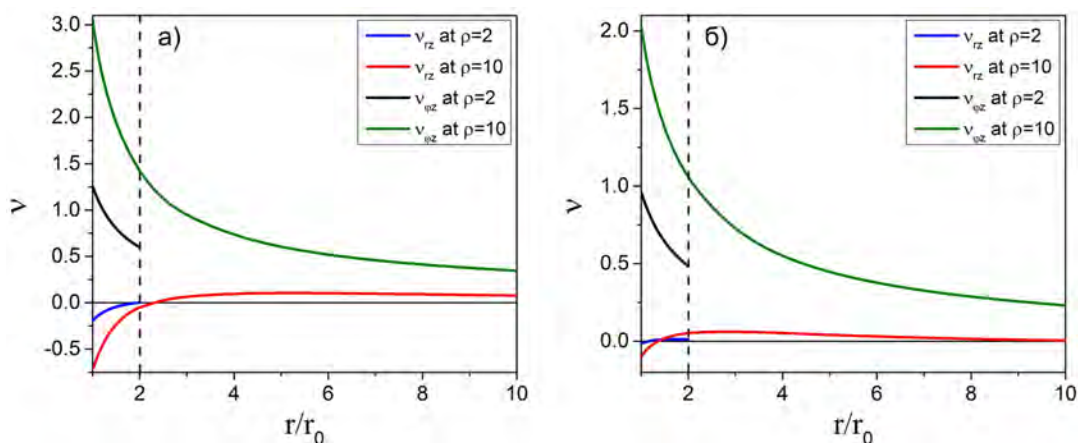


Рис. 2.29: Распределения радиального и углового коэффициентов Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\phi z}$ для хиральных трубок с $\chi = \pi/2$ из цинка и хиральных трубок с $\chi = \pi/4$ из графита в случаях $\rho \equiv R_0/r_0 = 2$ и 10 .

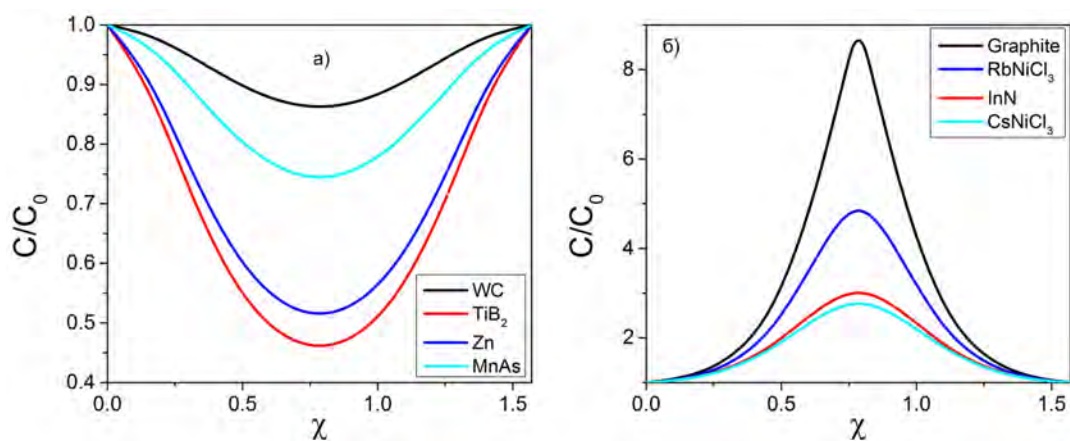


Рис. 2.30: Зависимости от угла хиральности безразмерных отношений крутильных жесткостей C/C_0 для тонкостенных ($\rho = 1.1$) трубок из ряда гексагональных кристаллов.

Численные расчеты по формулам (2.55) показывают, что безразмерное отношение крутильных жесткостей C/C_0 для трубок из различных гексагональных кристаллов может меняться существенно с изменением угла хиральности и в гораздо меньшей степени с изменением масштабного параметра ρ , за исключением трубки из графита и MoS_2 . Первое иллюстрируют графики зависимостей C/C_0 от χ на Рис.2.30 для тонкостенных (при $\rho = 1.1$) трубок из восьми кристаллов. Второе подтверждает Табл.2.15 для экстремальных значений C/C_0 нескольких трубок при фиксированном угле хиральности $\chi = \pi/2$ в диапазоне $1 < \rho < 10$ и Рис.2.31, представляющих зависимости C/C_0 от χ и ρ для трубок из кристаллов графита и цинка. Можно видеть, что крутильная жесткость трубки из графита увеличивается более чем в два раза при увеличении толщины стенки трубки.

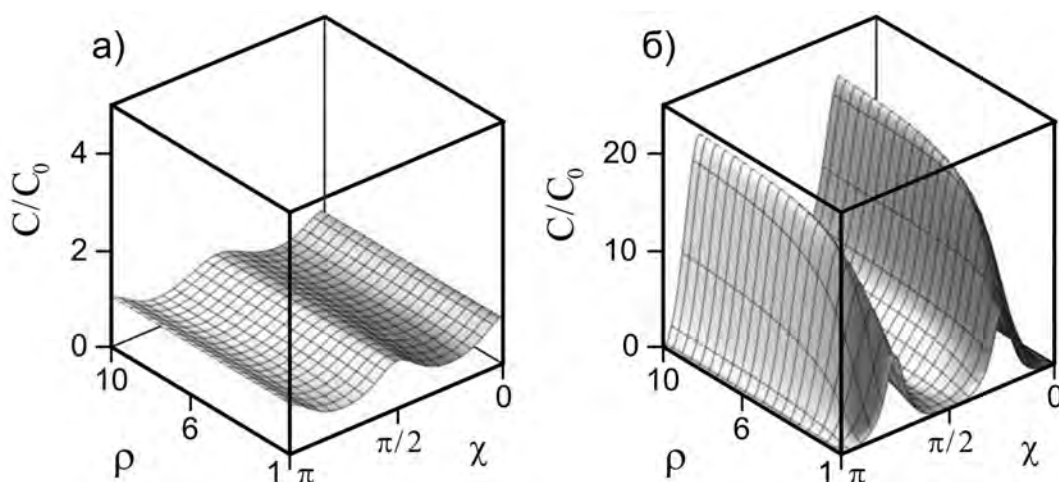


Рис. 2.31: Изменчивость безразмерных отношений крутильных жесткостей C/C_0 для трубок из кристаллов цинка и графита с изменением угла хиральности χ и безразмерного масштабного параметра $\rho \equiv R_0/r_0$.

Таблица 2.15: Экстремальные значения отношений крутильных жесткостей C/C_0 для трубок различной толщины из 12 гексагональных кристаллов в диапазоне $1 < \rho \leq 10$.

Трубки из кристаллов	C/C_0		
	min при $\rho = 1.1$	min при $\rho = 10$	max при $1 < \rho < 10$
WC	0.86	0.87	1
Zn	0.51	0.62	1
MnAs	0.74	0.80	1
TiB ₂	0.45	0.46	1
C ₇ H ₁₂	0.45	0.52	1
β -LiAlSiO ₄	0.51	0.53	1
Трубки из кристаллов	C/C_0		
	min при $1 < \rho < 10$	max при $\rho = 1.1$	max при $\rho = 10$
Graphite	1	8.65	20.5
MoS ₂	1	1.66	2.10
RbNiCl ₃	1	5.36	5.42
CsNiCl ₃	1	2.91	3.06
InN	1	3.18	3.21
GaN	1	2.47	2.51

2.9. Упругие свойства двухслойных нано/микротрубок с кубической анизотропией [34, 35]

Представляют интерес особенности ауксетического поведения композитов в случае анизотропных исходных материалов. Ниже мы ограничимся анализом двухслойных трубчатых композитов, образованных из кубических кристаллов. Среди сотен кубических кристаллов около одной трети являются ауксетиками (см. подраздел 1.2.2, стр.29). Точнее говоря, они оказываются частичными ауксетиками, поскольку характеризуются отрицательным коэффициентом Пуассона только для части направлений ориентации. При сворачивании тонких кристаллических пластин с произвольной ориентацией в нано/микротрубки количество ауксетиков еще возрастает (см. раздел 2.2). Однако, в частном случае трубок с цилиндрической анизотропией, соответствующей кристаллографическим осям сворачиваемых пластин, т.е. в случае нехиральных трубок число ауксетиков сокращается до полутора десятков (Табл.2.16).

При растяжении однослойных криволинейно-анизотропных трубок с нулевым углом хиральности, образованных сворачиванием кубических кристаллов, напряженное состояние оказывается однородным, и отлична от нуля лишь одна постоянная компонента напряжений $\sigma_{zz} = \varepsilon/s_{11} = \text{const}$. Однородным оказывается в силу закона Гука и деформированное состояние (см. раздел 2.2)

$$u_{zz} = \varepsilon = \text{const}, \quad u_{rr} = u_{\varphi\varphi} = \frac{s_{12}}{s_{11}}\varepsilon, \quad u_{r\varphi} = u_{rz} = u_{\varphi z} = 0.$$

В итоге для модуля Юнга и коэффициентов Пуассона имеем

$$E_0 = \frac{1}{s_{11}}, \quad \nu = \nu_{rz} = \nu_{\varphi z} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}.$$

Модуль Юнга для трубок из кубических кристаллов всегда положителен в соответствии с неравенством $s_{11} > 0$, справедливым для всех термодинамически устойчивых кристаллов. Другое неравенство $s_{12} > 0$ выполняется лишь для немногих кубических кристаллов согласно экспериментальным данным из [172, 175], так что относительно немногие нехиральные трубки характеризуются отрицательным коэффициентом Пуассона (Табл.2.16). При этом такой коэффициент остается постоянным по всему сечению трубок, так что они являются полными ауксетиками.

2.9.1. От однослойных к двухслойным трубкам

Пусть двухслойная трубка состоит из внутреннего слоя 1 и внешнего слоя 2 с радиальными координатами из диапазонов $r_0 \leq r \leq r_i$, $r_i \leq r \leq R_0$, соответственно (см. Рис.2.32). В дальнейшем в основном ограничимся частными случаями $\rho_1 \equiv r_i/r_0 = \rho_2 \equiv R_0/r_i = \rho$, для которых параметр ρ равен отношению толщины

Таблица 2.16: Трубки из кубических кристаллов-ауксетиков с коэффициентами податливости s_{11} , s_{12} , характеризующиеся модулями Юнга E_0 и отрицательными коэффициентами Пуассона ν .

Кристаллы	s_{11} (ТПа ⁻¹)	s_{12} (ТПа ⁻¹)	ν	E_0 (ГПа)
Ba [172]	123.7	6.01	-0.05	8.08
	157	-61	0.39	6.37
GeTe-SnTe 20 mole % GeTe [172]	9.7	0.1	-0.01	103
Sm _{0.9} La _{0.1} S [175]	8.14	1.25	-0.15	123
Sm _{0.75} La _{0.25} S [175]	14.3	5.7	-0.40	69.9
Sm _{0.65} La _{0.35} S [175]	19.7	6.84	-0.34	50.8
Sm _{0.85} Tm _{0.75} S [175]	9.45	0.28	-0.03	106
Sm _{0.75} Tm _{0.25} S [175]	15.3	7.05	-0.46	65.4
Sm _{0.75} Y _{0.25} S [172]	10.2	4.3	-0.42	98.0
	18.0	12.1	-0.67	55.6
Sm _{0.7} Y _{0.3} S [172]	10.75	5.26	-0.49	93.0
Sm _{0.58} Y _{0.42} S [172]	8.12	2.44	-0.30	123
Sm _{0.576} Y _{0.424} S [172]	7.41	1.98	-0.27	135
FeS ₂ [172]	2.78	-0.24	0.09	360
	2.56	0.31	-0.12	391
ReO ₃ [172]	2.09	0.03	-0.01	478
	1.75	-0.02	0.01	571
SmB ₆ [172]	2.41	0.04	-0.02	415
Tm _{0.99} Se [172]	7.95	3.71	-0.47	126
TmSe [172]	8.72	4.73	-0.54	115
SnTe (N[10 ²⁰ cm ⁻³] = 1.01) [172]	10.2	0.90	-0.09	98.0
USb [172]	5.16	-0.28	0.02	194
	5.16	0.28	-0.02	194
	6.27	-0.26	0.04	159
USE [172]	4.25	0.35	-0.08	235
	5.16	0	0	194
UTe [172]	6.97	0.10	-0.01	143

внешнего слоя к толщине внутреннего слоя h_2/h_1 . При этом будем обсуждать только случай более толстого внешнего слоя, т.е. с $\rho > 1$. Упругость каждого слоя, образованного из кубических кристаллов, характеризуется матричными коэффициентами податливости s_{11} , s_{12} , s_{44} с соответствующим номером слоя в виде дополнительного верхнего индекса. Анализ растяжения двухслойной трубки в приближении Сен-Венана требует учета радиальной зависимости напряженно-деформационного состояния в этих слоях с помощью двух систем уравнений закона Гука при $r_0 \leq r \leq r_i$

и $r_i \leq r \leq R_0$

$$\begin{aligned} u_{zz}^1(r) &= s_{11}^1 \sigma_{zz}^1(r) + s_{12}^1 (\sigma_{\varphi\varphi}^1(r) + \sigma_{rr}^1(r)), \\ u_{\varphi\varphi}^1(r) &= s_{12}^1 (\sigma_{zz}^1(r) + \sigma_{rr}^1(r)) + s_{11}^1 \sigma_{\varphi\varphi}^1(r), \\ u_{rr}^1(r) &= s_{12}^1 (\sigma_{zz}^1(r) + \sigma_{\varphi\varphi}^1(r)) + s_{11}^1 \sigma_{rr}^1(r), \\ 2u_{\varphi z}^1(r) &= s_{44}^1 \sigma_{\varphi z}^1(r), \quad 2u_{rz}^1(r) = s_{44}^1 \sigma_{rz}^1(r), \quad 2u_{r\varphi}^1(r) = s_{44}^1 \sigma_{r\varphi}^1(r). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{zz}^2(r) &= s_{11}^2 \sigma_{zz}^2(r) + s_{12}^2 (\sigma_{\varphi\varphi}^2(r) + \sigma_{rr}^2(r)), \\ u_{\varphi\varphi}^2(r) &= s_{12}^2 (\sigma_{zz}^2(r) + \sigma_{rr}^2(r)) + s_{11}^2 \sigma_{\varphi\varphi}^2(r), \\ u_{rr}^2(r) &= s_{12}^2 (\sigma_{zz}^2(r) + \sigma_{\varphi\varphi}^2(r)) + s_{11}^2 \sigma_{rr}^2(r), \\ 2u_{\varphi z}^2(r) &= s_{44}^2 \sigma_{\varphi z}^2(r), \quad 2u_{rz}^2(r) = s_{44}^2 \sigma_{rz}^2(r), \quad 2u_{r\varphi}^2(r) = s_{44}^2 \sigma_{r\varphi}^2(r). \end{aligned}$$

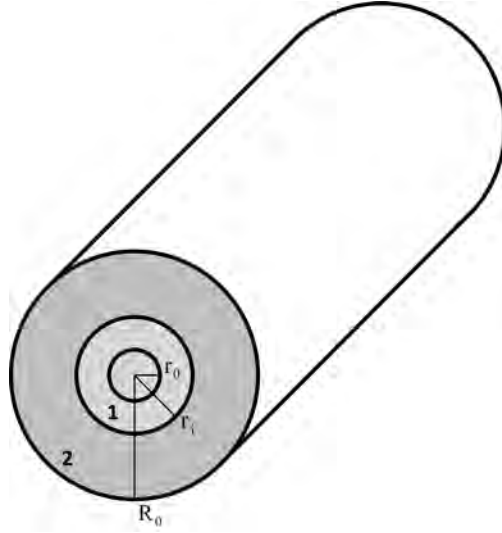


Рис. 2.32: Полая двухслойная цилиндрическая трубка. Слой 1: $r_0 \leq r \leq r_i$, слой 2: $r_i \leq r \leq R_0$.

Уравнения равновесия и отсутствие сил на внешней и внутренней поверхности полой двухслойной трубки приводят к обращению в нуль сдвиговых напряжений $\sigma_{r\varphi}^1(r)$, $\sigma_{r\varphi}^2(r)$, $\sigma_{rz}^1(r)$, $\sigma_{rz}^2(r)$. Однозначность одинаковых смещений на поверхности сцепления двух слоев приводит к дополнительным ограничениям

$$\begin{aligned} u_{zz}^1(r) &= \varepsilon, & u_{rr}^1(r) &= \frac{d}{dr}(ru_{\varphi\varphi}^1(r)), \\ u_{zz}^2(r) &= \varepsilon, & u_{rr}^2(r) &= \frac{d}{dr}(ru_{\varphi\varphi}^2(r)), \\ u_{\varphi z}^1(r_i) &= u_{\varphi z}^2(r_i) = \frac{1}{2}\tau r, & \varepsilon &= \text{const}, \quad \tau = \text{const}. \end{aligned}$$

В отсутствие крутящего момента $\tau = 0$ и исчезают также остальные сдвиговые деформации и напряжения $u_{\varphi z}^1(r) = u_{\varphi z}^2(r)$, $\sigma_{\varphi z}^1(r) = \sigma_{\varphi z}^2(r)$. С учетом уравнений равновесия для нормальных напряжений

$$\sigma_{\varphi\varphi}^1(r) = \frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}^1(r)), \quad \sigma_{\varphi\varphi}^2(r) = \frac{d}{dr}(r\sigma_{rr}^2(r)),$$

соотношений закона Гука и всех дополнительных соотношений находим отдельные дифференциальные уравнения второго порядка для радиальных компонент напряжений $\sigma_{rr}^1(r)$, $\sigma_{rr}^2(r)$

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}^1(r)) \right) = \sigma_{rr}^1(r), \quad \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}^2(r)) \right) = \sigma_{rr}^2(r).$$

Эти уравнения имеют степенные решения вида

$$\sigma_{rr}(r) = \begin{cases} \sigma_{rr}^1(r) = A_1\varepsilon + A_2\varepsilon \left(\frac{r_0}{r}\right)^2, & r_0 \leq r \leq r_i \\ \sigma_{rr}^2(r) = B_1\varepsilon + B_2\varepsilon \left(\frac{r_i}{r}\right)^2, & r_i \leq r \leq R_0 \end{cases} \quad (2.62)$$

Остальные компоненты нормальных напряжений можно выразить через эти радиальные компоненты. При этом продольное нормальное напряжение $\sigma_{zz}(r)$ меняется скачком на поверхности раздела слоев $r = r_i$ от одного постоянного значения до другого

$$\sigma_{zz}(r) = \begin{cases} \varepsilon \frac{1 - 2s_{12}^1 A_1}{s_{11}^1}, & r_0 \leq r \leq r_i \\ \varepsilon \frac{1 - 2s_{12}^2 B_1}{s_{11}^2}, & r_i < r \leq R_0 \end{cases} \quad (2.63)$$

Радиальные нормальные напряжения обращаются в нуль на внутренней и внешней поверхностях двухслойной трубки ($\sigma_{rr}^1(r_0) = 0$, $\sigma_{rr}^2(R_0) = 0$). Эти же напряжения $\sigma_{rr}^1(r)$, $\sigma_{rr}^2(r)$, а также нормальные угловые деформации $u_{\varphi\varphi}^1(r)$, $u_{\varphi\varphi}^2(r)$, совпадают на поверхности раздела при $r = r_i$. В итоге имеем четыре ограничения на четыре постоянных коэффициента A_1 , A_2 , B_1 , B_2

$$A_1 = -A_2 = -\rho^2 B_1 = B_2 = \left(\frac{s_{12}^1}{s_{11}^1} - \frac{s_{12}^2}{s_{11}^2} \right) \frac{1}{\Lambda},$$

$$\Lambda \equiv N_2 - M_1 + \frac{1}{\rho^2} (N_1 - M_2), \quad (2.64)$$

$$M_k \equiv s_{11}^k + s_{12}^k - 2 \frac{s_{12}^k s_{12}^k}{s_{11}^k}, \quad N_k \equiv s_{12}^k - s_{11}^k, \quad (k = 1, 2).$$

2.9.2. Эффективные модуль Юнга и коэффициенты Пуассона

Эффективный модуль Юнга определяется как коэффициент пропорциональности между действующей на единицу площади основания двухслойной трубки растягивающей силой и продольной деформацией $u_{zz}(r) = \varepsilon$

$$E = \frac{2}{\varepsilon(R_0^2 - r_0^2)} \left(\int_{r_0}^{r_i} \sigma_{zz}^1(r) r dr + \int_{r_0}^{r_i} \sigma_{zz}^1(r) r dr \right).$$

Простое вычисление с использованием выражения для $\sigma_{zz}(r)$ приводит к результату

$$E = \frac{1 - 2s_{12}^1 A_1}{s_{11}^1 (1 + \rho^2)} + \frac{\rho^2 + 2s_{12}^2 A_1}{s_{11}^2 (1 + \rho^2)}. \quad (2.65)$$

Как видно отсюда и из формул (2.64), безразмерный эффективный модуль Юнга $s_{11}^1 E$ зависит от безразмерных комбинаций коэффициентов податливости двух исходных трубок $s_{11}^1, s_{11}^2, s_{12}^1, s_{12}^2$ и отношений толщин слоев двухслойной трубки $\rho = h_2/h_1$.

Для полой цилиндрической двухслойной трубки с одинаковыми объемами внутреннего (1) и внешнего (2) слоев мы имеем $\pi(r_i^2 - r_0^2)L = \pi(R_0^2 - r_i^2)L$, или в безразмерной записи $\rho_2^2 + 1/\rho_1^2 = 2$ при $\rho_1 \equiv r_i/r_0, \rho_2 \equiv R_0/r_i$. Выражения для эффективного модуля Юнга в этом частном случае принимают вид

$$E = \frac{1 - 2s_{12}^1 A_1}{2s_{11}^1} + \frac{1 + 2s_{12}^2 A_1}{2s_{11}^2}, \quad (2.66)$$

$$A_1 = \left(\frac{s_{12}^1}{s_{11}^1} - \frac{s_{12}^2}{s_{11}^2} \right) \frac{1}{\Lambda}, \quad \Lambda \equiv 2N_2 - M_1 - M_2 + \frac{1}{\rho_1^2} (N_1 - N_2).$$

Обсудим численный пример для двухслойных трубок, образуемых исходной ауксетической трубкой из кубического кристалла $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ ($s_{11}^1 = 15.3 \text{ ТПа}^{-1}$, $s_{12}^1 = 7.05 \text{ ТПа}^{-1}$; $\nu = -0.46$, $E_{00} = 65.4 \text{ ГПа}$) во внешнем слое. Исходные неауксетические трубки из кристаллов Li, Ca, Th, Au, Al, Ge, Fe, SiC, W с модулями Юнга E_0 пусть заполняют внутренний слой. Результаты расчетов эффективного модуля Юнга E по формулам (2.66) при $\rho_2 = 1.2$, $1/\rho_1^2 = 0.56$ и модуля Юнга E_s для двухслойной трубки, найденного по простому «правилу сумм» $E_s = (E_{00} + E_0)/2$, приведены в Табл.2.17. Из таблицы можно видеть, что большие отклонения от предсказаний по «правилу смесей» имеют место. Они быстро увеличиваются с увеличением модуля Юнга E_0 для неауксетика, заполняющего внутренний слой трубки.

Уравнения закона Гука позволяют выразить нормальные деформации $u_{rr}(r)$, $u_{\varphi\varphi}(r)$ по найденным ранее нормальным напряжениям. В свою очередь по этим деформациям находятся радиальные и угловые эффективные коэффициенты Пуассона $\nu_{rz}(r)$, $\nu_{\varphi z}(r)$

$$\nu_{rz}(r) = -u_{rr}(r)/\varepsilon, \quad \nu_{\varphi z}(r) = -u_{\varphi\varphi}(r)/\varepsilon.$$

Такие эффективные коэффициенты Пуассона для двухслойных трубок не являются однородными и совпадающими в отличие от однослойных трубок. В упрощенном случае $\rho_1 = \rho_2 = \rho = h_2/h_1$ мы имеем следующие зависимости от безразмерных геометрических отношений $r/r_i, h_2/h_1$ и безразмерных комбинаций коэффициентов податливости

Таблица 2.17: Сравнение эффективных модулей Юнга двухслойных трубок E со значениями E_s , вычисленными по «правилу смесей». Внешние слои трубок заполнены ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$.

Кристаллы-неауксетики	E_0 , ГПа	E , ГПа	E_s , ГПа	$E - E_s$, ГПа
Li	3.17	36.9	34.3	2.6
Ca	9.62	42.9	37.5	5.43
Th	36.5	63.9	51.0	12.9
Au	42.7	71.2	54.1	17.2
Al	62.5	78.7	63.9	14.8
Ge	103	97.4	84.1	13.3
Fe	130	117	97.9	18.9
SiC	303	201	184	16.8
W	408	255	237	17.9

$$-\nu_{\varphi z}(r) = \begin{cases} \frac{s_{12}^1}{s_{11}^1} + \left(M_1 - N_1 \frac{r_i^2}{\rho^2 r^2} \right) A_1, & \frac{1}{\rho} \leq \frac{r}{r_i} \leq 1 \\ \frac{s_{12}^2}{s_{11}^2} - \left(M_2 \frac{1}{\rho^2} - N_2 \frac{r_i^2}{r^2} \right) A_1, & 1 \leq \frac{r}{r_i} \leq \rho \end{cases}$$

$$-\nu_{rz}(r) = \begin{cases} \frac{s_{12}^1}{s_{11}^1} + \left(M_1 + N_1 \frac{r_i^2}{\rho^2 r^2} \right) A_1, & \frac{1}{\rho} \leq \frac{r}{r_i} \leq 1 \\ \frac{s_{12}^2}{s_{11}^2} - \left(M_2 \frac{1}{\rho^2} + N_2 \frac{r_i^2}{r^2} \right) A_1, & 1 \leq \frac{r}{r_i} \leq \rho \end{cases}$$

Численные расчеты по этим формулам с использованием значений коэффициентов податливости из [172, 175] показали, что деформационное влияние одного слоя двухслойных трубок на другой из-за жесткого сцепления слоев настолько велико, что не может быть и речи о применении простых «правил смесей» по отношению к эффективным коэффициентам Пуассона. Рис.2.33 отражает состояния поперечных сечений растягиваемых двухслойных трубок с $\rho = h_2/h_1 = 2$ и внешним слоем, заполняемым ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ с коэффициентом Пуассона -0.46 и модулем Юнга 65.4 ГПа в исходной однослойной трубке. При этом, внутренний слой двухслойных трубок заполняется неауксетиками из Ca, Al, Ge или W с коэффициентами Пуассона $0.4, 0.36, 0.27, 0.28$ и модулями Юнга 9.62 ГПа, 62.5 ГПа, 102.8 ГПа, 408.2 ГПа в исходных однослойных трубках. Как видно из рисунка, влияние ауксетика $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$, находящегося во внешнем слое, настолько велико, что эффективный коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ оказывается отрицательным во всем сечении трубки для исходных неауксетиков Ca, Al, Ge с относительно небольшими модулями Юнга. Причем, это влияние оказывается наибольшим в случае Ca, характеризующимся наименьшим модулем Юнга (см. распределения эффективного коэффициента $\nu_{\varphi z}(r)$ по сечению трубы). Коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ достигает тогда на внутренней

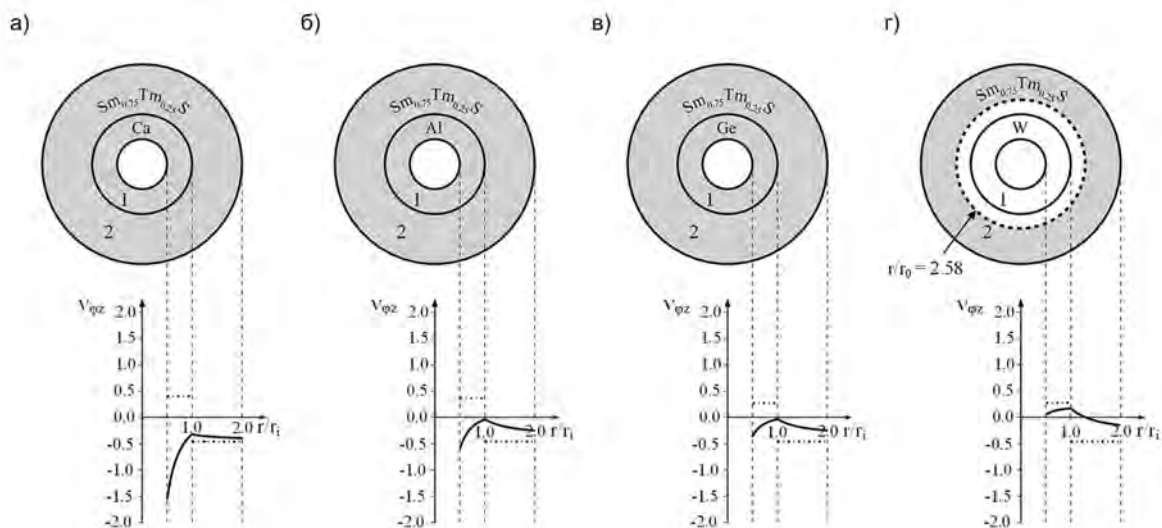


Рис. 2.33: Эффективный коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ в поперечных сечениях трубок, внешние слои которых заполнены ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$, а внутренние слои заполнены неауксетиками Ca, Al, Ge или W. Слои двухслойных трубок с отрицательным коэффициентом Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ окрашены серым цветом.

стенке двухслойного композита отрицательное значение -1.56 , которое значительно ниже известной нижней границы -1 для изотропных материалов. В случае более жесткого неауксетика W его влияние превосходит влияние ауксетика, так что коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ остается положительным во внутреннем слое 2. Более того, положительным этот коэффициент оказывается и в части внешнего слоя 1. Через внешний слой при $r = 1.29r_i$ проходит кривая ауксетичности $\nu_{\varphi z}(r) = 0$, разделяющая зоны отрицательного и положительного коэффициента Пуассона.



Рис. 2.34: Характер распределения коэффициента Пуассона $\nu_{rz}(r)$ в сечении двухслойной трубки при заполнении ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ внешнего слоя и неауксетиками Ca, Al, Ge или W внутреннего слоя. Зона с отрицательным коэффициентом Пуассона окрашена серым.

Что касается радиального коэффициента Пуассона $\nu_{rz}(r)$, то при том же внешнем ауксетике и при всех выше обсуждавшихся неауксетиках во внутреннем слое деление на с положительным и отрицательным коэффициентом Пуассона ка-

чественно совпадает с делением на слои 1 и 2 (Рис.2.34). Наибольшее значение 1.73 для коэффициента Пуассона достигается на внутренней поверхности двухслойной трубки с кальцием во внутреннем слое 1. Такое значение существенно выше верхней границы для коэффициента Пуассона изотропных материалов. Важное различие двух типов коэффициентов Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ и $\nu_{rz}(r)$ состоит в непрерывности функции $\nu_{\varphi z}(r)$ на границе раздела между слоями двухслойных трубок и разрывности функции $\nu_{rz}(r)$. Второй коэффициент может испытывать большие скачки при $r = r_i$.

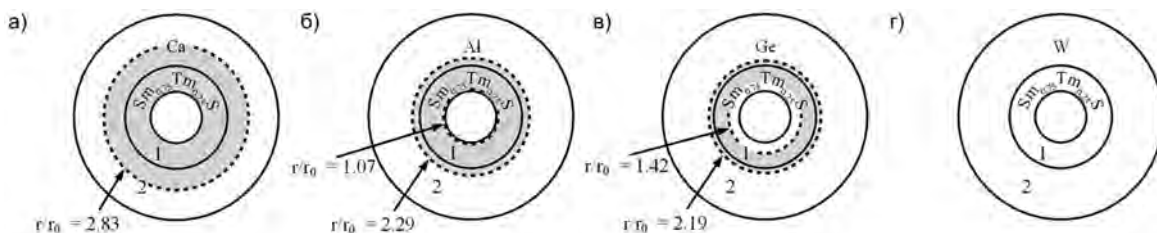


Рис. 2.35: Изменение зон с отрицательным эффективным коэффициентом Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ в двухслойных трубах (окрашены серым) в зависимости от заполнения внешнего слоя различными неауксетиками Ca, Al, Ge, W при заполнении внутреннего слоя ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$.

Резко меняется картина распределения знака эффективного коэффициента Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ по сечению двухслойных трубок в случае заполнения неауксетиками внешнего слоя и ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ внутреннего слоя при прежнем отношении толщин слоев $\rho = h_2/h_1 = 2$. Теперь во внешней части двухслойных трубок коэффициент Пуассона всегда положителен, а зона отрицательного коэффициента (затенена на рисунке) уменьшается последовательно с увеличением модуля Юнга у неауксетиков Ca, Al, Ge (Рис.2.35). Более того, в случае самого жесткого из четырех обсуждаемых неауксетиков (W) коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ оказывается положительным во всем сечении двухслойной трубки несмотря на то, что внутренний слой первоначально заполнялся ауксетиком.

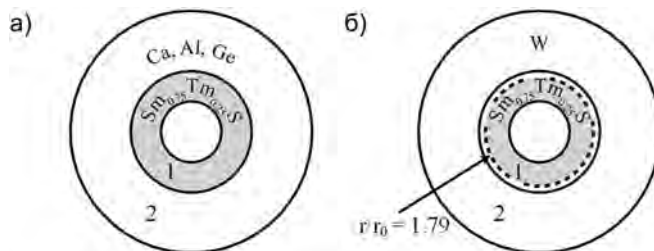


Рис. 2.36: Изменение границы зоны отрицательного эффективного коэффициента Пуассона $\nu_{rz}(r)$ (зона окрашена серым) при смене неауксетиков Ca, Al, Ge, W во внешнем слое.

Эффективный радиальный коэффициент Пуассона $\nu_{rz}(r)$ при заполнении

внешнего слоя двухслойной трубки каким-либо из трех неауксетиков Ca, Al, Ge и внутреннего слоя исходным ауксетиком $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ оказывается отрицательным во внутреннем слое 1 и положительным во внешнем слое 2 (Рис.2.36). В случае заполнения слоя 2 гораздо более жестким неауксетиком W эффективный коэффициент Пуассона $\nu_{rz}(r)$ оказывается не только положительным в этом слое, но и меняет знак во внутреннем слое 1 из-за сильного неауксетического влияния W (Рис.2.36).

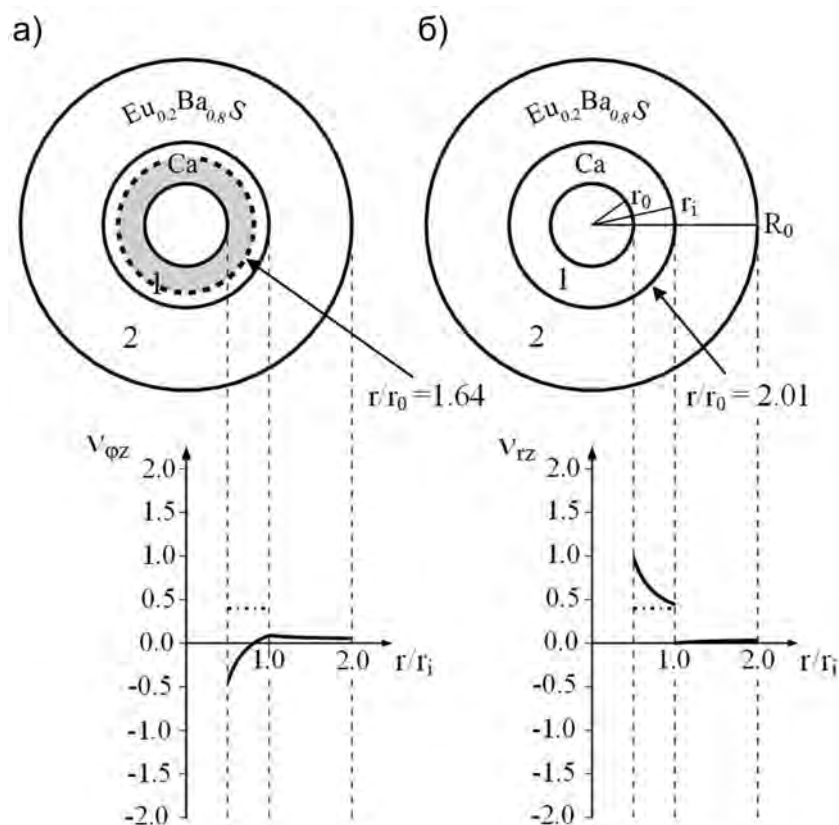


Рис. 2.37: Распределения эффективных коэффициентов Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ и $\nu_{rz}(r)$ в двухслойном трубчатом композите-ауксетике Ca-Eu_{0.2}Ba_{0.8}S, образованном парой неауксетиков при отношении толщин слоев $\rho = 2$.

Предыдущие примеры касались ауксетических двухслойных трубок, образованных из ауксетиков и неауксетиков. Однако, отрицательный коэффициент Пуассона оказывается возможным и при заполнении обоих слоев двухслойной трубки неауксетиками! В случае отдельной неауксетической трубки из $\text{Eu}_{0.2}\text{Ba}_{0.8}\text{S}$, которая характеризуется очень малым положительным коэффициентом Пуассона ($\nu = 0.03$, $E_0 = 114.9$ ГПа), в сумме с некоторыми другими неауксетиками это имеет место. Например, коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ в части внутреннего слоя 1 трубки-композита Ca-Eu_{0.2}Ba_{0.8}S при заполнении слоя 1 кальцием оказывается отрицательным (Рис.2.37). В то же время коэффициент Пуассона $\nu_{rz}(r)$ стремится к нулю при приближении к внутренней поверхности двухслойной трубки. Другая пара трубок-

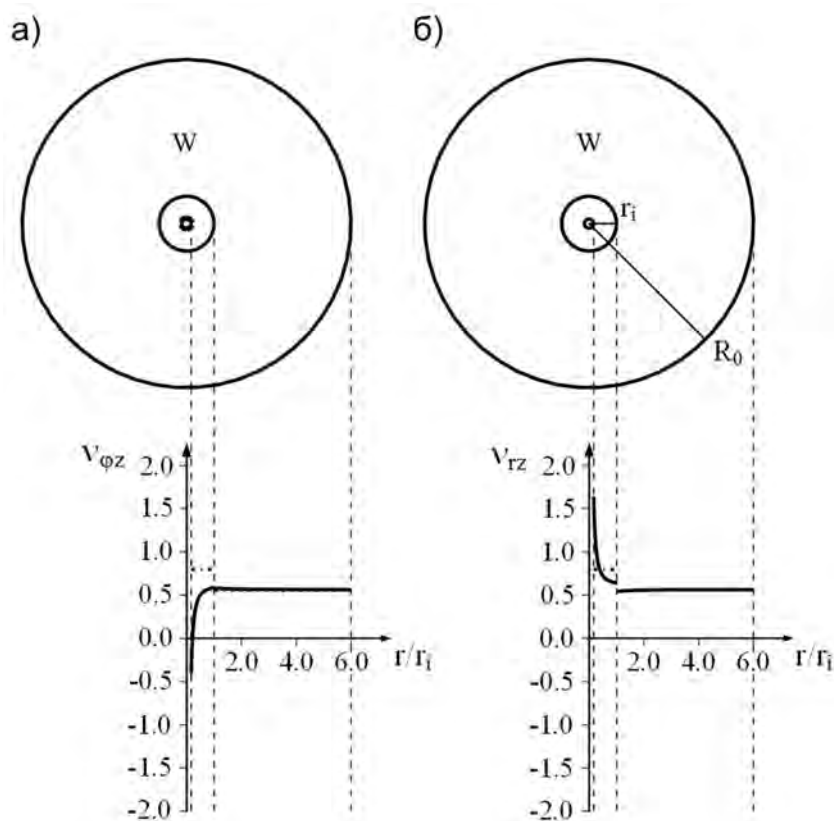


Рис. 2.38: Распределения эффективных коэффициентов Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ и $\nu_{rz}(r)$ в двухслойном трубчатом композите-ауксетике Ca-W, образованном парой неауксетиков при отношении толщин слоев $\rho = 6$.

неауксетиков из кальция и вольфрама с достаточно большими исходными коэффициентами Пуассона ($\nu = 0.4$, $\nu = 0.28$) образует трубку-композит Ca-W. Эта двухслойная трубка с кальцием во внутреннем слое при отношении толщин слоев $\rho = h_2/h_1 = 6$ характеризуется в окрестности внутренней поверхности отрицательным эффективным коэффициентом Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ при $r < 1.26r_0$ (Рис.2.38). Аналогичный результат получается для трубки-композита Ca-Mo с другим с таким же жестким неауксетиком Mo во внешнем слое 2 при отношении толщин слоев $\rho = h_2/h_1 = 6$. Рис.2.39 отражает еще один пример ауксетической двухслойной трубки, составленной из пары неауксетических исходных однослойных трубок с Li и Cr при отношении толщин слоев $\rho = h_2/h_1 = 2$. Однослойная трубка из Li характеризуется меньшим модулем Юнга 3.67 ГПа и большим коэффициентом Пуассона 0.46. Исходная трубка из Cr имеет примерно в десять раз больший модуль Юнга 32.8 ГПа и примерно в три раза меньший коэффициент Пуассона 0.16. В итоге при $\rho = h_2/h_1 = 2$ коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ двухслойной трубки Li-Cr, как видно из Рис.2.39, меняет знак во внутреннем слое, заполненном литием. Практически такой же вид характерен для двухслойной трубки из AlNi (60%atNi) во внутреннем слое и хрома во внешнем.

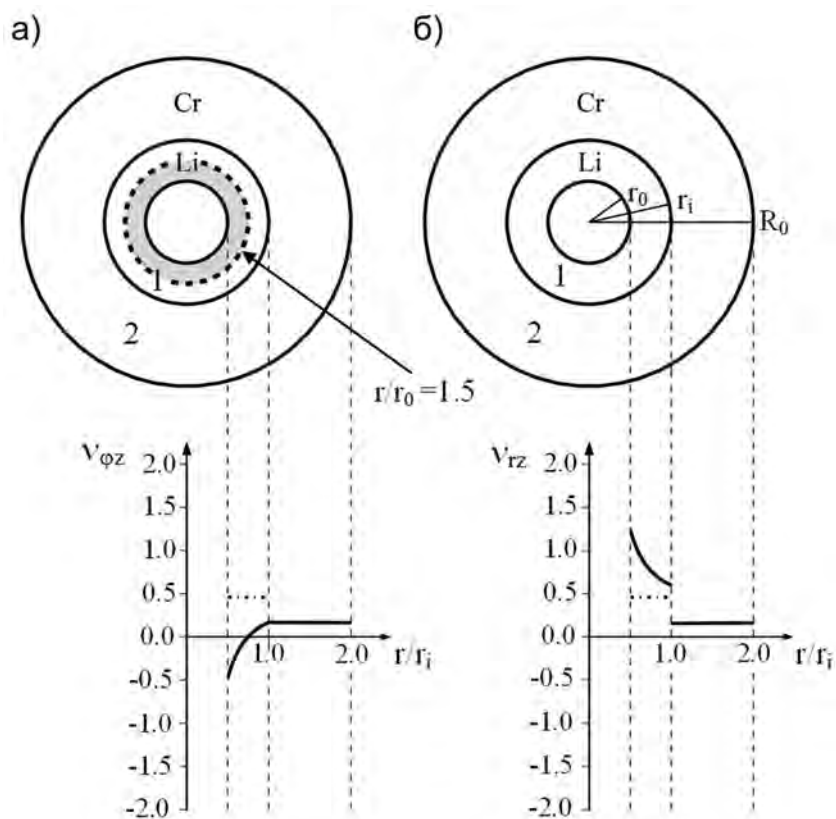


Рис. 2.39: Распределения эффективных коэффициентов Пуассона $\nu_{\varphi z}(r)$ и $\nu_{rz}(r)$ в двухслойном трубчатом композите-ауксетике Li-Cr, образованном парой неауксетиков при отношении толщин слоев $\rho = 2$.

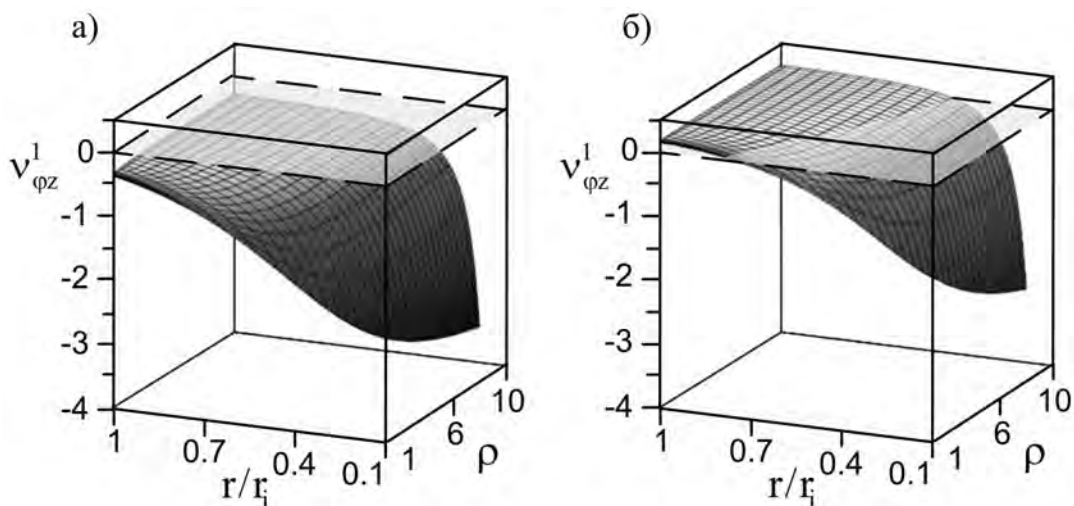


Рис. 2.40: Изменение эффективного коэффициента Пуассона во внутреннем слое трубки $\nu_{\varphi z}^1(r)$ с изменением отношения толщин слоев $\rho = h_2/h_1$ и безразмерной координаты r/r_i для композита неауксетик-ауксетик Ca-Sm_{0.75}Tm_{0.25}S (а) и композита неауксетик-неауксетик Li-Cr (б).

Сильное влияние на знак коэффициента Пуассона двухслойных трубок оказывает соотношение толщин составляющих слоев. Приведем несколько примеров с отношением $\rho = h_2/h_1$, изменяющимся от 1 до 10. Численный результат для композита Ca-Sm_{0.75}Tm_{0.25}S с ауксетиком Sm_{0.75}Tm_{0.25}S во внешнем слое 2 и неауксетиком Ca во внутреннем представлен на Рис.2.40. Рисунок отражает зависимость эффективного коэффициента Пуассона $\nu_{\varphi z}^1(r)$ от безразмерной радиальной координаты r/r_i и отношения толщин слоев ρ во внутреннем слое. Можно видеть, что при всех отношениях толщин $1 < \rho < 10$ такой коэффициент Пуассона отрицателен и растет по величине с ростом ρ . При $\rho \approx 10$ он достигает ≈ -3.5 . Это больше чем в три раза превосходит по величине минимальное теоретическое значение коэффициента Пуассона -1 для изотропных материалов, и почти в восемь раз коэффициент Пуассона исходного ауксетика Sm_{0.75}Tm_{0.25}S.

Существенное влияние на поведение двухслойных трубок оказывает наряду с отношением модулей Юнга составляющих кристаллов отношение толщин слоев трубок. Примеры композита неауксетик-ауксетик Ca-Sm_{0.75}Tm_{0.25}S и композита из неауксетиков Li-Cr отражены на Рис.2.40. Мы ограничиваемся здесь иллюстрацией зависимостей эффективного коэффициента Пуассона во внутреннем слое $\nu_{\varphi z}^1(r)$ от отношения толщин слоев $\rho = h_2/h_1$ в интервале $1 \leq \rho \leq 10$ и безразмерной радиальной координаты r/r_i в интервале $1/10 \leq r/r_i \leq 1$. Такой коэффициент у композита Ca-Sm_{0.75}Tm_{0.25}S является всегда отрицательным, убывает с ростом ρ и достигает значения -3.44 при $\rho = 10$ у внутренней поверхности полый трубки. Это больше чем в три раза превосходит по величине минимальное теоретическое значение коэффициента Пуассона для изотропных материалов, и почти в восемь раз коэффициент Пуассона исходного ауксетика Sm_{0.75}Tm_{0.25}S. Коэффициент Пуассона у композита из двух неауксетиков Li и Cr также быстро достигает большого отрицательного значения -2.85 при $\rho = 10$ у внутренней поверхности трубки. Такое минимальное значение $\nu_{\varphi z}^1(r)$ также существенно превосходит минимальный коэффициент Пуассона для однородных изотропных материалов -1 . Картина изменения эффективного коэффициента $\nu_{\varphi z}^1(r)$ для двух обсуждаемых различных типов композитов оказывается неожиданно похожей (Рис.2.40).

2.10. Эффект Пойнтинга для цилиндрически - анизотропных нано/микротрубок [31–33, 36–38]

Более ста лет назад Джон Генри Пойнтинг экспериментально обнаружил, что при закручивании стальных, медных и латунных проволок происходит их удлинение [162]. При этом удлинение было пропорциональным квадрату угла кручения. Подобный тип зависимости, как оказалось [164], соответствует случаю нелинейной изотропной упругости. В случае линейной анизотропной упругости возможен аналогичный линейный эффект Пойнтинга. Ниже линейный прямой и обратный эффект

Пойнтинга детально описан для нано/микротрубок из кубических кристаллов, и более кратко изложен для других типов кристаллов.

2.10.1. От кубических кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией

Упругие свойства анизотропных материалов при малых деформациях можно характеризовать тензором четвертого ранга коэффициентов податливости s_{ijkl} , связывающим тензор деформаций с тензором напряжений согласно линейному закону Гука

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}.$$

Вместо такой тензорной записи в трехмерных декартовых координатах часто используют эквивалентную 6-мерную матричную запись с матричными коэффициентами податливости s_{mn} . Минимальное число независимых таких коэффициентов составляет три для кристаллов кубической системы.

Для кристаллов кубической системы при выборе декартовой системы координат с осями, совпадающими с осями симметрии четвертого порядка, тремя независимыми коэффициентами податливости можно считать s_{1111} , s_{1122} , s_{1212} , которым соответствует матричная запись [171]

$$\|s_{mn}\| \equiv \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}.$$

В силу тензорного характера s_{ijkl} при повороте на угол χ вокруг оси 3 эти компоненты в повернутой штрихованной системе координат получаются из исходных с помощью 3×3 матрицы поворота (l_{ij})

$$s'_{\alpha\beta\mu\nu} = l_{\alpha i} l_{\beta j} l_{\mu k} l_{\nu l} s_{ijkl},$$

$$\|l_{ij}\| \equiv \begin{pmatrix} \cos \chi & \sin \chi & 0 \\ -\sin \chi & \cos \chi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Соответствующая матрица коэффициентов податливости $\|s_{ij}\|$ преобразуется при этом с помощью некоторой другой матрицы 6×6 $\|q_{ij}\|$, связанной с матрицей поворота [161],

$$s'_{ij} = q_{i\alpha}q_{j\beta}s_{\alpha\beta}$$

и принимает вид

$$\|s'_{ij}\| = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & 0 & s'_{16} \\ s'_{12} & s'_{11} & s'_{13} & 0 & 0 & -s'_{16} \\ s'_{13} & s'_{13} & s'_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 \\ s'_{16} & -s'_{16} & 0 & 0 & 0 & s'_{66} \end{pmatrix}. \quad (2.67)$$

Здесь, штрихованные коэффициенты податливости s'_{ij} следующим образом зависят от угла поворота χ

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11} - 0.5\Delta \sin^2 2\chi, & s'_{12} &= s_{12} + 0.5\Delta \sin^2 2\chi, \\ s'_{16} &= -0.5\Delta \sin 4\chi, & s'_{66} &= s_{66} + 2\Delta \sin^2 2\chi, \\ s'_{13} &= s_{12}, & s'_{33} &= s_{11}, & s'_{44} &= s_{66}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Размерная комбинация коэффициентов податливости $\Delta \equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{66}$ известна как параметр анизотропии. Из этих формул видна периодичность коэффициентов s'_{11} , s'_{12} , s'_{16} , s'_{66} по χ с периодом $\pi/2$. Отметим также, что штрихованные коэффициенты податливости s'_{11} , s'_{12} , s'_{66} являются четными функциями угла поворота, а коэффициент s'_{16} меняет знак при замене $\chi \rightarrow -\chi$ и в окрестности точки $\pi/4$.

Будем пользоваться идеализированным представлением о соответствии прямолинейно - анизотропной упругости пластинки и криволинейно - анизотропной упругости образованной из нее нано/микротрубки. Полагаем, что нормаль к основной плоскости пластины совпадает с кристаллографической осью кубического кристалла (осью 3), а нормали к двум боковым плоскостям отличаются от кристаллографических осей из-за поворота на угол χ вокруг оси 3. Тогда при соответствии между повернутым (штрихованным) базисом прямоугольной пластики и локальным цилиндрическим базисом трубки можно записать закон Гука для цилиндрически-анизотропной нано/микротрубки в виде

$$\begin{aligned} u_{zz} &= s'_{11}\sigma_{zz} + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13}\sigma_{rr} - s'_{16}\sigma_{\varphi z}, \\ u_{\varphi\varphi} &= s'_{12}\sigma_{zz} + s'_{11}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13}\sigma_{rr} + s'_{16}\sigma_{\varphi z}, \\ u_{rr} &= s'_{13}\sigma_{zz} + s'_{13}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{33}\sigma_{rr}, \\ 2u_{\varphi z} &= s'_{16}(\sigma_{\varphi\varphi} - \sigma_{zz}) + s'_{66}\sigma_{\varphi z}, & 2u_{rz} &= s'_{44}\sigma_{rz}, & 2u_{r\varphi} &= s'_{44}\sigma_{r\varphi}. \end{aligned}$$

Важная особенность подобной упругости в том, что между направлением оси трубки и кристаллографической осью имеется угол χ , именуемый углом хиральности. Этому обязана штриховка коэффициентов податливости s'_{ij} . В силу выше-

упомянутого масштабного фактора будет отсутствовать прямая связь хиральности многослойных и однослойных нанотрубок. Последние требуют молекулярного описания.

Рассмотрим задачу о растяжении и кручении полых цилиндрически - анизотропных нано/микротрубок в отсутствии напряжений на боковых поверхностях под действием интегральной силы и интегрального момента, приложенных к основаниям трубок

$$\begin{aligned} \sigma_{ri}|_{r=r_0} = 0, \quad \sigma_{ri}|_{r=R_0} = 0, \\ \int \sigma_{zz}(r)dS = PS, \quad \int \sigma_{\varphi z}(r)rdS = M. \end{aligned}$$

Решаем задачу полубратным методом Сен-Венана. Предполагаем решение осесимметричным радиально-неоднородным. Тогда уравнения равновесия вместе с краевыми условиями на боковых поверхностях трубок приводят к равенству нулю двух касательных напряжений $\sigma_{rz}(r)$, $\sigma_{r\varphi}(r)$, и соотношения закона Гука несколько упрощаются. Три нормальных напряжения $\sigma_{rr}(r)$, $\sigma_{\varphi\varphi}(r)$, $\sigma_{zz}(r)$ и одно касательное напряжение $\sigma_{\varphi z}(r)$ обеспечивают радиально-неоднородные деформации $u_{rr}(r)$, $u_{\varphi\varphi}(r)$, $u_{zz}(r)$, $u_{\varphi z}(r)$. Такие деформации дают однозначное поле смещений при выполнении дополнительных ограничений (более детальный вывод смотри в разделе 2.2)

$$\begin{aligned} u_{rr}(r) = \frac{d}{dr}[ru_{\varphi\varphi}(r)], \quad u_{zz}(r) = \varepsilon, \quad 2u_{\varphi z}(r) = \tau r, \\ \varepsilon = \text{const}, \quad \tau = \text{const}. \end{aligned}$$

Пользуясь этими ограничениями, соотношениями закона Гука и уравнениями равновесия, можно получить для нормального напряжения $\sigma_{rr}(r)$ уравнение второго порядка

$$\begin{aligned} a_0 \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] + a_1 \sigma_{rr} + a_2 \varepsilon + a_3 r \tau = 0, \\ a_0 \equiv (s'_{11} + s'_{12})(s'_{11}s'_{66} - s'_{12}s'_{66} - 2(s'_{16})^2), \\ a_1 \equiv s'_{66}(s'_{13})^2 - s'_{11}s'_{33}s'_{66} + s'_{33}(s'_{16})^2, \\ a_2 \equiv s'_{66}s'_{12} - s'_{13}s'_{66} + (s'_{16})^2, \quad a_3 \equiv s'_{16}(2s'_{11} + 2s'_{12} - s'_{13}). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Решая это дифференциальное уравнение удается найти вид компонент напряжений. После выполнения интегрирований по сечению нано/микротрубок приходим к следующим связям удельной растягивающей силы P и крутящего момента M с параметрами ε , τ

$$\begin{pmatrix} P \\ M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \tau r_0 \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

Здесь для коэффициентных функций m_{ij} получаются выражения

$$\begin{aligned}
 m_{11} &= \frac{2}{(\rho^2 - 1)\Sigma_0} \left[\left(s'_{66} + \frac{a_2\alpha_1}{a_0 + a_1} \right) \frac{\rho^2 - 1}{2} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{a_2\alpha_k}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \frac{\rho^{\lambda_+ + 2} - 1}{\lambda_+ + 2} - \frac{a_2\alpha_{-k}}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \frac{\rho^{\lambda_- + 2} - 1}{\lambda_- + 2} \right], \\
 m_{12} &= \frac{2}{(\rho^2 - 1)\Sigma_0} \left[\left(s'_{16} + \frac{a_3\alpha_2}{4a_0 + a_1} \right) \frac{\rho^3 - 1}{3} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{a_3\alpha_k}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \frac{\rho^{\lambda_+ + 2} - 1}{\lambda_+ + 2} - \frac{a_3\alpha_{-k}}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \frac{\rho^{\lambda_- + 2} - 1}{\lambda_- + 2} \right], \\
 m_{21} &= \frac{2\pi r_0^3}{\Sigma_0} s'_{16} \left[\left(1 + \frac{a_2\beta_1}{a_0 + a_1} \right) \frac{\rho^3 - 1}{3} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{a_2\beta_k}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \frac{\rho^{\lambda_+ + 3} - 1}{\lambda_+ + 3} - \frac{a_2\beta_{-k}}{a_0 + a_1} \frac{\rho^{-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3} \right], \\
 m_{22} &= \frac{2\pi r_0^3}{\Sigma_0} \left[\left(s'_{11} + \frac{a_3\beta_2}{4a_0 + a_1} s'_{16} \right) \frac{\rho^4 - 1}{4} - \right. \\
 &\quad \left. - s'_{16} \left(\frac{a_3\beta_k}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+ - \lambda_-} - 1} \frac{\rho^{\lambda_+ + 3} - 1}{\lambda_+ + 3} + \frac{a_3\beta_{-k}}{4a_0 + a_1} \frac{\rho^{1-\lambda_+} - 1}{\rho^{\lambda_- - \lambda_+} - 1} \frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3} \right) \right], \\
 \Sigma_0 &\equiv s'_{11}s'_{66} - (s'_{16})^2, \quad \lambda_{\pm} = -1 \pm k, \quad k \equiv \sqrt{-a_1/a_0} \\
 \alpha_q &\equiv s'_{13}s'_{66} + q(s'_{12}s'_{66} + (s'_{16})^2), \quad \beta_q \equiv s'_{13} + q(s'_{12} + s'_{11}) \\
 &\quad (q = 1, 2, \pm k).
 \end{aligned}$$

В частном случае продольного растяжения нано/микротрубки под действием удельной силы P в отсутствие крутящего момента ($M = 0$) отсюда следует для модуля Юнга $E = P/\varepsilon$ и угла кручения τ

$$E = \frac{\det \|m_{ij}\|}{m_{22}}, \quad \tau r_0 = \Lambda \varepsilon, \quad \Lambda \equiv -\frac{m_{21}}{m_{22}}. \quad (2.71)$$

Таким образом, даже в отсутствие крутящего момента растяжение нано/микротрубки из кубических кристаллов вызывает ее закручивание (обратный эффект Пойнтинга).

В обратной ситуации действия крутящего момента M в отсутствие растягивающего усилия ($P = 0$) происходит изменение длины нано/микротрубки. Для крутильной жесткости $C = M/\tau$ и относительного удлинения ε имеем

$$C = \frac{\det \|m_{ij}\|}{m_{11}}, \quad \varepsilon = \Gamma \tau r_0, \quad \Gamma \equiv -\frac{m_{12}}{m_{11}}. \quad (2.72)$$

Такими соотношениями описывается прямой эффект Пойнтинга, для которого характерно изменение длины при кручении в отсутствие растягивающих усилий.

Отметим, что из указанных общих соотношений для модуля Юнга и крутильной жесткости получается линейная связь между ними следующего вида

$$m_{11}C = m_{22}E$$

Коэффициент этой связи m_{22}/m_{11} не является константой. Он зависит от упругих коэффициентов податливости s_{ij} , угла хиральности χ , и внешнего и внутреннего радиусов нано/микротрубки.

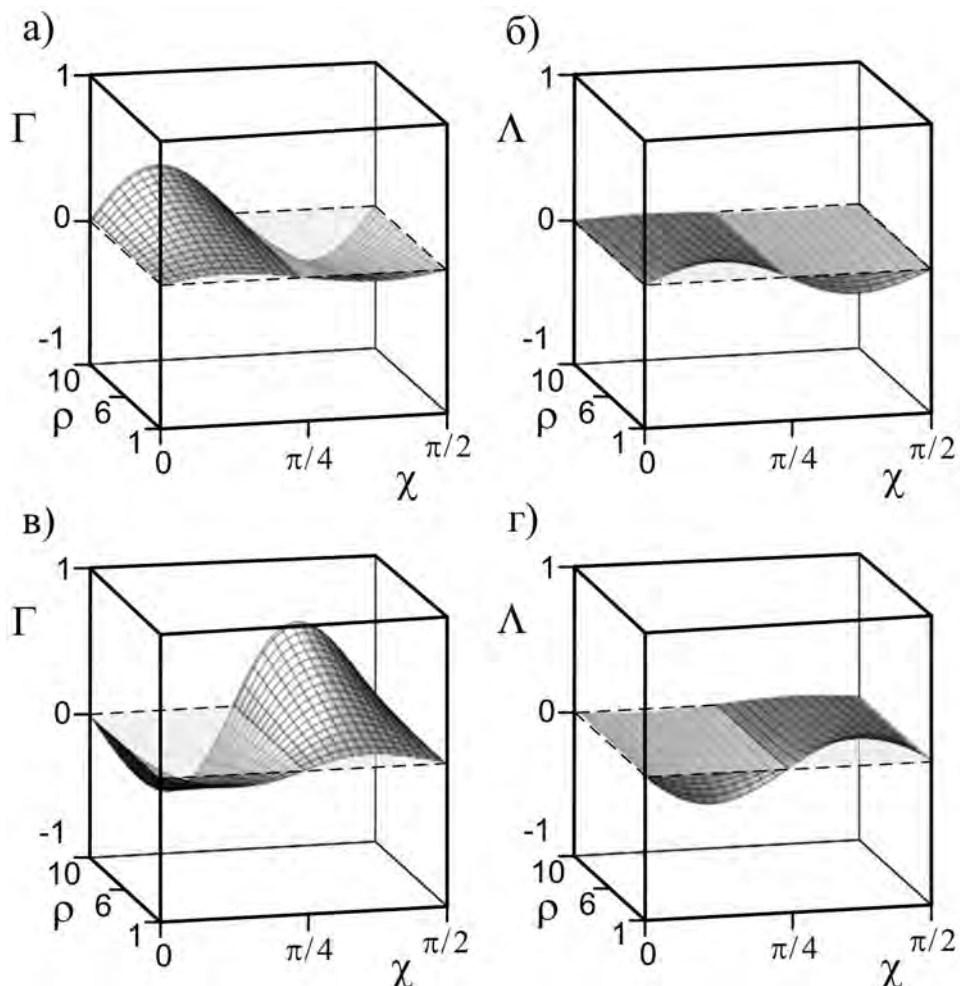


Рис. 2.41: Сравнение коэффициентов Пойнтинга Γ и Λ с изменением угла хиральности χ и параметра толщины ρ для скручиваемых и растягиваемых нано/микротрубок из кубических кристаллов Al (а и б) и Cr (в и г).

В пределе нулевого угла хиральности и при $\chi = \pi/4$ исчезает один штрихованный коэффициент податливости s'_{16} и коэффициент a_3 , соответственно. В силу этого недиагональные элементы m_{12} и m_{21} вышеприведенной матрицы пропадают, а диагональные m_{11} , m_{22} в нуль не обращаются. В итоге при нулевом угле хиральности и при $\chi = \pi/4$ имеем $\Gamma = 0$ и $\Lambda = 0$, т.е. исчезают прямой и обратный эффекты Пойнтинга. Кроме того, в соответствии с четностью зависимостей коэффициентов s'_{11} , s'_{12} , s'_{13} , s'_{33} , s'_{66} , a_0 , a_1 , a_2 , α_q , β_q , λ_{\pm} , k и нечетностью зависимостей s'_{16} , a_3 от угла хиральности нано/микротрубок зависимость недиагональных коэффициентов

m_{12} , m_{21} оказывается нечетной, а зависимость диагональных коэффициентов m_{11} , m_{22} четной функцией угла χ . Таким образом, прямой и обратный эффекты Пойнтинга (Γ , Λ) для нано/микротрубок из кубических кристаллов меняют знак при изменении знака угла хиральности. На Рис.2.41 приведено сравнение изменений коэффициентов Γ и Λ с изменением угла хиральности χ и безразмерного параметра толщины трубки ρ на примере нано/микротрубок из кристаллов Al и Sr. При фиксированном значении угла хиральности величина коэффициента $|\Gamma|$ монотонно растёт с ростом параметра ρ для всех кристаллов, а коэффициент $|\Lambda|$ ведет себя противоположным образом - монотонно падает. Рис.2.41а,б и Рис.2.41в,г являются типичными для нано/микротрубок из кубических кристаллов с $\Delta > 0$ и $\Delta < 0$, соответственно. Из рисунков ясно, что при положительном коэффициенте анизотропии Δ положительные эффекты Пойнтинга (прямой и обратный) для $0 < \chi < \pi/4$ сменяются отрицательными для $\pi/4 < \chi < \pi/2$. Обратная картина справедлива при $\Delta < 0$.

2.10.2. От тетрагональных кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией

А) Упругие свойства тетрагональных кристаллов характеризуются матрицей минимум из 6-ти различных коэффициентов податливости

$$\|s_{ij}\| = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}$$

При повороте вокруг главной кристаллографической оси (оси 3) на угол χ эта матрица переходит в матрицу вида (2.67) с семью независимыми штрихованными коэффициентами податливости, зависящими от исходных коэффициентов податливости s_{ij} и от угла поворота во многом аналогично (2.68),

$$\begin{aligned} s'_{11} = s'_{22} &= s_{11} - 0.5\Delta \sin^2 2\chi, & s'_{12} &= s_{12} + 0.5\Delta \sin^2 2\chi, \\ s'_{66} &= s_{66} + 2\Delta \sin^2 2\chi, & s'_{16} = -s'_{26} &= -0.5\Delta \sin 4\chi, \\ s'_{13} = s'_{23} &= s_{13}, & s'_{33} &= s_{33}, & s'_{44} = s'_{55} &= s_{44}, \\ \Delta &\equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{66}. \end{aligned} \tag{2.73}$$

Здесь также коэффициенты s'_{11} , s'_{12} , s'_{66} являются четными функциями, а s'_{16} нечетной функцией угла поворота. Эти штрихованные коэффициенты податливости являются периодическими функциями угла с периодом $\pi/2$. Коэффициенты s'_{16} и s'_{26} обращаются в нуль при $\chi = 0$ и $\chi = \pi/4$.

В итоге будем иметь для повернутых δ -ти константных тетрагональных кристаллов полностью аналогичное рассмотрение задачи кручения - растяжения для хиральных нано/микротрубок. Конечный результат для матрицы $\|m_{ij}\|$ будет одинаковым с полученным в предыдущем разделе. В силу общности (2.73) с (2.68) он, в частности, также указывает на нечетность зависимостей m_{12} , m_{21} и четность m_{11} , m_{22} от угла хиральности нано/микротрубок χ . Это означает согласно соотношениям предыдущего подраздела, что прямой и обратный линейные эффекты Пойнтинга меняют знак при изменении знака угла хиральности. В частности, отсюда следует отсутствие эффектов в отсутствие хиральности. Эффекты пропадают при $\chi = 0$, а также при $\chi = \pi/4$.

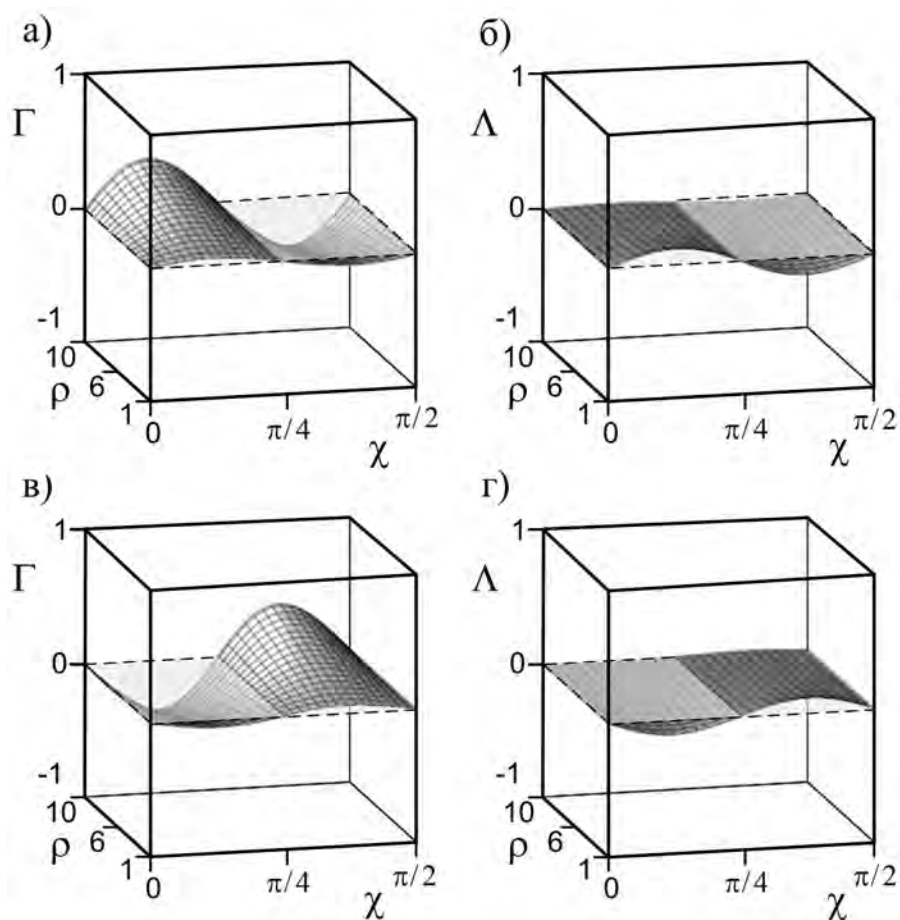


Рис. 2.42: Сравнение коэффициентов Пойнтинга Γ и Λ с изменением угла хиральности χ и параметра толщины ρ для скручиваемых и растягиваемых нано/микротрубок из δ -ти константных тетрагональных кристаллов MoSi_2 (а и б) и FeGe_2 (в и г).

Далее численные расчеты для нано/микротрубок из δ -ти константных тетрагональных кристаллов сделаны с использованием упругих коэффициентов из [172]. На Рис.2.42 приведены зависимости коэффициентов Γ и Λ от угла хиральности χ и безразмерного параметра толщины трубки ρ для нано/микротрубок из кристаллов

MoSi₂ и FeGe₂. Можно видеть, что для нано/микротрубок из 6-ти константных тетрагональных кристаллов, как и в случае нано/микротрубок из кубических кристаллов, величина $|\Gamma|$ при фиксированном значении угла хиральности монотонно растет с ростом параметра толщины ρ , а коэффициент $|\Lambda|$ – монотонно падает. Рис.2.42а,б и Рис.2.42в,г являются типичными для трубок из 6-ти константных кристаллов с $\Delta > 0$ и $\Delta < 0$, соответственно. Эффекты Пойнтинга для нано/микротрубок из таких кристаллов имеют осциллирующий характер. Для кристаллов с положительным коэффициентом анизотропии Δ удлинение трубок при кручении (положительный прямой эффект Пойнтинга) при $0 < \chi < \pi/4$ сменяется их укорачиванием (отрицательный прямой эффект Пойнтинга) при $\pi/4 < \chi < \pi/2$. В случае кристаллов с $\Delta < 0$ имеет место обратный порядок. Аналогичная картина справедлива и для обратного эффекта Пойнтинга.

Б) Несколько иная ситуация возникает в случае 7-ми константных тетрагональных кристаллов. Исходная матрица коэффициентов податливости выглядит следующим образом

$$\|s_{ij}\| = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & s_{16} \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & -s_{16} \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ s_{16} & -s_{16} & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}$$

При повороте вокруг главной кристаллографической оси 7-ми константная матрица тетрагонального кристалла $\|s_{ij}\|$ не меняет общего вида 7-ми константной матрицы и записывается как (2.67) с матричными коэффициентами податливости s'_{ij} , линейно зависящими от s_{ij} и нелинейно от угла поворота χ следующим образом

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11} - 0.5\Delta \sin^2 2\chi + 0.5s_{16} \sin 4\chi, \\ s'_{12} &= s_{12} + 0.5\Delta \sin^2 2\chi - 0.5s_{16} \sin 4\chi, \\ s'_{66} &= s_{66} + 2\Delta \sin^2 2\chi - 2s_{16} \sin 4\chi, \\ s'_{16} &= s_{16} \cos 4\chi - 0.5\Delta \sin 4\chi, \\ s'_{13} &= s_{13}, \quad s'_{33} = s_{33}, \quad s'_{44} = s_{44}, \\ \Delta &\equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{66}. \end{aligned} \tag{2.74}$$

Эти зависимости от угла остаются периодическими с прежним периодом $\pi/2$, но существенно отличаются от зависимостей (2.68). Однако в силу прежнего матричного вида (2.67) общий ход решения задачи кручения-растяжения остается таким же, как в разделе 2 для нано/микротрубок из повернутых кубических кристаллов. Основные конечные формулы (2.70)-(2.72) вместе с выражениями для m_{11} , m_{12} , m_{21} , m_{22} остаются прежними. Изменяется их интерпретация из-за отличия (2.74) от (2.68).

В силу формул (2.74) штрихованный коэффициент податливости s'_{16} не обращается в нуль при $\chi = 0$, из чего следует в соответствии с (2.70)-(2.72) наличие эффектов Пойнтинга для нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристаллов с нулевой хиральностью. Исчезновение этого коэффициента податливости, а, следовательно, и отсутствие эффектов Пойнтинга возможно при ненулевых значениях угла хиральности, определяемых из решений уравнения $\text{tg}4\chi = 2s_{16}/\Delta$ в интервале одного периода в $\pi/2$.

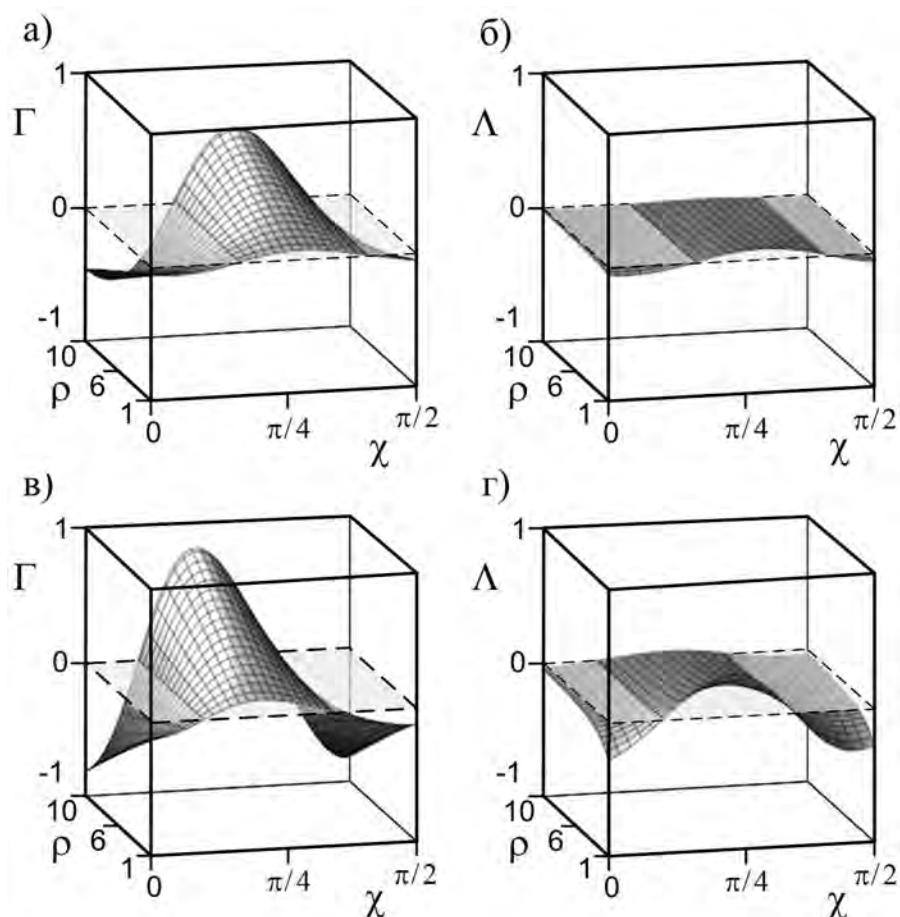


Рис. 2.43: Сравнение коэффициентов Пойнтинга Γ и Λ с изменением угла хиральности χ и параметра толщины ρ для скручиваемых и растягиваемых нано/микротрубок из 7-ти константных тетрагональных кристаллов $C_{14}H_8O_4$ (а и б) и $NaBi(MoO_4)_2$ (в и г).

Численные расчеты для нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристаллов сделаны с использованием упругих коэффициентов из [172]. На Рис.2.43 приведены зависимости коэффициентов Γ и Λ от угла хиральности χ и параметра толщины ρ для нано/микротрубок из кристаллов $C_{14}H_8O_4$ и $NaBi(MoO_4)_2$. Величина $|\Gamma|$ при фиксированном значении угла хиральности монотонно растет с ростом параметра толщины ρ , а коэффициент $|\Lambda|$ – монотонно падает. Эффекты Пойнтинга для нано/микротрубок из 7-ми константных тетрагональных кристал-

лов имеют осциллирующий характер. В отличие от нано/микротрубок из кубических и 6-ти константных тетрагональных кристаллов для нано/микротрубок из $C_{14}H_8O_4$ прямой и обратный эффекты Пойнтинга пропадают при углах хиральности $\chi = 0.27$ и $\chi = 1.05$, а для нано/микротрубок из $NaBi(MoO_4)_2$ при $\chi = 0.47$ и $\chi = 1.25$.

2.10.3. От орторомбических кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией

Приведем теперь основные формулы, связанные с решением задачи растяжение-кручение хиральных нано/микротрубок из орторомбических кристаллов. Матрица коэффициентов податливости таких кристаллов

$$\|s_{ij}\| = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{22} & s_{23} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{23} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}.$$

при повороте вокруг главной кристаллографической оси на угол χ принимает вид

$$\|s'_{ij}\| = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & 0 & s'_{16} \\ s'_{12} & s'_{22} & s'_{23} & 0 & 0 & s'_{26} \\ s'_{13} & s'_{23} & s'_{33} & 0 & 0 & s'_{36} \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & s'_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{45} & s'_{55} & 0 \\ s'_{16} & s'_{26} & s'_{36} & 0 & 0 & s'_{66} \end{pmatrix}.$$

Здесь тринадцать коэффициентов податливости $s'_{11}, s'_{12}, s'_{22}, s'_{13}, s'_{23}, s'_{33}, s'_{44}, s'_{55}, s'_{66}, s'_{45}, s'_{16}, s'_{26}, s'_{36}$ зависят от угла χ и исходных девяти коэффициентов податливости s_{ij} следующим образом

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11} + \delta \sin^4 \chi - 2\Delta \sin^2 \chi \cos^2 \chi, & s'_{22} &= s_{22} - \delta \sin^4 \chi - 2\Delta \sin^2 \chi \cos^2 \chi, \\ s'_{33} &= s_{33}, & s'_{12} &= s_{12} + (2\Delta + \Delta_1) \sin^2 \chi \cos^2 \chi, & s'_{13} &= s_{13} + (s_{23} - s_{13}) \sin^2 \chi \\ & & s'_{23} &= s_{23} + (s_{13} - s_{23}) \sin^2 \chi, & s'_{44} &= s_{44} + (s_{55} - s_{44}) \sin^2 \chi, \\ s'_{55} &= s_{55} + (s_{44} - s_{55}) \sin^2 \chi, & 2s'_{45} &= (s_{44} - s_{55}) \sin 2\chi, & s'_{36} &= (s_{23} - s_{13}) \sin 2\chi, \\ & & s'_{16} &= (-\Delta \cos 2\chi + \Delta_1 \sin^2 \chi) \sin 2\chi, \\ & & s'_{26} &= (\Delta \cos 2\chi + \Delta_1 \cos^2 \chi) \sin 2\chi, & \Delta_1 &\equiv s_{22} - s_{11} \\ & & s'_{66} &= s_{66} + (2\Delta + \Delta_1) \sin^2 2\chi, & 2\Delta &\equiv 2s_{11} - 2s_{12} - s_{66}. \end{aligned} \tag{2.75}$$

Из этих формул очевидна периодичность $s'_{11}, s'_{22}, s'_{13}, s'_{16}, s'_{26}, s'_{36}, s'_{23}, s'_{44}, s'_{55}, s'_{45}$ по χ с периодом π и периодичность s'_{12}, s'_{66} с периодом $\pi/2$. Коэффициенты $s'_{11}, s'_{22}, s'_{13}, s'_{12}, s'_{23}, s'_{66}, s'_{44}, s'_{55}$ оказываются четными функциями угла χ , а четыре коэффициента $s'_{45}, s'_{16}, s'_{26}, s'_{36}$ нечетными. Эти четыре коэффициента обращаются в нуль при $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$.

После сворачивания тонкой кристаллической пластины с такими штрихованными упругими коэффициентами податливости получаем цилиндрически - анизотропную нано/микротрубку с упругостью, описываемой законом Гука вида

$$\begin{aligned} u_{zz} &= s'_{11}\sigma_{zz} + s'_{12}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{13}\sigma_{rr} - s'_{16}\sigma_{\varphi z}, \\ u_{\varphi\varphi} &= s'_{12}\sigma_{zz} + s'_{22}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{23}\sigma_{rr} - s'_{26}\sigma_{\varphi z}, \\ u_{rr} &= s'_{13}\sigma_{zz} + s'_{23}\sigma_{\varphi\varphi} + s'_{33}\sigma_{rr} - s'_{36}\sigma_{\varphi z}, \\ 2u_{\varphi z} &= s'_{66}\sigma_{\varphi z} - s'_{16}\sigma_{zz} - s'_{26}\sigma_{\varphi\varphi} - s'_{36}\sigma_{rr}, \\ 2u_{rz} &= s'_{55}\sigma_{rz} - s'_{45}\sigma_{\varphi r}, \quad 2u_{r\varphi} = -s'_{45}\sigma_{rz} + s'_{44}\sigma_{\varphi r}. \end{aligned}$$

Задача о растяжении и кручении криволинейно-анизотропной полой нано/микротрубки из орторомбического кристалла в приближении Сен-Венана решается точно так же, как и в случае нано/микротрубки из кубического кристалла (см. подраздел 2.10.1). Для нормального напряжения $\sigma_{zz}(r)$ и касательного напряжения $\sigma_{\varphi z}(r)$ получается

$$\begin{aligned} t_{11}\sigma_{zz}(r) &= [1 - b_1(t_{12} + t_{13})]\varepsilon + \left[\frac{s'_{16}}{s'_{66}} - b_2(2t_{12} + t_{13}) \right] \tau r_0 \left(\frac{r}{r_0} \right) - \\ &\quad - \sum_{\pm} [t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_{\pm})] A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}, \\ s'_{66}\sigma_{\varphi z}(r) &= \left[\frac{s'_{16}}{t_{11}} + b_1 \left(s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \varepsilon + \\ &\quad + \left[1 + \frac{(s'_{16})^2}{s'_{66}t_{11}} + b_2 \left(2s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \tau r_0 \left(\frac{r}{r_0} \right) + \\ &\quad + \sum_{\pm} \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_{\pm}) \right] A_{\pm} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_{\pm}}, \\ A_+ &= b_1 \frac{\rho^{\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \varepsilon + b_2 \frac{\rho^{\lambda_-} - \rho}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \tau r_0, \quad A_- = b_1 \frac{1 - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \varepsilon + b_2 \frac{\rho - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \tau r_0. \end{aligned}$$

Здесь b_0, b_1, b_2 представляют собой различные комбинации из девяти эффективных коэффициентов податливости $s'_{11}, s'_{12}, s'_{22}, s'_{13}, s'_{33}, s'_{16}, s'_{26}, s'_{36}, s'_{66}$

$$\begin{aligned}
 b_0 &\equiv \frac{t_{11}t_{33} - t_{13}^2}{t_{11}t_{22} - t_{12}^2}, & b_1 &\equiv \frac{t_{13} - t_{12}}{t_{11}(t_{22} - t_{33}) + t_{13}^2 - t_{12}^2}, \\
 b_2 &\equiv \frac{1}{s'_{66}} \frac{s'_{16}(t_{13} - 2t_{12}) + (2s'_{26} - s'_{36})t_{11}}{t_{11}(4t_{22} - t_{33}) + t_{13}^2 - 4t_{12}^2}, \\
 t_{mn} &\equiv s'_{mn} - \frac{s'_{m6}s'_{n6}}{s'_{66}}, & \lambda_{\pm} &\equiv -1 \pm \sqrt{b_0}.
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

Осреднение этих напряжений (точнее $\sigma_{zz}(r)$ и $r\sigma_{\varphi z}(r)$) по сечению нано/микротрубки приводит к окончательному результату

$$\begin{aligned}
 m_{11} &= \frac{1}{t_{11}} - \frac{b_1}{t_{11}}(t_{12} + t_{13}) - \frac{2b_1}{t_{11}} \left[\frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_+)}{\rho^2 - 1} \frac{\rho^{\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_+ + 2} - 1}{\lambda_+ + 2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_-)}{\rho^2 - 1} \frac{1 - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_- + 2} - 1}{\lambda_- + 2} \right] \\
 m_{12} &= \left[\frac{s'_{16}}{s'_{66}} - b_2(2t_{12} + t_{13}) \right] \frac{2(\rho^3 - 1)}{3t_{11}(\rho^2 - 1)} - \\
 &\quad - \frac{2b_2}{t_{11}} \left[\frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_+)}{\rho^2 - 1} \frac{\rho^{\lambda_-} - \rho}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_+ + 2} - 1}{\lambda_+ + 2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_-)}{\rho^2 - 1} \frac{\rho - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_- + 2} - 1}{\lambda_- + 2} \right], \\
 m_{21} &= \frac{2\pi r_0^3}{s'_{66}} \left\{ \left[\frac{s'_{16}}{t_{11}} + b_1 \left(s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \frac{\rho^3 - 1}{3} + \right. \\
 &\quad + b_1 \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_+) \right] \frac{\rho^{\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_+ + 3} - 1}{\lambda_+ + 3} + \\
 &\quad \left. + b_1 \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_-) \right] \frac{1 - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3} \right\}, \\
 m_{22} &= \frac{2\pi r_0^3}{s'_{66}} \left\{ \left[1 + \frac{(s'_{16})^2}{s'_{66}t_{11}} + b_2 \left(2s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \frac{\rho^4 - 1}{4} + \right. \\
 &\quad + b_2 \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_+) \right] \frac{\rho^{\lambda_-} - \rho}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_+ + 3} - 1}{\lambda_+ + 3} + \\
 &\quad \left. + b_2 \left[s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left(s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_-) \right] \frac{\rho - \rho^{\lambda_+}}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3} \right\}.
 \end{aligned}$$

Общая связь удельной растягивающей силы и крутящего момента с параметрами ε , τ имеет прежний вид (2.70), но содержит выписанные здесь выражения для коэффициентов m_{11} , m_{12} , m_{21} , m_{22} . При ограничении случаем продольного растяжения нано/микротрубок свободных от крутящего момента ($M = 0$) получаем линейную связь (2.71) между ε и τ . Здесь безразмерный коэффициент пропорциональности Λ , характеризующий обратный эффект Пойнтинга, зависит от относительной толщины стенки трубки $(\rho - 1)$, безразмерных комбинаций семи коэффициентов

податливости s_{11} , s_{12} , s_{22} , s_{13} , s_{23} , s_{33} , s_{66} и угла хиральности χ . Причем, при $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$ связь между продольной деформацией и углом кручения исчезает.

В случае кручения нано/микротрубок под действием крутящего момента M в отсутствие продольной растягивающей силы ($P = 0$) находим соотношение связи угла кручения τ и продольной деформации ε вида (2.72). Безразмерный коэффициент пропорциональности Γ , характеризующий прямой эффект Пойнтинга, зависит от относительной толщины стенки трубки ($\rho - 1$), безразмерных комбинаций семи коэффициентов податливости s_{11} , s_{12} , s_{22} , s_{13} , s_{23} , s_{33} , s_{66} и угла хиральности χ . Причем, при $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$ связь между продольной деформацией и углом кручения здесь также исчезает.

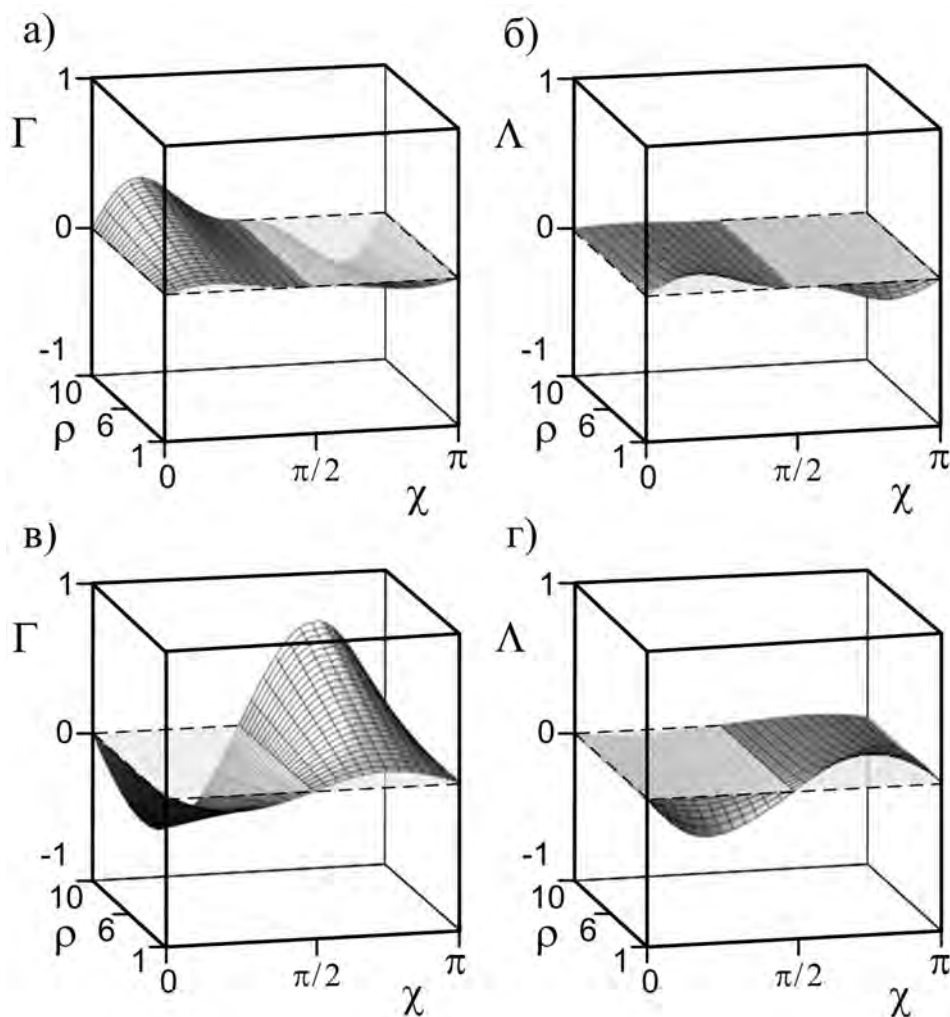


Рис. 2.44: Сравнение коэффициентов Пойнтинга Γ и Λ с изменением угла хиральности χ и параметра толщины ρ для скручиваемых и растягиваемых нано/микротрубок из орторомбических кристаллов $ZnSb$ (а и б) и Mn_2SiO_4 (в и г).

В соответствии с указанной выше четностью зависимости одних штрихованных коэффициентов податливости от угла хиральности и нечетностью зависимости остальных (см. (2.74)) четными оказываются зависимости от угла χ коэффициентов

$t_{11}, t_{12}, t_{22}, t_{13}, t_{33}, b_0, b_1, \lambda_{\pm}$ и нечетной зависимости коэффициента b_2 (см. (2.76)). Этим определяется четная зависимость от угла хиральности диагональных коэффициентов m_{11}, m_{22} и нечетная недиагональных коэффициентов m_{12}, m_{21} . В итоге нечетными оказываются зависимости от угла хиральности χ коэффициентов Λ и Γ , так что знаки прямого и обратного эффектов Пойнтинга для нано/микротрубок из орторомбических кристаллов меняются при замене $\chi \rightarrow -\chi$.

Расчеты коэффициента Γ с использованием экспериментальных данных из [172] показывают, что прямой эффект Пойнтинга может быть разных знаков. При кручении нано/микротрубок они могут, как увеличивать, так и уменьшать свою длину. Более того знак эффекта может изменяться разное число раз с изменением угла хиральности для разных кристаллических материалов. Некоторые примеры такого осциллирующего поведения приведены на Рис.2.44а и Рис.2.44в. На них показаны зависимости эффекта от угла хиральности и от отношения радиусов внешней и внутренней стенок трубок из $ZnSb$ и Mn_2SiO_4 .

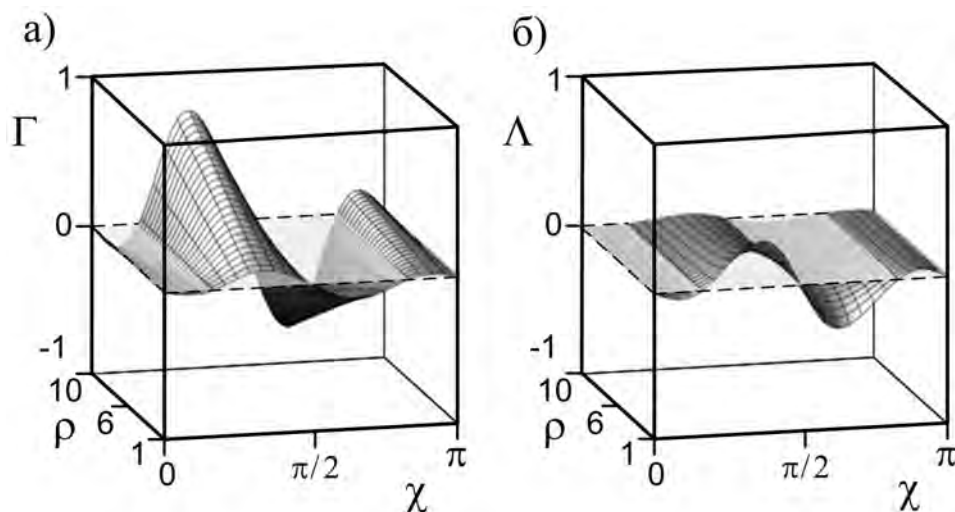


Рис. 2.45: Сравнение коэффициентов Пойнтинга Γ и Λ с изменением угла хиральности χ и параметра толщины ρ для скручиваемых и растягиваемых нано/микротрубок из орторомбических кристаллов Na_2SO_4 (а и б).

Аналогичное осциллирующее поведение обнаружено для коэффициента обратного эффекта Пойнтинга Λ в случае нано/микротрубок из орторомбических кристаллов. Это проиллюстрировано на примерах с кристаллами $ZnSb$ и Mn_2SiO_4 на Рис.2.44б и Рис.2.44г. Оба эффекта Пойнтинга пропадают при нулевом угле хиральности, при $\chi = \pi/2$ и угле хиральности равном π в силу периодической зависимости от угла. Оба эффекта Пойнтинга оказываются положительными при $0 < \chi < \pi/2$ и отрицательными при $\pi/2 < \chi < \pi$ для нано/микротрубок из орторомбических кристаллов с положительным параметром анизотропии Δ . Обратная картина имеет место при $\Delta < 0$. Из Рис.2.44 также видно, что в то время как коэффициент $|\Gamma|$ растет для $ZnSb$ и Mn_2SiO_4 с ростом параметра ρ , величина коэффициента $|\Lambda|$

уменьшается с ростом этого параметра. Угловые осцилляции коэффициентов Пойнтинга Γ и Λ для нано/микротрубок из орторомбических кристаллов могут быть частыми, как это видно на примере кристалла Na_2SO_4 (Рис.2.45).

2.10.4. От кубических кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011)

Рассмотрим ниже прямой эффект Пойнтинга (случай кручения нано/микротрубок под действием крутящего момента M_z в отсутствие продольной растягивающей силы ($P_z = 0$)) нано/микротрубок из кубических кристаллов, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011), на основе результатов раздела 2.7 (стр.180).

Кручение нано/микротрубок из кубических кристаллов, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (011) в трубку, в отсутствие продольной растягивающей силы вызывает их растяжение. Данный эффект называется прямым эффектом Пойнтинга [162], и в работах Пойнтинга он являлся нелинейным.

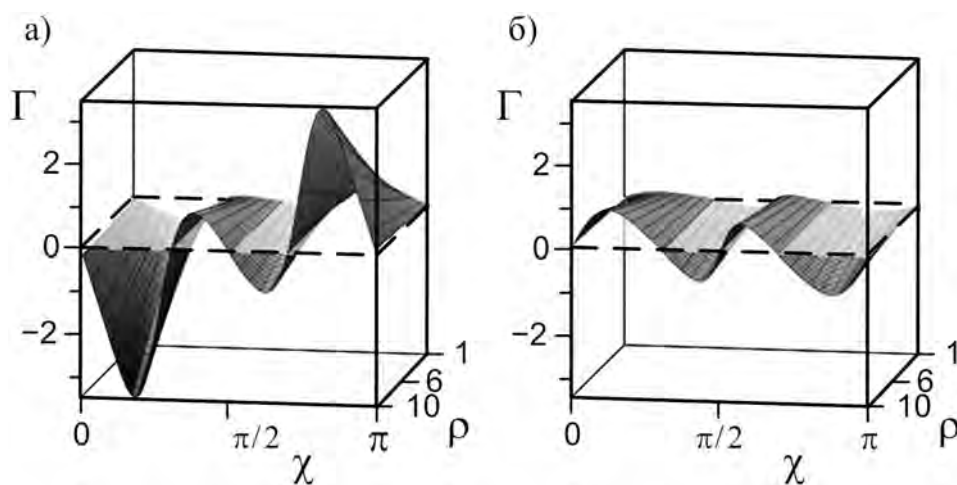


Рис. 2.46: Зависимости Γ от угла хиральности χ и параметра толщины ρ для нано/микротрубок из кубических кристаллов $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$ (а) и Cu (б).

Эффект Пойнтинга имеет место только для хиральных нано/микротрубок из кубических кристаллов, и исчезают при углах хиральности, равных 0 и $\pi/2$. Расчеты коэффициента Γ показывают, что прямой эффект Пойнтинга может быть разных знаков. При кручении нано/микротрубок они могут как увеличивать, так и уменьшать свою длину. На Рис.2.46 приведены примеры осциллирующего поведения коэффициента Γ в зависимости от угла хиральности и параметра толщины для трубок из кубических кристаллов $\text{Tm}_{0.99}\text{Se}$ с отрицательным коэффициентом анизотропии $\Delta < 0$ и Cu с положительным коэффициентом анизотропии $\Delta > 0$.

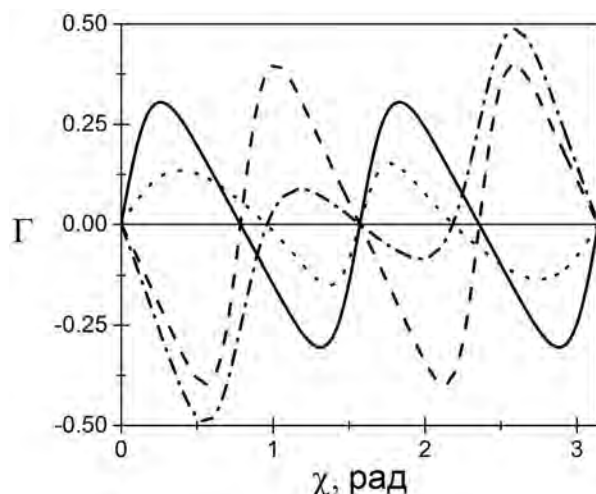


Рис. 2.47: Зависимости Γ от угла хиральности χ и параметра толщины ρ для нано/микротрубок из кубических кристаллов Tm_{0.99}Se (а) и Cu (б). Сплошная линия – нано/микротрубка из меди с плоскостью (001), пунктирная линия - нано/микротрубка из меди с плоскостью (011), штриховая линия - нано/микротрубка из Tm_{0.99}Se с плоскостью (001), штрих-пунктирная линия – нано/микротрубка из Tm_{0.99}Se с плоскостью (011).

Следует отметить различия между нано/микротрубками, полученными сворачиванием кристаллических плоскостей (001) и (011) (см. разделы 2.2 и 2.7). На Рис.2.47 дано сравнение безразмерно коэффициента Γ для нано/микротрубок, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (001) и (011) из кубических кристаллов Tm_{0.99}Se (с отрицательным коэффициентом анизотропии) и Cu (с положительным коэффициентом анизотропии). На этом рисунке сплошной и пунктирной линиям соответствуют значения Γ для нано/микротрубки из меди, полученной сворачиванием кристаллической плоскости (001) и (011) соответственно, а пунктирной и штрих-пунктирной линиям соответствуют Γ для нано/микротрубки из Tm_{0.99}Se. Из Рис.2.47 видно, что безразмерный коэффициент Γ более сильно меняется для тонкостенных нано/микротрубок из Cu, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (001), чем для трубок, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (011). В случае тонкостенных трубок из Tm_{0.99}Se имеет место обратная ситуация. Анализ, проведенный для других нано/микротрубок из кубических кристаллов, представленных в Табл.П.17 (стр.350), показывает аналогичное поведение коэффициента Γ для трубок, полученных сворачиванием кристаллических плоскостей (001) и (011), в зависимости от знака коэффициента анизотропии.

2.10.5. От гексагональных кристаллов с прямолинейной упругой анизотропией к нано/микротрубкам с криволинейной анизотропией

Рассмотрим эффект Пойнтинга для нано/микротрубок с гексагональной криволинейной анизотропией на основе результатов раздела 2.8 (стр.182). Выражения для удельной растягивающей силы P и крутящего момента M от параметров ε и τ имеют вид

$$\begin{aligned} P &= m_{11}\varepsilon + m_{12}r_0\tau, \\ M &= m_{21}\varepsilon + m_{22}r_0\tau. \end{aligned}$$

Таким образом, получены общие линейные связи деформации растяжения ε и угол кручения τ с растягивающим усилием P и крутящим моментом M , приложенными к трубке. В частном случае отсутствия растягивающего усилия ($P = 0$), тем не менее, происходит наряду с кручением изменение длины трубки в соответствии с линейной связью вида

$$\varepsilon = \Gamma r_0\tau, \quad \Gamma = -\frac{m_{12}}{m_{11}}. \quad (2.77)$$

Подобный эффект удлинения (укорочения) стержней при кручении получил название эффекта Пойнтинга, впервые наблюдавшем его для стальных, медных и латунных проволок [162, 163].

В отсутствие крутящего момента ($M = 0$) не исчезает угол кручения τ , который определяется по деформации растяжения

$$r_0\tau = \Lambda\varepsilon, \quad \Lambda = -\frac{m_{21}}{m_{22}}. \quad (2.78)$$

Тем самым существует обратный эффект Пойнтинга. Нетрудно убедиться, что при изменении знака угла хиральности χ коэффициенты m_{12} , m_{21} меняют знак, а другая пара коэффициентов m_{11} , m_{22} знака не меняет. В итоге прямой и обратный эффекты Пойнтинга должны изменять знак.

Расчеты по формулам (2.77) и (2.78) показывают, что коэффициентные функции прямого и обратного эффекта Пойнтинга $\Gamma(\chi, \rho)$ и $\Lambda(\chi, \rho)$ сильно изменяются с изменением угла хиральности и безразмерного масштабного параметра. Примеры таких изменений в диапазонах $0 < \chi < \pi$, $1 < \rho < 10$ для трубок из кристаллов MnAs и GaN приведены на Рис.2.48 и Рис.2.49. Эти рисунки демонстрируют важную особенность зависимостей обсуждаемых коэффициентных функций от угла хиральности. А именно, они в указанном диапазоне углов хиральности один или три раза меняют знак. Изменение знака коэффициентных функций означает смену удлинения и укорочения трубок в случае прямого эффекта Пойнтинга и изменение направления закручивания трубок при обратном эффекте Пойнтинга. Эффекты Пойнтинга исчезают при нулевом угле хиральности и происходит дополнительная

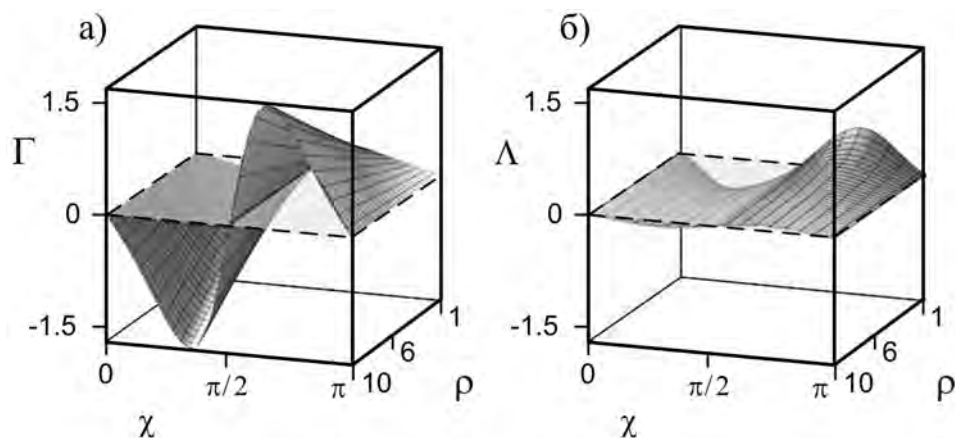


Рис. 2.48: Зависимость коэффициентных функций прямого и обратного эффектов Пойнтинга $\Gamma(\chi, \rho)$ и $\Lambda(\chi, \rho)$ от угла хиральности χ и отношения внешнего и внутреннего радиусов трубок из кристалла MnAs.

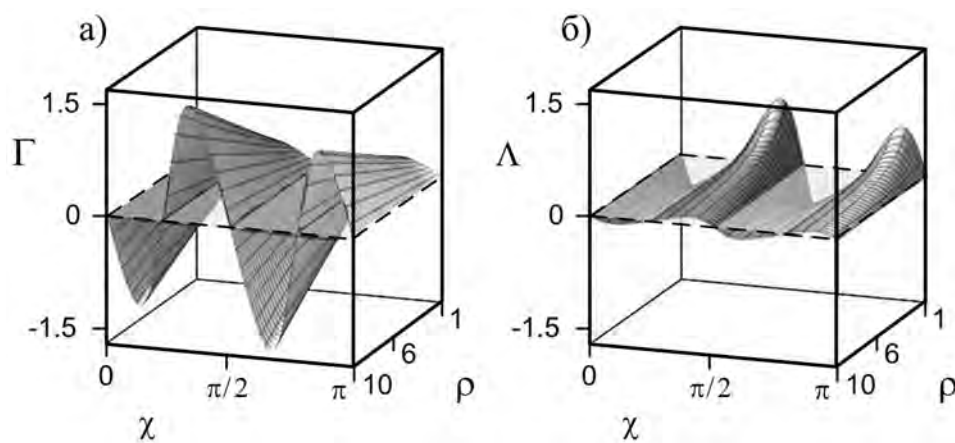


Рис. 2.49: Зависимость коэффициентных функций прямого и обратного эффектов Пойнтинга $\Gamma(\chi, \rho)$ и $\Lambda(\chi, \rho)$ от угла хиральности χ и отношения внешнего и внутреннего радиусов трубок из кристалла GaN.

смена знаков в силу нечетной зависимости от угла хиральности коэффициентных функций, периодических с периодом π по углу хиральности.

Отметим, что при рассмотрении нано/микротрубок, свернутых из кристаллических плоскостей (001) с гексагональной кристаллической структуры, как представлено на Рис.2.6, эффект Пойнтинга не наблюдается.

2.11. Заключение

Выше обсуждались в рамках подхода Сен-Венана решения задач кручения и растяжения нано/микротрубок с цилиндрической анизотропией. В результате выполненного анализа упругого растяжения нано/микротрубок из различных кубических, гексагональных, ромбоэдрических (тригональных), тетрагональных и ор-

торомбических кристаллов найдено, что в подавляющем большинстве случаев они проявляют свойства частичных ауксетиков. В немногих других случаях это утверждать затруднительно из-за большого разброса данных по экспериментально определенным упругим константам кристаллов. Найдено, что на отрицательность коэффициентов Пуассона сильное влияние оказывает толщина стенок нано/микротрубок и величина угла хиральности, т.е. ориентация кристаллической структуры относительно оси трубок. Радиальный коэффициент Пуассона ν_{rz} на внутренней поверхности нано/микротрубок часто становится отрицательным при превышении критических толщин трубок. В большем числе случаев отрицательным оказывается также коэффициент Пуассона $\nu_{\varphi z}$. На внутренней поверхности трубок он часто отрицателен для ряда кристаллов при толщинах, превосходящих критические значения. Отметим, что при всем разнообразии изменений знака двух коэффициентов Пуассона ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ для нано/микротрубок они не бывают отрицательными одновременно.

Структурная анизотропия двухслойных трубок приводит к делению эффективных коэффициентов Пуассона на радиальные и угловые, а структурная радиальная неоднородность отражается на большом различии их поведения во внешнем и внутреннем слоях трубок. Приведенный теоретический анализ позволил выяснить, что в случае композита из кубических кристаллов ауксетик-неауксетик заполнение ауксетиком внешнего слоя оказывается предпочтительным для отрицательности эффективных коэффициентов Пуассона. Быстрый рост отрицательного влияния происходит при увеличении относительной толщины внешнего слоя. В итоге отрицательность эффективных коэффициентов Пуассона может сильно превосходить отрицательность коэффициентов Пуассона исходных ауксетиков и известную теоретическую границу для изотропных материалов. В частности, это указывает на невозможность применения «правила смесей» для теоретического анализа.

Подавляющее влияние на отрицательность эффективного коэффициента Пуассона оказывает величина модуля Юнга неауксетиков, заполняющих внутренний слой трубки. Наибольшее влияние установлено для кубического кристалла вольфрама, имеющего большой модуль Юнга. Эффективные модули Юнга двухслойных трубок с равными объемами внешнего и внутреннего слоев при ауксетике во внешних слоях и наборе неауксетиков во внутренних слоях были оценены численно. Сравнение с предсказаниями «правила смесей» показало большие отклонения от последних, быстро растущие с увеличением модулей Юнга неауксетиков.

Отрицательные эффективные коэффициенты Пуассона для двухслойных трубок возможны и в случае композитов типа неауксетик-неауксетик. Примеры рассмотренных композитов Ca-Eu_{0.2}Va_{0.8}S, Ca-W, Ca-Mo, Li-Cr подтверждают это. В частности, было показано, что один из эффективных коэффициентов Пуассона для двухслойной трубки с большим отношением толщин внешнего слоя к внутреннему слою характеризуется отрицательным коэффициентом, существенно выходящим за теоретическую границу коэффициента Пуассона изотропных материалов. Выполненный анализ композитов в виде слоистых трубок демонстрирует возможности

расширения типов прикладных материалов с аномальными упругими свойствами, в частности, материалов с ауксетическими свойствами.

Кручение хиральных нано/микротрубок даже в отсутствие растягивающих усилий сопровождается изменением их длины (прямой эффект Пойнтинга). Знак эффекта (удлинение или укорочение трубок) меняется при этом с изменением величины и знака угла хиральности для нано/микротрубок из кубических, 6-ти константных тетрагональных и орторомбических кристаллов. Особыми являются хиральные нано/микротрубки из 7-ми константных тетрагональных кристаллов, у которых эффект Пойнтинга не исчезает при нулевом угле хиральности. В противоположной ситуации продольного растяжения имеет место закручивание нано/микротрубок из орторомбических кристаллов, т.е. обратный эффект Пойнтинга. Причем, в зависимости величины и знака угла хиральности закручивание может менять направление.

Наряду с линейным эффектом Пойнтинга кристаллические нано/микротрубки часто обнаруживают отрицательные коэффициенты Пуассона, оказываются ауксетиками. Сочетание двух эффектов может давать важное для приложений разнообразие режимов деформирования трубок. При положительном (отрицательном) эффекте Пойнтинга, когда кручение вызывает удлинение (укорочение) нано/микротрубок, в отсутствие ауксетичности будет происходить поперечное сжатие (расширение), и наоборот в случае ауксетичности.

Глава 3.

Слоистые композиты, содержащие ауксетики

Ниже будет рассмотрено упругое продольное растяжение тонкой двухслойной пластины из изотропных материалов, из кубических и гексагональных кристаллов и трехслойной пластины из кубических кристаллов с положительными и отрицательными коэффициентами Пуассона. Будут проанализированы особенности как эффективного модуля Юнга, так и коэффициентов Пуассона таких слоистых пластин. Также проведен сравнительный анализ при растяжении и изгибе эффективного коэффициента Пуассона трехслойной пластины из кубических кристаллов с положительными и отрицательными коэффициентами Пуассона.

3.1. Тонкие двухслойные пластины из гексагональных кристаллов [39]

3.1.1. Продольное растяжение двухслойной пластины из гексагональных кристаллов

Пусть пластина состоит из нижнего слоя 1 толщины h_1 и верхнего слоя 2 толщины h_2 , заполненных одинаково ориентированными гексагональными кристаллами, и растягивается в продольном направлении вдоль оси x (Рис.3.1). Линейная упругость k -го слоя ($k = 1, 2$) тонкой прямоугольной двухслойной пластины из гексагональных кристаллов, главное кристаллографическое направление с осью симметрии 6-го порядка которых ортогонально плоскости пластины, характеризуется матрицей коэффициентов податливости с пятью независимыми коэффициентами $s_{11}^k, s_{12}^k, s_{13}^k, s_{33}^k, s_{44}^k$

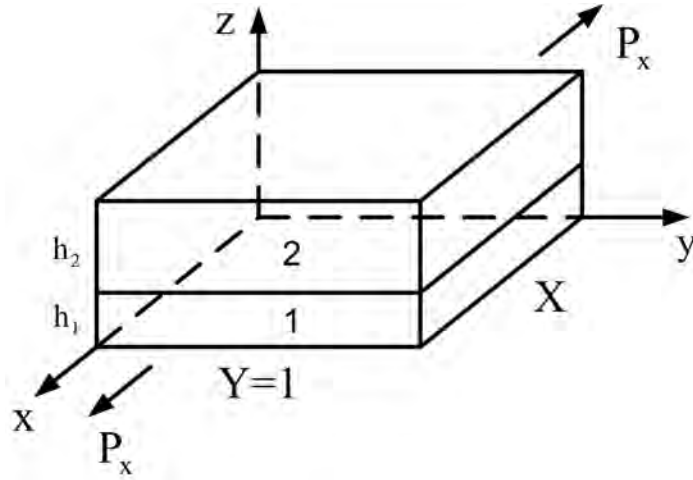


Рис. 3.1: Растяжение продольной силой P_x пластины, состоящей из двух слоев 1 и 2 толщиной h_1 и h_2 .

$$\|s_{ij}^k\| = \begin{pmatrix} s_{11}^k & s_{12}^k & s_{13}^k & 0 & 0 & 0 \\ s_{12}^k & s_{11}^k & s_{13}^k & 0 & 0 & 0 \\ s_{13}^k & s_{13}^k & s_{33}^k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44}^k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44}^k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66}^k \end{pmatrix}, \quad s_{66}^k = 2(s_{11}^k - s_{12}^k).$$

Здесь и далее верхний индекс указывает номер слоя. Две оси прямоугольной системы координат 1 и 2 лежат в плоскости пластины, а ось 3 перпендикулярна ей. Следует отметить, что при обсуждаемой здесь и далее частной ориентации из гексагональных кристаллов только два оказываются ауксетиками (MoS_2 , Zn), в то время как при произвольной ориентации их число возрастает до семи (MoS_2 , Zn , C_7H_{12} , MnAs , TiB_2 , Be , BeCu (2.4 at. % Cu)).

В предположении однородности деформаций каждого из слоев тонкой пластины в отсутствие сил на поверхностях пластины ($\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = 0$) и продольного ее кручения закон Гука определяет связи нормальных деформаций с нормальными напряжениями в слоях вида

$$\begin{aligned} \varepsilon_x^k &= s_{11}^k \sigma_x^k + s_{12}^k \sigma_y^k \\ \varepsilon_y^k &= s_{12}^k \sigma_x^k + s_{11}^k \sigma_y^k, \\ \varepsilon_z^k &= s_{13}^k (\sigma_x^k + \sigma_y^k) \end{aligned} \quad (k = 1, 2) \quad (3.1)$$

Продольное растяжение тонкой двухслойной пластины в направлении оси x удельной силой P в отсутствие силы в ортогональном направлении в плоскости пластины (при выборе единичной ширины пластины в этом направлении) позволяет написать уравнения равновесия следующим образом

$$h_1\sigma_x^1 + h_2\sigma_x^2 = P, \quad h_1\sigma_y^1 + h_2\sigma_y^2 = 0. \quad (3.2)$$

При жестком контакте слоев в двухслойной пластине имеем равенство нормальных деформаций в плоскости пластины $\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2$, $\varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2$ на плоскости контакта, так что

$$s_{11}^1\sigma_x^1 + s_{12}^1\sigma_y^1 = s_{11}^2\sigma_x^2 + s_{12}^2\sigma_y^2, \quad (3.3)$$

$$s_{12}^1\sigma_x^1 + s_{11}^1\sigma_y^1 = s_{12}^2\sigma_x^2 + s_{11}^2\sigma_y^2. \quad (3.4)$$

Удобно сначала переписать последнюю систему четырех уравнений в виде уравнений для сумм и разностей $\sigma_x^1 \pm \sigma_y^1$, $\sigma_x^2 \pm \sigma_y^2$, а затем получить отдельные выражения для нормальных напряжений σ_x^1 , σ_y^1 , σ_x^2 , σ_y^2

$$\begin{aligned} \sigma_x^k &= \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^k + s_{12}^k)S_+} + \frac{1}{(s_{11}^k - s_{12}^k)S_-} \right), \\ \sigma_y^k &= \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^k + s_{12}^k)S_+} - \frac{1}{(s_{11}^k - s_{12}^k)S_-} \right), \\ S_+ &\equiv \sum_{k=1}^2 \frac{h_k}{s_{11}^k + s_{12}^k}, \quad S_- \equiv \sum_{k=1}^2 \frac{h_k}{s_{11}^k - s_{12}^k}. \end{aligned}$$

Можно убедиться, что эти формулы для двухслойной пластины из гексагональных кристаллов не отличаются от соответствующих формул для пластины из кубических кристаллов (см. раздел 3.2). Более того выражения для нормальных деформаций $\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2$, $\varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2$, получаемые согласно закону Гука,

$$\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2 = P \frac{S_+ + S_-}{2S_+S_-}, \quad \varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2 = P \frac{S_+ - S_-}{2S_+S_-} \quad (3.5)$$

являются одинаковыми для гексагональных и кубических кристаллов. Различия возникают только для деформаций ε_z^k . По закону Гука в случае двухслойной пластины из гексагональных кристаллов имеем

$$\varepsilon_z^k = s_{13}^k(\sigma_x^k + \sigma_y^k) = \frac{2s_{13}^k}{s_{11}^k + s_{12}^k} \frac{P}{S_+}. \quad (3.6)$$

Выражение для эффективного модуля Юнга двухслойной пластины из гексагональных кристаллов принимает при этом вид

$$E_{\text{eff}} = \frac{P}{(h_1 + h_2)\varepsilon_x^1} = \frac{1}{h_1 + h_2} \frac{2S_+S_-}{S_+ + S_-}. \quad (3.7)$$

Эффективные коэффициенты Пуассона можно записать как

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} \equiv \nu_{xy}^{1 \text{ eff}} = -\frac{\varepsilon_y^1}{\varepsilon_x^1} = \nu_{xy}^{2 \text{ eff}} = -\frac{\varepsilon_y^2}{\varepsilon_x^2} = \frac{S_+ - S_-}{S_+ + S_-}, \quad (3.8)$$

$$\nu_{xz}^{k \text{ eff}} = -\frac{\varepsilon_z^k}{\varepsilon_x^1} = -\frac{s_{13}^k}{s_{11}^k + s_{12}^k} \frac{2S_-}{S_+ + S_-}. \quad (3.9)$$

В частном случае двухслойных пластинок со слоями одинаковой толщины $h = h_1 = h_2$ эффективные коэффициенты не будут зависеть от толщины пластины

$$E_{\text{eff}} = \frac{T_+ T_-}{T_+ + T_-}, \quad (3.10)$$

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} = \frac{T_+ - T_-}{T_+ + T_-}, \quad \nu_{xz}^{k \text{ eff}} = -\frac{s_{13}^k}{s_{11}^k + s_{12}^k} \frac{2T_-}{T_+ + T_-}. \quad (3.11)$$

Здесь введено следующее сокращенное обозначение

$$T_+ \equiv \sum_{k=1}^2 \frac{1}{s_{11}^k + s_{12}^k}, \quad T_- \equiv \sum_{k=1}^2 \frac{1}{s_{11}^k - s_{12}^k}. \quad (3.12)$$

3.1.2. Эффективные модули Юнга и коэффициенты Пуассона двухслойных пластин для различных гексагональных кристаллов (ауксетиков и неауксетиков)

Для исходных однослойных пластин из гексагональных кристаллов, из которых образуются двухслойные пластины, модули Юнга и коэффициенты Пуассона определяются более простыми выражениями через коэффициенты податливости

$$E^k = \frac{1}{s_{11}^k}, \quad \nu_{xy}^k = -\frac{s_{12}^k}{s_{11}^k}, \quad \nu_{xz}^k = -\frac{s_{13}^k}{s_{11}^k} \quad (3.13)$$

Используя эти соотношения, формулу для эффективного модуля Юнга двухслойной пластины из гексагональных кристаллов в общем случае можно переписать в следующем удобном виде

$$E_{\text{eff}} = \alpha \langle E \rangle, \quad \langle E \rangle \equiv \frac{h_1 E^1 + h_2 E^2}{h_1 + h_2}, \quad (3.14)$$

$$\alpha \equiv 1 + \frac{\lambda}{1 + \lambda} \frac{(\nu_{xy}^1 - \nu_{xy}^2)^2}{\lambda[1 - (\nu_{xy}^2)^2] + [1 - (\nu_{xy}^1)^2]}, \quad \lambda \equiv \frac{h_1 E^1}{h_2 E^2}. \quad (3.15)$$

В известном «правиле смесей» с объемным осреднением Фойгта для продольной двухслойной прямоугольной пластины $X \cdot Y$ имеем

$$\langle E \rangle = \frac{E^1 V_1 + E^2 V_2}{V_1 + V_2} = \frac{E^1 h_1 + E^2 h_2}{h_1 + h_2}, \quad V_k = h_k X Y. \quad (3.16)$$

так что полученная формула для эффективного модуля Юнга (3.14) в общем случае гексагональных кристаллов не следует правилу смесей. Более того он всегда превосходит предсказания по этому правилу. Действительно, согласно требованию кристаллической устойчивости таких кристаллов должны выполняться следующие ограничения на коэффициенты податливости

$$s_{11} > 0, \quad s_{11} > s_{12} > -s_{11}, \quad s_{44} > 0, \quad s_{33}(s_{11} + s_{12}) > 2s_{13}^2. \quad (3.17)$$

что приводит к неравенствам для модулей Юнга и коэффициентов Пуассона

$$E^k > 0, \quad (\nu_{xy}^k)^2 < 1. \quad (3.18)$$

Эти неравенства позволяют утверждать, что коэффициент α , входящий множителем в формулу для эффективного модуля Юнга, будет всегда больше единицы, за исключением предельного случая $\nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2$. Из полученной формулы (3.15) можно видеть, что при фиксированном значении параметра λ этот множитель возрастает с увеличением разности положительных коэффициентов Пуассона слоев для пары неауксетиков и для комбинации ауксетик-неауксетик. Вместе с тем при небольших различиях пар исходных кристаллов по модулям Юнга и коэффициентам Пуассона точность предсказания эффективного модуля Юнга по правилу смесей оказывается вполне удовлетворительной.

Эффективные коэффициенты Пуассона ν_{xy}^{eff} , $\nu_{xz}^{1 \text{ eff}}$, $\nu_{xz}^{2 \text{ eff}}$ можно записать в виде следующей зависимости от коэффициентов податливости и толщин, составляющих двухслойную пластину гексагональных слоев,

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} = -\frac{h_1 s_{12}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2] + h_2 s_{12}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]}{h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2] + h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]}, \quad (3.19)$$

$$\nu_{xz}^{1 \text{ eff}} = -s_{13}^1 \frac{(s_{11}^2 + s_{12}^2)[h_1(s_{11}^2 - s_{12}^2) + h_2(s_{11}^1 - s_{12}^1)]}{h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2] + h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]}, \quad (3.20)$$

$$\nu_{xz}^{2 \text{ eff}} = -s_{13}^2 \frac{(s_{11}^1 + s_{12}^1)[h_1(s_{11}^2 - s_{12}^2) + h_2(s_{11}^1 - s_{12}^1)]}{h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2] + h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]}, \quad (3.21)$$

или коэффициентов Пуассона исходных гексагональных слоев ν_{xy}^1 , ν_{xy}^2 и безразмерного комплекса λ , составленного из отношений толщин и модулей Юнга слоев

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} = \frac{\nu_{xy}^1 \lambda [1 - (\nu_{xy}^2)^2] + \nu_{xy}^2 [1 - (\nu_{xy}^1)^2]}{\lambda [1 - (\nu_{xy}^2)^2] + 1 - (\nu_{xy}^1)^2}, \quad (3.22)$$

$$\nu_{xz}^{1 \text{ eff}} = \nu_{xz}^1 (1 - \nu_{xy}^2) \frac{\lambda(1 + \nu_{xy}^2) + 1 + \nu_{xy}^1}{\lambda [1 - (\nu_{xy}^1)^2] + 1 - (\nu_{xy}^2)^2}, \quad (3.23)$$

$$\nu_{xz}^{2 \text{ eff}} = \nu_{xz}^2 (1 - \nu_{xy}^1) \frac{\lambda(1 + \nu_{xy}^2) + 1 + \nu_{xy}^1}{\lambda [1 - (\nu_{xy}^1)^2] + 1 - (\nu_{xy}^2)^2}. \quad (3.24)$$

Симметрия полученных здесь формул (3.22), (3.23), (3.24) состоит в совокупности замен $\lambda \leftrightarrow 1/\lambda$, $\nu_{xy}^1 \leftrightarrow \nu_{xy}^2$, $\nu_{xz}^1 \leftrightarrow \nu_{xz}^2$, что соответствует обмену местами слоев 1 и 2.

В частном случае одинаковых толщин слоев ($h_1 = h_2$) и одинаковых модулей Юнга в слоях ($E^1 = E^2$) параметр λ равен единице и формула (3.22) для ν_{xy}^{eff} упрощается

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} = \beta_0 \frac{\nu_{xy}^1 + \nu_{xy}^2}{2}, \quad \beta_0 \equiv \frac{1 - \nu_{xy}^1 \nu_{xy}^2}{1 - 0.5 [(\nu_{xy}^2)^2 + (\nu_{xy}^1)^2]}. \quad (3.25)$$

Поскольку очевидно $\beta_0 > 1$, то эффективный коэффициент Пуассона ν_{xy}^{eff} превосходит предсказание правила смесей Фойгта для двухслойной пластины с равными толщинами слоев. Это превосходство наиболее существенно для пластин типа ауксетик-неауксетик, как ясно из вида коэффициента β_0 .

При одинаковых толщинах слоев, но различных модулях Юнга для кристаллов в двух слоях, $\lambda = E^1/E^2 \neq 1$ и формула для ν_{xy}^{eff} может быть переписана в более общем виде

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} = B_0 \frac{\nu_{xy}^1 + \nu_{xy}^2}{2}, \quad (3.26)$$

$$B_0 \equiv \frac{1 - \nu_{xy}^1 \nu_{xy}^2 + (\lambda - 1) \nu_{xy}^1 [1 - (\nu_{xy}^2)^2] / (\nu_{xy}^1 + \nu_{xy}^2)}{1 - 0.5 [(\nu_{xy}^2)^2 + (\nu_{xy}^1)^2] + 0.5(\lambda - 1)[1 - (\nu_{xy}^2)^2]}. \quad (3.27)$$

Таблица 3.1: Примеры двухслойных пластин с одинаковыми толщинами слоев и гексагональным неауксетиком Mg ($E^1 = 45.5$ ГПа, $\nu_{xy}^1 = 0.355$) в первом слое, которые характеризуются большими отклонениями значениями эффективного продольного коэффициента Пуассона ν_{xy}^{eff} от значений предсказанных правилом смесей.

Гексагональные кристаллы во 2-м слое	E^2 , ГПа	ν_{xy}^2	E_{eff} , ГПа	α	ν_{xy}^{eff}	B_0
BN ₃	138	0.548	92.4	1.008	0.508	1.125
RbNiCl ₃	28.1	0.115	37.3	1.014	0.270	1.149
Cd	80.6	0.097	64.1	1.017	0.197	0.874
UPt ₃	200	0.195	123	1.004	0.227	0.826
SiC	481	0.178	264	1.003	0.195	0.731
ZrO at 24% O	159	0.095	103	1.013	0.159	0.706
C (графит)	1020	0.163	534	1.002	0.172	0.666
Be	290	0.081	169	1.010	0.123	0.562
Zn	122	-0.073	86.9	1.098	0.055	0.387
MoS ₂	209	-0.282	136	1.067	-0.164	-4.54

Теперь новый коэффициент B_0 не обязательно превосходит единицу. Однако, для многих пар гексагональных кристаллов с положительными коэффициентами Пуассона множитель B_0 даже при неравных модулях Юнга мало отличается от единицы и правило смесей Фойгта выполняется с удовлетворительной точностью. Например, для двухслойных пластин с кристаллом Mg ($E^1 = 45.5$ ГПа, $\nu_{xy}^1 = 0.219$) в одном

Таблица 3.2: Примеры двухслойных пластин с одинаковыми толщинами слоев и гексагональным неауксетиком Ti ($E^1 = 103.2$ ГПа, $\nu_{xy}^2 = 0.486$) в первом слое, которые характеризуются большими отклонениями значениями эффективного продольного коэффициента Пуассона ν_{xy}^{eff} от значений предсказанных правилом смесей.

Гексагональные кристаллы во 2-м слое	E^2 , ГПа	ν_{xy}^2	E_{eff} , ГПа	α	ν_{xy}^{eff}	B_0
MoS ₂	209	-0.282	181	1.16	0.004	0.04
C (графит)	1020	0.163	568	1.01	0.200	0.616
SiC	480	0.178	297	1.02	0.244	0.734
Be	290	0.081	204	1.04	0.209	0.738
WC	595	0.280	352	1.01	0.316	0.824
CaMg ₂	49.8	0.234	77.7	1.02	0.420	1.15
Hf	58.3	0.145	83.1	1.03	0.382	1.21
MnAs	38.5	0.077	72.2	1.02	0.419	1.235
RbNiCl ₃	28.9	0.115	67.3	1.03	0.422	1.40
CdMg at. 14.01% Mg	47.8	0.005	79.6	1.05	0.360	1.47

слое и для какого-либо из 170 неауксетических кристаллов, указанных в справочнике [172], во втором слое коэффициент B_0 отличается от единицы менее, чем на десять процентов, в более ста тридцати случаях. Только в трех случаях $B_0 > 1.1$, а в остальных тридцати - $B_0 < 0.9$. В Табл.3.1 приведены примеры двухслойных пластин с Mg в 1-ом слое и кристаллами из второго слоя с коэффициентами B_0 , отличающимися от единицы более, чем на десять процентов. Среди них выделяются двухслойные пластины с кристаллами Zn, MoS₂ во втором слое, имеющими отрицательный коэффициент Пуассона. Аналогично в случае пластин с кристаллом Ti ($E^1 = 103.2$ ГПа, $\nu_{xy}^1 = 0.486$) с большим коэффициентом Пуассона в одном слое и около сорока различных кристаллов в другом слое коэффициент B_0 отличается от единицы больше, чем на десять процентов. Неравенство $B_0 > 1.1$ выполняется тогда примерно в половине случаев. Примеры таких пластин, содержащих Ti со значительным отклонением коэффициента B_0 от единицы, приведены в Табл.3.2. Наименьшее значение $B_0 = 0.04$ соответствует пластине с дисульфидом молибдена во втором слое, обладающим отрицательным коэффициентом Пуассона. Около 120 двухслойных пластин из гексагональных кристаллов, в которых первый слой заполнен кристаллом InN, коэффициент B_0 отличается от единицы менее, чем на десять процентов. Лишь в пятнадцати случаях $B_0 > 1.1$, и в тридцати восьми $B_0 < 0.9$.

Принципиально иная ситуация имеет место для двухслойных пластин при равных толщинах слоев с ауксетиком MoS₂ в первом слое ($E^1 = 209$ ГПа, $\nu_{xy}^2 = -0.282$) и разнообразными неауксетиками во втором. Выяснилось, что в этом случае все 170 исследованных пластин имеют коэффициент B_0 , отличный от едини-

Таблица 3.3: Примеры двухслойных пластин с одинаковыми толщинами слоев и гексагональным ауксетиком MoS_2 ($E^1 = 209$ ГПа, $\nu_{xy}^2 = -0.282$) в первом слое, которые характеризуются большими отклонениями значениями эффективного плоскостного коэффициента Пуассона ν_{xy}^{eff} от значений предсказанных правилом смесей.

Гексагональные кристаллы во 2-м слое	E^2 , ГПа	ν_{xy}^2	E_{eff} , ГПа	α	ν_{xy}^{eff}	B_0
Ho	65.4	0.281	146	1.06	-0.148	215
ZrO at 7% O	110	0.275	172	1.08	-0.091	23.7
GaSe	95.2	0.257	163	1.07	-0.115	9.12
CaMg ₂	49.8	0.134	135	1.04	-0.185	7.63
GaS	111	0.256	172	1.16	-0.097	7.39
RbMnCl ₃	35.3	0.318	128	1.05	-0.194	-10.9
Ru	479	0.278	369	1.07	0.107	-43.5
Dy	62.5	0.288	144	1.06	-0.151	-59.5
Tb-50% Ho	61.0	0.287	143	1.06	-0.154	-73.9
WC	595	0.28	429	1.07	0.133	-100

цы более, чем на десять процентов. Для пятидесяти пластин найдено $B_0 > 1.1$, а для остальных ста двадцати оказалось $B_0 < 0.9$ (с отрицательными значениями, в частности). Основные характеристики некоторых таких пластин с большими значениями $|B_0|$ приведены в Табл.3.3. Большинство двухслойных пластин с ауксетиком MoS_2 в одном из слоев оказываются ауксетиками. Около ста сорока пластин имеют отрицательный коэффициент Пуассона ν_{xy}^{eff} . Десяток таких двухслойных пластин имеют эффективный модуль Юнга, превосходящий модули Юнга кристаллов в обоих слоях ($E_{\text{eff}} > E^1, E^2$), что заведомо невозможно при справедливости правила смесей по Фойгту. Двухслойные пластины с более слабым ауксетиком Zn в первом слое ($E^1 = 121.7$ ГПа, $\nu_{xy}^1 = -0.073$) имеют лишь в двадцати случаях отрицательный эффективный коэффициент Пуассона ν_{xy}^{eff} . Что касается коэффициента B_0 , то он отличается от единицы больше, чем на десять процентов в ста пятидесяти случаях. В девяносто случаях отличие превосходит двадцать процентов.

Все предыдущие численные оценки касались пластин с одинаковой толщиной слоев. Обсудим теперь изменчивость эффективных характеристик двухслойных пластин при некоторых выборах пар гексагональных кристаллов с изменением отношения толщин слоев h_1/h_2 , и тем самым изменением параметра $\lambda = (E^1/E^2)h_1/h_2$. В частности, совмещение ауксетиков и неауксетиков в двухслойных пластинах позволяет управлять получением пластин с контролируемыми отрицательными коэффициентами Пуассона с помощью подбора слоев с различным отношением толщин.

Проанализируем особенности упругого поведения двухслойных пластин с ауксетиком MoS_2 в первом слое. Пример двухслойной пластины вида $\text{MoS}_2\text{-GaN}$

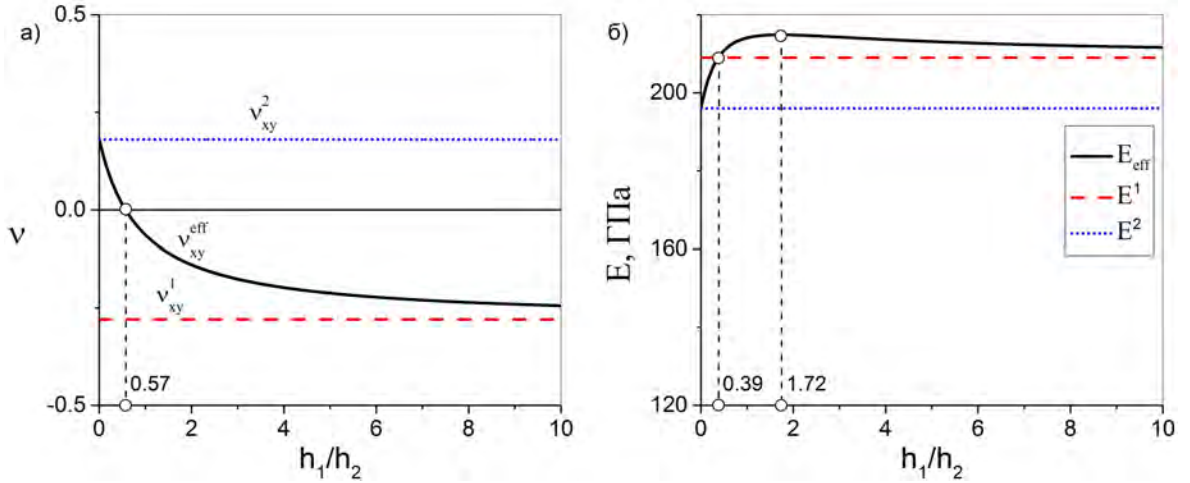


Рис. 3.2: Зависимости эффективного продольного коэффициента Пуассона ν_{xy}^{eff} (а) и эффективного модуля Юнга E_{eff} (б) от отношения толщин слоев двухслойной пластины $\text{MoS}_2\text{-GaN}$ с начальными упругими характеристиками кристаллов ν_{xy}^1 , E^1 , ν_{xy}^2 , E^2 .

показывает, что эффективный коэффициент Пуассона пластины ν_{xy}^{eff} быстро падает с ростом отношения толщин слоев, меняя знак уже при $h_1/h_2 = 0.57$ (Рис.3.2а). Эффективный модуль Юнга для такой пластины при $h_1/h_2 > 0.39$ превосходит модули Юнга исходных кристаллов $E^1 = 209$ ГПа, $E^2 = 196$ ГПа. При $h_1/h_2 = 1.72$ он достигает максимальное значение $\text{Max}E_{eff} = 215$ ГПа (Рис.3.2б). Что касается эффективных коэффициентов Пуассона $\nu_{xz}^{1\,eff}$, $\nu_{xz}^{2\,eff}$, то они положительны и монотонно растут. При этом справедливы неравенства $\nu_{xz}^{2\,eff} > \nu_{xz}^2 = 0.478 > \nu_{xy}^2 > \nu_{xy}^1$. Эффективные коэффициенты Пуассона и модуль Юнга для другой двухслойной пластины $\text{MoS}_2\text{-Co}$, содержащей тот же ауксетик MoS_2 и другой неауксетик Co , ведут себя вполне аналогично. Эффективный коэффициент ν_{xy}^{eff} быстро падает с ростом отношения h_1/h_2 и становится отрицательным при $h_1/h_2 > 1.80$, а коэффициенты $\nu_{xz}^{1\,eff}$, $\nu_{xz}^{2\,eff}$ всегда положительны и растут. Эффективный модуль Юнга превосходит при $h_1/h_2 > 0.12$ модули Юнга обоих исходных кристаллов и достигает максимума $\text{Max}E_{eff} = 236$ ГПа при $h_1/h_2 = 1.10$. Лишь количественные отличия от предыдущего имеют место и в случае двухслойной пластины $\text{MoS}_2\text{-BN}_3$, эффективный коэффициент Пуассона которой ν_{xy}^{eff} монотонно падает и становится отрицательным при $h_1/h_2 > 1.68$. Эффективный модуль Юнга при $h_1/h_2 > 0.96$ превосходит модули Юнга обоих исходных кристаллов и достигает максимума $\text{Max}E_{eff} = 1.58E^2$ при $h_1/h_2 = 2.85$. Эффективные коэффициенты $\nu_{xz}^{1\,eff}$, $\nu_{xz}^{2\,eff}$ положительны и монотонно растут. При $h_1/h_2 > 0.55$ выполняются неравенства $\nu_{xz}^{2\,eff} > \nu_{xz}^2 = 0.497 > \nu_{xy}^2 > \nu_{xy}^1$. Для двухслойной пластины $\text{MoS}_2\text{-Mg}$ с тем же ауксетиком MoS_2 и неауксетиком Mg имеются некоторые количественные и качественные отличия от предыдущих примеров. Эффективный коэффициент Пуассона ν_{xy}^{eff} , быстро падая, уже при $h_1/h_2 > 0.29$ становится отрицательным, а эффективный модуль Юнга монотонно растет с ро-

стом отношения h_1/h_2 . Другие эффективные коэффициенты Пуассона $\nu_{xz}^{1\text{ eff}}$, $\nu_{xz}^{2\text{ eff}}$ оба положительны. Первый падает и стремится к нулю при больших отношениях h_1/h_2 , а второй растет с увеличением этого параметра и при $h_1/h_2 > 0.30$ выполняются неравенства $\nu_{xz}^{2\text{ eff}} > \nu_{xy}^2 = 0.355 > \nu_{xz}^2 > \nu_{xy}^1$. В случае двухслойной пластины MoS₂-C (графит) с жестким неауксетиком во втором слое различие между эффективным модулем Юнга E_{eff} и модулем $\langle E \rangle$, рассчитанным по правилу смесей, оказывается малым ($\alpha \equiv E_{\text{eff}}/\langle E \rangle < 1.055$). Различие между эффективным коэффициентом Пуассона ν_{xy}^{eff} , меняющим знак при $h_1/h_2 = 2.67$, и $\langle \nu_{xy} \rangle$, меняющим знак при $h_1/h_2 = 0.58$, может быть значительным. Другой эффективный коэффициент Пуассона $\nu_x^{1\text{ eff}}$ подчиняется неравенствам $\nu_{xz}^{1\text{ eff}} \geq \nu_{xz}^1 = 0.584 > \nu_{xy}^2 > \nu_{xy}^1$ при $h_1/h_2 \geq 0.07$ и быстро растет, достигая большого значения 9 при $h_1/h_2 = 10$.

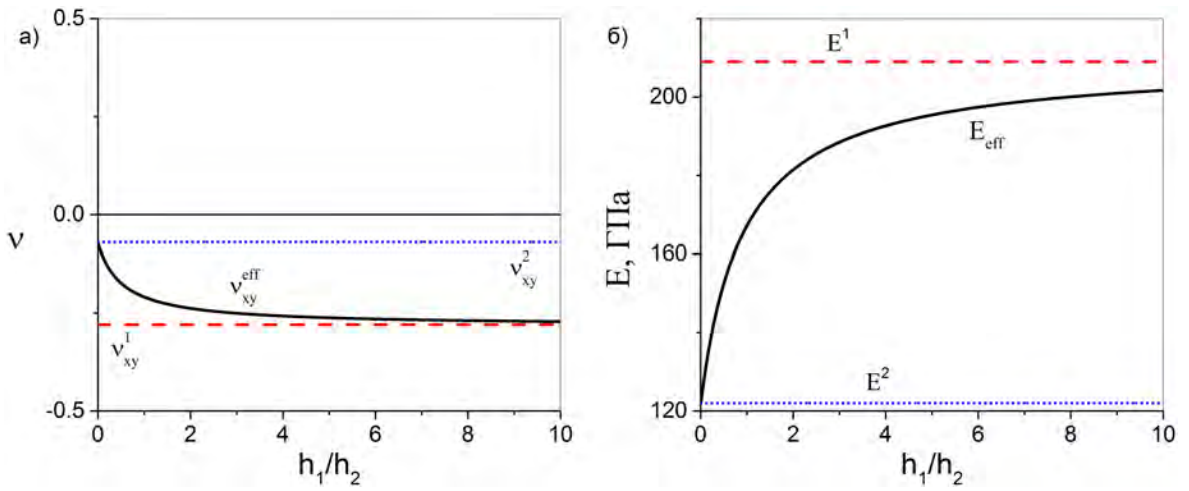


Рис. 3.3: Зависимости эффективного продольного коэффициента Пуассона ν_{xy}^{eff} (а) и эффективного модуля Юнга E_{eff} (б) от отношения толщин слоев двухслойной пластины MoS₂-Zn с начальными упругими характеристиками кристаллов ν_{xy}^1 , E^1 , ν_{xy}^2 , E^2 .

Случай двухслойной пластины с парой ауксетиков MoS₂-Zn значительно отличается от предыдущих примеров двухслойных пластин с одним ауксетиком. В этом случае ν_{xy}^{eff} быстро падает с ростом h_1/h_2 , оставаясь всегда отрицательным (Рис. 3.3а). Эффективный модуль Юнга монотонно растет, оставаясь меньше модуля Юнга $E^1 = 209$ ГПа для кристалла MoS₂ (Рис. 3.3б). Эффективный коэффициент $\nu_{xz}^{1\text{ eff}}$ падает, а $\nu_{xz}^{2\text{ eff}}$ растет с увеличением отношения толщин слоев h_1/h_2 , при этом $\nu_{xz}^{2\text{ eff}} > \nu_{xz}^2 > \nu_{xy}^2 > \nu_{xy}^1$.

Два примера ауксетических пластин с более слабым ауксетиком Zn и неауксетиками дают двухслойные пластины Zn-Co и Zn-Ti. Такие пластины приобретают отрицательный эффективный коэффициент Пуассона ν_{xy}^{eff} лишь при больших значениях отношения h_1/h_2 (13.0 в первом случае и 7.4 во втором). Эффективный модуль Юнга монотонно спадает от 196 ГПа = E^2 до 122 ГПа = E^1 для Zn-Co, и достигает максимума $\text{Max} E_{\text{eff}} = 125$ ГПа при $h_1/h_2 = 2.27$ для Zn-Ti.

Двухслойные пластины с различными толщинами слоев, образованные из пар неаксетиков, часто обладают эффективными упругими свойствами, удовлетворительно описываемыми простыми правилами смесей. Удобно для оценки этого пользоваться коэффициентом α для эффективного модуля Юнга, определяемым по общим формулам (3.14), (3.15), и коэффициентом B для эффективного коэффициента Пуассона, определяемым в общем случае следующим образом (ν_{xy}^{eff} задается формулой (3.22))

$$\nu_{xy}^{\text{eff}} = B \langle \nu_{xy} \rangle, \quad \langle \nu_{xy} \rangle \equiv \frac{h_1 \nu_{xy}^1 + h_2 \nu_{xy}^2}{h_1 + h_2}. \quad (3.28)$$

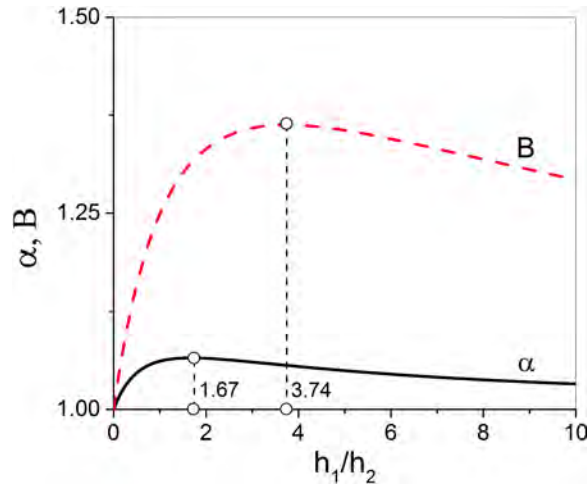


Рис. 3.4: Зависимость коэффициента B для эффективного плоскостного коэффициента Пуассона и коэффициента α для эффективного модуля Юнга от отношения толщин слоев двухслойной пластины $\text{Bi}_2\text{Ge}_3\text{O}_9\text{-BN}_3$ (α and B представлены формулами (3.15) и (3.28)).

В частном случае двухслойных пластин с одинаковой толщиной слоев эта формула переходит в (3.26), (3.27). Примеры двухслойных пластин InN-GaN и InN-Ti с различными толщинами слоев и относительно небольшими отличиями упругих свойств исходных кристаллов (InN : $E = 104$ ГПа, $\nu_{xy} = 0.219$; GaN : $E = 196$ ГПа, $\nu_{xy} = 0.180$; Ti : $E = 103$ ГПа, $\nu_{xy} = 0.486$) демонстрируют ничтожные отличия от единицы коэффициентов α и B . Найдено, что $1 < \alpha < 1.0004$, $0.970 < B < 1$ у пластины InN-GaN и $1 < \alpha < 1.022$, $1 < B < 1.043$ у пластины InN-Ti , т.е. простое правило смесей хорошо работает в этих случаях. Пример двухслойной пластины $\text{Ba(NO}_2)_2\text{H}_2\text{O-BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ демонстрирует, что даже при большом отношении модулей Юнга двух исходных кристаллов ($E^1 = 37.0$ ГПа, $E^2 = 234$ ГПа) при малом различии коэффициентов Пуассона ($\nu_{xy}^1 = 0.39$, $\nu_{xy}^2 = 0.36$) коэффициенты α и B мало отличаются от единицы при всех отношениях h_1/h_2 ($1 < \alpha < 1.0003$, $0.965 < B < 1$). Можно видеть из общих формул (3.15), (3.22), (3.28), что предельный результат $\alpha = B = 1$ получается при $\nu_{xy}^1 \rightarrow \nu_{xy}^2$ для любой величины

параметра $\lambda = h_1 E^1 / h_2 E^2$. Двухслойная пластина $\text{In}_2\text{Bi-RbNiCl}_3$ с относительно небольшим различием модулей Юнга исходных кристаллов и большим различием коэффициентов Пуассона (In_2Bi : $E^1 = 16.4$ ГПа, $\nu_{xy}^1 = 0.716$; RbNiCl_3 : $E^2 = 28.1$ ГПа, $\nu_{xy}^2 = 0.115$) характеризуется несколько большими диапазонами изменения указанных коэффициентов: $1 < \alpha < 1.12$, $1 < B < 1.075$, но все еще небольшими отклонениями от предсказаний правил смесей. Близкие упругие характеристики двух исходных кристаллов в двухслойной пластине $\text{CuCl-Al}(\text{IO}_3)_3 \cdot 2\text{HIO}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ отражаются в аналогичном поведении обсуждаемых коэффициентов. Положение меняется в случае пластины $\text{In}_2\text{Bi-SiC}$ с сильным различием исходных модулей Юнга и значительным различием коэффициентов Пуассона (In_2Bi : $E = 16.5$ ГПа, $\nu_{xy} = 0.716$; SiC : $E = 481$ ГПа, $\nu_{xy} = 0.178$). Коэффициент B изменяется тогда в гораздо более широком диапазоне от 0.45 до единицы, т.е. имеются большие отклонения от правила смесей для эффективного коэффициента Пуассона ν_{xy}^{eff} , в то время как для коэффициента α получается $1 < \alpha < 1.10$. Аномально больших величин может достигать эффективный коэффициент упругости $\nu_{xz}^{1\text{eff}}$ с ростом отношения h_1/h_2 (27 при $h_1/h_2 = 10$). В ситуации с двухслойной пластиной $\text{Bi}_2\text{Ge}_3\text{O}_9\text{-BN}_3$, у которой модуль Юнга кристалла второго слоя $E^2 = 138$ ГПа несколько превосходит модуль Юнга кристалла первого слоя $E^1 = 98.0$ ГПа и различие коэффициентов Пуассона ν_{xy}^k велико ($\nu_{xy}^2/\nu_{xy}^1 \approx 7$), отклонение коэффициента α для эффективного модуля Юнга от единицы мало (меньше 6.6 %), а отклонение коэффициента B для эффективного коэффициента Пуассона от единицы может достигать 36 % при $h_1/h_2 \approx 3.74$ (Рис.3.4). Аналогичные результаты получаются для двухслойной пластины Cd-BN_3 . Что касается эффективных поперечных коэффициентов Пуассона, то они всегда положительны.

3.2. Продольное растяжение двухслойных пластин из изотропных ауксетиков-неауксетиков и из кубических кристаллов [40]

3.2.1. Двухслойные пластины из кубических кристаллов

Пусть пластина состоит из нижнего слоя 1 толщины h_1 и верхнего слоя 2 толщины h_2 , заполненных одинаково ориентированными кубическими кристаллами, и растягивается в продольном направлении вдоль оси x (Рис.3.1, стр.228). Упругие свойства каждого из кубических кристаллов с $k = 1$ и $k = 2$ определяются тройками независимых матричных коэффициентов податливости $s_{11}^k, s_{12}^k, s_{44}^k$ ($k = 1, 2$). Однако при продольном растяжении тонкой пластины с однородным плоским напряженным состоянием $\sigma_z^1 = \sigma_z^2 = 0$ линейный закон Гука для обоих слоев принимает упрощенный вид

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_x^k &= s_{11}^k \sigma_x^k + s_{12}^k \sigma_y^k, \\
 \varepsilon_y^k &= s_{11}^k \sigma_y^k + s_{12}^k \sigma_x^k, \quad (k = 1, 2) \\
 \varepsilon_z^k &= s_{12}^k (\sigma_x^k + \sigma_y^k).
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Условия совместного растяжения пластин 1 и 2, условия равенства деформаций $\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2$, $\varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2$ можно благодаря закону Гука представить следующим образом

$$(s_{11}^1 \pm s_{12}^1)(\sigma_x^1 \pm \sigma_y^1) = (s_{11}^2 \pm s_{12}^2)(\sigma_x^2 \pm \sigma_y^2). \tag{3.30}$$

Условия равновесия при растяжении в продольном направлении x силой P_x дают еще два соотношения

$$h_1 \sigma_x^1 + h_2 \sigma_x^2 = P_x, \quad h_1 \sigma_y^1 + h_2 \sigma_y^2 = 0. \tag{3.31}$$

Здесь и далее поперечную сторону пластины в направлении y выбираем за единичную длину.

Из системы соотношений (3.30), (3.31) для компонент напряжений в обоих слоях можно получить выражения для отдельных компонент. В частности, находим для слоя 1

$$\sigma_x^1 = P_x \frac{h_2(s_{11}^1 s_{11}^2 - s_{12}^1 s_{12}^2) + h_1[(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}, \tag{3.32}$$

$$\sigma_y^1 = P_x \frac{h_2(s_{11}^1 s_{12}^2 - s_{12}^1 s_{11}^2)}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}. \tag{3.33}$$

При этом в силу закона Гука для компоненты деформации ε_x^1 слоя 1, равной компоненте ε_x^2 для слоя 2, имеем

$$\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2 = P_x \alpha, \tag{3.34}$$

$$\alpha = \frac{h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}. \tag{3.35}$$

Эффективный модуль Юнга для двухслойной пластины E_{eff} определяется отношением удельной растягивающей силы $P_x/(h_1 + h_2)$ к указанной деформации (3.34)

$$E_{\text{eff}} = \frac{1}{\alpha(h_1 + h_2)}. \tag{3.36}$$

Этот результат в частном случае двух изотропных сред с модулями Юнга E^k и коэффициентами Пуассона ν^k , т.е. в пределе $s_{11}^k \rightarrow 1/E^k$, $s_{12}^k \rightarrow -\nu^k/E^k$, соответствует результату работы [126].

Закон Гука (3.29) и формулы (3.32), (3.33) для компонент напряжения в первом слое позволяют получить выражение для компоненты деформации ε_y^1 в этом слое, равной такой же компоненте в слое 2,

$$\varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2 = P_x \frac{h_2 s_{12}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 s_{12}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}. \quad (3.37)$$

Напряжения в слое 2 находятся по напряжениям в слое 1 с помощью соотношений (3.31)-(3.33)

$$\sigma_x^2 = P_x \frac{h_2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 (s_{11}^1 s_{11}^2 - s_{12}^1 s_{12}^2)}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}, \quad (3.38)$$

$$\sigma_y^2 = -P_x \frac{h_1 (s_{11}^1 s_{12}^2 - s_{11}^2 s_{12}^1)}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}. \quad (3.39)$$

Наконец, с помощью (3.32), (3.33), (3.38), (3.39) и закона Гука (3.29) получаем следующие выражения для компонент деформации ε_z в обоих слоях

$$\varepsilon_z^1 = s_{12}^1 P_x \frac{h_2 (s_{11}^1 - s_{12}^1)(s_{11}^2 + s_{12}^2) + h_1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}, \quad (3.40)$$

$$\varepsilon_z^2 = s_{12}^2 P_x \frac{h_2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 (s_{11}^1 + s_{12}^1)(s_{11}^2 - s_{12}^2)}{(h_2 s_{11}^1 + h_1 s_{11}^2)^2 - (h_2 s_{12}^1 + h_1 s_{12}^2)^2}. \quad (3.41)$$

Соответствующие напряжения σ_z^1 , σ_z^2 при этом отсутствуют.

По деформациям слоев двухслойной пластины определяются коэффициенты Пуассона для них

$$\nu_{xy}^1 = -\frac{\varepsilon_y^1}{\varepsilon_x^1} = -\frac{\varepsilon_y^2}{\varepsilon_x^2} = \nu_{xy}^2, \quad \nu_{xz}^1 = -\frac{\varepsilon_z^1}{\varepsilon_x^1}, \quad \nu_{xz}^2 = -\frac{\varepsilon_z^2}{\varepsilon_x^2} = -\frac{\varepsilon_z^2}{\varepsilon_x^1}.$$

$$\nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2 = -\frac{h_2 s_{12}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 s_{12}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}{h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}, \quad (3.42)$$

$$\nu_{xz}^1 = -s_{12}^1 \frac{h_2 (s_{11}^1 - s_{12}^1)(s_{11}^2 + s_{12}^2) + h_1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}{h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}, \quad (3.43)$$

$$\nu_{xz}^2 = -s_{12}^2 \frac{h_2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 (s_{11}^1 + s_{12}^1)(s_{11}^2 - s_{12}^2)}{h_2 s_{11}^2 [(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2] + h_1 s_{11}^1 [(s_{11}^2)^2 - (s_{12}^2)^2]}. \quad (3.44)$$

3.2.2. Двухслойные пластины из изотропных ауксетиков - неауксетиков

В пределе изотропных сред имеем $s_{11}^k \rightarrow 1/E^k$, $s_{12}^k \rightarrow -\nu^k/E^k$ и выражения для коэффициентов Пуассона можно записать в безразмерном виде трехпараметрических зависимостей от ν^1 , ν^2 , λ

$$\nu_{xy}^1 = \frac{\nu^2[1 - (\nu^1)^2] + \lambda\nu^1[1 - (\nu^2)^2]}{1 - (\nu^1)^2 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]} = \nu_{xy}^2, \quad (3.45)$$

$$\nu_{xz}^1 = \nu^1(1 - \nu^2) \frac{1 + \nu^1 + \lambda(1 + \nu^2)}{1 - (\nu^1)^2 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]}, \quad (3.46)$$

$$\nu_{xz}^2 = \nu^2(1 - \nu^1) \frac{1 + \nu^1 + \lambda(1 + \nu^2)}{1 - (\nu^1)^2 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]}. \quad (3.47)$$

Здесь безразмерный комплекс λ объединяет отношение толщин слоев и отношение модулей Юнга двух изотропных сред, заполняющих слой,

$$\lambda \equiv \frac{h_1 E^1}{h_2 E^2}. \quad (3.48)$$

Формулы (3.45)-(3.47) для коэффициентов Пуассона в случае изотропных исходных сред обладают симметрией относительно одновременной замены $\nu^1 \leftrightarrow \nu^2$, $\lambda \rightarrow \lambda^{-1}$. В пределе $\lambda = 0$ коэффициенты ν_{xy} и ν_{xz}^2 совпадают и равны ν^2 . При $\lambda \rightarrow \infty$ коэффициенты ν_{xy} и ν_{xz}^1 стремятся к ν^1 . В случае обсуждаемой здесь комбинации ауксетик-неауксетик ($\nu^1 < 0$, $\nu^2 > 0$) всегда будет $\nu_{xz}^1 < 0$, $\nu_{xz}^2 > 0$, а ν_{xy} меняет знак с положительного на отрицательный с ростом параметра λ . Благодаря известному термодинамическому ограничению $-1 \leq \nu^1, \nu^2 \leq 0.5$ для изотропных сред производные коэффициентов Пуассона $\nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2$, ν_{xz}^2 по ν^2 и ν_{xz}^1 по ν^1 для трубок оказываются неотрицательными, и имеет место монотонный рост этих коэффициентов в диапазонах

$$-1 \leq \nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2 \leq 0.5 \frac{1 - (\nu^1)^2 + 1.5\lambda\nu^1}{1 - (\nu^1)^2 + 0.75\lambda} \leq 0.5, \quad (3.49)$$

$$-1 \leq \nu_{xz}^1 \leq 0.5(1 - \nu^2) \frac{1.5 + \lambda(1 + \nu^2)}{0.75 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]} \leq 2, \quad (3.50)$$

$$-1 \leq \nu_{xz}^2 \leq 0.5(1 - \nu^1) \frac{1 + \nu^1 + 1.5\lambda}{1 - (\nu^1)^2 + 0.75\lambda} \leq 2. \quad (3.51)$$

В итоге, верхняя граница коэффициентов Пуассона ν_{xy}^1, ν_{xy}^2 для обоих слоев двухслойных трубок остается равной $1/2$, т.е. такой же, как у исходных изотропных материалов, в то время как верхняя граница для коэффициентов ν_{xz}^1, ν_{xz}^2 оказывается в четыре раза большей, чем у исходных материалов. Нижняя граница -1 в предельном частном случае для одного из заполняющих слой изотропных материалов с $\nu^1 = -1$ (или $\nu^2 = -1$) достигается для обоих слоев двухслойной пластины. Кроме того, в слое, который заполняется материалом с $\nu = -1$, коэффициент Пуассона ν_{xz} остается равным -1 . Тогда в другом слое будет $\nu_{xz}^2 = 2\nu^2/(1 - \nu^2)$ при $\nu^1 = -1$, и $\nu_{xz}^1 = 2\nu^1/(1 - \nu^1)$ при $\nu^2 = -1$. Верхняя граница этих выражений, равная 2 , достигается при $\nu^2 = 1/2$ или $\nu^1 = 1/2$, соответственно. При этом в слое (2, например), заполненном неауксетиком коэффициент ν_{xz} растет с увеличением ν^2 от нуля до

2 независимо от величины параметра λ , т.е. не зависимо от толщины слоев и их модулей Юнга.

В частном случае одного ауксетического с $\nu^1 = -0.5$ и другого несжимаемого с $\nu^2 = 0.5$ исходных изотропных материалов получаем для коэффициентов ν_{xy}^1, ν_{xy}^2

$$\nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2 = 0.5 \frac{1 - \lambda}{1 + \lambda}. \quad (3.52)$$

Величина и знак этих коэффициентов Пуассона двухслойной пластины зависят от величины параметра λ . Они оказываются отрицательными при $\lambda > 1$, обращаются в нуль при $\lambda = 1$, и остаются положительными при $1 > \lambda > 0$. Для двух других коэффициентов ν_{xz}^1, ν_{xz}^2 имеем

$$\nu_{xz}^1 = -\frac{\lambda}{1 + \lambda} < 0, \quad \nu_{xz}^2 = 1.5 \frac{\lambda}{1 + \lambda} > 0, \quad (3.53)$$

так что один из них отрицательный, а другой положительный не зависимо от величины параметра λ .

При $\nu^1 = 0$

$$\nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2 = \frac{\nu^2}{1 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]}, \quad (3.54)$$

$$\nu_{xz}^1 = 0, \quad \nu_{xz}^2 = \nu^2 \frac{1 + \lambda(1 + \nu^2)}{1 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]}, \quad (3.55)$$

и, следовательно, знак трех коэффициентов Пуассона ν_{xy}^1, ν_{xy}^2 и ν_{xz}^2 совпадает со знаком ν^2 , а коэффициент ν_{xz}^1 в слое 1 обращается в нуль в соответствии с $\nu^1 = 0$ для исходного материала.

Различие нескольких коэффициентов Пуассона $\nu_{xy}, \nu_{xz}^1, \nu_{xz}^2$ отражает отсутствие изотропии двухслойной пластины, составленной из изотропных материалов, и уже поэтому невозможность простых «правил сумм». В частности, на это же указывает превосходство верхней границы для ν_{xz} в четыре раза над верхней границей коэффициентов Пуассона для исходных изотропных материалов.

Выбирая для иллюстрации типичное значение коэффициента Пуассона изотропного неауксетика $\nu^2 = 1/3$, представляем на Рис.3.5 вид зависимостей трех коэффициентов Пуассона $\nu_{xy} \equiv \nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2, \nu_{xz}^1, \nu_{xz}^2$ от коэффициента Пуассона исходного изотропного материала ν^1 и параметра $\lambda \equiv h_1 E^1 / h_2 E^2$. Коэффициент ν_{xy} меняет знак при отрицательных значениях ν^1 (в частности, при $\nu^1 = -1/3, \lambda = 1$) и достигает -1 при $\nu^1 = -1$ и любых λ (Рис.3.5а). Коэффициент ν_{xz}^1 отрицателен при любых отрицательных ν^1 и убывает с ростом $|\nu^1|$ вплоть до -1 при $\nu^1 = -1$ (Рис.3.5б). Коэффициент ν_{xz}^2 оказывается в диапазоне $10 > \lambda > 1$ положительным и тем большим, чем меньше ν^1 . При $\nu^1 = -1$ достигается $\nu_{xz}^2 = 1$ независимо от величины λ (Рис.3.5в). Эта единичная верхняя граница связана здесь с частным выбором $\nu^2 = 1/3$ для неауксетического наполнителя слоя 2.

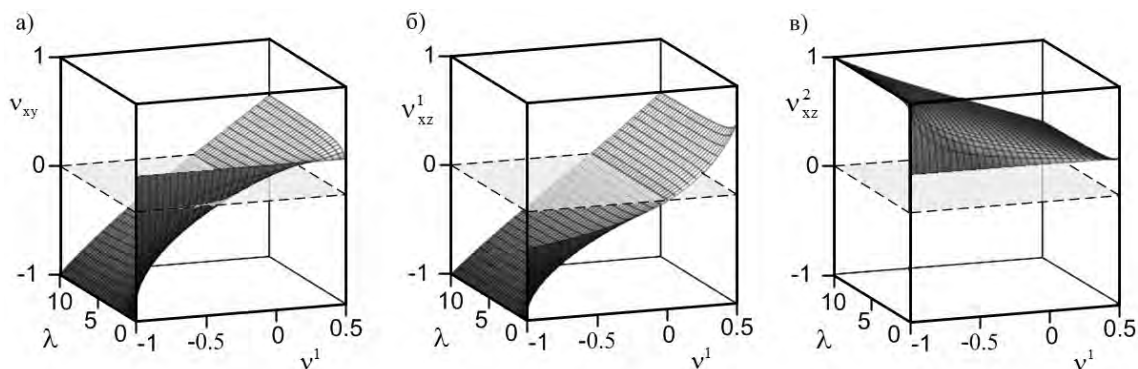


Рис. 3.5: Зависимости коэффициентов Пуассона двухслойной пластины а) $\nu_{xy} \equiv \nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2$, б) ν_{xz}^1 и в) ν_{xz}^2 от исходного коэффициента ν^1 и составного безразмерного параметра $\lambda \equiv h_1 E^1 / h_2 E^2$ при $\nu^2 = 1/3$ в неуксетическом исходном слое.

Эффективный модуль Юнга двухслойной пластины в соответствии с (3.35), (3.36) в изотропном пределе записывается следующим образом

$$\frac{E_{\text{eff}}}{E^2} = \frac{1}{1 + h_1/h_2} \frac{(1 + \lambda)^2 - (\nu^1 + \lambda\nu^2)^2}{1 - (\nu^1)^2 + \lambda[1 - (\nu^2)^2]} \quad (3.56)$$

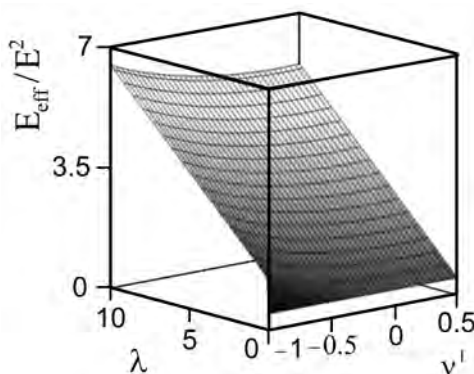


Рис. 3.6: Зависимость безразмерного отношения эффективного модуля Юнга и исходного модуля E_{eff}/E^2 пластины со слоями равной толщины при $\nu^2 = 1/3$ от характеристики ν^1 и отношения исходных модулей Юнга кристаллов, образующих два слоя, $\lambda = E^1/E^2$.

В частном случае пластины со слоями одинаковой толщины ($h_1 = h_2$) и при частном значении коэффициента Пуассона для неуксетического материала второго слоя $\nu^2 = 1/3$ зависимость безразмерного отношения E_{eff}/E^2 от ν^1 и параметра λ , который сводится в этом случае к отношению модулей Юнга для двух слоев, отражает Рис.3.6. С ростом $\lambda = E^1/E^2$ растет отношение E_{eff}/E^2 при любых значениях ν^1 .

3.2.3. Частная ориентация кубических кристаллов

При ограничении частной ориентацией кубических кристаллов $Ox \parallel [100]$, $Oy \parallel [010]$ выражения для их модуля Юнга и коэффициента Пуассона в случае растяжения вдоль оси Ox принимают простой вид

$$E = \frac{1}{s_{11}}, \quad \nu = -\frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad (3.57)$$

совпадающий с выражениями для изотропного материала. Отрицательные коэффициенты Пуассона при такой ориентации кубических кристаллов получаются в относительно небольшом числе случаев, когда $s_{12} > 0$. Экспериментальные данные по упругим коэффициентам для кубических кристаллов, собранные в обширном справочнике [172] и в работе [175], позволяют выделить возможные ауксетики при такой ориентации (Табл.3.4). При этом заключение об ауксетичности следующих кристаллов Ba, FeS₂, ReO₃, USb, USe базируется на противоречивых данных. Лишь остальные 14 кристаллов из таблицы однозначно характеризуются как ауксетики.

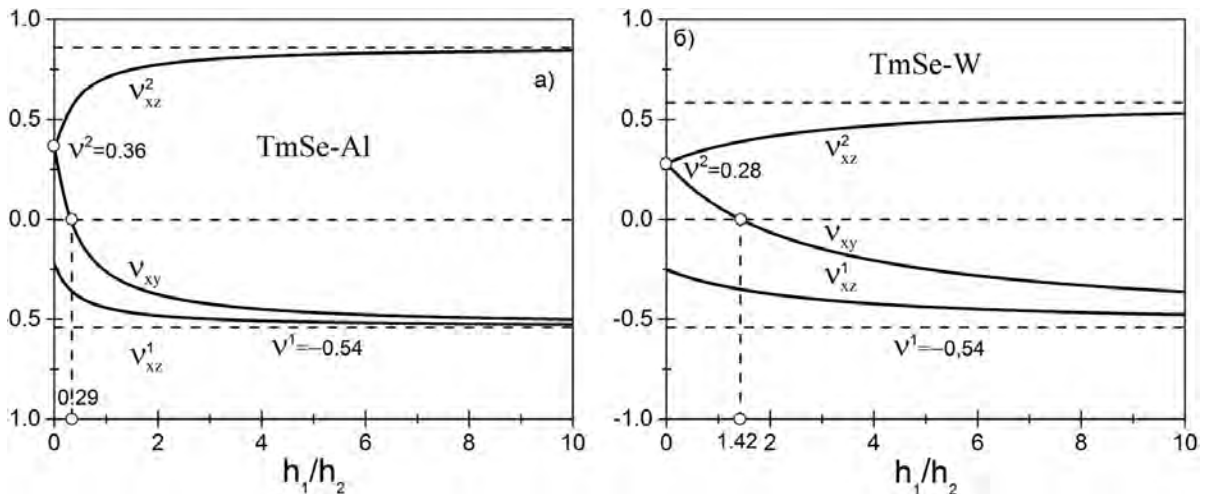


Рис. 3.7: Зависимости коэффициентов Пуассона ν_{xy} , ν_{xz}^1 , ν_{xz}^2 для двухслойной пластины из а) ауксетического кристалла TmSe и неауксетика Al и б) того же ауксетика TmSe и более жесткого неауксетика W от отношения толщин слоев h_1/h_2 .

В случае двухслойной кристаллической пластины TmSe-Al имеем исходные упругие характеристики $\nu^1 = -0.54$, $E^1 = 115$ ГПа для ауксетического кристалла TmSe и $\nu^2 = 0.36$, $E^2 = 62.5$ ГПа для неауксетического кристалла Al. Тогда единственным переменным параметром, определяющим изменение коэффициентов Пуассона ν_{xy} , ν_{xz}^1 , ν_{xz}^2 , становится $\lambda = 1.84h_1/h_2$, пропорциональный отношению толщин слоев (Рис.3.7а). В пределе очень тонкого ауксетического слоя коэффициенты ν_{xy} и ν_{xz}^2 близки друг другу и к $\nu^2 = 0.36$. В пределе относительно толстого ауксетического слоя ν_{xy} и ν_{xz}^1 сближаются и стремятся к $\nu^1 = -0.54$. Из формул (3.45)-(3.47) и из рисунка можно видеть, что $\nu_{xz}^1 < 0$, $\nu_{xz}^2 > 0$ при любых значениях параметра λ , а ν_{xy} меняет знак с положительного на отрицательный с ростом λ

Таблица 3.4: Коэффициенты податливости, коэффициенты Пуассона и модули Юнга для кубических ауксетиков при растяжении в направлении $Ox||[100]$.

Кристаллы	s_{11} , ГПа ⁻¹	s_{44} , ГПа ⁻¹	s_{12} , ГПа ⁻¹	ν	E , ГПа
Ba [172]	123.7	98.9	6.01	-0.05	8.08
	157	105	-61	0.39	6.37
GeTe-SnTe 20 mole % GeTe [172]	9.7	8.6	0.1	-0.01	103
Sm _{0.9} La _{0.1} S [175]	8.14	41.6	1.25	-0.15	123
Sm _{0.75} La _{0.25} S [175]	14.3	35.7	5.7	-0.40	69.9
Sm _{0.65} La _{0.35} S [175]	19.7	27.8	6.84	-0.34	50.8
Sm _{0.85} Tm _{0.75} S [175]	9.45	38.5	0.28	-0.03	106
Sm _{0.75} Tm _{0.25} S [175]	15.3	27.0	7.05	-0.46	65.4
	10.2	33.3	4.3	-0.42	98.0
Sm _{0.75} Y _{0.25} S [172]	18.0	33.3	12.1	-0.67	55.6
	10.75	32.3	5.26	-0.49	93.0
Sm _{0.7} Y _{0.3} S [172]	8.12	28.8	2.44	-0.30	123
Sm _{0.58} Y _{0.42} S [172]	7.41	32	1.98	-0.27	135
Sm _{0.576} Y _{0.424} S [172]	2.78	9.38	-0.24	0.09	360
	2.56	8.79	0.31	-0.12	391
ReO ₃ [172]	2.09	16.4	0.03	-0.01	478
	1.75	14.7	-0.02	0.01	571
SmB ₆ [172]	2.41	12.82	0.04	-0.02	415
Tm _{0.99} Se [172]	7.95	37.0	3.71	-0.47	126
TmSe [172]	8.72	38.5	4.73	-0.54	115
SnTe($N[10^{20} \text{ cm}^{-3}] = 1.01$) [172]	10.2	81.0	0.90	-0.09	98.0
USb [172]	5.16	56.2	-0.28	0.02	194
	5.16	56.2	0.28	-0.02	194
	6.27	50.0	-0.26	0.04	159
USE [172]	4.25	67.6	0.35	-0.08	235
	5.16	62.5	0	0	194
UTe [172]	6.97	83.3	0.10	-0.01	143

при относительно тонком ауксетическом слое (при $h_1 = 0.29h_2$ или $\lambda = 0.53$). Этим же параметром определяется и величина эффективного модуля Юнга двухслойной пластины (Рис.3.8а)

$$E_{\text{eff}} = 62.5 \text{ ГПа} \frac{1}{1 + \lambda/1.84} \frac{(1 + \lambda)^2 - (0.36\lambda - 0.54)^2}{1 - (0.54)^2 + \lambda[1 - (0.36)^2]}. \quad (3.58)$$

Эффективный модуль Юнга E_{eff} быстро растет от $E^2 = 62.5 \text{ ГПа}$ до $E^1 = 1.84E^2 =$

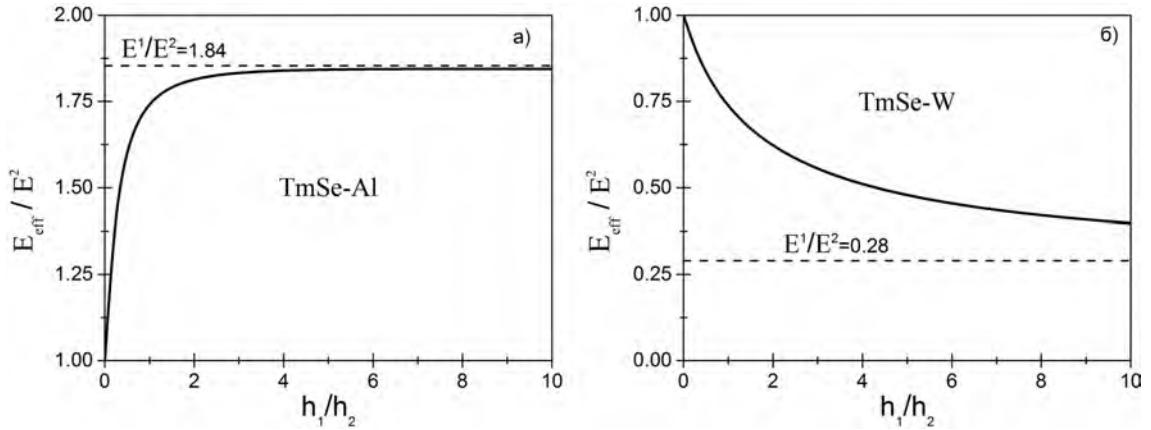


Рис. 3.8: Зависимости отношений эффективного модуля Юнга двухслойной пластины к модулям Юнга неауксетиков (а) Al и (б) W от отношения толщин слоев h_1/h_2 .

115 ГПа с ростом отношения толщин слоев h_1/h_2 .

Для двухслойной пластины TmSe-W с тем же ауксетиком TmSe ($\nu^1 = -0.54$, $E^1 = 115$ ГПа) и гораздо более жестким неауксетиком W ($\nu^2 = 0.28$, $E^2 = 408$ ГПа) параметр $\lambda = 0.28h_1/h_2$, пропорциональный отношению толщин слоев, сильно изменяется. Это отражается на замедлении изменений коэффициентов Пуассона с изменением толщин слоев (Рис.3.7б), и коэффициенты $\nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2$ теперь меняют знак только при ауксетическом слое более толстом, чем слой с неауксетиком, а именно, при $h_1/h_2 = 1.43$. Для такой двухслойной пластины с вольфрамом эффективный модуль Юнга быстро падает от $E^2 = 408$ ГПа до $E^1 = 0.28E^2 = 115$ ГПа с ростом отношения толщин слоев h_1/h_2 (Рис.3.8б).

При замене ауксетика TmSe на ауксетик $\text{Sm}_{0.58}\text{Y}_{0.42}\text{S}$ с характеристиками $\nu^1 = -0.30$, $E^1 = 123$ ГПа и тех же неауксетиках результаты для коэффициентов Пуассона двухслойных пластин качественно мало изменяются.

Важные изменения поведения эффективного модуля Юнга обнаруживаются в случае двухслойной пластины $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S-Ag}$. Модуль Юнга для обоих составляющих пластину кристаллов невысок. Для ауксетического кристалла $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ имеем $\nu^1 = -0.34$, $E^1 = 50.8$ ГПа, а для кристалла Ag имеем упругие характеристики $\nu^2 = 0.43$, $E^2 = 43.5$ ГПа. В таком случае $\lambda = 1.17h_1/h_2$ и E_{eff} превосходит модули Юнга обоих исходных материалов E^1 и E^2 для любых толщин слоев (Рис.3.9). Сначала (при малых h_1/h_2) эффективный модуль Юнга быстро растет от E^2 до $1.28E^2$ (при $h_1/h_2 = 1.58$), а затем медленно асимптотически спадает к значению $E^1 = 1.17E^2$. Сходный немонотонный характер изменения эффективного модуля Юнга с изменением относительной ширины слоев пластины $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S-Th}$ имеет место для неауксетика Th с $\nu^2 = 0.39$, $E^2 = 43.5$ ГПа. Такое поведение снова подтверждает невозможность применения каких-либо правил смеси для нахождения эффективного модуля Юнга двухслойной пластины с ауксетиком.

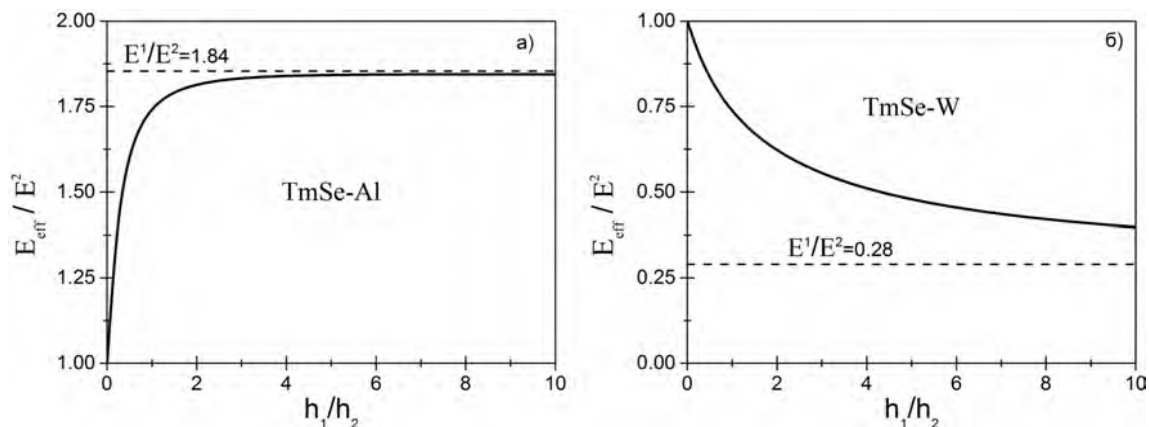


Рис. 3.9: Зависимости отношений эффективного модуля Юнга двухслойной пластины из а) ауксетического кристалла $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ и неауксетика Ag и б) того же ауксетика $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ и неауксетика Th от отношения толщин слоев h_1/h_2 .

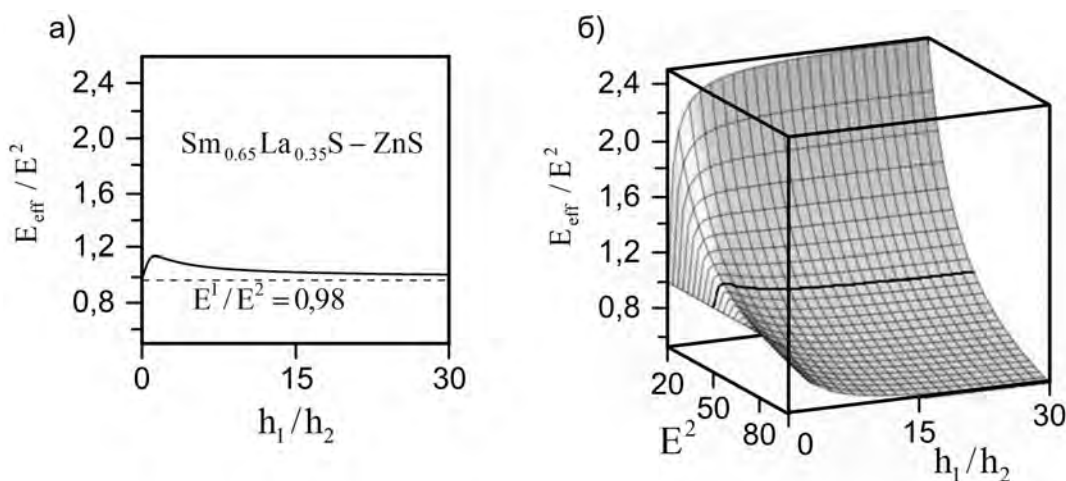


Рис. 3.10: Зависимость E_{eff}/E^2 от а) отношения толщин двух слоев с близкими модулями Юнга E^1 и E^2 в случае наполняющих их ауксетика $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ и неауксетика ZnS , и от б) отношения h_1/h_2 и изменяющегося модуля Юнга E^2 ГПа при $E^1 = 50.8$ ГПа, $\nu^1 = -0.34$ ($\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$) в предположении $\nu^2 = 0.39$. Жирной кривой на пространственном рисунке выделен результат для частного случая двухслойной пластины $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S-ZnS}$.

Выбирая в пару к ауксетику $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ ($\nu^1 = -0.34$, $E^1 = 50.8$ ГПа) кристалл ZnS с близким модулем Юнга ($\nu^2 = 0.39$, $E^2 = 51.3$ ГПа), находим, что эффективный модуль Юнга двухслойной пластины $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S-ZnS}$ в 1.15 раз превосходит E^1 и $E^2 \approx E^1$ при $h_1 = 0.99h_2$ (Рис.3.10а). Близкий результат получается для другой двухслойной пластины $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S-CeSn}_3$ с $E^2 = 51.8$ ГПа, $\nu^2 = |\nu^1| = 0.34$ для неауксетика CeSn_3 . На Рис.3.10б представлена более общая ситуация с заполнением слоя 1 таким же ауксетиком, т.е. при фиксированных значениях $\nu^1 = -0.34$, $E^1 = 50.8$ ГПа, и слоя 2 неауксетиками с фиксированным значением коэффициента

Пуассона $\nu^1 = 0.39$ и различными значениями модуля Юнга E^2 . Из этого рисунка можно видеть, что при $E^2 \leq 30$ ГПа эффективный модуль Юнга E_{eff} с ростом отношения h_1/h_2 монотонно растет от E^2 до E^1 , для неауксетиков с $E^2 \geq 80$ ГПа происходит падение E_{eff} от E^2 до E^1 , а в промежуточном диапазоне достигается максимум при некоторых значениях h_1/h_2 . Жирной линией на Рис.3.10б показана кривая, соответствующая значению $E^2 = 51.3$ ГПа, $\nu^2 = 0.39$ (кристалл ZnS) и отраженная на Рис.3.10а.

3.3. Тонкие однородные двухслойные пластины из кубических кристаллов с различной ориентацией слоев [41]

3.3.1. Продольное растяжение двухслойной пластины из кубических кристаллов с различной ориентацией слоев

Линейная упругость слоя 1 тонкой прямоугольной двухслойной пластины из кубических кристаллов, который ориентирован по главным кристаллографическим направлениям 1, 2, 3, определяется матрицей коэффициентов податливости вида

$$\|s_{ij}^1\| = \begin{pmatrix} s_{11}^1 & s_{12}^1 & s_{12}^1 & 0 & 0 & 0 \\ s_{12}^1 & s_{11}^1 & s_{12}^1 & 0 & 0 & 0 \\ s_{12}^1 & s_{12}^1 & s_{11}^1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44}^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44}^1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44}^1 \end{pmatrix}.$$

Здесь и далее верхний индекс указывает номер слоя.

Если 2-ой слой повернут относительно кристаллографической системы координат в плоскости осей 1 и 2 на угол χ , и тем самым относительно 1-го слоя, то закон Гука будет характеризоваться преобразованной за счет поворота матрицей коэффициентов податливости

$$\|\bar{s}_{ij}^2\| = \begin{pmatrix} \bar{s}_{11}^2 & \bar{s}_{12}^2 & \bar{s}_{13}^2 & 0 & 0 & \bar{s}_{16}^2 \\ \bar{s}_{12}^2 & \bar{s}_{11}^2 & \bar{s}_{13}^2 & 0 & 0 & -\bar{s}_{16}^2 \\ \bar{s}_{13}^2 & \bar{s}_{13}^2 & \bar{s}_{33}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{s}_{44}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{s}_{44}^2 & 0 \\ \bar{s}_{16}^2 & -\bar{s}_{16}^2 & 0 & 0 & 0 & \bar{s}_{66}^2 \end{pmatrix}.$$

Преобразованные коэффициенты податливости \bar{s}_{ij}^2 , отмеченные чертой сверху, следующим образом зависят от угла поворота χ и исходных коэффициентов кристаллов 2-го слоя s_{ij}^2

$$\begin{aligned}
 \bar{s}_{11}^2 &= s_{11}^2 - 0.5\Delta \sin^2 2\chi, & \bar{s}_{12}^2 &= s_{12}^2 + 0.5\Delta \sin^2 2\chi, \\
 \bar{s}_{16}^2 &= -0.5\Delta \sin 4\chi, & \bar{s}_{66}^2 &= s_{44}^2 + 2\Delta \sin^2 2\chi, \\
 \bar{s}_{13}^2 &= s_{12}^2, & \bar{s}_{33}^2 &= s_{11}^2, & \bar{s}_{44}^2 &= s_{44}^2, & \Delta &= s_{11}^2 - s_{12}^2 - 0.5s_{44}^2.
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

Продольное растяжение тонкой двухслойной пластины различным образом ориентированных кубических кристаллов упрощает при отсутствии сил на внешних горизонтальных поверхностях напряженное состояние в объеме слоев

$$\sigma_{13}^1 = \sigma_{23}^1 = \sigma_{33}^1 = 0, \quad \sigma_{13}^2 = \sigma_{23}^2 = \sigma_{33}^2 = 0.$$

В таком случае в рамках линейной теории упругости закон Гука для продольно растягиваемого слоя 1 и слоя 2, растягиваемого под углом χ по отношению к кристаллографической ориентации кубического кристалла, позволяет записать

$$\begin{aligned}
 u_{11}^1 &= s_{11}^1 \sigma_{11}^1 + s_{12}^1 \sigma_{22}^1, & u_{22}^1 &= s_{12}^1 \sigma_{11}^1 + s_{11}^1 \sigma_{22}^1, \\
 u_{33}^1 &= s_{12}^1 \sigma_{11}^1 + s_{12}^1 \sigma_{22}^1, & 2u_{12}^1 &= s_{44}^1 \sigma_{12}^1, & u_{13}^1 &= u_{23}^1 = 0. \\
 u_{11}^2 &= \bar{s}_{11}^2 \sigma_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2 \sigma_{22}^2 + \bar{s}_{16}^2 \sigma_{12}^2, & u_{22}^2 &= \bar{s}_{12}^2 \sigma_{11}^2 + \bar{s}_{11}^2 \sigma_{22}^2 - \bar{s}_{16}^2 \sigma_{12}^2, \\
 u_{33}^2 &= \bar{s}_{13}^2 \sigma_{11}^2 + \bar{s}_{13}^2 \sigma_{22}^2, & 2u_{12}^2 &= \bar{s}_{16}^2 (\sigma_{11}^2 - \sigma_{22}^2) + \bar{s}_{66}^2 \sigma_{12}^2, & u_{13}^2 &= u_{23}^2 = 0.
 \end{aligned}$$

Здесь u_{ij}^1, u_{ij}^2 - деформации двух слоев. Условия совместного растяжения слоев двухслойной пластины $u_{11}^1 = u_{11}^2, u_{22}^1 = u_{22}^2, u_{12}^1 = u_{12}^2$ можно выразить через компоненты напряжений

$$\begin{aligned}
 s_{11}^1 \sigma_{11}^1 + s_{12}^1 \sigma_{22}^1 &= \bar{s}_{11}^2 \sigma_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2 \sigma_{22}^2 + \bar{s}_{16}^2 \sigma_{12}^2, \\
 s_{12}^1 \sigma_{11}^1 + s_{11}^1 \sigma_{22}^1 &= \bar{s}_{12}^2 \sigma_{11}^2 + \bar{s}_{11}^2 \sigma_{22}^2 - \bar{s}_{16}^2 \sigma_{12}^2, \\
 s_{44}^1 \sigma_{12}^1 &= \bar{s}_{16}^2 (\sigma_{11}^2 - \sigma_{22}^2) + \bar{s}_{66}^2 \sigma_{12}^2.
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

Условия равновесия при растяжении силой P в направлении 1 при выборе единичной ширины пластины в направлении 2 записываются в виде

$$h_1 \sigma_{11}^1 + h_2 \sigma_{11}^2 = P, \quad h_1 \sigma_{22}^1 + h_2 \sigma_{22}^2 = 0.$$

Замыкающее соотношение для напряжений получается из отсутствия крутящего момента, связанного со сдвиговыми напряжениями,

$$M_{12} = \int_0^{h_1} \sigma_{12}^1 z dz + \int_{h_1}^{h_2+h_1} \sigma_{12}^2 z dz = 0.$$

Оно в приближении однородных сдвиговых напряжений сводится к следующей связи между сдвиговыми напряжениями в двух слоях

$$\sigma_{12}^1 = -\frac{h_2}{h_1} \left(2 + \frac{h_2}{h_1} \right) \sigma_{12}^2.$$

Такая связь позволяет исключить сдвиговое напряжение в первом слое σ_{12}^1 из ранее выписанной связи между сдвиговыми и нормальными напряжениями в (3.60) и выразить сдвиговое напряжение во втором слое σ_{12}^2 через разность нормальных напряжений во втором слое

$$\sigma_{12}^2 = \Lambda(\sigma_{11}^2 - \sigma_{22}^2), \quad \Lambda \equiv -\frac{h_1^2 \bar{s}_{16}^2}{h_1^2 \bar{s}_{66}^2 + h_2(2h_1 + h_2)s_{44}^1}.$$

В свою очередь исключение второго сдвигового напряжения из системы соотношений (3.60) позволяет найти следующие выражения для сумм и разностей нормальных напряжений в каждом из слоев

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^1 + \sigma_{22}^1 &= \frac{P}{(s_{11}^1 + s_{12}^1)S_+}, & \sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 &= \frac{P}{(\bar{s}_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2)S_+}, \\ \sigma_{11}^2 - \sigma_{22}^2 &= \frac{P}{H}, & \sigma_{11}^1 - \sigma_{22}^1 &= \frac{P}{h_1} \left(1 - \frac{h_2}{H} \right), \\ S_+ &\equiv \frac{h_1}{s_{11}^1 + s_{12}^1} + \frac{h_2}{\bar{s}_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2}, & H &\equiv h_2 + h_1 \frac{k_1 - k_2}{s_{11}^1 - s_{12}^1}, \\ k_1 &= \bar{s}_{11}^2 + \bar{s}_{16}^2 \Lambda = \bar{s}_{11}^2 - \frac{h_1^2 (\bar{s}_{16}^2)^2}{h_1^2 \bar{s}_{66}^2 + h_2(2h_1 + h_2)s_{44}^1}, \\ k_2 &= \bar{s}_{12}^2 - \bar{s}_{16}^2 \Lambda = \bar{s}_{12}^2 + \frac{h_1^2 (\bar{s}_{16}^2)^2}{h_1^2 \bar{s}_{66}^2 + h_2(2h_1 + h_2)s_{44}^1}. \end{aligned}$$

Из этого находим сами напряжения

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^1 &= \frac{P}{2(s_{11}^1 + s_{12}^1)S_+} + \frac{P}{2h_1} \left(1 - \frac{h_2}{H} \right), \\ \sigma_{22}^1 &= \frac{P}{2(s_{11}^1 + s_{12}^1)S_+} - \frac{P}{2h_1} \left(1 - \frac{h_2}{H} \right), \\ \sigma_{11}^2 &= \frac{P}{2(\bar{s}_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2)S_+} + \frac{P}{2H}, & \sigma_{22}^2 &= \frac{P}{2(\bar{s}_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2)S_+} - \frac{P}{2H}. \end{aligned}$$

и в свою очередь по напряжениям с помощью закона Гука получаем нормальные деформации

$$\begin{aligned} u_{11}^1 &= u_{11}^2 = \frac{P}{2S_+} + P \frac{s_{11}^1 - s_{12}^1}{2h_1} \left(1 - \frac{h_2}{H} \right), \\ u_{22}^1 &= u_{22}^2 = \frac{P}{2S_+} - P \frac{s_{11}^1 - s_{12}^1}{2h_1} \left(1 - \frac{h_2}{H} \right), \\ u_{33}^1 &= P \frac{s_{12}^1}{s_{11}^1 + s_{12}^1} S_+^{-1}, & u_{33}^2 &= P \frac{\bar{s}_{13}^2}{\bar{s}_{11}^2 + \bar{s}_{12}^2} S_+^{-1}. \end{aligned} \tag{3.61}$$

Они определяют эффективные модуль Юнга и коэффициенты Пуассона для тонкой двухслойной пластины

$$E_{\text{eff}} = \frac{P}{(h_1 + h_2)u_{11}^1},$$

$$\nu_{12} = -\frac{u_{22}^1}{u_{11}^1} = -\frac{u_{22}^2}{u_{11}^2}, \quad \nu_{13}^1 = -\frac{u_{33}^1}{u_{11}^1}, \quad \nu_{13}^2 = -\frac{u_{33}^2}{u_{11}^2}.$$

С помощью соотношений (3.61) находим следующие зависимости эффективного модуля Юнга и коэффициентов Пуассона тонкой **двухслойной пластины из различных пар кубических кристаллов** от основных параметров

$$E_{\text{eff}} = \frac{(\alpha s_{11}^1 + k_1)^2 - (\alpha s_{12}^1 + k_2)^2}{(\alpha + 1)[s_{11}^1(k_1^2 - k_2^2) + \alpha k_1((s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2)]},$$

$$\nu_{12}^{\text{eff}} = -\frac{s_{12}^1(k_1^2 - k_2^2) + \alpha k_2[(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]}{s_{11}^1(k_1^2 - k_2^2) + \alpha k_1[(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]},$$

$$\nu_{13}^{1\text{eff}} = -s_{12}^1(k_1 + k_2) \frac{(k_1 - k_2) + \alpha(s_{11}^1 - s_{12}^1)}{s_{11}^1(k_1^2 - k_2^2) + \alpha k_1[(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]},$$

$$\nu_{13}^{2\text{eff}} = -\bar{s}_{13}^2(s_{11}^1 + s_{12}^1) \frac{(k_1 - k_2) + \alpha(s_{11}^1 - s_{12}^1)}{s_{11}^1(k_1^2 - k_2^2) + \alpha k_1[(s_{11}^1)^2 - (s_{12}^1)^2]},$$

где

$$\alpha \equiv \frac{h_2}{h_1},$$

$$k_1 = \bar{s}_{11}^2 - \frac{(\bar{s}_{16}^2)^2}{\bar{s}_{66}^2 + \alpha(2 + \alpha)s_{44}^1}, \quad k_2 = \bar{s}_{12}^2 + \frac{(\bar{s}_{16}^2)^2}{\bar{s}_{66}^2 + \alpha(2 + \alpha)s_{44}^1}.$$

В частном случае с двумя различно ориентированными слоями ($\chi \neq 0$) из одинаковых кубических кристаллов выражения для коэффициентов податливости (3.59) упрощаются

$$s_{ij}^1 \equiv s_{ij}, \quad \bar{s}_{11}^2 = s_{11} - 0.5\Delta \sin^2 2\chi, \quad \bar{s}_{12}^2 = s_{12} + 0.5\Delta \sin^2 2\chi,$$

$$\bar{s}_{16}^2 = -0.5\Delta \sin 4\chi, \quad \bar{s}_{66}^2 = s_{44} + 2\Delta \sin^2 2\chi, \quad \bar{s}_{13}^2 = s_{12},$$

$$\bar{s}_{33}^2 = s_{11}, \quad \bar{s}_{44}^2 = s_{44}, \quad \Delta = s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}.$$

Как было продемонстрировано в подразделе 1.2.2, удобными безразмерными характеристиками упругих свойств кубического кристалла являются Π и δ

$$\Pi \equiv -2\frac{s_{12}}{\Delta}, \quad \delta \equiv \frac{\Delta}{s_{11}}.$$

С их помощью предыдущие результаты для различно ориентированных **слоев из одинаковых кубических кристаллов** можно представить в упрощенном виде

$$s_{11}E_{\text{eff}} = \frac{k_{10} - k_{20} + \alpha(1 + 0.5\Pi\delta)}{k_{10} - k_{20} + \alpha k_{10}(1 + 0.5\Pi\delta)}, \quad (3.62)$$

$$\nu_{12}^{\text{eff}} = \nu_{12}^{1\text{eff}} = \nu_{12}^{2\text{eff}} = -\frac{\alpha k_{20}(1 + 0.5\Pi\delta) - 0.5\Pi\delta(k_{10} - k_{20})}{\alpha k_{10}(1 + 0.5\Pi\delta) + k_{10} - k_{20}}, \quad (3.63)$$

$$\nu_{13}^{\text{eff}} = \nu_{13}^{1\text{eff}} = \nu_{13}^{2\text{eff}} = 0.5\Pi\delta \frac{\alpha(1 + 0.5\Pi\delta) + k_{10} - k_{20}}{\alpha k_{10}(1 + 0.5\Pi\delta) + k_{10} - k_{20}}. \quad (3.64)$$

$$k_{10} = \frac{k_1}{s_{11}} = 1 - \kappa, \quad k_{20} = \frac{k_2}{s_{11}} = -0.5\Pi\delta + \kappa,$$

$$\kappa = 0.5\delta \sin^2 2\chi \left[1 + \frac{2\delta \cos^2 2\chi}{(2 - 2\delta + \Pi\delta)(1 + \alpha)^2 + 2\delta \sin^2 2\chi} \right].$$

Эти формулы показывают, что эффективные безразмерные модули Юнга $s_{11}E_{\text{eff}}$ и коэффициенты Пуассона двухслойных пластин из одинаковых различно ориентированных кубических кристаллов зависят только от безразмерных характеристик $\alpha = h_2/h_1$, Π , δ и χ .

3.3.2. Результаты и обсуждение

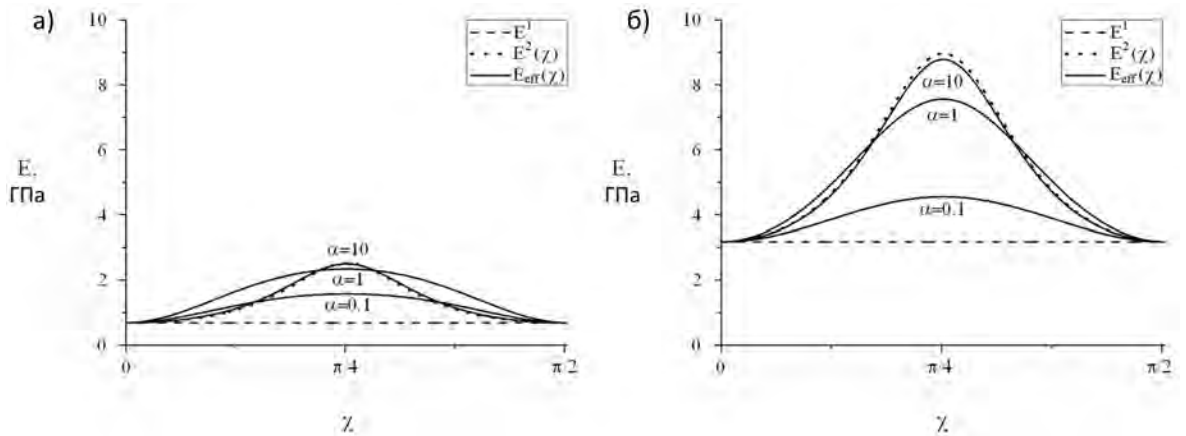


Рис. 3.11: Зависимости эффективного модуля Юнга двухслойной пластины $E_{\text{eff}}(\chi)$ и модулей Юнга E^1 , $E^2(\chi)$ для двух слоев, заполняемых кубическим кристаллом InTl (25at.%Tl) с $\delta > 0$ (а), а также в случае другого кубического кристалла Li с $\delta > 0$ (б) от угла относительной ориентации слоев χ при относительных толщинах слоев $\alpha \equiv h_2/h_1 = 0.1, 1, 10$.

Обсудим сначала численные результаты, основанные на формулах (3.62), (3.63), (3.64) для двухслойной пластины из одинаковых различно ориентированных кубических кристаллов с положительным коэффициентом анизотропии, экспериментальные упругие константы которых собраны в справочнике [172]. Сравнение эффективных модулей Юнга $E_{\text{eff}}(\chi)$ и величин модулей Юнга E^1 , $E^2(\chi)$ для исходных слоев 1 и 2 из кубического кристалла InTl (25at.%Tl)

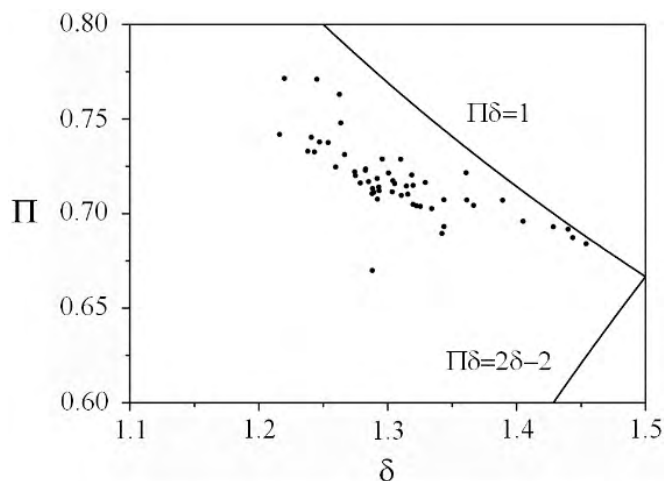


Рис. 3.12: Расположение на плоскости безразмерных параметров Π , δ кубических кристаллов, образующих двухслойные пластины с эффективными модулями Юнга, превосходящими модули Юнга обоих слоев при какой-либо относительной ориентации слоев. Сплошные кривые соответствуют границам устойчивости кристаллов.

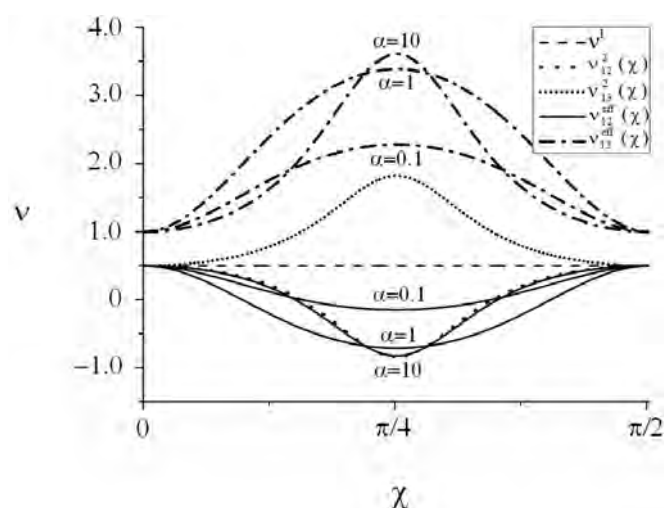


Рис. 3.13: Изменчивость коэффициентов Пуассона двух исходных пластин ν^1 , $\nu_{12}^2(\chi)$, $\nu_{13}^2(\chi)$ и эффективных коэффициентов двухслойных пластин $\nu_{12}^{eff}(\chi)$, $\nu_{13}^{eff}(\chi)$ при различных относительных толщинах слоев пластин ($\alpha = 0.1, 1, 10$), образованных из кубического кристалла InTl (25at%Tl) с $\delta > 0$.

(частичный ауксетик с $\delta > 0, 1 > \Pi > 0$) при различных относительных толщинах слоев (при $\alpha = 0.1, 1, 10$) дано на Рис.3.11а. Из рисунка можно видеть, что в некоторых диапазонах изменения углов относительной ориентации и толщин слоев кристалла χ и α эффективный модуль Юнга двухслойной пластины превосходит модули Юнга обоих слоев. Очевидно, что этот результат не соответствует результатам, получаемым по известным правилам смесей (по правилу объемного среднего Фойгта). Подобная ситуация оказывается типичной для 57-ми кристаллов с положительным коэффициентом анизотропии $\delta > 0$ (Rb, K, Na, Li, CuZn(43at.%Zn),

CuAuZn, InTl (25at.%Tl) и др.) из тысячи двухсот кубических кристаллов, собранных в справочнике [172]. Положение таких кристаллов показано точками на плоскости безразмерных параметров Π , δ в диапазоне $1.2 < \delta < 1.5$ вблизи границы термодинамической устойчивости $\Pi\delta = 1$ на Рис.3.12. Аналогичный пример модулей Юнга пластин из кубического кристалла Li (частичного ауксетика с $\delta > 0$) при $\alpha = 0.1, 1, 10$ дается на Рис.3.11б. Вместе с тем найдено, что для двухслойных пластин из различно ориентированных одинаковых кубических кристаллов эффективный модуль Юнга не превосходит максимума модуля Юнга повернутого слоя, который достигается при $\chi = \pi/4$. Эффективные коэффициенты Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$, $\nu_{13}^{\text{eff}}(\chi)$ двухслойной пластины в обсуждаемой ситуации различно ориентированных слоев из одинаковых кубических кристаллов с $\delta > 0$ сильно отличаются друг от друга. Зависимости, представленные на Рис.3.13 для кристалла InTl (25at.%Tl), являются типичными. Эффективный коэффициент Пуассона пластины $\nu_{13}^{\text{eff}}(\chi)$ оказывается положительным и всегда превосходит коэффициент Пуассона исходного первого слоя ν^1 . Другой эффективный коэффициент Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$ всегда меньше ν^1 , может изменять знак и меньше коэффициента Пуассона повернутой пластины $\nu_{12}^2(\chi)$ в определенных диапазонах углов поворота χ и отношений толщин слоев α . Эффективный коэффициент $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$ оказывается также меньше коэффициента $\nu_{13}^2(\chi)$ для исходного 2-го слоя и коэффициента $\nu^1 = \nu_{12}^1 = \nu_{13}^1$ для исходного 1-го слоя (кроме случаев $\chi = 0$ и $\chi = \pi/2$). Не удалось обнаружить двухслойные пластинки из различно ориентированных одинаковых кристаллов с $\delta > 0$, у которых эффективный коэффициент Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$ был меньше значения коэффициента Пуассона исходной повернутой пластины $\nu_{12}^2(\chi)$ при $\chi = \pi/4$.

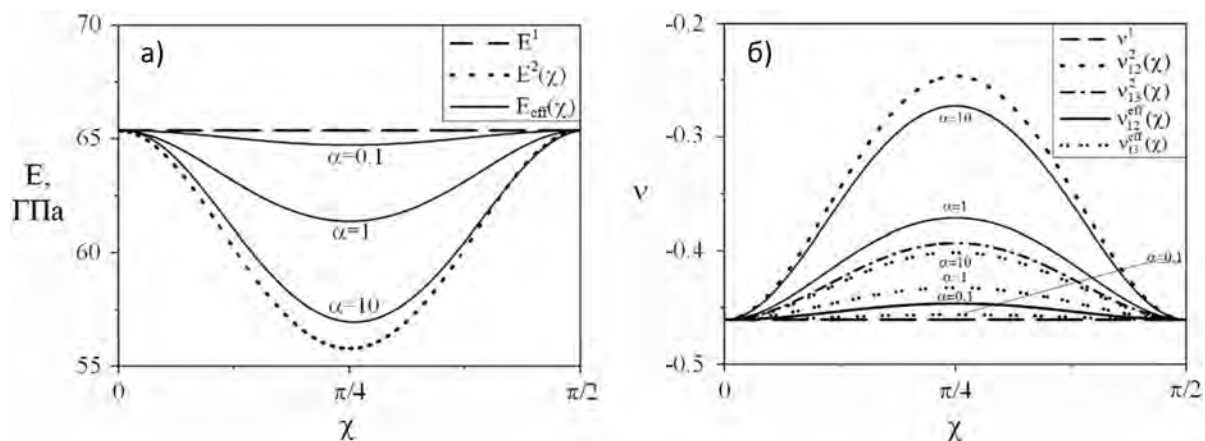


Рис. 3.14: Эффективные модули Юнга двухслойных пластин $E_{\text{eff}}(\chi)$ и модули Юнга исходных слоев E^1 , $E^2(\chi)$ (а), и коэффициенты Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$, $\nu_{13}^{\text{eff}}(\chi)$, ν^1 , $\nu_{12}^2(\chi)$, $\nu_{13}^2(\chi)$ (б) при различных толщинах слоев ($\alpha = 0.1, 1, 10$) и одном кристалле $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ с $\delta < 0$.

Поведение двухслойных пластин с **различно ориентированными слоями из одинаковых кубических кристаллов с отрицательным коэффициентом**

том анизотропии $\delta < 0$ кардинальным образом отличается от описанного выше. Это демонстрируют результаты для эффективных модулей Юнга и коэффициентов Пуассона в случае кристалла $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ (полного ауксетика с $\delta < 0$, $\Pi > 1$) на Рис.3.14. Эффективный модуль Юнга двухслойной пластины здесь при всех углах χ и относительных толщинах α меньше модуля Юнга первого слоя E^1 и больше модуля Юнга второго слоя $E^2(\chi)$ (Рис.3.14а). В отличие от максимума эффективного модуля при $\chi = \pi/4$ для кристаллов с $\delta > 0$ (Рис.3.11) для кристалла с $\delta < 0$ он достигает минимума при таком значении χ (Рис.3.14а). Все эффективные коэффициенты Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$ и $\nu_{13}^{\text{eff}}(\chi)$ для двухслойной пластины из кристалла $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$, оставаясь отрицательными, изменяются в пределах между коэффициентами Пуассона ν^1 и $\nu_{12}^2(\chi)$ для исходных слоев, а при $\chi = \pi/4$ достигают максимумов (Рис.3.14б). Такое поведение сильно отличается от того, которое имеет место для кристаллов с $\delta > 0$ (ср. с Рис.3.13).

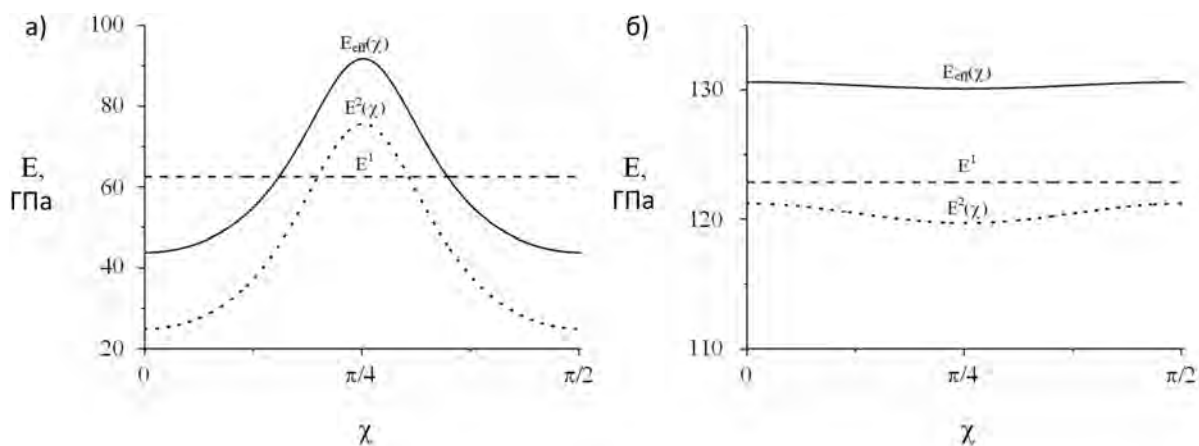


Рис. 3.15: Эффективные модули Юнга двухслойных пластин из кристаллов Al с $\delta > 0$ и CuAlNi (14.5wt.%Al,3.15wt.%Ni) с $\delta > 0$ (а) и из кристаллов $\text{Sm}_{0.9}\text{La}_{0.1}\text{S}$ с $\delta < 0$ и TiV (71at.%V) с $\delta \approx 0$ (б) при одинаковых толщинах слоев ($\alpha = 1$).

Поведение двухслойных пластин с **различно ориентированными слоями становится более разнообразным при различных кубических кристаллах в слоях**. В частном случае одинаковых толщин слоев ($\alpha = 1$), заполненных кристаллическим неауксетиком Al с $\delta > 0$ в слое 1 и кубическим кристаллом (частичным ауксетиком) CuAlNi (14.5wt.%Al,3.15wt.%Ni) также с $\delta > 0$ в повернутом слое 2, эффективный модуль Юнга превосходит модули Юнга кристаллов в обоих исходных слоях при углах относительного поворота χ только в некоторой окрестности $\chi = \pi/4$ (Рис.3.15а). Максимальное значение эффективного модуля Юнга 91.8 ГПа достигается при $\chi = \pi/4$, $\alpha = 1.02$. Для двухслойной пластины с $\alpha = 1$, заполненной неауксетиком Al и неауксетиками с $\delta > 0$ был выявлен один случай (Al-AuGa₂), когда эффективный модуль Юнга превосходил модули Юнга кристаллов в обоих исходных слоях в окрестности $\chi = \pi/4$. Максимальное значение эффективного модуля Юнга при $\chi = \pi/4$ и $\alpha = 1$ равно 64.3 ГПа с модулями Юнга $E^1 = 62.5$ ГПа для

Al и $E^2(\chi = \pi/4) = 62.9$ ГПа для AuGa₂. В другом случае двухслойной пластины из кристалла Sm_{0.9}La_{0.1}S (частичного ауксетика с $\delta < 0$ и $1 > \Pi > 0$) в слое 1 и повернутого кристаллического неауксетика TiV (71at.%V) с $\delta \approx 0$ в слое 2 эффективный модуль Юнга превосходит модули Юнга обоих кристаллов для всех значениях угла χ при $\alpha = 1$ (Рис.3.15б). Наибольшее значение эффективного модуля Юнга для такого типа пластины $E_{\text{eff}} = 131$ ГПа достигается при $\chi = 0$ и $\alpha = 0.87$. Влияние знака коэффициента анизотропии на поведение эффективного модуля Юнга здесь очевидно.

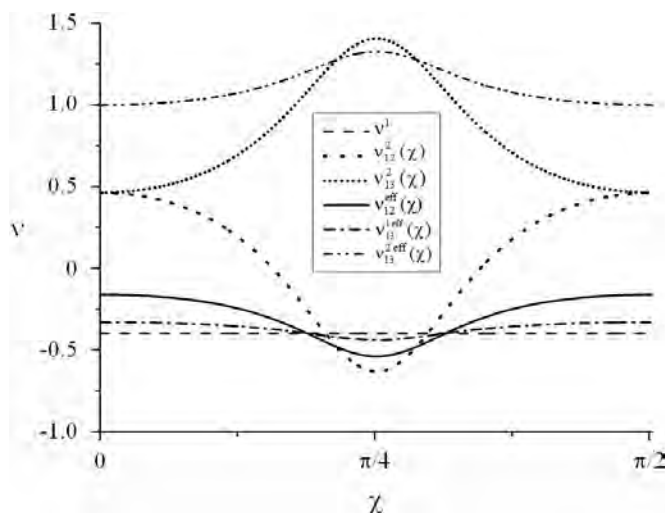


Рис. 3.16: Эффективные коэффициенты Пуассона двухслойной пластины $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$, $\nu_{13}^{1\text{eff}}(\chi)$, $\nu_{13}^{2\text{eff}}(\chi)$ и коэффициенты Пуассона ν^1 , $\nu_{12}^2(\chi)$, $\nu_{13}^2(\chi)$ для исходных кубических кристаллов Sm_{0.75}La_{0.25}S и CuAlNi (14.5wt.%Al, 3.15wt.%Ni) в слоях одинаковой толщины ($\alpha = 1$).

Численные расчеты показывают, что эффективные коэффициенты Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$, $\nu_{13}^{1\text{eff}}(\chi)$ и коэффициент $\nu_{13}^{2\text{eff}}(\chi)$ для двухслойной пластины из разных кристаллов Sm_{0.75}La_{0.25}S (полного ауксетика с $\delta < 0$, $\Pi > 1$) и CuAlNi (14.5wt.%Al, 3.15wt.%Ni) (частичного ауксетика с $\delta > 0$) со слоями одинаковой толщины ($\alpha = 1$) ведут себя противоположным образом. Первые два коэффициента отрицательны при всех χ и минимальны при $\chi = \pi/4$, а коэффициент $\nu_{13}^{2\text{eff}}(\chi)$ всегда положителен и при $\chi = \pi/4$ достигает максимума, что соответствует характеру поведения коэффициентов $\nu_{12}^2(\chi)$, $\nu_{13}^2(\chi)$ для исходного второго слоя (Рис.3.16).

Хорошей иллюстрацией разнообразия поведения $E_{\text{eff}}(\chi, \alpha)$ для двухслойных пластин со слоями различной толщины и различной ориентации может служить пример пластины из кристалла Sm_{0.65}La_{0.35}S (полного ауксетика с $\delta < 0$, $\Pi > 1$) в слое 1 и повернутого кристалла серебра Ag (частичного ауксетика с $\delta > 0$) в слое 2. Как видно из Рис.3.17, эффективный модуль Юнга такой двухслойной пластины при отношении толщин слоев $\alpha \equiv h_2/h_1 < 3.57$ (относительно толстом слое с повернутым кристаллом) превосходит модули Юнга обоих слоев в окрестности зна-

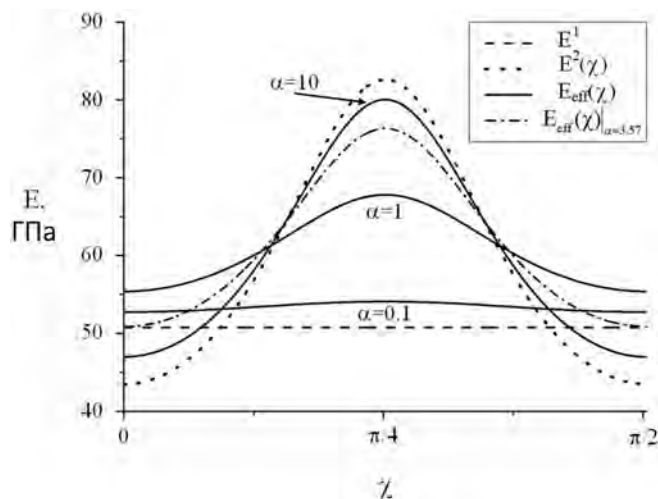


Рис. 3.17: Изменение эффективного модуля Юнга $E_{\text{eff}}(\chi)$ для двухслойной пластины из кристалла $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ в слое 1 и повернутого кристалла Ag в слое 2 и модулей Юнга исходных слоев E^1 , $E^2(\chi)$ с изменением угла поворота во втором слое χ и изменением относительной толщины слоев α . Для кривой $E_{\text{eff}}(\chi)$ при $\alpha = 3.57$ выполняется условие $E_{\text{eff}}(\chi = 0) = E^1$.

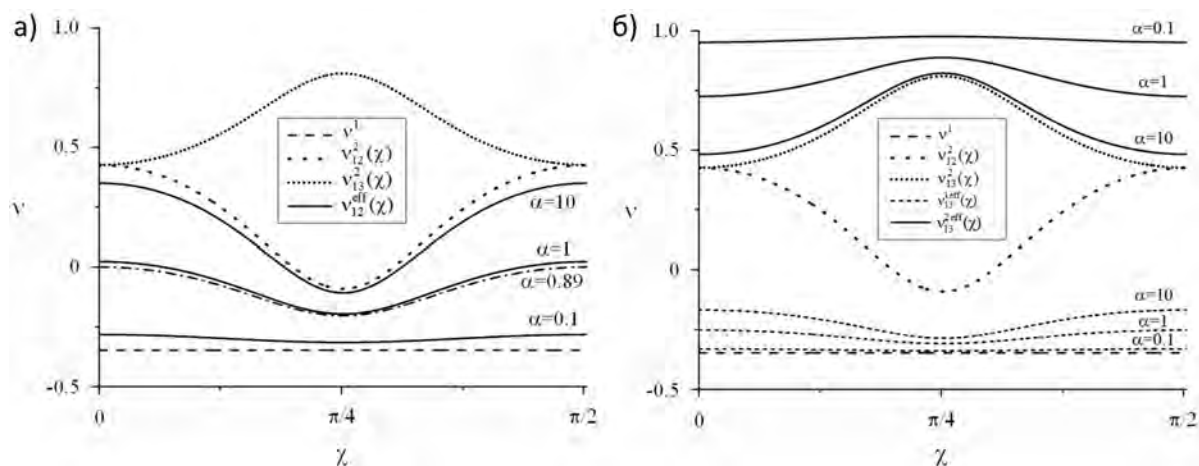


Рис. 3.18: Изменение эффективных коэффициентов Пуассона $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$ (а) и $\nu_{13}^{1\text{eff}}(\chi)$, $\nu_{13}^{2\text{eff}}(\chi)$ (б) для двухслойной пластины из кристалла $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ с $\delta < 0$ и кристалла Ag с $\delta > 0$, и коэффициентов Пуассона исходных слоев ν^1 , $\nu_{12}^2(\chi)$, $\nu_{13}^2(\chi)$ с изменением угла χ и параметра толщины α . Неравенство $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi) < 0$ справедливо при любых χ и $\alpha < \alpha_{cr} = 0.89$.

чений угла χ , равных 0 и $\pi/2$. При слоях одинаковой толщины ($\alpha = 1$) упомянутая угловая окрестность составляет около $\pi/8$. Что касается эффективных коэффициентов Пуассона такой двухслойной пластины, то коэффициент $\nu_{12}^{\text{eff}}(\chi)$ минимален при $\chi = \pi/4$ и любом α , может менять знак при больших α и оказывается всегда отрицательным при $\alpha < \alpha_{cr} = 0.89$ (Рис.3.18а). Другой эффективный коэффициент Пуассона $\nu_{13}^{\text{eff}}(\chi)$ в слое 1 ($\nu_{13}^{1\text{eff}}(\chi)$) отрицателен при любых α и минимален при

$\chi = \pi/4$, а в слое 2 ($\nu_{13}^{2\text{eff}}(\chi)$) всегда положителен и при $\chi = \pi/4$ достигает максимума (Рис.3.18б). В случае двухслойной пластины со слоями одинаковой толщины ($\alpha = 1$) и различной ориентации из кристалла $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ (полного ауксетика с $\delta < 0$, $\Pi > 1$) в слое 1 и повернутого кристалла серебра Al (неауксетика с $\delta > 0$) в слое 2 эффективный модуль Юнга ($E_{\text{eff}}(\chi = \pi/4) = 79.8$ ГПа) может превосходить модули Юнга обоих слоев ($E^1 = 50.8$ ГПа для $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ и $E^2(\chi = \pi/4) = 71.8$ ГПа для Al) в окрестности значений угла χ , равного $\pi/4$.

Для двухслойных пластин изучена большая выборка в 104 пар из кубических кристаллов Al (неауксетик с $\delta > 0$), W (неауксетик с $\delta \approx 0$), Ca (частичный ауксетик с $\delta > 0$), Ge (неауксетик с $\delta > 0$), $\text{Sm}_{0.9}\text{La}_{0.1}\text{S}$ (частичный ауксетик с $\delta < 0$), $\text{Sm}_{0.85}\text{Tm}_{0.15}\text{S}$ (частичный ауксетик с $\delta < 0$), $\text{Sm}_{0.75}\text{La}_{0.25}\text{S}$ (полный ауксетик с $\delta < 0$), $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ (полный ауксетик с $\delta \approx 0$), $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ (полный ауксетик с $\delta < 0$) для слоя 1 и всех остальных кубических кристаллов с экспериментальными данными из [172, 175] для повернутого слоя 2. Обнаружено большое количество двухслойных пластин, у которых эффективный модуль Юнга превосходит модули Юнга исходных пар при тех или иных значениях угла поворота χ . Оно составило в частном случае равных толщин слоев ($\alpha = 1$) около 1/5 от общего количества рассмотренных пар кристаллов и главным образом при твердых растворах самария в первом слое.

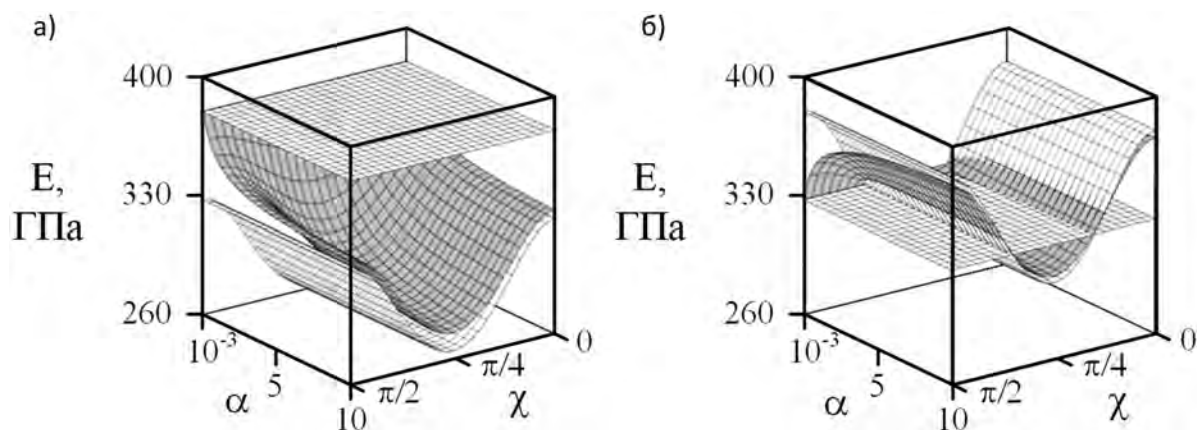


Рис. 3.19: Зависимость эффективного модуля Юнга и модулей Юнга в двух различным образом ориентированных слоях двухслойных пластин Mo-Cr (а) и Cr-Mo (б) от угла поворота 2-го слоя χ и отношения толщин слоев α . Разные модули Юнга обозначены разной штриховкой (эффективный модуль Юнга обозначен более темной штриховкой). Модули Юнга для первого слоя отличаются постоянством.

В случае двухслойной пластины, заполненной двумя неауксетическими кристаллами Mo и Cr , оба из которых имеют отрицательный коэффициент анизотропии $\delta < 0$, характер изменения эффективных коэффициентов зависит от того, в каком из слоев находится кристалл с большим модулем Юнга, который составляет 380 ГПа для Mo и 328 ГПа для Cr (Рис.3.19). Для композита Mo-Cr оказывается справед-

ливым неравенство $E^1 > E_{\text{eff}}(\chi, \alpha) > E^2(\chi)$. В противоположном случае композита Cr-Mo с менее жестким кристаллом Cr в слое 1 изменения эффективных коэффициентов имеют гораздо более сложный характер и, в частности, в некотором диапазоне χ и α выполняется неравенство $E_{\text{eff}}(\chi, \alpha) > E^1, E^2(\chi)$, противоречащее простым правилам смесей. Аналогичное поведение эффективного модуля Юнга двухслойных пластин имеет место для пар неауксетиков Nb и LaAl₂ с $\delta < 0$ и модулями Юнга 152 ГПа и 132 ГПа. При заполнении 1-го слоя неауксетиком с более значительным модулем Юнга в двухслойной пластине Nb-LaAl₂ эффективный модуль Юнга имеет промежуточное значение. При заполнении 1-го слоя неауксетиком с меньшим модулем Юнга в двухслойной пластине для некоторых углов поворота и отношений толщин слоев эффективный модуль Юнга оказывается больше модулей Юнга 1-го и 2-го повернутого слоев. Если двухслойные пластины образуются из кристаллических неауксетиков с $\delta < 0$ и частичных ауксетиков с $\delta < 0$ (например, неауксетика Nb с модулем Юнга 152 ГПа и частичного ауксетика TmSe с модулем Юнга 115 ГПа), то эффективный модуль Юнга может превосходить модули Юнга обоих слоев обеих комбинаций ауксетика и неауксетика (двухслойных пластин Nb-TmSe и TmSe-Nb). Однако, в случае кристаллов с сильно различающимися жесткостями, например, неауксетика Cr с модулем Юнга 328 ГПа и частичного ауксетика TmSe с модулем Юнга 115 ГПа эффективный модуль Юнга двухслойных пластин оказывается больше модуля Юнга одного из слоев, но меньше модуля Юнга другого слоя для обоих композитов Cr-TmSe и TmSe-Cr.

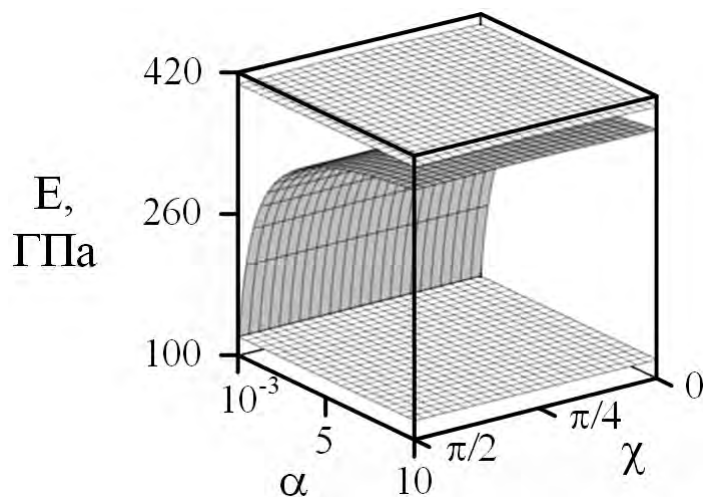


Рис. 3.20: Изменчивость эффективного модуля Юнга двухслойной пластины W-TiV (71at.%V) из кубических кристаллов с очень малой анизотропией, повернутых в слоях относительно друг друга. Модуль Юнга W в первом слое не меняется (равняется 408 ГПа), а изменение модуля Юнга другого повернутого кристалла во втором слое практически отсутствует. Эффективный модуль Юнга обозначен более темной штриховкой.

Имеется ряд кубических кристаллов с очень малым коэффициентом анизо-

тропии $\delta \approx 0$, для которых важными остаются только два коэффициента упругости, и которые можно назвать «изотропными кристаллами» в отношении упругих свойств. Примерами таких кристаллов являются кристалл W с $\delta = 0.008$ и кристалл TiV (71at.%V) с $\delta = -0.05$. В случае двухслойной пластины из таких «изотропных кристаллов» W-TiV (71at.%V) (а также пластины TiV (71at.%V) - W) эффективный модуль Юнга меняется с изменением относительной толщины слоев α от 121 ГПа (модуля Юнга кристалла TiV (71at.%V)) до 408 ГПа (модуля Юнга кристалла W) (см. Рис.3.20). Эффективный модуль Юнга двухслойной пластины W-Cr, образованной из «изотропного кристалла» и кристалла-неауксетика с $\delta < 0$, оказывается заключенным между 408 ГПа и $E^2(\chi)$, модулем Юнга 2-го повернутого на угол χ слоя из кристалла Cr.

3.4. Тонкие трехслойные пластины из кубических кристаллов [42]

3.4.1. Продольное растяжение трехслойной пластины из кубических кристаллов

Растяжение тонкой трехслойной пластины со слоями из кубических кристаллов в приближении плоского напряженного состояния при отсутствии сил на внешних горизонтальных поверхностях характеризуется следующими упрощающими соотношениями

$$\sigma_z^1 = \sigma_z^2 = \sigma_z^3 = 0.$$

Ось z направлена перпендикулярна слоям. В силу закона Гука для малых упругих деформаций имеем линейные связи между нормальными напряжениями и деформациями для трех слоев ($k = 1, 2, 3$ - номер слоя)

$$\begin{aligned} \varepsilon_x^k &= s_{11}^k \sigma_x^k + s_{12}^k \sigma_y^k, \\ \varepsilon_y^k &= s_{11}^k \sigma_y^k + s_{12}^k \sigma_x^k, \\ \varepsilon_z^k &= s_{12}^k \sigma_x^k + s_{12}^k \sigma_y^k. \end{aligned}$$

Условия совместного горизонтального растяжения трех жестко сцепленных слоев для деформаций $\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2 = \varepsilon_x^3$, $\varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2 = \varepsilon_y^3$ переписываются в виде следующих условий для напряжений

$$\begin{aligned} s_{11}^1 \sigma_x^1 + s_{12}^1 \sigma_y^1 &= s_{11}^2 \sigma_x^2 + s_{12}^2 \sigma_y^2 = s_{11}^3 \sigma_x^3 + s_{12}^3 \sigma_y^3, \\ s_{11}^1 \sigma_y^1 + s_{12}^1 \sigma_x^1 &= s_{11}^2 \sigma_y^2 + s_{12}^2 \sigma_x^2 = s_{11}^3 \sigma_y^3 + s_{12}^3 \sigma_x^3. \end{aligned}$$

Условия равновесия при растяжении пластины в направлении оси x силой P при выборе поперечной ширины пластины равной единице имеют вид

$$h_1\sigma_x^1 + h_2\sigma_x^2 + h_3\sigma_x^3 = P, \quad h_1\sigma_y^1 + h_2\sigma_y^2 + h_3\sigma_y^3 = 0.$$

Здесь и далее обозначения h_1, h_2, h_3 относятся к толщинам слоев.

Удобно переписать полученные соотношения в виде уравнений для линейных комбинаций напряжений $\sigma_x^k \pm \sigma_y^k$

$$(s_{11}^1 \pm s_{12}^1)(\sigma_x^1 \pm \sigma_y^1) = (s_{11}^2 \pm s_{12}^2)(\sigma_x^2 \pm \sigma_y^2) = (s_{11}^3 \pm s_{12}^3)(\sigma_x^3 \pm \sigma_y^3),$$

$$h_1(\sigma_x^1 \pm \sigma_y^1) + h_2(\sigma_x^2 \pm \sigma_y^2) + h_3(\sigma_x^3 \pm \sigma_y^3) = P$$

или по отдельности для таких комбинаций

$$(\sigma_x^1 \pm \sigma_y^1) = \frac{P}{(s_{11}^1 \pm s_{12}^1)S_{\pm}}, \quad (\sigma_x^2 \pm \sigma_y^2) = \frac{P}{(s_{11}^2 \pm s_{12}^2)S_{\pm}},$$

$$(\sigma_x^3 \pm \sigma_y^3) = \frac{P}{(s_{11}^3 \pm s_{12}^3)S_{\pm}}, \quad S_{\pm} \equiv \sum_k \frac{h_k}{s_{11}^k \pm s_{12}^k}.$$

Отсюда для отдельных компонент напряжений находим

$$\sigma_x^1 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^1 + s_{12}^1)S_+} + \frac{1}{(s_{11}^1 - s_{12}^1)S_-} \right),$$

$$\sigma_y^1 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^1 + s_{12}^1)S_+} - \frac{1}{(s_{11}^1 - s_{12}^1)S_-} \right),$$

$$\sigma_x^2 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^2 + s_{12}^2)S_+} + \frac{1}{(s_{11}^2 - s_{12}^2)S_-} \right),$$

$$\sigma_y^2 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^2 + s_{12}^2)S_+} - \frac{1}{(s_{11}^2 - s_{12}^2)S_-} \right),$$

$$\sigma_x^3 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^3 + s_{12}^3)S_+} + \frac{1}{(s_{11}^3 - s_{12}^3)S_-} \right),$$

$$\sigma_y^3 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{(s_{11}^3 + s_{12}^3)S_+} - \frac{1}{(s_{11}^3 - s_{12}^3)S_-} \right).$$

В соответствии с законом Гука для деформаций тогда имеем

$$\varepsilon_x^1 = \varepsilon_x^2 = \varepsilon_x^3 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{S_+} + \frac{1}{S_-} \right), \quad \varepsilon_y^1 = \varepsilon_y^2 = \varepsilon_y^3 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{S_+} - \frac{1}{S_-} \right),$$

$$\varepsilon_z^1 = P \frac{s_{12}^1}{(s_{11}^1 + s_{12}^1)S_+}, \quad \varepsilon_z^2 = P \frac{s_{12}^2}{(s_{11}^2 + s_{12}^2)S_+}, \quad \varepsilon_z^3 = P \frac{s_{12}^3}{(s_{11}^3 + s_{12}^3)S_+}.$$

Используя полученные выражения для деформаций, можно теперь получить результаты для эффективных коэффициентов Пуассона и модуля Юнга для тонкой трехслойной пластины, воспользовавшись их связями

$$\nu_{xy} = \nu_{xy}^1 = \nu_{xy}^2 = \nu_{xy}^3 = -\frac{\varepsilon_y^1}{\varepsilon_x^1}, \quad \nu_{xz}^1 = -\frac{\varepsilon_z^1}{\varepsilon_x^1}, \quad \nu_{xz}^2 = -\frac{\varepsilon_z^2}{\varepsilon_x^1}, \quad \nu_{xz}^3 = -\frac{\varepsilon_z^3}{\varepsilon_x^1},$$

$$\nu_{xz} = \frac{1}{h_1 + h_2 + h_3} \sum_k h_k \nu_{xz}^k, \quad E = \frac{P}{(h_1 + h_2 + h_3) \varepsilon_x^1}.$$

Получаем

$$\nu_{xy} = \frac{S_+ - S_-}{S_+ + S_-}, \quad (3.65)$$

$$\nu_{xz}^1 = -\frac{2s_{12}^1}{(s_{11}^1 + s_{12}^1)} \frac{S_-}{S_+ + S_-}, \quad (3.66)$$

$$\nu_{xz}^2 = -\frac{2s_{12}^2}{(s_{11}^2 + s_{12}^2)} \frac{S_-}{S_+ + S_-}, \quad (3.67)$$

$$\nu_{xz}^3 = -\frac{2s_{12}^3}{(s_{11}^3 + s_{12}^3)} \frac{S_-}{S_+ + S_-}, \quad (3.68)$$

$$\nu_{xz} = -\frac{2}{h_1 + h_2 + h_3} \frac{S_-}{S_+ + S_-} \sum_k \frac{h_k s_{12}^k}{s_{11}^k + s_{12}^k}, \quad (3.69)$$

$$E = \frac{2}{(h_1 + h_2 + h_3)} \frac{S_+ S_-}{S_+ + S_-}. \quad (3.70)$$

Полученные результаты инвариантны относительно перестановки слоев. В частности, в силу этого случай с любыми парами одинаковых слоев (двух слоев одинаковой толщины и упругих свойств) приводится к случаю двухслойной пластины. В случае трех слоев одинаковой толщины, но с разными кристаллами, результаты для модуля Юнга и коэффициентов Пуассона оказываются независящими от толщины слоев

$$E = \frac{1}{3} \left(\sum_k \frac{1}{s_{11}^k + s_{12}^k} \right) \left(\sum_k \frac{1}{s_{11}^k - s_{12}^k} \right) / \sum_k \frac{s_{11}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2}, \quad (3.71)$$

$$\nu_{xy} = -\sum_k \frac{s_{12}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2} / \sum_k \frac{s_{11}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2}, \quad (3.72)$$

$$\nu_{xz}^1 = -\frac{s_{12}^1}{s_{11}^1 + s_{12}^1} \sum_k \frac{1}{s_{11}^k - s_{12}^k} / \sum_k \frac{s_{11}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2}, \quad (3.73)$$

$$\nu_{xz}^2 = -\frac{s_{12}^2}{(s_{11}^2 + s_{12}^2)} \sum_k \frac{1}{s_{11}^k - s_{12}^k} / \sum_k \frac{s_{11}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2}, \quad (3.74)$$

$$\nu_{xz}^3 = -\frac{s_{12}^3}{(s_{11}^3 + s_{12}^3)} \sum_k \frac{1}{s_{11}^k - s_{12}^k} / \sum_k \frac{s_{11}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2}, \quad (3.75)$$

$$\nu_{xz} = -\frac{1}{3} \sum_k \frac{1}{s_{11}^k - s_{12}^k} \sum_k \frac{s_{12}^k}{s_{11}^k + s_{12}^k} / \sum_k \frac{s_{11}^k}{(s_{11}^k)^2 - (s_{12}^k)^2}. \quad (3.76)$$

Полученные соотношения для трехслойных пластин остаются пригодными и в случае более многослойных пластин, если подразумевать под знаком $\sum_k a_k$ суммы при $k = 1, 2, \dots, n$.

Наконец, однородное продольное растяжение слоев позволяет использовать замены коэффициентов податливости s_{11}^k, s_{12}^k через модули Юнга E_k и коэффициенты Пуассона ν_k для отдельных исходных слоев

$$s_{11}^k = \frac{1}{E_k}, \quad s_{12}^k = -\frac{\nu_k}{E_k}.$$

Эффективные коэффициенты Пуассона и модуль Юнга трехслойной пластины, введенные выше, не содержат индекса k .

3.4.2. Изгиб трехслойной пластины из кубических кристаллов

До сих пор коэффициент Пуассона был определен из растяжения стержня. Также можно получить значение коэффициента Пуассона пластины при чистом изгибе, в частности, прикладывая изгибающие моменты на двух противоположных сторонах прямоугольной пластины. Для изотропной однослойной пластины изгибающие моменты имеют вид

$$M_x = -D(\kappa_x + \nu\kappa_y) \quad M_y = -D(\nu\kappa_x + \kappa_y), \quad (3.77)$$

где кривизна вдоль осей x и y определяется как $\kappa_x = \partial^2 w / \partial x^2$ и $\kappa_y = \partial^2 w / \partial y^2$, w – вертикальное смещение пластины, жесткость пластины – $D = Eh^3 / [12(1 - \nu^2)]$. В случае приложения только момента M_x (т.е. $M_y = 0$), эффективный продольный коэффициент Пуассона может быть получен из второго выражения (3.77)

$$\nu_{xy} = -\frac{\kappa_y}{\kappa_x}. \quad (3.78)$$

Формула (3.78) является определением коэффициента Пуассона при изгибе по аналогии с коэффициентом Пуассона $\nu_{xy} = -\varepsilon_y / \varepsilon_x$ при растяжении. Для однослойной пластины коэффициенты Пуассона одинаковы как при растяжении, так и при изгибе. Ниже будет показано, что для трехслойной пластины эффективные продольные коэффициенты Пуассона при растяжении и изгибе различны. Эффективный продольный коэффициент Пуассона для трехслойной пластины при изгибе может быть получен с помощью Классической теории слоистых структур (Classical Lamination Theory), в которой продольные и сдвиговые силы (N_x, N_y, N_{xy}) и изгибные и скручивающие моменты (M_x, M_y, M_{xy}) связаны с деформациями срединной поверхности ($\varepsilon_x^0, \varepsilon_y^0, \gamma_{xy}^0$) и кривизнами ($\kappa_x, \kappa_y, \kappa_{xy}$)

$$\begin{pmatrix} N_x \\ N_y \\ N_{xy} \\ M_x \\ M_y \\ M_{xy} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{16} & B_{11} & B_{12} & B_{16} \\ & A_{22} & A_{26} & B_{12} & B_{22} & B_{26} \\ & & A_{66} & B_{16} & B_{26} & B_{66} \\ & & & D_{11} & D_{12} & D_{16} \\ & \text{sym} & & & D_{22} & D_{26} \\ & & & & & D_{66} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_x^0 \\ \varepsilon_y^0 \\ \gamma_{xy}^0 \\ \kappa_x \\ \kappa_y \\ \kappa_{xy} \end{pmatrix}.$$

Матрицы жесткости $[A]$, $[B]$ $[D]$ определяются как

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^n [(\bar{Q}_{ij})]_k (h_k - h_{k-1}), \quad B_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n [(\bar{Q}_{ij})]_k (h_k^2 - h_{k-1}^2),$$

$$D_{ij} = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^n [(\bar{Q}_{ij})]_k (h_k^3 - h_{k-1}^3),$$

где $i = 1, 2, 6$, $j = 1, 2, 6$ и в случае трехслойной пластины $n = 3$. Тогда элементы преобразованных матриц жесткости $[\bar{Q}]$ для каждого слоя можно записать через матричные коэффициенты жесткости $[Q]$

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{11} &= Q_{11} \cos^4 \theta + Q_{22} \sin^4 \theta + 2(Q_{12} + 2Q_{66}) \cos^2 \theta \sin^2 \theta \\ \bar{Q}_{22} &= Q_{11} \sin^4 \theta + Q_{22} \cos^4 \theta + 2(Q_{12} + 2Q_{66}) \cos^2 \theta \sin^2 \theta \\ \bar{Q}_{12} &= (Q_{11} + Q_{22} - 4Q_{66}) \cos^2 \theta \sin^2 \theta + Q_{12}(\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) \\ \bar{Q}_{16} &= (Q_{11} - Q_{12} - 2Q_{66}) \cos^3 \theta \sin \theta - (Q_{22} - Q_{12} - 2Q_{66}) \cos \theta \sin^3 \theta \\ \bar{Q}_{26} &= (Q_{11} - Q_{12} - 2Q_{66}) \cos \theta \sin^3 \theta - (Q_{22} - Q_{12} - 2Q_{66}) \cos^3 \theta \sin \theta \\ \bar{Q}_{66} &= (Q_{11} + Q_{22} - 2Q_{12}) \cos^2 \theta \sin^2 \theta + Q_{66}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)^2 \end{aligned}$$

где

$$Q_{11} = Q_{22} = \frac{E}{1 - \nu^2}, \quad Q_{12} = \frac{\nu E}{1 - \nu^2}, \quad Q_{66} = G.$$

Приведенные выше выражения могут быть упрощены, если (а) главные кристаллографические оси кубического кристалла совпадают со сторонами пластин, т.е. $\theta = 0$ и $[\bar{Q}] = [Q]$, и (б) пластина является симметричной, причем первый и третий слой состоят из одного и того же материала $Q_{ij}^1 = Q_{ij}^3$ и имеют ту же толщину $h_1 = h_3$, так что $[B] = 0$. Пусть $h_2 = xh_1 = xh_3$, тогда

$$D_{11} = D_{22} = \frac{h_1^3}{3} \left[\left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2 \right) \frac{E_1}{1 - \nu_1^2} + \frac{x^3}{4} \frac{E_2}{1 - \nu_2^2} + \left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2 \right) \frac{E_3}{1 - \nu_3^2} \right],$$

$$D_{12} = \frac{h_1^3}{3} \left[\left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2 \right) \frac{\nu_1 E_1}{1 - \nu_1^2} + \frac{x^3}{4} \frac{\nu_2 E_2}{1 - \nu_2^2} + \left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2 \right) \frac{\nu_3 E_3}{1 - \nu_3^2} \right].$$

В отсутствие крутящих моментов изгибающие моменты связаны с кривизнами как

$$M_x = D_{11}\kappa_x + D_{12}\kappa_y \quad (3.79)$$

$$M_y = D_{12}\kappa_x + D_{22}\kappa_y \quad (3.80)$$

Решая систему (3.77) в случае $M_y = 0$, $D_{22} = D_{11}$, имеем

$$\kappa_x = \frac{D_{11}}{D_{11}^2 - D_{12}^2} M_x, \quad (3.81)$$

$$\kappa_y = \frac{D_{12}}{D_{12}^2 - D_{11}^2} M_x \quad (3.82)$$

Подстановка (3.81), (3.82) в (3.78), позволяет получить выражение для эффективного продольного коэффициента Пуассона при изгибе

$$\nu_{\text{eff}}^B = \frac{D_{12}}{D_{11}} = \frac{\left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2\right) \frac{\nu_1 E_1}{1-\nu_1^2} + \frac{x^3}{4} \frac{\nu_2 E_2}{1-\nu_2^2} + \left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2\right) \frac{\nu_3 E_3}{1-\nu_3^2}}{\left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2\right) \frac{E_1}{1-\nu_1^2} + \frac{x^3}{4} \frac{E_2}{1-\nu_2^2} + \left(1 + \frac{3}{2}x + \frac{3}{4}x^2\right) \frac{E_3}{1-\nu_3^2}} \quad (3.83)$$

В случае растяжения трехслойной пластины формулу (3.65) можно переписать в виде

$$\nu_{\text{eff}}^S = \frac{\frac{\nu_1 E_1}{1-\nu_1^2} + x \frac{\nu_2 E_2}{1-\nu_2^2} + \frac{\nu_3 E_3}{1-\nu_3^2}}{\frac{E_1}{1-\nu_1^2} + x \frac{E_2}{1-\nu_2^2} + \frac{E_3}{1-\nu_3^2}} \quad (3.84)$$

для сравнения с (3.83). Предполагая, что все толщины слоев равны ($x = 1$), то

$$D_{11} = D_{22} = \frac{h_1^3}{3} \left[3.25 \frac{E_1}{1-\nu_1^2} + 0.25 \frac{E_2}{1-\nu_2^2} + 3.25 \frac{E_3}{1-\nu_3^2} \right],$$

$$D_{12} = \frac{h_1^3}{3} \left[3.25 \frac{\nu_1 E_1}{1-\nu_1^2} + 0.25 \frac{\nu_2 E_2}{1-\nu_2^2} + 3.25 \frac{\nu_3 E_3}{1-\nu_3^2} \right]$$

и выражения для эффективного продольного коэффициента Пуассона при изгибе имеет вид

$$\nu_{\text{eff}}^B = \frac{D_{12}}{D_{11}} = \frac{13 \frac{\nu_1 E_1}{1-\nu_1^2} + \frac{\nu_2 E_2}{1-\nu_2^2} + 13 \frac{\nu_3 E_3}{1-\nu_3^2}}{13 \frac{E_1}{1-\nu_1^2} + \frac{E_2}{1-\nu_2^2} + 13 \frac{E_3}{1-\nu_3^2}}. \quad (3.85)$$

Используя формулы (3.72) и (3.84), можно записать аналогичное выражение эффективного продольного коэффициента Пуассона при растяжении для сравнения с (3.85)

$$\nu_{\text{eff}}^S = \frac{\frac{\nu_1 E_1}{1-\nu_1^2} + \frac{\nu_2 E_2}{1-\nu_2^2} + \frac{\nu_3 E_3}{1-\nu_3^2}}{\frac{E_1}{1-\nu_1^2} + \frac{E_2}{1-\nu_2^2} + \frac{E_3}{1-\nu_3^2}}. \quad (3.86)$$

Независимо от того, имеют ли слои равные или неравные толщины, коэффициент Пуассона при изгибе для симметрично расположенных трехслойных пластин оказывает большее влияние на слои 1 и 3 и оказывает меньшее влияние на слой 2.

3.4.3. Результаты и обсуждение

Обычное соотношение, связывающее модуль Юнга E , модуль сдвига G и коэффициент Пуассона ν для изотропных материалов неприменим для кубических материалов. В частности, коэффициенты податливости связаны с техническими упругими характеристиками как $s_{ii} = 1/E$, $s_{ij} = -\nu/E$ и $s_{kk} = 1/G$, где $i, j = 1, 2, 3$ и $k = 4, 5, 6$. Остальные коэффициенты податливости равны нулю. Мерой анизотропии кубических материалов является

$$A = 2(1 + \nu) \frac{G}{E} = \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}}.$$

Случай изотропии имеет место при $A = 1$. Коэффициент A также называют коэффициентом анизотропии Зенера.

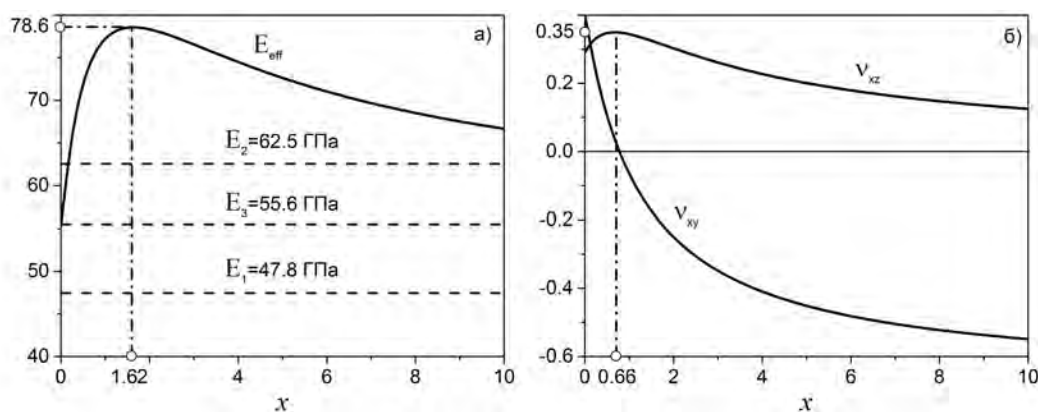


Рис. 3.21: Зависимости эффективного модуля Юнга E_{eff} (а) и эффективных коэффициентов Пуассона ν_{xy} и ν_{xz} (б) от отношения толщин слоев $x = h_2/h_1 = h_2/h_3$ для трехслойной пластины NiTi-Sm_{0.75}Y_{0.25}S-Al.

Некоторые результаты об эффективных упругих свойствах трехслойных пластин, состоящих из разных кубических материалов, вида неауксетик - ауксетик - неауксетик представлены в Табл.3.5. В этой таблице приведены три вида трехслойных пластин: (i) NiTi - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик, (ii) Al - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик и (iii) LiBr - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик с неауксетическими кристаллами в третьем слое KI, LiBr, Al, Ge, Mo, W, Ir в первом случае и KI, NaBr, Mg₂Pb, Ge, Mo, W, Ir во втором и третьем случаях. Все слои имеют равную толщину $h_1 = h_2 = h_3$, а свойства слоев обозначаются индексами 1, 2 и 3 для первого, среднего и последнего слоев, соответственно. Эффективные продольный и поперечный коэффициенты Пуассона ν_{xy} и ν_{xz} и эффективный модуль Юнга E_{eff} рассчитывались с помощью формул (3.71), (3.72), (3.76). Среди рассмотренных случаев не было найдено трехслойных пластин, у которых эффективный поперечный коэффициенты Пуассона ν_{xz} был отрицательным. Рассчитанный продольный коэффициент Пуассона ν_{xy} проявляет ауксетичность в случае относительно мягких неауксетических слоев. По мере увеличения

Таблица 3.5: Эффективные упругие характеристики для трехслойной пластины неауксетик - ауксетик - неауксетик при одинаковых толщинах.

Неауксетик	$E_1,$ ГПа	$E_2,$ ГПа	$E_3,$ ГПа	$E_{\text{eff}},$ ГПа	ν_1	ν_2	ν_3	ν_{xy}	ν_{xz}	
NiTi-Sm _{0.75} Y _{0.25} S-неауксетик										
KI	47.8	55.6	26.2	60.0	0.44	-0.67		0.14	0.20	0.22
LiBr			27.2	62.1				0.33	-0.17	0.34
Al			62.5	77.3				0.36	-0.07	0.34
Ge			103	90.5				0.27	-0.04	0.27
Mo			380	187				0.26	0.11	0.22
W			408	198				0.28	0.14	0.23
Ir			446	211				0.30	0.16	0.23
Al-Sm _{0.75} Y _{0.25} S-неауксетик										
KI	62.5	55.6	26.2	64.2	0.36	-0.67		0.14	-0.19	0.13
NaBr			35.6	68.3				0.21	-0.16	0.17
Mg ₂ Pb			61.3	78.4				0.23	-0.11	0.17
Ge			103	94.6				0.27	-0.04	0.19
Mo			380	191				0.26	0.11	0.15
W			408	202				0.28	0.13	0.16
Ir			446	216				0.30	0.16	0.17
LiBr-Sm _{0.75} Y _{0.25} S-неауксетик										
KI	27.2	55.6	26.2	46.5	0.33	-0.67		0.14	-0.34	0.11
NaBr			61.3	51.3				0.23	-0.30	0.15
NiTi			47.8	62.1				0.44	-0.17	0.34
Mg ₂ Pb			61.3	62.4				0.23	-0.22	0.16
Ge			103	79.8				0.27	-0.12	0.17
Mo			380	178				0.26	0.09	0.13
W			408	189				0.28	0.12	0.14
Ir	446	203	0.30	0.14	0.15					

модуля Юнга третьего слоя продольный коэффициент Пуассона ν_{xy} увеличивается. Этот коэффициент становится положительным для таких сильно жестких неауксетиков в третьем слое, как Mo, W, Ir. Анализ для некоторых пластин с относительно мягкими исходными слоями показывает, что эффективный модуль Юнга выше, чем модули Юнга слоев. Пример такой ситуации представлен на Рис.3.21а для эффективного модуля Юнга трехслойной пластины NiTi - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - Al в зависимости от параметра толщины $x = h_2/h_1 = h_2/h_3$. Эффективный модуль Юнга больше модуля Юнга слоя с наибольшим модулем при $x > 0.2$ и достигает максимума при $x = 1.62$. С другой стороны поперечный коэффициент Пуассона ν_{xz} остается всегда

положительным, достигая максимума при $x = 0.66$, а продольный коэффициент Пуассона ν_{xy} быстро уменьшается с увеличением x и становится отрицательным при $x > 0.77$ (Рис.3.21б).

Анализ эффективного модуля Юнга и эффективных коэффициентов Пуассона трехслойных пластин NiTi-Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик, Al - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик и LiBr - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик, Mo - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик при параметре толщины $x = 1$ проводился для более чем семисот различных неауксетиков. Обнаружено, что эффективный модуль Юнга для NiTi-Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик и Al - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик превышает модули Юнга трех исходных слоев в более двухсот случаях. В тоже время поперечный коэффициент Пуассона всегда положителен, а продольный коэффициент Пуассона для таких трехслойных пластин отрицателен для половины исходных неауксетиков в третьем слое. Одна треть среди таких трехслойных пластин являются слабыми ауксетиками ($0 > \nu_{xy} > -1$). Также обнаружено, что эффективный модуль Юнга трехслойных пластинок LiBr - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик превышает все три исходных модуля Юнга в меньшем числе случаев (около 50), тогда как число отрицательных продольных коэффициентов Пуассона становится больше, чем для двух предыдущих трехслойных пластин. Однако поперечный коэффициент Пуассона по-прежнему остается положительным. Наконец, трехслойные пластины Mo - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - неауксетик всегда являются неауксетиками ($\nu_{xy} > 0, \nu_{xz} > 0$) из-за подавляющего влияния большой жесткости неауксетического Mo в первом слое.

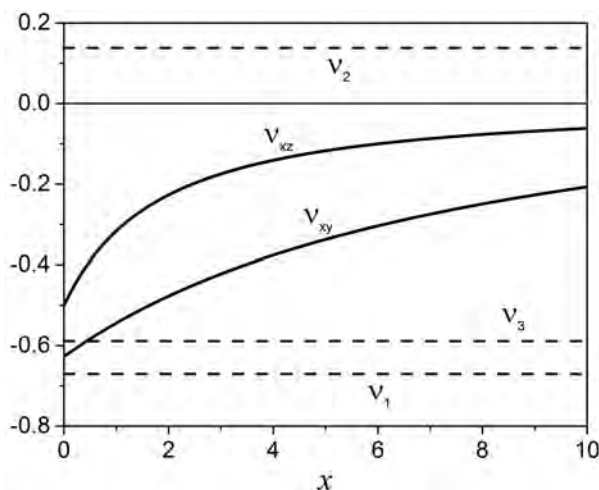


Рис. 3.22: Зависимости эффективных коэффициентов Пуассона ν_{xy} и ν_{xz} от отношения толщин слоев $x = h_2/h_1 = h_2/h_3$ для трехслойной пластины Sm_{0.75}Y_{0.25}S - KI - Sm_{0.7}Y_{0.3}S.

Категория трехслойных пластин вида ауксетик - неауксетик- ауксетик рассматривалась на примерах пластин Sm_{0.7}Y_{0.3}S - неауксетик - Sm_{0.7}Y_{0.3}S с параметром толщины $x = 1$ и с таким же количеством (около 700) неауксетиков. Найдено, что эффективные модули Юнга для трехслойных пластин превышают модули

Таблица 3.6: Эффективные упругие характеристики для трехслойной пластины ауксетик - неауксетик - ауксетик при одинаковой толщине.

Неауксетик	E_1 , ГПа	E_2 , ГПа	E_3 , ГПа	E_{eff} , ГПа	ν_1	ν_2	ν_3	ν_{xy}	ν_{xz}	
$Sm_{0.75}Y_{0.25}S$ - неауксетики - $Sm_{0.7}Y_{0.3}S$										
$BaCa_2(C_2H_5CO_2)_6$	55.6	4.31	76.3	47.2	-0.67	0.37	-0.59	-0.60	-0.10	
KI		26.2		57.4				0.14	-0.54	-0.32
LiBr		27.2		61.2				0.33	-0.51	-0.15
NiTi		47.8		78.0				0.44	-0.40	0.01
Al		62.5		82.6				0.36	-0.38	-0.09
Ge		103		98.1				0.27	-0.32	-0.18
Si		129		111				0.29	-0.27	-0.16
V		148		123				0.34	-0.21	-0.10
Mo		380		208				0.26	-0.05	-0.15
W		408		220				0.28	-0.02	-0.13
Ir		446		236				0.30	0.01	-0.11
$Sm_{0.65}La_{0.35}S$ - неауксетики - $Sm_{0.75}Tm_{0.25}S$										
$BaCa_2(C_2H_5CO_2)_6$	50.8	4.31	65.4	41.3	-0.35	0.37	-0.46	-0.39	0.01	
KI		26.2		49.8				0.14	-0.33	-0.18
LiBr		27.2		52.5				0.33	-0.28	-0.04
NiTi		47.8		65.1				0.44	-0.16	0.09
Al		62.5		69.3				0.36	-0.15	0.00
Ge		103		82.8				0.27	-0.11	-0.07
Si		129		93.2				0.29	-0.07	-0.07
V		148		103				0.34	0.00	-0.02
Mo		380		181				0.26	0.09	-0.07
W		408		192				0.28	0.11	-0.05
Ir		446		206				0.30	0.14	-0.04

Юнга трех исходных слоев для одной десятой неауксетиков. Большинство из этих трехслойных пластин были ауксетиками как в отношении продольного коэффициента Пуассона, так и в отношении поперечного коэффициента Пуассона. Небольшой пример таких трехслойных пластин приведен в Табл.3.6. В этой таблице также показаны результаты для пластин $Sm_{0.65}La_{0.35}S$ - неауксетик - $Sm_{0.75}Tm_{0.25}S$ с двумя другими ауксетиками и неауксетиком из того же набора. Это демонстрирует роль жесткости неауксетика в отрицательности продольного коэффициента Пуассона ν_{xy} для категории пластин ауксетик - неауксетик - ауксетик. Коэффициент Пуассона ν_{xy} возрастает с увеличением модуля Юнга неауксетика, аналогично рассмотренному выше случаю трехслойных пластин ауксетик - неауксетик - ауксетик. Изменение

коэффициентов Пуассона ν_{xy} и ν_{xz} с увеличением относительной толщины внутреннего слоя x для трехслойной пластины $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ - KI - $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$ приведено на Рис.3.22.

Таблица 3.7: Эффективный коэффициент Пуассона ν_{xy} трехслойной пластины с равными толщинами слоев при растяжении и изгибе.

Трехслойная пластина с $h_1 = h_2 = h_3$	E_1, E_3 ГПа	E_2 ГПа	E_{eff} ГПа	$\nu_1,$ ν_3	ν_2	ν_{xy}^S раст.	ν_{xy}^B изг.
Ауксетик при растяжении, неауксетик при изгибе ($\nu_{xy}^S < 0 < \nu_{xy}^B$)							
KI- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -KI	26.2	55.6	43.6	0.14	-0.67	-0.39	0.03
LiBr- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -LiBr	27.2		49.3	0.33		-0.30	0.21
Mg_2Pb - $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ - Mg_2Pb	61.3		75.0	0.23		-0.16	0.18
Al- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Al	62.5		81.4	0.36		-0.07	0.31
Ge- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Ge	103		108	0.27		-0.02	0.24
Неауксетик при растяжении, ауксетик при изгибе ($\nu_{xy}^S > 0 > \nu_{xy}^B$)							
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ -Si- $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$	50.8	129	85.2	-0.35	0.29	0.00	-0.29
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ -Cr- $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		328	151		0.16	0.03	-0.25
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ -Mo- $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		380	171		0.26	0.12	-0.22
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ -W- $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		408	182		0.28	0.15	-0.20
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ -Ir- $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		446	196		0.30	0.18	-0.19
Ауксетик при растяжении, ауксетик при изгибе ($\nu_{xy}^B < \nu_{xy}^S < 0$)							
$\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Al- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$	55.6	62.5	76.8	-0.67	0.36	-0.40	-0.64
$\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Ge- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$		103	92.6		0.27	-0.34	-0.63
$\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Si- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$		129	105		0.29	-0.28	-0.62
$\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Cr- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$		328	176		0.16	-0.15	-0.58
$\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -Mo- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$		380	203		0.26	-0.05	-0.55
$\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ -W- $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$		408	215		0.28	-0.02	-0.53

Для трехслойных пластин с одинаковой толщиной слоев сравнение между формулами (3.85) и (3.86) показывает, что в продольный коэффициент Пуассона при изгибе дополнительно входит коэффициент 13 в каждый член, относящийся к внешним слоям. В Табл.3.7 показаны результаты выборки для трех групп симметричных трехслойных пластин, в которых представлена продольная ауксетичность от вида нагрузки. При анализе использовались полные ауксетики и неауксетики. Первая группа симметричных трехслойных пластин состоит из неауксетик - $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ - неауксетик, которые являются продольными ауксетиками при растяжении, но неауксетиками при изгибе; вторая группа – из симметричных пластин $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ - неауксетик $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$, которые являются продольными неауксетиками при растяжении и продольными ауксетиками при изгибе; третья группа состоит из симметричных пластин $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ - неауксетик - $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$, которые

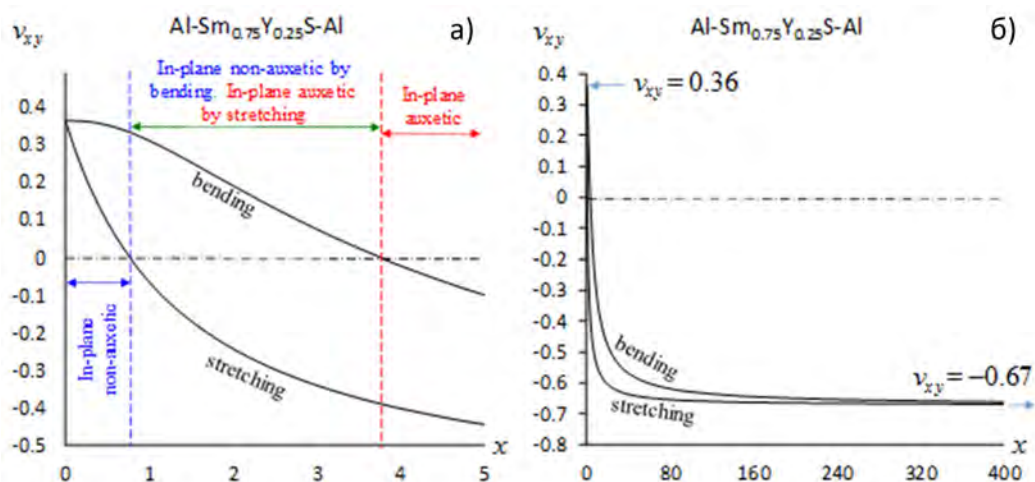


Рис. 3.23: Зависимости от типа нагружения продольного коэффициента Пуассона ν_{xy} в симметричной пластине Al - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - Al, показывающие: область полной продольной ауксетичности, область полной продольной неауксетичности и область частичной ауксетичности.

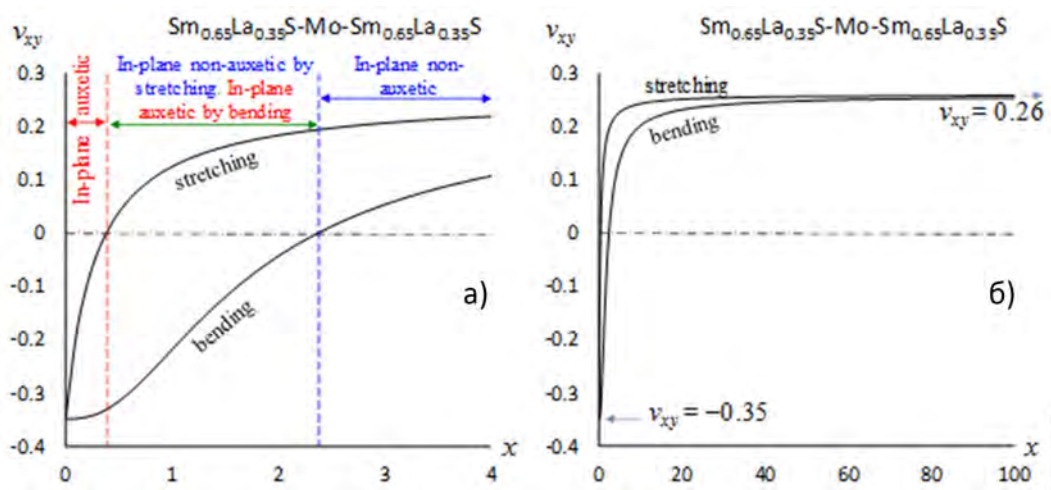


Рис. 3.24: Зависимости от типа нагружения продольного коэффициента Пуассона ν_{xy} в симметричной пластине Sm_{0.65}La_{0.35}S - Mo - Sm_{0.65}La_{0.35}S, показывающие: область полной продольной ауксетичности, область полной продольной неауксетичности и область частичной ауксетичности.

являются продольными ауксетиками при обоих нагрузках. Примеры данных случаев в зависимости от толщины слоев с $x = h_2/h_1 = h_2/h_3$ представлены на Рис.3.23 - Рис.3.25.

На Рис.3.23 изображен продольный коэффициент Пуассона симметричной трехслойной пластины Al - Sm_{0.75}Y_{0.25}S - Al. В частности, на Рис.3.23а показано, что эта пластинка проявляет полную продольную неауксетичность при $x < 0.766$ и полную продольную ауксетичность при $x > 3.743$; в интервале $0.766 \leq x \leq 3.74$

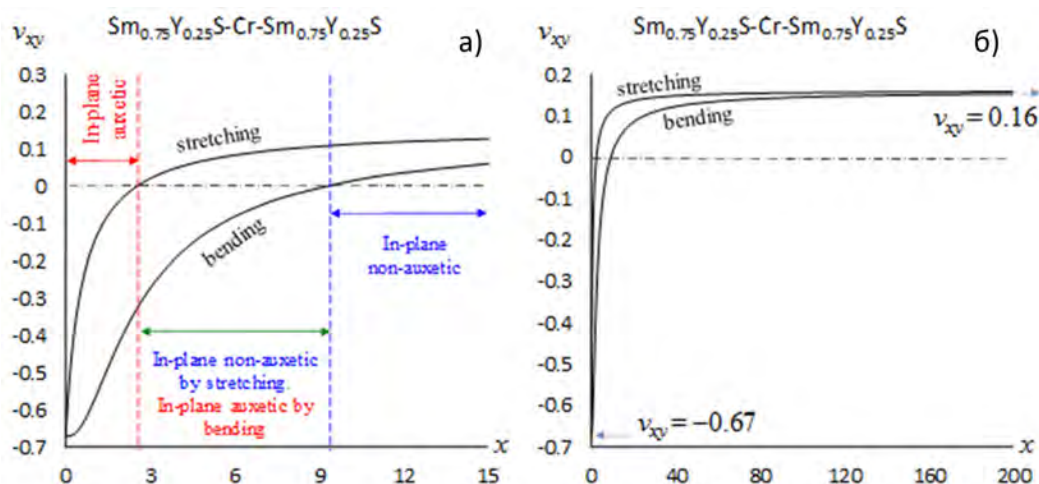


Рис. 3.25: Зависимости от типа нагружения продольного коэффициента Пуассона ν_{xy} в симметричной пластине $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S} - \text{Cr} - \text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$, показывающие: область полной продольной ауксетичности, область полной продольной неауксетичности и область частичной ауксетичности.

эта пластина ведет себя как продольный ауксетик при растяжении и как продольный неауксетик при изгибе. На Рис.3.23б проиллюстрировано, что продольные коэффициенты Пуассона при обоих режимах нагрузки сходятся при больших значениях x . Это неудивительно, потому что пластина становится заполненной Al или $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ при $x = 0$ или $x \rightarrow \infty$ соответственно. Как упоминалось ранее в анализе изгиба коэффициенты Пуассона пластины одинаковы как для растяжения, так и для изгиба, если пластина изготовлена из одного материала.

Зависимости продольного коэффициента Пуассона ν_{xy} для симметрично слоистой пластинки $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S} - \text{Mo} - \text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ изображены на Рис.3.24а. Из этого рисунка видно, что пластина является полным продольным ауксетиком при $x \leq 0.382$ и полным продольным неауксетиком при $x \geq 2.381$. Более интересно, что трехслойная пластина проявляет ауксетичность в зависимости от режима нагрузки, когда относительная толщина среднего слоя находится в интервале $0.382 < x < 2.381$. Как и в случае с другими слоистыми пластинками, коэффициенты Пуассона для обоих режимов нагружения сходятся при больших значениях x (Рис.3.24б). Сравнение между Рис.3.23 и Рис.3.24 показывает, что в случае пластин типа неауксетик - ауксетик - неауксетик эффективный продольный коэффициент Пуассона проявляет более высокие положительные значения при изгибе, чем при растяжении. тогда как в случае пластин типа ауксетик - неауксетик - ауксетик коэффициент ν_{xy} имеет более отрицательные значения при изгибе, чем при растяжении.

Результаты для симметричной трехслойной пластины типа $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ - неауксетик - $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ с одинаковыми толщинами слоев, представленные в Табл.3.7, показывают, что такие пластины обладают отрицательными продольными коэффициентами Пуассона как при растяжении, так и при изгибе. Величины

продольных коэффициентов Пуассона для обоих типов нагружения возрастают с увеличением жесткости неауксетика. Зависимость от типа нагружения продольных коэффициентов Пуассона в зависимости от толщин слоев x на примере симметричной пластины $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S} - \text{Cr} - \text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ представлены на Рис.3.25. В этом случае область полной продольной ауксетичности реализуется при $x < 2.530$, а область полной продольной неауксетичности достигается при $x > 9.332$. Смешанное поведение имеет место в интервале $2.530 \leq x \leq 9.332$.

Таблица 3.8: Эффективный коэффициент Пуассона ν_{xy} трехслойной пластины с равными толщинами слоев при растяжении и изгибе.

Трехслойная пластина с $h_1 = h_2 = h_3$	E_1, E_3 ГПа	E_2 ГПа	E_{eff} ГПа	$\nu_1,$ ν_3	ν_2	ν_{xy}^S раст.	ν_{xy}^B изг.
Ауксетик при растяжении, неауксетик при изгибе ($\nu_{xy}^S < 0 < \nu_{xy}^B$)							
Ca-TmSe-Ca	9.62	115	50.6	0.4	-0.54	-0.43	0.07
Ce-TmSe-Ce	15.9		56.8	0.36		-0.38	0.13
La-TmSe-La	19.3		60.9	0.37		-0.34	0.17
Ag-TmSe-Ag	43.5		87.3	0.43		-0.16	0.32
Cu-TmSe-Cu	66.7		108	0.42		-0.06	0.35
Неауксетик при растяжении, ауксетик при изгибе ($\nu_{xy}^S > 0 > \nu_{xy}^B$)							
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}-\text{Co}-\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$	50.8	114	83.2	-0.35	0.40	0.05	-0.29
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}-\text{Fe}-\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		130	88.5		0.37	0.06	-0.28
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}-\text{Ni}-\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		130	89.0		0.38	0.07	-0.28
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}-\text{SiC}-\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		272	136		0.29	0.11	-0.24
$\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}-\text{TiC}-\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$		476	201		0.17	0.07	-0.22

Более 300 кубических кристаллов проявляют ауксетические свойства (см. раздел 1.2.2). Подавляющее большинство из них являются частичными ауксетиками. Примеры симметричных трехслойных пластин с такими кристаллами и полным ауксетиком $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$ даны в Табл.3.8. Продольный коэффициент Пуассона для симметричной пластины $\text{Ca} - \text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S} - \text{Ca}$ приведен на Рис.3.26. В частности, на Рис.3.26а показано, что эта пластина является полным продольным неауксетиком при $x \leq 0.452$ и полным продольным ауксетиком при $x > 2.642$; в интервале $0.452 < x \leq 2.642$ эта пластина ведет себя как продольный неауксетик при растяжении и как продольный ауксетик при изгибе. На Рис.3.26б показано, что продольные коэффициенты Пуассона при обоих режимах нагрузки сходятся при больших значениях x . Поскольку обсуждавшиеся кубические кристаллы - $\text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$, $\text{Sm}_{0.7}\text{Y}_{0.3}\text{S}$ и $\text{Sm}_{0.75}\text{Tm}_{0.25}\text{S}$ являются полными ауксетиками, т.е. их знак коэффициента Пуассона не меняется с ориентацией, они здесь просто называются ауксетиками.

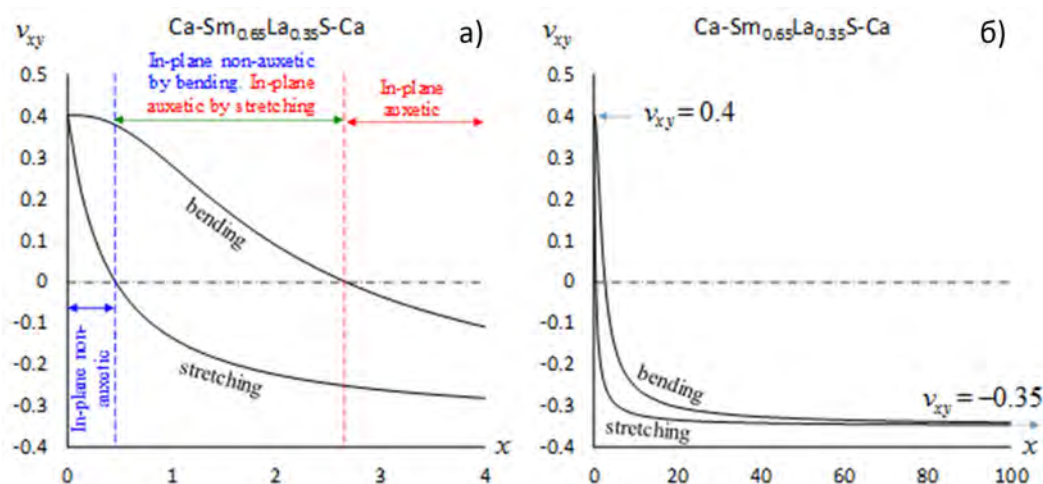


Рис. 3.26: Зависимости от типа нагружения продольного коэффициента Пуассона ν_{xy} в симметричной пластине $\text{Ca} - \text{Sm}_{0.65}\text{La}_{0.35}\text{S} - \text{Ca}$, показывающие: область полной продольной ауксетичности, область полной продольной неауксетичности и область частичной ауксетичности.

3.5. Заключение

Выше показано для гексагональных кристаллов, что зависимость упругих свойств двухслойных кристаллических композитов от упругих свойств исходных кристаллов может иметь как простой, так и сложный характер. В случае двухслойных пластин эффективный продольный модуль Юнга всегда превосходит результат, вычисленный по правилу смеси Фойгта. Различие может увеличиваться с ростом разности положительных коэффициентов Пуассона исходных пар неауксетиков и для комбинаций ауксетик - неауксетик. Однако, при небольших различиях пар исходных кристаллов по модулям Юнга и коэффициентам Пуассона точность правила смеси для модуля Юнга становится удовлетворительной.

Эффективный продольный коэффициент Пуассона в предельном случае одинаковых толщин слоев и равных модулей Юнга исходных пар кристаллов также превосходит предсказание по правилу смеси. Различие может стать существенным лишь в случае двухслойных пластин типа ауксетик - неауксетик. При одинаковых толщинах слоев и различных модулях Юнга неауксетических кристаллов в двух слоях отношение эффективного коэффициента Пуассона к значению, предсказываемому по правилу смеси, перестает быть обязательно большим единицы. Тем не менее отличие от единицы остается во многих случаях малым и точность правила смесей удовлетворительной. Например, для двухслойных пластин из магния в одном слое и любого из ста семидесяти неауксетических гексагональных кристаллов, перечисленных в справочнике [172], в другом слое, отношение эффективного продольного коэффициента Пуассона к коэффициенту, предсказываемому по правилу смеси, отличается от единицы менее, чем на десять процентов, в более ста тридцати

случаях. Близкие результаты получены и для других неауксетиков в первом слое.

Ситуация изменяется коренным образом в случае двухслойной пластины с равными толщинами слоев, один из которых заполняет ауксетик, а другой слой заполняется любым гексагональным неауксетиком. Отношение эффективного продольного коэффициента Пуассона к значению, предсказываемому правилом смеси, отличается от единицы для всех таких пластин более чем на десять процентов. Большинство таких двухслойных пластин (около сто сорока) имеет отрицательный эффективный продольный коэффициент Пуассона. Эффективный модуль Юнга десятка пластин превосходит модули Юнга исходных кристаллов в обоих слоях, что невозможно при выполнении правила смеси.

В случае двухслойных пластин с неравными толщинами слоев изменение толщины слоя с ауксетиком позволяет управлять величиной отрицательного эффективного продольного коэффициента Пуассона слоистого композита. Примеры двухслойных пластин при различных толщинах слоев пар неауксетиков с относительно небольшими различиями модулей Юнга и продольных коэффициентов Пуассона демонстрируют довольно точное выполнение правила смесей. Хорошая точность может достигаться и в случаях, когда только продольные коэффициенты Пуассона или модули Юнга исходных кристаллов имеют небольшие различия. Аналитические результаты легко подтверждают отсутствие зависимости от модуля Юнга и отношения толщин слоев в пределе одинаковых коэффициентов Пуассона исходных пар кристаллов. В случае больших различий коэффициентов Пуассона эффективный продольный коэффициент Пуассона может сильно отличаться от предсказания правила смесей.

Таким образом, наибольшие отклонения обоих эффективных упругих характеристик двухслойных пластин из гексагональных кристаллов, модуля Юнга и продольного коэффициента Пуассона, имеет место при сочетании ауксетиков и неауксетиков. При этом выбор толщин слоев позволяет получать двухслойные пластины с различными отрицательными эффективными продольными коэффициентами Пуассона. Что касается эффективных поперечных коэффициентов Пуассона, то они всегда положительны.

Эффективные упругие характеристики растягиваемой двухслойной пластины из изотропных материалов и кубических кристаллов, максимально симметричных в направлении растяжения, также не следуют правилам смесей. Выше было показано, что эффективный модуль Юнга пластины из ауксетика и неауксетика может существенно превосходить оба модуля Юнга исходных материалов в слоях произвольной толщины. Объединение ауксетиков и неауксетиков в двухслойных пластинах также сильно влияет на их эффективные коэффициенты Пуассона. В частности, эффективный продольный коэффициент Пуассона оказывается отрицательным в обоих слоях пластины при исходном заполнении ауксетиком только одного слоя с достаточно большим произведением отношения толщин слоев и отношения модулей Юнга. В обратной ситуации малого последнего произведения

эффективный продольный коэффициент Пуассона оказывается положительным во всей пластине.

В этой главе также дано описание особенностей таких характеристик двухслойных пластин из различно ориентированных кубических кристаллов, как эффективные модули Юнга и эффективные коэффициенты Пуассона. Сильное различие зависимостей обоих типов эффективных коэффициентов двухслойных пластин от угла относительной ориентации и отношения толщин слоев установлено в случае заполнения обоих слоев одинаковыми кристаллами с положительными или отрицательными коэффициентами анизотропии $\delta \equiv (s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44})/s_{11}$.

В частности, более полусотни кубических кристаллов с положительными коэффициентами анизотропии образовывали двухслойные пластины с эффективным модулем Юнга, который при некоторых значениях угла ориентации и толщин слоев превосходит оба модуля Юнга слоев, заполненных одинаковыми кристаллами. Тем самым, эффективный модуль Юнга продольно растягиваемой двухслойной пластины превышает объемное среднее, так что прямое правило смесей (по Фойгту) не выполняется. Еще большее количество двухслойных пластин с такими особенностями упругого поведения обнаружено, когда слои заполнялись различными неауксетиками и ауксетиками с положительными, отрицательными и очень малыми коэффициентами анизотропии.

Проведено исследование эффективных свойств трехслойных пластин, состоящих из кубических кристаллов, при растяжении и изгибе. Эффективные модули Юнга слоистых пластинок были во многих случаях больше, чем модули Юнга всех слоев, за исключением композитов с очень жесткими кристаллами. Эффективные продольные коэффициенты Пуассона при растяжении трехслойных пластин часто увеличивались с увеличением жесткости неауксетиков, изменяя отрицательный знак на положительный. Во многих случаях трехслойные пластины типа неауксетик - ауксетик - неауксетик характеризуются положительными эффективными поперечными коэффициентами Пуассона, тогда как оба эффективных (продольный и поперечный) коэффициента Пуассона могут быть отрицательными в трехслойных пластинах типа ауксетик - неауксетик - ауксетик.

В случае изгиба симметричных пластин внешние слои оказывают более сильное влияние на эффективный продольный коэффициент Пуассона при изгибе, чем при растяжении, что приводит к трем видам поведения: (а) полной продольной ауксетичности (эффективные продольный и поперечный коэффициенты Пуассона принимают отрицательные значения), (б) полной продольной неауксетичности (эффективные продольный и поперечный коэффициенты Пуассона принимают положительные значения) и (в) сочетание продольной ауксетичности и неауксетичности в зависимости от типа нагрузки (эффективные продольный и поперечный коэффициенты Пуассона принимают значения с разными знаками). Поскольку хорошо известно, что как ауксетические, так и неауксетические материалы имеют свои преимущества и недостатки, возможность разрешить совместное существование та-

ких свойств - как ауксетических, так и неауксетических - означает, что материалы и структуры могли вести себя как ауксетический материал, когда более выгодно быть ауксетиком при одном типе нагрузки, а также вести себя как неауксетический материал, когда невыгодно быть ауксетиком при другом типа нагрузки.

Анализ аномальных упругих свойств кристаллов и их слоистых компози- тов показывает, что отрицательный коэффициент Пуассона не является редкостью для известных реальных материалов вопреки бытовавшему до сих пор мнению. Большое разнообразие видов ауксетиков среди кристаллов и еще большее среди композитов позволяет рассчитывать на их широкое применение, расширение уже известных приложений материалов и метаматериалов.

Глава 4.

Поверхностные волны Релея и Лява при отрицательном коэффициенте Пуассона изотропных сред

Изложение классической теории упругости изотропных сред обычно ограничивается случаями положительных коэффициентов Пуассона ν , несмотря на то, что термодинамически допустимый интервал их изменения включает в себя и область отрицательных значений: $-1 < \nu < 1/2$ [50, 204]. В тоже время установлена отрицательность коэффициента Пуассона для ряда кристаллов [1, 58] и изотропных материалов [110]. В недавней работе [205], опираясь на анализ размерностей, оценивалось влияние коэффициентов Пуассона во всем возможном диапазоне их изменения на скорости (и только на скорости) упругих волн для ряда задач теории изотропной упругости, и, в частности, задачи о поверхностных волнах Релея. Исследование безразмерных распределений смещений и напряжений в волнах Релея при положительных и отрицательных коэффициентах Пуассона было выполнено ранее в работе [206]. Однако, анализ влияния коэффициента Пуассона на распределения смещений и напряжений в [206] нельзя считать вполне успешным, поскольку выбранные обезразмеривающие характеристики сами менялись с изменением коэффициента Пуассона. Ниже анализ волн Релея при различных коэффициентах Пуассона будет проведен с обезразмериванием на характеристики при фиксированном значении коэффициента Пуассона (например, при $\nu = 0$). Аналогичный анализ будет проведен для безразмерных распределений смещений и напряжений у первой моды сдвиговых волн Лява в изотропных средах.

4.1. Влияние величины и знака коэффициента Пуассона на волны Релея [43]

В полупространстве $z < 0$, занятом изотропной упругой средой, возможны два типа волн, распространяющихся параллельно его поверхности. А именно, объемные сдвиговые волны, «скользящие» вдоль свободной поверхности без затухания с глубиной, и поверхностные волны Релея, представляющие собой комбинацию затухающих с глубиной сдвиговой (поперечной) и продольной волн

$$\begin{aligned} u_x &= (\kappa_t a e^{\kappa_t z} + k b e^{\kappa_l z}) \cos k(x - ct), & u_y &= 0, \\ u_z &= (k a e^{\kappa_t z} + \kappa_t b e^{\kappa_l z}) \sin k(x - ct). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Здесь a, b - амплитудные множители, а коэффициенты

$$\kappa_t = k \sqrt{1 - \frac{c^2}{c_t^2}}, \quad \kappa_l = k \sqrt{1 - \frac{c^2}{c_l^2}}$$

характеризуют изменения поперечной и продольной волновых составляющих с глубиной. На больших глубинах из двух вкладов наибольшим оказывается вклад поперечных волн, поскольку их скорость c_t меньше скорости продольных волн c_l .

На свободной поверхности упругого тела (при $z = 0$) должны исчезать компоненты напряжений $\sigma_{xz}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz}$, что требует ограничений на смещения вида

$$\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} = 0, \quad u_y = 0, \quad (c_l^2 - 2c_t^2) \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_t^2 \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0.$$

Из них следует линейная связь между амплитудными множителями a, b (один из них остается произвольным, что отражает линейность уравнений теории упругости для волн малой амплитуды) и дисперсионное ограничение вида

$$(\kappa_t^2 + k^2)a + 2k\kappa_l b = 0, \quad (4.2)$$

$$(\kappa_t^2 + k^2)^2 = 4k^2 \kappa_t \kappa_l. \quad (4.3)$$

Последнее дисперсионное соотношение может быть переписано в виде хорошо известного бикубического уравнения Релея

$$\xi^6 - 8\xi^4 + 8\xi^2 \left(3 - 2\frac{c_t^2}{c_l^2} \right) - 16 \left(1 - \frac{c_t^2}{c_l^2} \right) = 0, \quad \xi \equiv \frac{c}{c_t}.$$

Решение этого уравнения имеет единственный вещественный корень с ограничением $\xi < 1$, следующим из вещественности κ_t, κ_l и определяющим зависимость безразмерной скорости волны Релея ξ от безразмерного параметра c_t/c_l . В свою очередь, этот параметр зависит только от коэффициента Пуассона и не зависит от модуля Юнга и длины волны (волны без дисперсии)

$$\frac{c_t^2}{c_l^2} = 1 - \frac{1}{2(1-\nu)}.$$

Это позволяет выразить зависимость ν от ξ следующим образом:

$$\nu = 1 + \frac{8(\xi^2 - 1)}{\xi^2(\xi^4 - 8\xi^2 + 8)}$$

и при точности до двух значащих цифр свести ее к линейному соотношению

$$\xi \approx 0.18\nu + 0.87.$$

Поскольку скорость сдвиговых волн зависит от величины коэффициента Пуассона, то при анализе зависимости безразмерной скорости волны Релея более целесообразно обезразмеривать скорость делением на сдвиговую скорость при фиксированном значении коэффициента Пуассона, например, при $\nu = 0$. Тогда получим следующую простую зависимость безразмерной скорости от коэффициента Пуассона во всем диапазоне его изменения $-1 < \nu < 1/2$:

$$\frac{c}{c_0} \approx \frac{0.18\nu + 0.87}{\sqrt{1 + \nu}}, \quad c_0 \equiv c_t|_{\nu=0} = \sqrt{\frac{E}{2\rho}}.$$

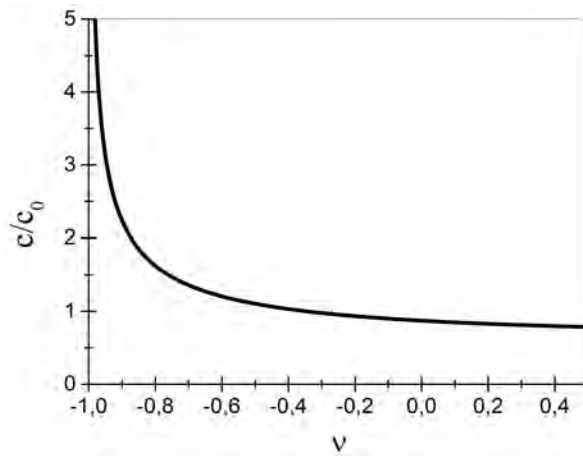


Рис. 4.1: Зависимость безразмерной скорости волны Релея c/c_0 от коэффициента Пуассона полупространства ν .

Рис.4.1 наглядно отражает монотонно падающий характер этой зависимости. Причем, изменения оказываются малыми как при положительных значениях ν , так и при отрицательных коэффициентах Пуассона из диапазона $-0.5 < \nu < 0$. Лишь при меньших отрицательных ν рост безразмерной скорости волн становится заметным и быстро увеличивается по мере приближения коэффициента Пуассона к -1 .

Используя соотношения (4.2), (4.3), выражениям для «горизонтальной» и «вертикальной» компонент смещений (4.1) можно придать вид

$$u_x = A(z) \cos k(x - ct), \quad (4.4)$$

$$u_z = B(z) \sin k(x - ct), \quad (4.5)$$

$$A(z) = a\kappa_t \left(e^{\kappa_t z} - \frac{k}{\sqrt{\kappa_t \kappa_l}} e^{\kappa_l z} \right), \quad (4.6)$$

$$B(z) = ak \left(e^{\kappa_t z} - \frac{\sqrt{\kappa_t \kappa_l}}{k} e^{\kappa_l z} \right). \quad (4.7)$$

Поскольку компоненты смещений в волне Релея сдвинуты по фазе на $\pi/2$, частицы двигаются по эллиптической траектории

$$\frac{u_x^2}{A^2(z)} + \frac{u_z^2}{B^2(z)} = 1.$$

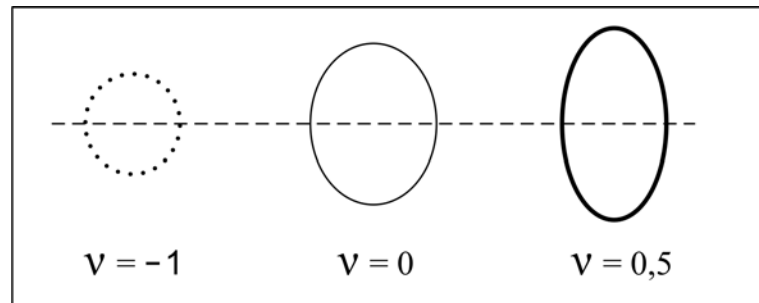


Рис. 4.2: Эллиптические траектории частиц на поверхности с изменением коэффициента Пуассона.

На свободной поверхности упругой среды (при $z = 0$), полагая $a > 0$, для амплитуд имеем

$$A_0 \equiv A(z = 0) = -a\kappa_t \frac{k^2 - \kappa_t^2}{k^2 + \kappa_t^2} < 0, \quad B_0 \equiv B(z = 0) = ak \frac{c^2}{2c_t^2} > 0,$$

что соответствует вращению частиц у поверхности по эллиптической траектории против часовой стрелки. При этом эллипс вытянут в направлении, перпендикулярном свободной поверхности («вертикальном»), что видно из неравенства $|B_0/A_0| = \sqrt{\kappa_l/\kappa_t} > 1$. На больших глубинах эллипсы также вытянуты вертикально, поскольку тогда $B/A \approx k/\kappa_t > 1$, но частицы вращаются по часовой стрелке в силу неравенств $A > 0, B > 0$. Эллиптическая траектория частиц на поверхности значительно изменяется с изменением коэффициента Пуассона. Как ясно видно из Рис.4.2 эллиптическая траектория частиц на свободной поверхности значительно уменьшается по вертикальной оси с уменьшением коэффициента Пуассона и приближается к окружности при ν стремящемся к -1 . На этой фигуре и далее для обезразмеривания смещений используется вертикальная компонента смещений при нулевом числе Пуассона

$$B_{00} \equiv B(z = 0)|_{\nu=0} = 0.382ak.$$

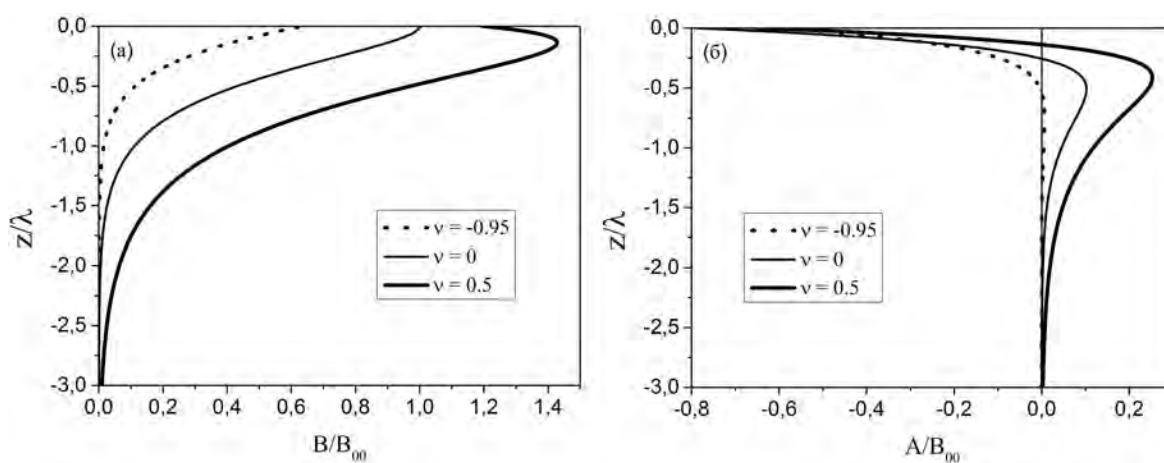


Рис. 4.3: Влияние величины и знака коэффициента Пуассона на амплитуду волн Релея на разных глубинах.

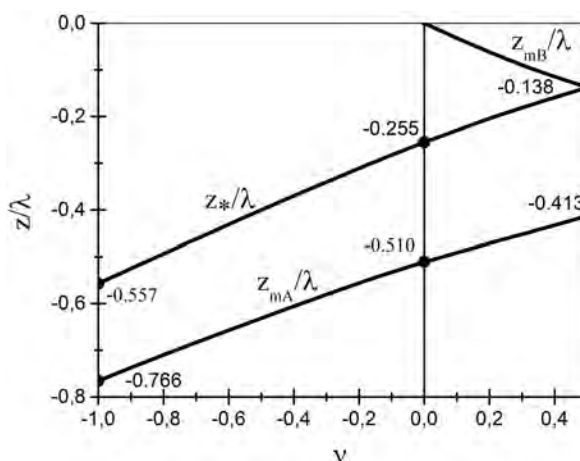


Рис. 4.4: Изменчивость безразмерных глубин z_{mA}/λ , z_mB/λ и z_*/λ от коэффициента Пуассона ν .

Характер влияния величины и знака коэффициента Пуассона на амплитуду волн Релея на разных глубинах хорошо иллюстрирует Рис.4.3. На ней безразмерные амплитуды вертикальной и горизонтальной компонент смещений B/B_{00} , A/B_{00} даны в зависимости от безразмерного расстояния от свободной поверхности при различных коэффициентах Пуассона. Амплитуды сделаны безразмерными делением на амплитуду вертикальной компоненты на свободной поверхности при нулевом коэффициенте Пуассона B_{00} , а глубина делением на длину волны λ . Из Рис.4.3а можно видеть, что при положительном коэффициенте Пуассона $\nu = 1/2$ безразмерная амплитуда вертикального смещения B/B_{00} меняется с глубиной не

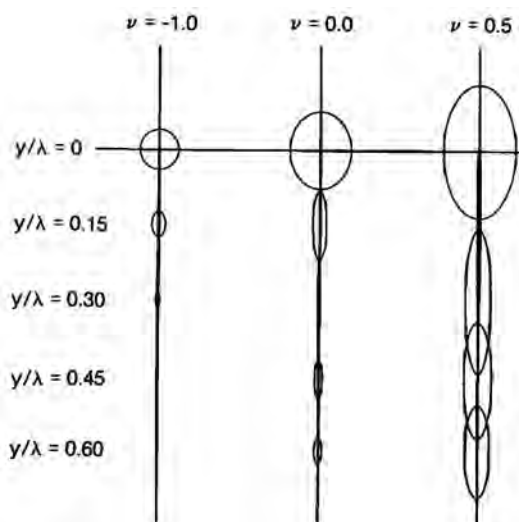


Рис. 4.5: Изменение траектории движения частиц при коэффициентах Пуассона -1 , 0 и 0.5 с изменением глубины y/λ [206].

монотонным образом. Амплитуда B сначала не только не убывает, но возрастает более чем на 10%, и лишь при $|z/\lambda| > 0.4$ она становится меньше амплитуды на свободной поверхности, и асимптотически экспоненциально спадает на большой глубине. В то время как при отрицательных коэффициентах Пуассона амплитуда B/B_0 убывает при любом погружении и тем быстрее, чем более отрицателен коэффициент Пуассона. Из Рис.4.3б видно, что зависимость безразмерной амплитуды горизонтального смещения A/B_0 от глубины не является монотонной при любых значениях коэффициента Пуассона и при небольших глубинах $|z|/\lambda \leq 0.557$ меняет знак. Изменение знака амплитуды A при положительности знака амплитуды B (Рис.4.3) отражает изменение направления вращения частиц по эллиптическим траекториям на определенных глубинах. Обращение в нуль A на этих глубинах указывает на схлопывание эллиптических траекторий (линейную поляризацию волны Релея на таких глубинах). Монотонный рост таких глубин $|z_*|/\lambda$ с уменьшением коэффициента Пуассона иллюстрирует Рис.4.4. При последующем увеличении глубины амплитуда горизонтальной компоненты смещений A становится положительной, достигает максимума при глубине z_{mA}/λ и затем убывает экспоненциально быстро (как $e^{\kappa_t z}$ при $z \rightarrow -\infty$). Максимальные значения здесь тем меньше, чем меньше коэффициент Пуассона, и при $\nu = -1$, $|z|/\lambda > 0.557$ горизонтальное смещение оказывается очень малым. На этом рисунке показано также поведение точки z_{mB}/λ , характеризующей максимум отношения B/B_0 . Отсюда ясно, что немонотонное изменение такого отношения с глубиной при положительных коэффициентах Пуассона становится монотонным при отрицательных значениях (ср. Рис.4.3). Наглядная иллюстрация изменений траекторий движения частиц в волне Релея с изменением глубины и коэффициента Пуассона приведены на Рис.4.5, которая была дана ранее в статье [206].

С помощью закона Гука и дифференцирования смещений (4.4)-(4.7) находятся компоненты напряжений в волне Релея

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \Sigma_{xx}(z) \sin k(x - ct), & \sigma_{zz} &= \Sigma_{zz}(z) \sin k(x - ct), \\ \sigma_{xz} &= \Sigma_{xz}(z) \cos k(x - ct).\end{aligned}$$

Изменение их амплитуд с глубиной описывается следующими зависимостями

$$\begin{aligned}\Sigma_{xz}(z) &= a \frac{E}{1 + \nu} k \sqrt{\kappa_t \kappa_l} f(z), & \Sigma_{zz}(z) &= a \frac{E}{1 + \nu} k \kappa_t f(z), \\ \Sigma_{xx}(z) &= a \frac{E}{1 + \nu} \left[(\kappa_l^2 - \kappa_t^2) \sqrt{\frac{\kappa_t}{\kappa_l}} e^{\kappa_l z} - k \kappa_t f(z) \right], \\ f(z) &\equiv e^{\kappa_t z} - e^{\kappa_l z}.\end{aligned}$$

На свободной поверхности две компоненты напряжений σ_{xz} , σ_{zz} , как и должно быть согласно краевым условиям, обращаются в нуль и лишь нормальная компонента σ_{xx} отлична от нуля

$$\Sigma_{xx}(z = 0) = a \frac{E}{1 + \nu} \left[(\kappa_l^2 - \kappa_t^2) \sqrt{\frac{\kappa_t}{\kappa_l}} e^{\kappa_l z} - k \kappa_t f(z) \right].$$

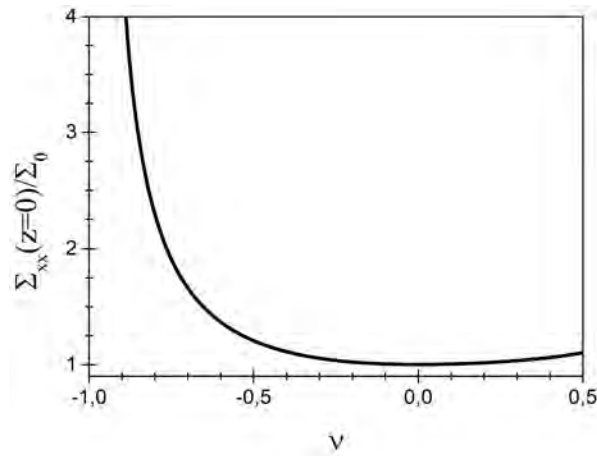


Рис. 4.6: Изменчивость безразмерного поверхностного напряжения $\Sigma_{xx}(z = 0)/\Sigma_0$ от коэффициента Пуассона ν .

Делением на нее трех компонент напряжений последние делаются безразмерными (так было сделано в [206]). При этом произвольный амплитудный множитель a исключается. Однако анализ полученных безразмерных характеристик от коэффициента Пуассона на разной глубине не является корректным, поскольку включает в себя и зависимость поверхностного напряжения от этого коэффициента (как видно из Рис.4.6, поверхностное напряжение быстро возрастает при больших отрицательных значениях коэффициента Пуассона, при $\nu < -0.5$). При выборе поверхностного

напряжения для некоторого фиксированного значения коэффициента Пуассона, например, $\nu = 0$:

$$\Sigma_0 \equiv \Sigma_{xx}(z = 0)|_{\nu=0} = 0.3Ek^2a$$

в качестве обезразмеривающей характеристики такая зависимость поверхностного напряжения исключается, и анализ изменений напряжений с изменением коэффициента Пуассона становится полным.

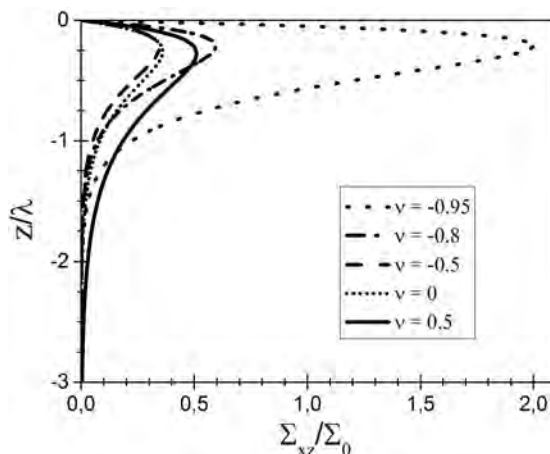


Рис. 4.7: Изменение безразмерного сдвигового напряжения Σ_{xz}/Σ_0 в зависимости от безразмерной глубины z/λ при различных коэффициентах Пуассона 0.5, 0, -0.5 , -0.8 , -0.95 .

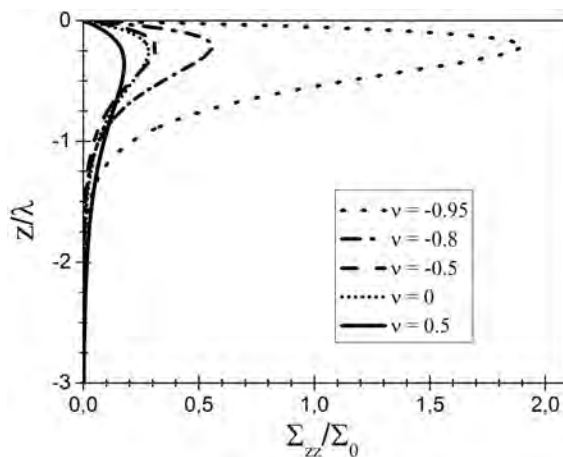


Рис. 4.8: Изменение безразмерного нормального напряжения Σ_{zz}/Σ_0 в зависимости от безразмерной глубины z/λ при различных коэффициентах Пуассона 0.5, 0, -0.5 , -0.8 , -0.95 .

На Рис.4.7–4.9 представлены изменения безразмерных сдвигового и нормальных напряжений Σ_{xz}/Σ_0 , Σ_{zz}/Σ_0 , Σ_{xx}/Σ_0 в зависимости от безразмерной глубины z/λ при различных коэффициентах Пуассона 0.5, 0, -0.5 , -0.8 , -0.95 . Следует

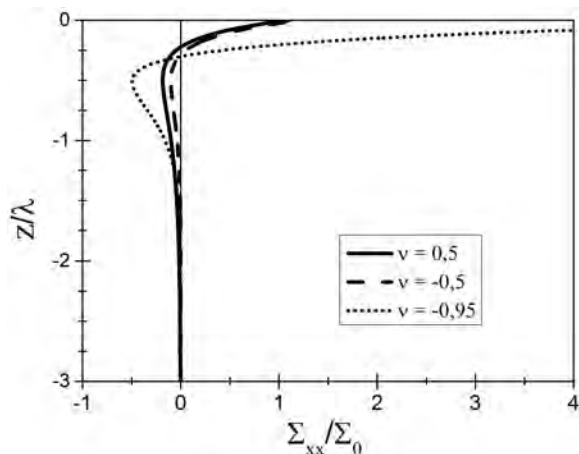


Рис. 4.9: Изменение безразмерного нормального напряжения Σ_{xx}/Σ_0 в зависимости от безразмерной глубины z/λ при различных коэффициентах Пуассона 0.5, -0.5 , -0.95 .

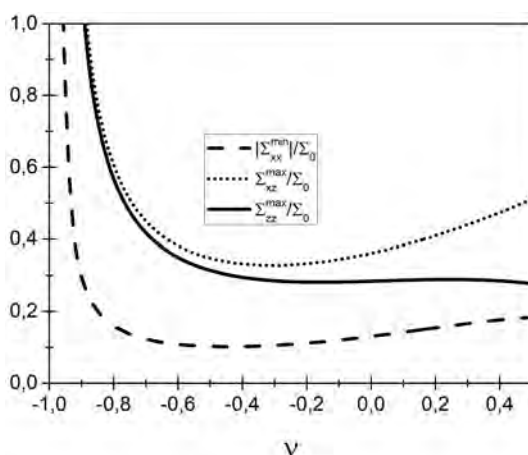


Рис. 4.10: Изменчивость экстремумов безразмерных компонент напряжений $|\Sigma_{xx}^{\min}|/\Sigma_0$, $\Sigma_{zz}^{\max}/\Sigma_0$, $\Sigma_{xz}^{\max}/\Sigma_0$ в зависимости от коэффициента Пуассона ν .

отметить немонотонный характер влияния величины и знака коэффициента Пуассона. Например, сдвиговое напряжение при $\nu = 0.5$ превосходит напряжение при $\nu = -0.5$ и лишь при $\nu < -0.8$ напряжение быстро увеличивается по мере уменьшения коэффициента Пуассона. Для нормальных напряжений также имеет место немонотонное изменение с изменением коэффициента Пуассона. Для них также быстрый рост происходит при достаточно больших по модулю отрицательных коэффициентах Пуассона (при $\nu \rightarrow -1$). Глубины характерных точек этих распределений слабо меняются с изменением коэффициента Пуассона как в положительной, так и отрицательной области. Например, глубина $|z/\lambda|$ максимума сдвигового напряжения Σ_{xz}/Σ_0 и нормального напряжения Σ_{zz}/Σ_0 монотонно уменьшается от 0.275 до 0.209 при уменьшении коэффициента Пуассона ν от 0.5 до -1 . Глубина $|z/\lambda|$ минимума нормального напряжения Σ_{xx}/Σ_0 подрастает от 0.498 до 0.510 при

уменьшении ν от 0.5 до -0.05 и далее падает до 0.505. Глубина $|z/\lambda|$, на которой обращается в нуль нормальное напряжение Σ_{xx}/Σ_0 монотонно подрастает от 0.222 до 0.296 при уменьшении ν от 0.5 до -1 . Рис.4.10 демонстрирует, что экстремумы этих трех компонент напряжений быстро растут при уменьшении отрицательного коэффициента Пуассона ниже -0.5 . Вместе с тем экстремумы Σ_{xz} , $|\Sigma_{xx}|$ могут несколько увеличиваться при росте положительного коэффициента Пуассона и его небольших отрицательных значениях.

4.2. Влияние величины и знака коэффициента Пуассона на волны Лява [43]

При покрытии упругой среды в полупространстве слоем другого материала «скользящие» вдоль поверхности объемные сдвиговые волны становятся затухающими с удалением от поверхности вглубь полупространства. Такие локализованные в слое и у поверхности полупространства поперечные волны именуют волнами Лява.

Пусть слой одного изотропного материала 1 толщины h (слой от $z = 0$ до $z = h$) покрывает полупространство с другим изотропным материалом 2 (полупространство $z \leq 0$). На свободной поверхности покрывающего слоя 1 (при $z = h$) должно исчезать сдвиговое напряжение σ_{yz} , т.е. $\partial u_{y1}/\partial z = 0$, а на границе раздела между этим слоем и материалом в остальном полупространстве 2 (при $z = 0$) должны быть одинаковыми смещения u_{y1} и u_{y2} и сдвиговые напряжения σ_{yz1} и σ_{yz2} , т.е. $u_{y1} = u_{y2}$, $\mu_1 \partial u_{y1}/\partial z = \mu_2 \partial u_{y2}/\partial z$. В таком композите может распространяться совместная поперечная горизонтальная волна вида

$$u_{y1} = V_1(z) \sin k(x - ct), \tag{4.8}$$

$$u_{y2} = V_2(z) \sin k(x - ct), \tag{4.9}$$

$$u_{x1} = u_{x2} = u_{z1} = u_{z2} = 0,$$

$$V_1(z) = a \cos \kappa_1(z - h), \tag{4.10}$$

$$V_2(z) = a e^{\kappa_2 z} \cos \kappa_1 h, \tag{4.11}$$

если выполняется дисперсионное уравнение [50]

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(h\kappa_1) &= \frac{\mu_2 \kappa_2}{\mu_1 \kappa_1}, \\ \kappa_1 &= k \sqrt{\frac{c^2}{c_{t1}^2} - 1}, \quad \kappa_2 = k \sqrt{1 - \frac{c^2}{c_{t2}^2}}, \quad c_t^2 = \frac{\mu}{\rho}. \end{aligned}$$

Это дисперсионное уравнение обязано совместному выполнению краевых условий отсутствия сдвигового напряжения на свободной поверхности покрывающего слоя

и равенства смещений и сдвиговых напряжений на границе раздела между этим слоем и упругим полупространством. Дисперсионное уравнение допускает счетное число решений волн с дисперсией (вследствие выделенного масштаба длины h) при ограничении на скорость волн

$$c_{t2}^2 > c^2 > c_{t1}^2.$$

Оно показывает то, что волны Лява быстрее сдвиговых волн в материале покрывающего слоя и медленнее сдвиговых волн в материале полупространства.

В дальнейшем ограничимся анализом только первой моды волн Лява, которая выделяется условием относительной тонкости покрывающего слоя $hk_1 < \pi/2$. В задаче о волнах Лява в отличие от волн Релея скорость волн зависит от длины волны $\lambda = 2\pi/k$ и нескольких материальных параметров

$$\rho_1, \rho_2, \mu_1 = \frac{E_1}{2(1+\nu_1)}, \mu_2 = \frac{E_2}{2(1+\nu_2)},$$

а не одного коэффициента Пуассона.

Ограничение на скорости волн Лява приводит к неравенству на материальные параметры

$$1 + \nu_1 > \frac{E_1\rho_2}{E_2\rho_1} (1 + \nu_2).$$

Отсюда следует, что в частной ситуации $E_1/\rho_1 \geq E_2/\rho_2$ требуется выполнение условия $\nu_1 > \nu_2$. Оно подразумевает, что для волн Лява в материалах в полупространстве с положительным коэффициентом Пуассона (неауксетиках) материал в покрывающем слое также не может быть ауксетиком (материалом с отрицательным коэффициентом Пуассона). Проанализируем подобного типа случай материалов одинаковой плотности с одинаковыми модулями упругости и различными коэффициентами Пуассона

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho, \quad E_1 = E_2 = E, \quad \nu_1 > \nu_2.$$

Будем предполагать покрывающий слой несжимаемым, т.е. $\nu_1 = 1/2$. Тогда допустимо рассматривать в полупространстве материалы с коэффициентами Пуассона из всего диапазона $-1 < \nu_2 < 1/2$. В этой ситуации изменения безразмерной скорости первой моды волн Лява c/c_0 (здесь и далее $c_0 = \sqrt{E_1/2\rho_1}$) с изменением коэффициента ν_2 и безразмерной толщины покрывающего слоя h/λ описываются кривыми Рис.4.11а. Из этого рисунка можно видеть, что при тонком покрывающем слое $h/\lambda < 0.1$ скорость волн существенно больше при отрицательных коэффициентах Пуассона ($\nu_2 = -0.5$ и $\nu_2 = -0.95$) и растет с их убыванием. Что касается относительного распределения смещений в покрывающем слое и полупространстве, то в рассматриваемой ситуации, как видно из Рис.4.12 волна слабо проникает в полупространство $z < 0$ при любых значениях коэффициента Пуассона ν_2 , и тем

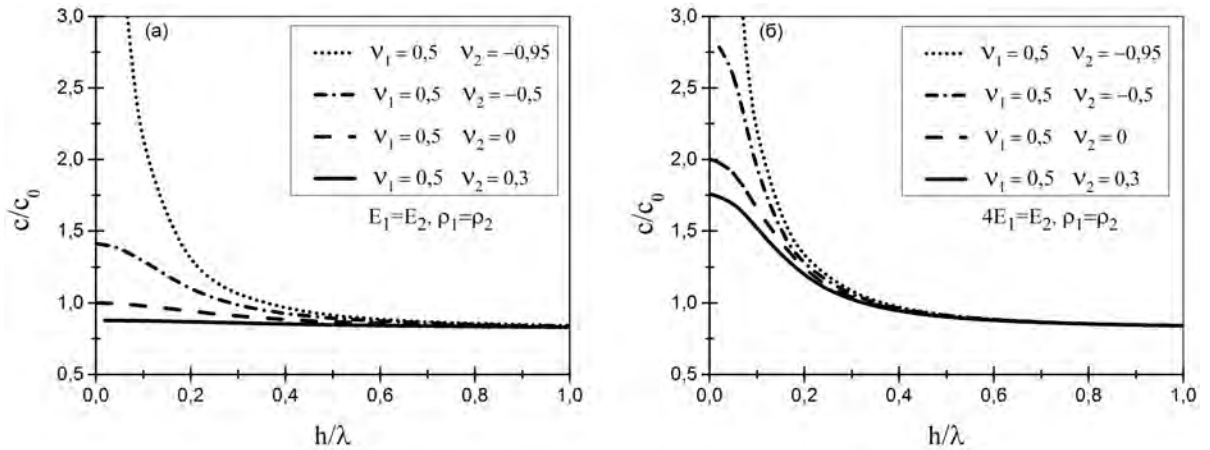


Рис. 4.11: Изменения безразмерной скорости первой моды волн Лява c/c_0 с изменением коэффициента ν_2 и безразмерной толщины покрывающего слоя h/λ при $E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$ (а) и $4E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$ (б) и при различных значениях коэффициентов Пуассона $\nu_1 = 0.5$ и $\nu_2 = -0.95$, $\nu_1 = 0.5$ и $\nu_2 = -0.5$, $\nu_1 = 0.5$ и $\nu_2 = 0$, $\nu_1 = 0.5$ и $\nu_2 = 0.3$.

меньше, чем меньше ν_2 . В пределе $\nu_2 \rightarrow -1$ локализация в слое становится полной. На Рис.4.12 представлены безразмерные смещения $u_y/u_y(z = h)$ в слое (при $z > 0$) и в полупространстве ($z < 0$) в функции от безразмерной координаты z/λ при различных значениях коэффициента Пуассона в полупространстве. Как можно видеть, только при положительном коэффициенте ν_2 волна существенно больше заходит в полупространство, чем в тонкий покрывающий слой с $h/\lambda = 0.3$. При больших отрицательных коэффициентах Пуассона даже в случае слоя малой толщины волна оказывается захваченной этим слоем. При толстом покрывающем слое ($h/\lambda = 5$) это верно практически при любых коэффициентах Пуассона.

Рассмотрим теперь ситуацию более жесткого полупространства

$$\rho_1 = \rho_2, \quad E_2 = 4E_1,$$

при которой совместное ограничение на коэффициенты Пуассона слоя и полупространства оказывается более слабым

$$1 + \nu_1 > \frac{1 + \nu_2}{4}.$$

Это позволяет изучить также случаи покрывающего слоя с отрицательным коэффициентом Пуассона ν_1 .

В обсуждаемой ситуации с $E_2 = 4E_1$ при $\nu_1 = 1/2$, как видно из Рис.4.11б, безразмерная скорость волн при тонком несжимаемом покрывающем слое с $h/\lambda < 0.1$ становится еще большей. Что касается распределения смещений здесь как в случае тонкого (с $h/\lambda = 0.3$), так и толстого несжимаемого слоя (с $h/\lambda = 5$), волна Лява

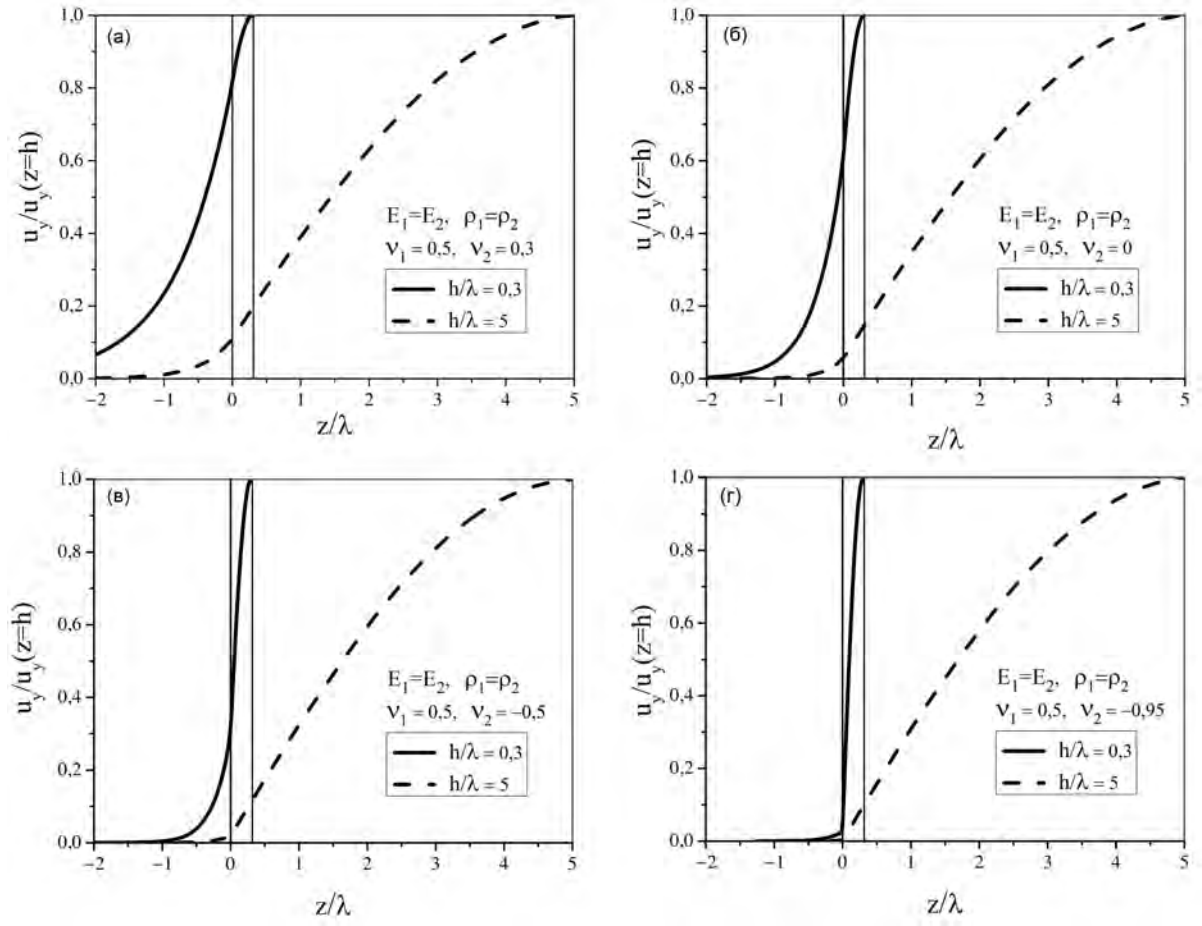


Рис. 4.12: Зависимость безразмерных смещений $u_y/u_y(z=h)$ в слое (при $z > 0$) и в полупространстве ($z < 0$) от безразмерной координаты z/λ при различных значениях коэффициента Пуассона в полупространстве и при $E_1 = E_2, \rho_1 = \rho_2$ (сплошная линия - $h/\lambda = 0.3$, штрихованная линия - $h/\lambda = 5$).

слабо проникает в полупространство, локализуясь все больше в слое при уменьшении коэффициента Пуассона ν_2 (Рис.4.13).

На Рис.4.14 представлен случай покрывающего слоя с отрицательным коэффициентом Пуассона $\nu_1 = -0.5$ при тех же коэффициентах Пуассона для полупространства $\nu_2 = 0.3, 0, -0.5, -0.95$ и $E_2 = 4E_1$. Из сравнения Рис.4.13 и Рис.4.14 можно видеть, что волна Лява вновь больше проникает в полупространство при неотрицательном коэффициенте Пуассона у последнего и отрицательном коэффициенте у тонкого слоя.

Дисперсионное уравнение для волн Лява сильно упрощается в случае тонкого покрывающего слоя. При условии $h\kappa_1 \ll 1$ тангенс в дисперсионном уравнении заменяется на линейную функцию и получаем

$$h\kappa_2 \frac{\mu_2}{\mu_1} \ll h\kappa_1 \ll 1.$$

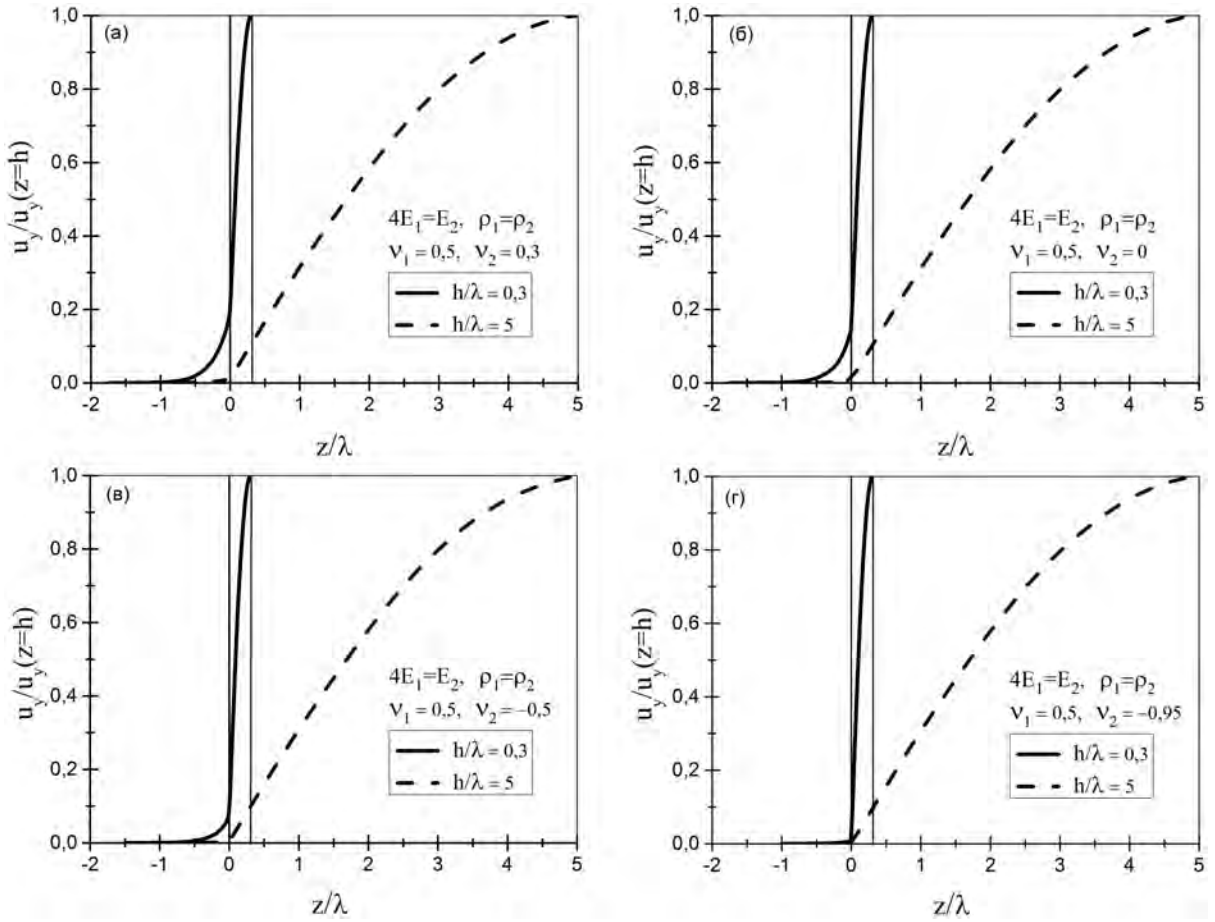


Рис. 4.13: Распределения смещений $u_y/u_y(z=h)$ в случае тонкого (с $h/\lambda = 0.3$, сплошная линия) и толстого несжимаемого слоя (с $h/\lambda = 5$, штрихованная линия) для волн Лява при $4E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$; а - $\nu_1 = 0.5$, $\nu_2 = 0.3$, б - $\nu_1 = 0.5$, $\nu_2 = 0$, в - $\nu_1 = 0.5$, $\nu_2 = -0.5$, г - $\nu_1 = 0.5$, $\nu_2 = -0.95$.

В первом приближении из $\kappa_2 \approx 0$ следует $c^2 \approx c_{t2}^2$, а в следующем приближении теории возмущений по малому параметру, пропорциональному толщине, находим

$$c^2 \approx c_{t2}^2 \left[1 - \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} - \frac{\mu_1}{\mu_2} \right)^2 (hk)^2 \right].$$

В ситуации $\rho_1 = \rho_2 = \rho$, $E_1 = E_2 = E$ имеем тогда следующую зависимость безразмерной скорости волн от коэффициентов Пуассона и безразмерного отношения толщины слоя к длине волны

$$\frac{c^2}{c_0^2} \approx \frac{1}{1 + \nu_2} \left[1 - 4\pi^2 \left(\frac{\nu_1 - \nu_2}{1 + \nu_1} \right)^2 \left(\frac{h}{\lambda} \right)^2 \right], \quad c_0 = \sqrt{\frac{E}{2\rho}}.$$

Как и в случае точного дисперсионного уравнения скорость волн первой моды падает здесь с толщиной слоя и растет с уменьшением числа Пуассона, особен-

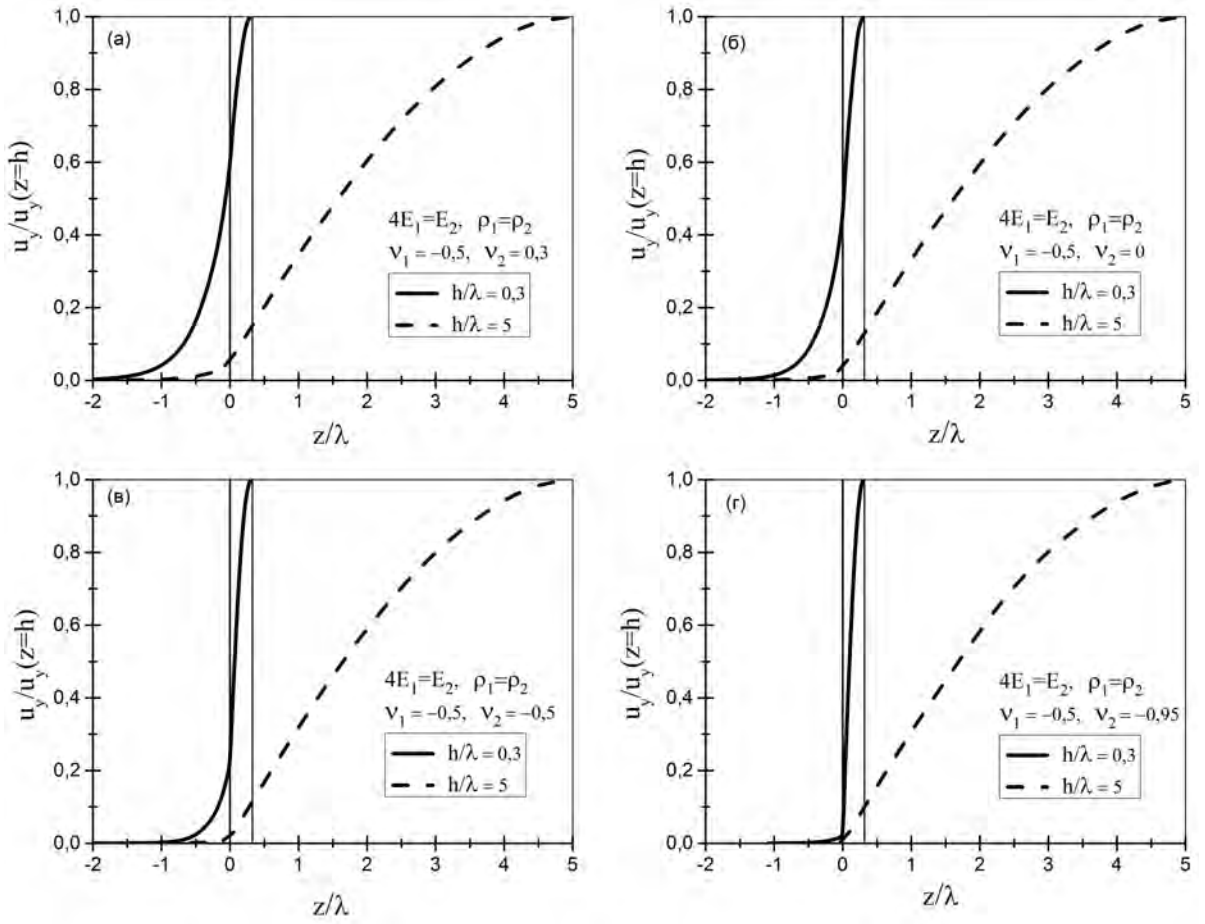


Рис. 4.14: Распределения смещений $u_y/u_y(z=h)$ в случае тонкого (с $h/\lambda = 0.3$, сплошная линия) и толстого несжимаемого слоя (с $h/\lambda = 5$, штрихованная линия) для волн Лява при $4E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$; а - $\nu_1 = -0.5$, $\nu_2 = 0.3$, б - $\nu_1 = -0.5$, $\nu_2 = 0$, в - $\nu_1 = -0.5$, $\nu_2 = -0.5$, г - $\nu_1 = -0.5$, $\nu_2 = -0.95$.

но сильно при $\nu_2 \rightarrow -1$. Аналогичное поведение скорости имеет место в ситуациях $\rho_1 = \rho_2$, $E_1 \neq E_2$ (ср. Рис.4.11б).

Что касается приближения толстой пластины с $h\kappa_2\mu_2/\mu_1 \gg 1$ для волн первой моды с $h\kappa_1 < \pi/2$ приближенным дисперсионным уравнением в безразмерном виде будет

$$\frac{c^2}{c_0^2} \approx \frac{1}{1 + \nu_1} \left[1 + \frac{1}{16} \left(\frac{\lambda}{h} \right)^2 \right].$$

И это находится в полном соответствии с поведением безразмерной скорости при $h/\lambda \approx 1$ на Рис.4.14.

В соответствии с выражениями для смещений (4.8)-(4.11) сдвиговые напряжения в покрывающем слое 1 и в полупространстве 2 имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_{yz} &= \Sigma_{yz}(z) \sin k(x - ct), & \sigma_{xy} &= \Sigma_{xy}(z) \cos k(x - ct), \\ \Sigma_{yz1}(z) &= \mu_1 \kappa_1 a \sin \kappa_1(h - z), & \Sigma_{xy1}(z) &= \mu_1 k a \cos \kappa_1(h - z), \\ \Sigma_{yz2}(z) &= \mu_2 \kappa_2 a e^{\kappa_2 z} \cos \kappa_1 h, & \Sigma_{xy2}(z) &= \mu_2 k a e^{\kappa_2 z} \cos \kappa_1 h. \end{aligned}$$

Как и следует из граничных условий на свободной поверхности покрывающего слоя и на границе раздела для них выполняются свойства

$$\Sigma_{yz1}(z = h) = 0, \quad \Sigma_{yz1}(z = 0) = \Sigma_{yz2}(z = 0).$$

Чтобы перейти к безразмерному виду распределений напряжений, будем использовать

$$\Sigma \equiv \Sigma_{xy1}(z = h)|_{\nu_1=0.5} = \frac{1}{3} a k E_1.$$

После деления на эту величину получим следующие безразмерные распределения сдвиговых напряжений в покрывающем слое

$$\frac{\Sigma_{yz1}}{\Sigma} = \frac{3\kappa_1}{2k(1 + \nu_1)} \sin \kappa_1(h - z), \quad \frac{\Sigma_{xy1}}{\Sigma} = \frac{3}{2(1 + \nu_1)} \cos \kappa_1(h - z)$$

и в нижнем полупространстве

$$\frac{\Sigma_{yz2}}{\Sigma} = \frac{3\kappa_2 E_2}{2k(1 + \nu_2) E_1} e^{\kappa_2 z} \cos \kappa_1 h, \quad \frac{\Sigma_{xy2}}{\Sigma} = \frac{3E_2}{2(1 + \nu_2) E_1} e^{\kappa_2 z} \cos \kappa_1 h.$$

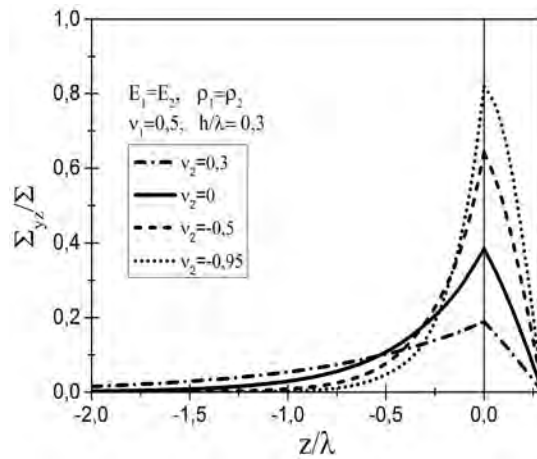


Рис. 4.15: Распределения сдвиговых напряжений Σ_{yz}/Σ первой моды волны Лява в покрывающем слое с $\nu_1 = 0.5$ и полупространстве при различных значениях коэффициентов Пуассона ($\nu_2 = 0.3, \nu_2 = 0, \nu_2 = -0.5, \nu_2 = -0.95$ и при $E_1 = E_2, \rho_1 = \rho_2, h/\lambda = 0.3$).

На последующих рисунках дается наглядный вид этих распределений сдвиговых напряжений первой моды волны Лява в покрывающем слое и полупространстве при различных значениях коэффициентов Пуассона. Рис.4.15 отражает изменения распределений сдвигового напряжения Σ_{yz}/Σ при четырех значениях коэффициента Пуассона материала полупространства ν_2 (в частности, при двух отрицательных) в ситуации $\rho_1 = \rho_2$, $E_1 = E_2$ при «тонком» ($h/\lambda = 0.3$) несжимаемом ($\nu_1 = 0.5$) покрывающем слое. Максимум этого сдвигового напряжения приходится на границу раздела между покрывающим слоем и полупространством. При этом с уменьшением коэффициента Пуассона ν_2 и перехода к его отрицательным значениям имеет место большой рост максимума. С другой стороны, при достаточно большом заглублении в полупространство (при $|z|/\lambda > 0.5$) сдвиговое напряжение Σ_{yz}/Σ снижается с уменьшением ν_2 . Отметим, что гораздо меньшими оказываются максимальные сдвиговые напряжения на границе раздела в случае «толстого» покрывающего слоя (0.05 при $h/\lambda = 5$) и они слабо растут при снижении коэффициента ν_2 .

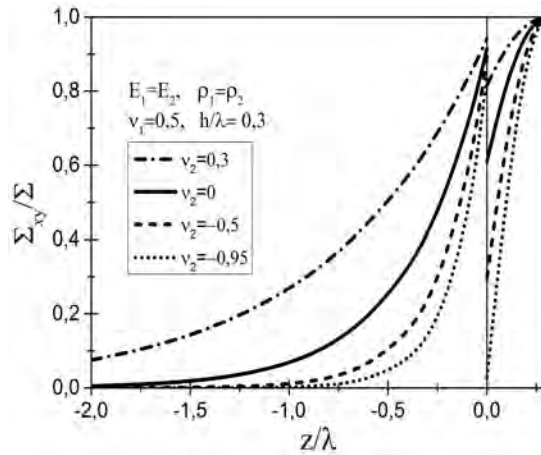


Рис. 4.16: Распределения сдвиговых напряжений Σ_{xy}/Σ первой моды волны Лява в покрывающем слое с $\nu_1 = 0.5$ и полупространстве при различных значениях коэффициентов Пуассона ($\nu_2 = 0.3$, $\nu_2 = 0$, $\nu_2 = -0.5$, $\nu_2 = -0.95$ и при $E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$, $h/\lambda = 0.3$).

Рис.4.16 отражает поведение другого сдвигового напряжения Σ_{xy}/Σ в той же ситуации $\rho_1 = \rho_2$, $E_1 = E_2$, $h/\lambda = 0.3$, $\nu_1 = 0.5$. Это напряжение испытывает на границе раздела скачок, растущий с убыванием коэффициента Пуассона ν_2 , и уменьшается с обеих сторон от границы раздела с уменьшением ν_2 , оказываясь существенно ниже со стороны покрывающего слоя у границы раздела.

В другой ситуации $\rho_1 = \rho_2$, $4E_1 = E_2$, $h/\lambda = 0.3$ для первой моды Лява допустимо рассматривать покрывающий слой с отрицательным коэффициентом Пуассона ν_1 . Из Рис.4.17 можно видеть, что при покрывающем слое с отрицательным коэффициентом Пуассона $\nu_1 = -0.5$ максимумы сдвиговых напряжений Σ_{yz}/Σ при различных ν_2 на границе раздела возрастают в несколько раз по сравнению с максимумами напряжений в предыдущей ситуации с $\nu_1 = +0.5$ (на Рис.4.15 и Рис.4.17

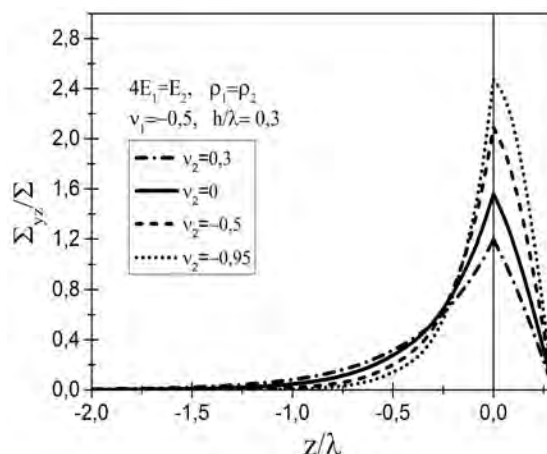


Рис. 4.17: Распределения сдвиговых напряжений Σ_{yz}/Σ первой моды волны Лява в покрывающем слое с отрицательным коэффициентом Пуассона $\nu_1 = -0.5$ и полупространстве при различных значениях коэффициентов Пуассона ($\nu_2 = -0.95$, $\nu_2 = -0.5$, $\nu_2 = 0$, $\nu_2 = 0.3$) и при $4E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$, $h/\lambda = 0.3$.

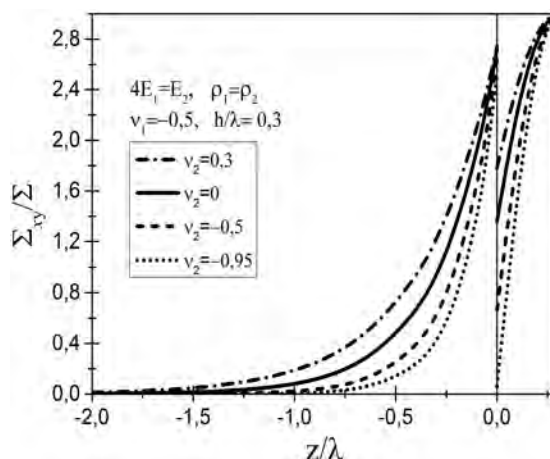


Рис. 4.18: Распределения сдвиговых напряжений Σ_{xy}/Σ первой моды волны Лява в покрывающем слое с отрицательным коэффициентом Пуассона $\nu_1 = -0.5$ и полупространстве при различных значениях коэффициентов Пуассона ($\nu_2 = -0.95$, $\nu_2 = -0.5$, $\nu_2 = 0$, $\nu_2 = 0.3$) и при $4E_1 = E_2$, $\rho_1 = \rho_2$, $h/\lambda = 0.3$.

масштабы на осях ординат различны). При отрицательном $\nu_1 = -0.5$ величины других сдвиговых напряжений Σ_{xy}/Σ у границы раздела, их скачки и распределения аналогично возрастают (Рис.4.18) по сравнению с тем, что имело место в ситуации Рис.4.16.

В случае толстого покрывающего слоя ($h/\lambda = 5$) при $\rho_1 = \rho_2$, $4E_1 = E_2$, $\nu_1 = -0.5$ максимальное напряжение Σ_{yz}/Σ , хотя и возрастает в три раза по сравнению с ситуацией $\rho_1 = \rho_2$, $E_1 = E_2$, $\nu_1 = +0.5$, остается малым (0.14-0.15) и слабо растущим с уменьшением ν_2 . В то же время напряжение Σ_{xy}/Σ в обеих ситуациях оказывается большим в пределах толстого покрывающего слоя, причем, в три раза большим

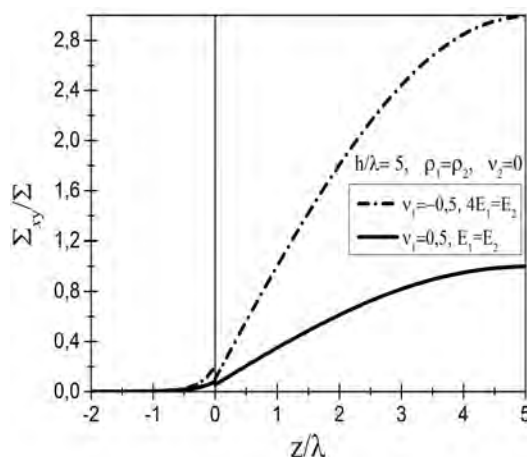


Рис. 4.19: Распределения сдвиговых напряжений Σ_{xy}/Σ первой моды волны Лява в покрывающем слое и полупространстве при $h/\lambda = 5$, $\rho_1 = \rho_2$ и $\nu_2 = 0$. Сплошная линия - $\nu_1 = -0.5$, $4E_1 = E_2$, штрих-пунктирная линия - $\nu_1 = 0.5$, $E_1 = E_2$.

при отрицательном коэффициенте Пуассона этого слоя $\nu_1 = -0.5$, и очень малым в полупространстве (Рис.4.19).

4.3. Заключение

В данной главе выполнено сравнение поведения поверхностных волн Релея и первой моды волн Лява при положительных и отрицательных коэффициентах Пуассона изотропных сред. Поведение волн Релея и Лява оказывается сильно зависящим от коэффициента Пуассона полупространства в первом случае и от двух коэффициентов Пуассона для покрывающего слоя и нижнего полупространства во втором. Это прослежено на полях смещений и напряжений. Отрицательность коэффициентов Пуассона материалов, у поверхности которых распространяются волны Релея и Лява, существенно сказывается на скоростях распространения, амплитудах и степени проникания волн в объем. При достаточно больших по модулю отрицательных коэффициентах Пуассона имеет место большой рост максимальных напряжений в приповерхностных областях для волн обоих типов.

Материальные частицы в волнах Релея вращаются по эллиптическим траекториям в противоположные стороны на большой и малой глубине от свободной поверхности, и волны обладают линейной поляризацией на некоторой промежуточной глубине. Эти характерные глубины оказываются сильно зависящими от величины и знака коэффициента Пуассона. Степень проникновения сдвиговых волн Лява в материальное полупространство, покрытое слоем другого материала, зависит от толщины покрывающего слоя, коэффициента Пуассона и модулей Юнга обоих материалов.

Глава 5.

Ауксетики среди новых материалов

Углеродные алмазоподобные фазы (УАФ) - это фазы, состоящие из углеродных атомов, в которых каждый атом, как в алмазной структуре, образует четыре σ -связи с соседними атомами [207]. При этом решетка таких алмазоподобных фаз отличается от решетки алмаза. Основой для создания алмазоподобных фаз могут служить различные полиморфы углерода - графен, фуллереноподобные молекулы, трубчатые структуры на основе углерода. Алмазоподобные фазы, составной единицей которых являются фуллереноподобные молекулы, получили название *фуллеран*, материал, состоящий из листов графена - *графан*, а из нанотрубок - *тубулан* [207]. Наряду с наноалмазами [208], такие структуры вызывают большой интерес исследователей. К настоящему времени экспериментально синтезированы и теоретически исследованы несколько углеродных алмазоподобных фаз, например, полимеризованный кубический фуллерит C_{24} [209, 210] (материал, состоящий из молекул фуллерена), углеродная C_8 фаза высокой плотности [211] и т.д. В ряде теоретических работ достаточно полно представлены характеристики различных алмазоподобных фаз и их классификация [212–215]. В работе [216] впервые было предложено получать наноалмазную фазу из полимеризованных нанотрубок. Структурные характеристики кристаллов, получаемых из полиморфов графена были исследованы в [217]. УАФ и их свойства изучались ранее в работах [213, 218, 219]. Методом молекулярной динамики рассчитаны равновесные состояния кластеров фуллереноподобных молекул C_{24} и C_{48} [220, 221].

Наиболее важной областью применения УАФ является покрытие поверхностей в биомедицине [222], легко изнашивающихся поверхностей [223], а также в антифрикционных покрытиях [224]. Получение таких материалов можно осуществить гораздо легче и дешевле по сравнению с алмазами.

Структурные и энергетические характеристики различных алмазоподобных фаз активно исследуются в последние годы, однако многие их свойства остаются мало изученными и требуют дальнейших исследований.

Ниже рассматриваются фуллериты и алмазоподобные фазы с кубической, гексагональной и тетрагональной анизотропией, равновесное состояние которых ис-

следовано методом молекулярной динамики. Данные, найденные с помощью атомистического моделирования, используются для анализа упругих характеристик.

5.1. Упругие свойства фуллерита [44, 45]

В последние десятилетия все большее внимание исследователей привлекают объемные углеродные наноматериалы, демонстрирующие новые интересные свойства [220]. Среди таких наноматериалов хорошо известным является фуллерит. Одной из наиболее исследованных структур является фуллерит на основе фуллерена C_{60} . Несмотря на то, что такой фуллерит известен довольно давно, его механические свойства и характеристики остаются малоизученными. К настоящему моменту имеются исследования упругих свойств поликристаллических образцов фуллерита C_{60} [225], измерения модуля Юнга на монокристаллических образцах малых размеров [226, 227] и исследования поликристаллических пленок. Ранее также были выполнены измерения упругих постоянных некоторых алмазоподобных структур и фуллеритов [228–231]. Упругие модули монокристаллического C_{60} были определены на основе измерения скоростей ультразвука [228], исследован релаксационный вклад [229] и температурное поведение [230, 231] модулей упругости. В работе [85] на основе модулей жесткости, полученных в [230], исследовались упругие свойства фуллерита в зависимости от температуры.

Ниже в данном разделе изучены упругие характеристики трех различных кристаллов фуллеритов, основываясь на результатах, полученных методом молекулярной динамики и результатах, представленных в Главе 1.

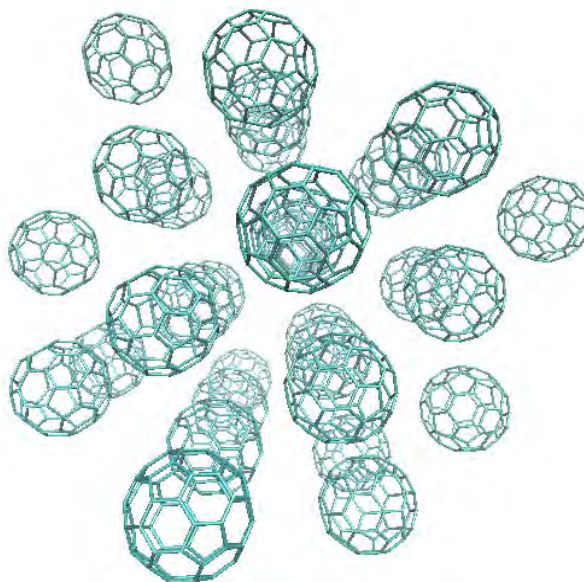


Рис. 5.1: Пример структуры фуллерита C_{60} с ГЦК укладкой.

Расчетные ячейки фуллеритов были созданы на основе фуллерена C_{60} и фул-

лереноподобной молекулы C_{48} . Поскольку из эксперимента известно, что устойчивыми являются фуллериты на основе C_{60} с ПК (простой кубической) и ГЦК (гранецентрированной) укладкой, то рассматривались именно эти две конфигурации. Для сравнения был рассмотрен также фуллерит на основе молекулы C_{48} с ПК укладкой. На Рис.5.1 показан пример фуллерита на основе C_{60} с ГЦК укладкой.

Релаксация структур и расчеты коэффициентов податливости s_{ij} проводилось с помощью программы LAMMPS с потенциалом межатомного взаимодействия AIREBO [232]. Такой потенциал хорошо зарекомендовал себя для моделирования углеродных и углеводородных структур, хорошо воспроизводит свойства ковалентной связи между атомами углерода и широко используется для моделирования моно- и многослойных листов графена [233, 234], смятого графена [235, 236], фуллеренов [237] и т.п. Данные, полученные с помощью этого потенциала, хорошо согласуются с экспериментальными результатами и расчетами *ab initio*.

Все исследования проводились при нулевой температуре. Постоянство температур поддерживалось с помощью термостата Носе-Хувера. В начальный момент структура релаксировала до достижения локального или глобального минимума потенциальной энергии. После чего, производились расчеты коэффициентов податливости s_{ij} с использованием закона Гука для анизотропного тела.

Для расчета s_{11} и s_{12} к расчетной ячейке было приложено одноосное растяжение вдоль оси x посредством добавления растягивающего напряжения $\sigma_{xx}=200$ МПа. Напряжение выбиралось таким образом, чтобы итоговая деформация не превышала 2%. При этом остальные компоненты напряжения были равны нулю ($\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$). Определялись ненулевые деформации ε_{xx} и $\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz}$ и по ним рассчитывались коэффициенты податливости s_{11} и s_{12} . Для определения s_{44} прикладывалось сдвиговое напряжение $\sigma_{xy} = 100$ МПа, а все остальные компоненты тензора напряжения были равны нулю. По найденному значению ε_{xy} было рассчитано s_{44} . Упругие модули c_{11} , c_{12} и c_{44} рассчитывались из формул [171]

$$c_{11} = \frac{s_{11} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})}, \quad c_{12} = \frac{-s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})}, \quad c_{44} = \frac{1}{s_{44}}.$$

Таблица 5.1: Коэффициенты податливости s_{ij} и жесткости c_{ij} для трех структур.

Структура	s_{11} , ГПа ⁻¹	s_{44} , ГПа ⁻¹	s_{12} , ГПа ⁻¹	c_{11}	c_{44}	c_{12}
C_{48}	10.5	6.61	-4.68	331 МПа	151 МПа	265 МПа
C_{60} ПК	43.3	218	-1.87	23.2 МПа	4.59 МПа	1.05 МПа
C_{60} ГЦК	0.052	0.0348	-0.0224	55.3 ГПа	28.7 ГПа	41.8 ГПа

Значения коэффициентов податливости и жесткости, полученные методом молекулярной динамики, представлены в Табл.5.1. На основании значений этих ко-

Таблица 5.2: Экстремальные значения модуля Юнга и параметра анизотропии Δ .

Структура	Δ , ГПа ⁻¹	$E_{[100]}$	$E_{[110]}$	$E_{[111]}$
C ₄₈	11.9	95.1 МПа	219 МПа	386 МПа
C ₆₀ ПК	-63.7	23.1 МПа	13.3 МПа	11.7 МПа
C ₆₀ ГЦК	0.06	19.2 ГПа	42.6 ГПа	71.4 ГПа

Таблица 5.3: Экстремальные значения коэффициентов Пуассона (глобальные максимумы и минимумы ν_{\max} , ν_{\min} , экстремумы при частных ориентациях $\nu_{[001]} = \nu_{[100],[001]}$, $\nu_{[001],[110]}$, $\nu_{[1\bar{1}0],[110]}$, $\nu_{[111]} = \nu_{(111),[111]}$), а также усредненное по всем направлениям значение коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ и значения безразмерных комплексов Π и δ .

Структура	Π	δ	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$	$\nu_{[001]}$	$\nu_{[001],[110]}$	$\nu_{[1\bar{1}0],[110]}$	$\nu_{[111]}$
C ₄₈	0.787	1.13	-0.28	1.02	0.39	0.44	1.02	-0.28	0.28
C ₆₀ ПК	-0.059	-1.47	0.01	0.45	0.2	0.04	0.02	0.45	0.27
C ₆₀ ГЦК	0.788	1.10	-0.26	0.96	0.36	0.43	0.96	-0.26	0.25

Таблица 5.4: Экстремальные значения модуля сдвига и параметра анизотропии Зенера P .

Структура	P	G_1	G_2
C ₄₈	4.60	151 МПа	32.9 МПа
C ₆₀ ПК	0.415	4.59 МПа	11.1 МПа
C ₆₀ ГЦК	4.28	28.7 ГПа	6.72 ГПа

Эффективность была проанализирована изменчивость упругих «технических коэффициентов» (модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига). В Табл.5.2-5.4 представлены результаты аналитических расчетов. В них также даны следующие комбинации из коэффициентов податливости

$$\Delta \equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}, \quad \delta \equiv \frac{\Delta}{s_{11}}, \quad \Pi \equiv \frac{-2s_{12}}{\Delta}, \quad P \equiv \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}}.$$

Детали расчета коэффициента Пуассона и модуля сдвига представлены в разделах 1.2.2, 1.2.5.

Анализ изменчивости модуля Юнга кубических кристаллов позволяет определить три экстремальных значения [176], соответствующие растяжению в направлениях [100], [110] и [111]

$$E_{[100]} = \frac{1}{s_{11}}, \quad E_{[110]} = \frac{1}{s_{11} - \Delta/2}, \quad E_{[111]} = \frac{1}{s_{11} - 2\Delta/3}. \quad (5.1)$$

Экстремальные значения модуля Юнга зависят от знака и величины параметра анизотропии Δ . Для кубических кристаллов с положительной анизотропией $\Delta > 0$

из соотношений (5.1) имеем $E_{[111]} > E_{[110]} > E_{[100]}$. Для кубических кристаллов с отрицательной анизотропией $\Delta < 0$ из этих соотношений следуют противоположные неравенства $E_{[100]} > E_{[110]} > E_{[111]}$. Экстремальные значения модулей Юнга и значения коэффициента анизотропии Δ для различных видов фуллеритов представлены в Табл.5.2. Фуллерит C_{60} с ПК укладкой имеет отрицательную анизотропию. Для него максимальное значение модуля Юнга наблюдается при растяжении в направлении $[100]$. Два других фуллерита имеют положительную анизотропию, и для них максимум модуля Юнга будет при растяжении в направлении $[111]$. Максимальное значение модуля Юнга для фуллерита C_{60} с ГЦК укладкой превосходит более чем в 180 раз максимальные значения модулей для двух других фуллеритов. Глобальные максимумы выделены в Табл.5.2 полужирным шрифтом.

В Табл.5.3 представлены результаты расчета минимального и максимального значений коэффициента Пуассона (ν_{\min} и ν_{\max}), его усредненное по всем направлениям значение $\langle \nu \rangle$, значения безразмерных параметров Π , δ , а также экстремумы при частных ориентациях. Расчеты коэффициентов Пуассона показали, что два из рассмотренных материалов являются частичными ауксетиками. Для фуллерита C_{60} с гранецентрированной кубической укладкой минимальное значение коэффициента Пуассона равно -0.26 , а для фуллерита C_{48} с простой кубической укладкой оно принимает значение -0.28 .

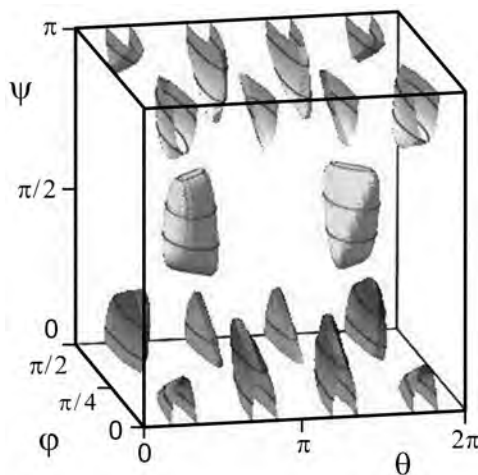


Рис. 5.2: Поверхность ауксетичности $\nu = 0$ для фуллерита C_{60} с ГЦК укладкой.

На Рис.5.2 представлена поверхность ауксетичности для фуллерита C_{60} с ГЦК укладкой в пространстве углов Эйлера с периодичностью $T_\varphi = \pi/2$, $T_\theta = 2\pi$ и $T_\psi = \pi$. Зона ауксетичности находится внутри представленных поверхностей. Такая зона позволяет через углы Эйлера определить направления растяжения, при которых наблюдается отрицательный коэффициент Пуассона. Поверхность ауксетичности для фуллерита C_{48} имеет аналогичный вид, т.к. он характеризуется близкими значениями безразмерных параметров Π , δ .

Минимальные и максимальные значения модулей сдвига для фуллеритов

представлены в Табл.5.4. Наибольшим модулем сдвига обладает фуллерит C_{60} с ГЦК укладкой.

5.2. Упругие свойства алмазоподобных фаз, состоящих из фуллереноподобных молекул [10, 45, 46]

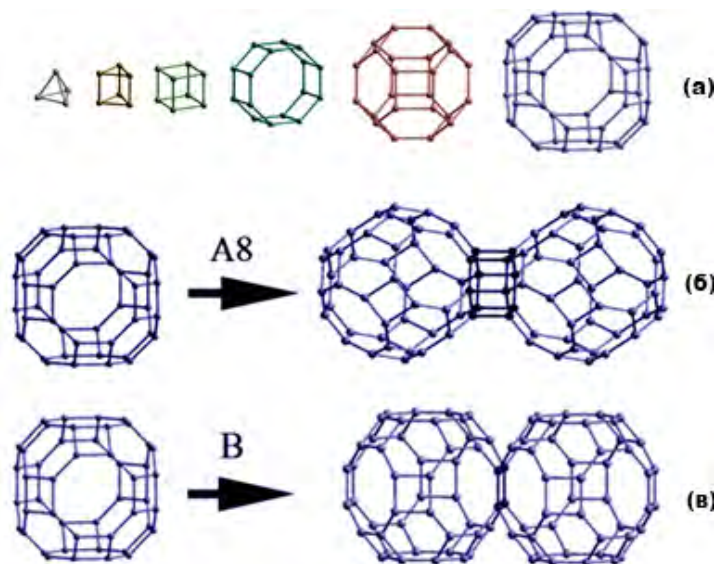


Рис. 5.3: Фуллереноподобные молекулы C_4 , C_6 , C_8 , C_{16} , C_{24} , C_{48} (слева на право) (а). Два способа соединения фуллерено-подобных молекул в кластер (б, в).

Устойчивые УАФ обсуждались в работе [207], и, исходя из представленных там расчетов, в данном подразделе исследуются упругие свойства алмазоподобные фазы, состоящие из фуллереноподобных молекул. Согласно [207, 213], один и тот же фуллерен можно использовать для создания различных алмазоподобных фаз, поскольку могут отличаться методы шивки молекул. Название структур соответствует типу соединения двух фуллеренов между собой, например, структура с обозначением образуется шивкой ковалентными связями, а с обозначением совмещением атомов углерода (см. Рис.5.3). Исходные параметры алмазоподбных фаз $CA1$, $CA2$, $CA3$, $CA4$, $CA5$, $CA6$, $CA7$, $CA8$, 9 и CB приведены в работах [207, 213]. Фуллереноподобные молекулы, из которых были составлены исследуемые структуры, показаны на Рис.5.3: C_4 , C_6 , C_8 , C_{16} , C_{24} и C_{48} . Среди десяти УАФ составным элементом которых является фуллереноподобная молекула, восемь ($CA1$, $CA3$, $CA4$, $CA6$, $CA7$, $CA8$, $CA9$, CB) имеют кубическую анизотропию, фаза $CA2$ имеет гексагональную анизотропию и фаза $CA5$ - тетрагональную [207].

Для получения равновесных структур алмазоподобных фаз и оценки их характеристик был использован программный пакет молекулярно динамического моделирования LAMMPS, где для описания межатомного взаимодействия используется

потенциал AIREBO [232].

Для получения равновесного состояния рассматриваемых алмазоподобных фаз выполнялась минимизация энергий с последующей релаксацией. Релаксация системы проводилась с помощью термостата Носе - Хувера. Ньютоновские уравнения движения атомов интегрировались по алгоритму Верле четвертого порядка. Для расчета коэффициентов податливости s_{ij} к ячейке моделирования прикладывалось линейно увеличивающееся во времени напряжение с одной ненулевой компонентой и вычислялись возникающие при этом деформации. Оказалось, что для деформаций менее 2% кривые напряжение - деформация практически линейны и по наклонам данных кривых из закона Гука рассчитывались искомые коэффициенты податливости s_{ij} .

Таблица 5.5: Значения коэффициентов податливости s_{ij} и коэффициентов жесткости c_{ij} для углеродных алмазоподобных структур с кубической анизотропией.

УАФ	s_{11} , ТПа ⁻¹	s_{44} , ТПа ⁻¹	s_{12} , ТПа ⁻¹	c_{11} , ГПа	c_{44} , ГПа	c_{12} , ГПа
СА3	1.87	2.496	-0.44	625	401	192
СА4	1.87	9.64	-0.437	624	104	190
СА6	0.948	8.66	-0.072	1068	115	87.8
СА7	8.12	3.64	3.82	455	262	370
СА8	1.67	5.91	-0.299	650	169	142
СА9	3.73	7.31	-0.90	316	137	101
СВ	5.53	10	-2.0	306	99.9	174

Полученные значения для алмазоподобных фаз с кубической анизотропией (СА3, СА4, СА6, СА7, СА8, СА9 и СВ) приведены в Табл.5.5. Для гексагональной фазы СА2, основываясь на аналогичном моделировании, имеем следующие значения коэффициентов податливости $s_{11} = 2.515$ ТПа⁻¹, $s_{33} = 1.92$ ТПа⁻¹, $s_{44} = 18.4$ ТПа⁻¹, $s_{12} = 0.0906$ ТПа⁻¹, $s_{13} = -0.3625$ ТПа⁻¹ и $s_{66} = 5.94$ ТПа⁻¹. Используя связь между коэффициентами податливости и коэффициентами жесткости, получаем $c_{11} = 409$ ГПа, $c_{33} = 550$ ГПа, $c_{44} = 54.4$ ГПа, $c_{12} = -3.705$ ГПа, $c_{13} = 76.5$ ГПа и $c_{66} = 168$ ГПа.

Коэффициенты жесткости для фаз с кубической анизотропией были рассчитаны с учетом коэффициентов податливости следующим образом [171]

$$c_{11} = \frac{s_{11} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})}, \quad c_{12} = \frac{-s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})}, \quad c_{44} = \frac{1}{s_{44}},$$

а для фаз с гексагональной анизотропией как

$$c_{11} + c_{12} = \frac{s_{33}}{s}, \quad c_{11} - c_{12} = \frac{1}{s_{11} - s_{12}}, \quad c_{13} = -\frac{s_{13}}{s},$$

$$c_{33} = \frac{(s_{11} + s_{12})}{s}, \quad c_{44} = \frac{1}{s_{44}}, \quad c_{66} = \frac{1}{s_{66}},$$

где $s = s_{33}(s_{11} + s_{12}) - 2s_{13}^2 > 0$.

Деформация структуры СА5 выявила ее неустойчивость. Даже малая деформация (до 0.01%) приводит к перестройке структуры с разрывом некоторых связей. Аналогично, фаза СА1 показала себя как малоустойчивая в динамических условиях.

На основании значений коэффициентов податливости для УАФ с кубической и гексагональной анизотропией была проанализирована изменчивость упругих «технических коэффициентов» (модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига).

Таблица 5.6: Экстремальные значения модуля Юнга и параметра анизотропии Δ .

УАФ	Δ , ТПа ⁻¹	$E_{[100]}$, ГПа	$E_{[110]}$, ГПа	$E_{[111]}$, ГПа
СА3	1.06	535	746	860
СА4	-2.51	535	320	282
СА6	-3.31	1055	384	317
СА7	9.85	123	313	644
СА8	-0.99	599	462	430
СА9	0.98	268	308	325
СВ	2.53	181	234	260

В Табл.5.6, основываясь на величинах упругих констант равновесных структур с кубической анизотропией из углеродных алмазоподобных кластеров, представленных в Табл.5.5, определены экстремальные значения модуля Юнга (5.1) и значения параметра анизотропии Δ . Три из равновесных алмазоподобных фаз с кубической структурой, СА4, СА6 и СА8, имеют отрицательную анизотропию, а четыре других - положительную анизотропию. Наибольшие модули Юнга оказываются у фазы СА6 (1055 ГПа, $\Delta < 0$) при растяжении в направлении [100] и фазы СА3 (958 ГПа, $\Delta > 0$) в направлении [111]. Полужирными цифрами в Табл.5.6 помечены максимальные значения модуля Юнга.

Расчеты безразмерных параметров $\Pi = -2s_{12}/\Delta$ и $\delta = \Delta/s_{11}$ (см. подраздел 1.2.2) показывают, что две из восьми изученных равновесных алмазоподобных структур с кубической анизотропией СА3 ($\Pi = 0.816$) и СА7 ($\Pi = 0.739$) могут иметь отрицательный коэффициент Пуассона (см. Табл.5.7), т.е. эти алмазоподобные фазы являются частичными ауксетиками. Полных ауксетиков среди исследуемых алмазоподобных фаз не обнаружено. В Табл.5.7 помимо значений безразмерных комплексов Π и δ приведены глобальные максимальные и минимальные значения коэффициентов Пуассона (ν_{\max} , ν_{\min}), усредненное по всем направлениям

Таблица 5.7: Экстремальные значения коэффициентов Пуассона (глобальные максимумы и минимумы ν_{\max} , ν_{\min} , экстремумы при частных ориентациях $\nu_{[001]} = \nu_{[100],[001]}$, $\nu_{[001],[110]}$, $\nu_{[1\bar{1}0],[110]}$, $\nu_{[111]} = \nu_{(111),[111]}$), а также усредненное по всем направлениям значение коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ и значения безразмерных комплексов Π и δ .

УАФ	Π	δ	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$	$\nu_{[001]}$	$\nu_{[001],[110]}$	$\nu_{[1\bar{1}0],[110]}$	$\nu_{[111]}$
СА3	0.83	0.57	-0.07	0.33	0.15	0.24	0.33	-0.07	0.07
СА4	-0.35	-1.34	0.14	0.54	0.32	0.23	0.14	0.54	0.36
СА6	-0.04	-3.49	0.03	0.66	0.31	0.08	0.03	0.66	0.37
СА7	0.74	1.21	-0.40	1.14	0.38	0.45	1.14	-0.40	0.23
СА8	-0.61	-0.59	0.14	0.37	0.24	0.18	0.14	0.37	0.27
СА9	1.84	0.26	0.13	0.28	0.21	0.24	0.28	0.13	0.19
СВ	1.58	0.46	0.17	0.47	0.33	0.36	0.47	0.17	0.30

значение коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$. Наименьший коэффициент Пуассона выявляется у равновесной структуры СА7 ($\nu_{\min} = -0.4$). Для этого ауксетика имеется большой диапазон изменения ($\nu_{\max} - \nu_{\min} = 1.54$) коэффициента Пуассона. Средний коэффициент Пуассона $\langle \nu \rangle$ для всех представленных кристаллических материалов оказывается положительным и меняется в пределах от 0.21 до 0.38. Значения коэффициентов Пуассона при частных для равновесных УАФ ориентациях из Табл.5.7 были рассчитаны по формулам (1.26)-(1.27) (см. стр.34). Для структур СА3 и СА7 отрицательные значения коэффициента Пуассона будет наблюдаться у коэффициента $\nu_{[1\bar{1}0],[110]}$.

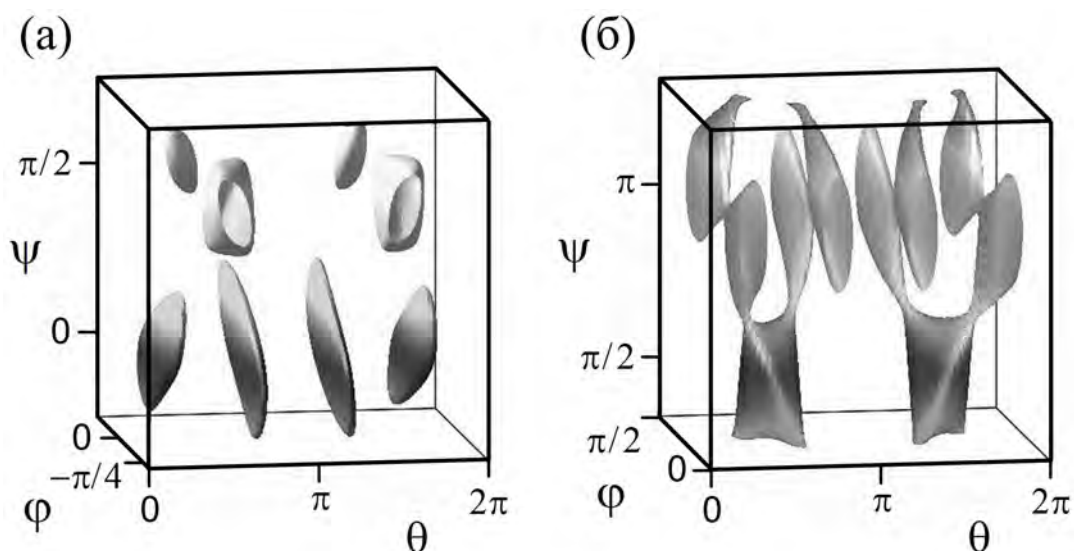


Рис. 5.4: Поверхности ауксетичности $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ углеродных алмазоподобных структур СА3 (а) и СА7 (б) с кубической анизотропией.

На Рис.5.4 проиллюстрированы поверхности ауксетичности $\nu(\varphi, \theta, \psi) = 0$ для алмазоподобных фаз СА3 и СА7, которые были построены в пространстве углов Эйлера с периодами $T_\varphi = \pi/2$, $T_\theta = 2\pi$ и $T_\psi = \pi$. Для этих фаз ауксетичность имеет место внутри представленных поверхностей. По этим поверхностям можно определить углы Эйлера, т.е. направления растяжения, при которых будет наблюдаться отрицательный коэффициент Пуассона. Как видно из Рис.5.4 наибольшей зоной ауксетичности будет обладать кристаллический материал СА7.

Анализ формулы модуля сдвига для кубических кристаллов позволяет определить максимальное и минимальное значения (см. подраздел 1.2.5, стр.50)

$$G_1 = \frac{1}{s_{44}}, \quad G_2 = \frac{1}{2(s_{11} - s_{12})}.$$

Таблица 5.8: Максимальные и минимальные значения модуля сдвига, коэффициента анизотропии Зенера P и объемного модуля B .

УАФ	P	$G_1 = s_{44}^{-1}$, ГПа	$G_2 = (2(s_{11} - s_{12}))^{-1}$, ГПа	B , ГПа Наст. раб.	B , ГПа [207, 214]	B , ГПа [213]
СА3	1.85	400	216	337	342	346.2
СА4	0.48	104	217	335	249	284.5
СА6	0.24	115	490	415	323	350.5
СА7	6.16	262	43	398	207	269.6
СА8	0.67	169	254	311	–	274.5
СА9	1.27	137	108	173	–	239.2
СВ	1.50	100	66	218	–	277.6

В Табл.5.8 представлены значения коэффициента анизотропии Зенера $P = 1 + 2\Delta/s_{44}$, экстремальных значений для модуля сдвига и значения объемного модуля, определяемого по формуле $B = (c_{11} + 2c_{12})/3$. Наибольший модуль сдвига оказывается у алмазоподобной фазы СА6 (490 ГПа) при экстремальном значении G_2 . Наименьший модуль сдвига наблюдается у структуры СВ ($G_{1\min} = 100$ ГПа). Наибольший объемный модуль выявляется у равновесной структуры СА3 (339 ГПа), а наименьший у структуры СА9 (173 ГПа).

Структура СА2 имеет гексагональную анизотропию. На Рис.5.5 представлена поверхность коэффициента Пуассона для алмазоподобной фазы СА2, построенная с помощью формулы (1.67). Структура СА2 оказалась частичным ауксетиком. Минимальное значение коэффициента Пуассона равно $\nu_{\min} = -s_{12}/s_{11} = -0.04$. Другое экстремальное значение коэффициента принимает значение $\nu = -s_{13}/s_{11} = 0.14$. Максимальное значение коэффициента Пуассона ($\nu_{\max} = 0.67$) достигается при $\theta = 0$ и $\psi = 42^\circ, 138^\circ$. Еще одно экстремальное значение коэффициента Пуассона

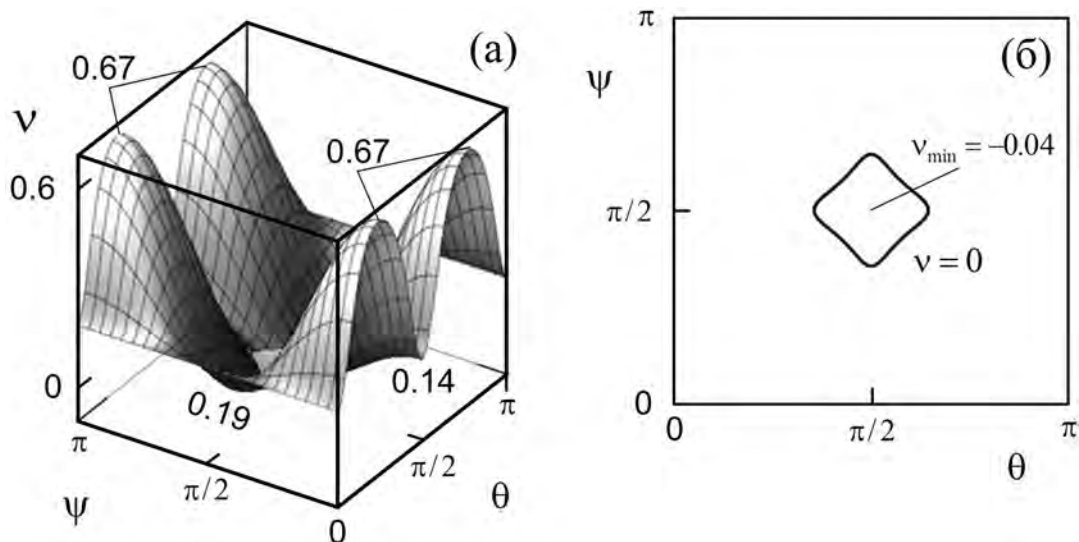


Рис. 5.5: Поверхность коэффициента Пуассона (а) и кривая ауксетичности в пространстве двух углов Эйлера (б) для равновесной алмазоподобной структуры *CA2* с гексагональной анизотропией.

равно $\nu = -s_{13}/s_{33} = 0.19$. Усредненное по всем направлениям значение коэффициента Пуассона $\langle \nu \rangle$ принимает значение 0.25. На Рис.5.5б представлена кривая ауксетичности $\nu = 0$, построенная по формуле (1.67). Зона ауксетичности находится внутри области, представленной на рисунке.

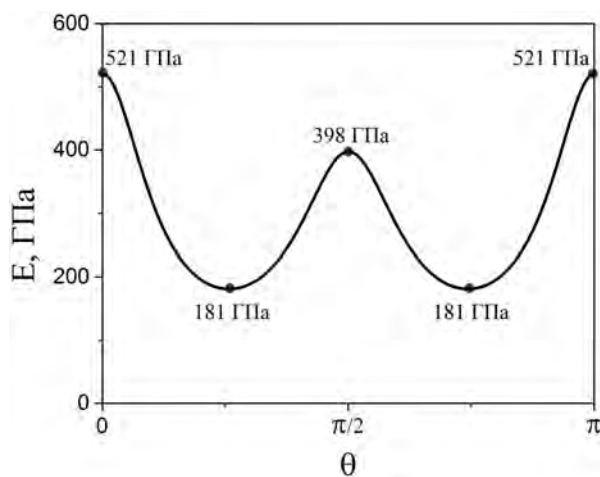


Рис. 5.6: Изменчивость модуля Юнга равновесной алмазоподобной структуры *CA2* с гексагональной анизотропией. Жирными точками отмечены экстремальные значения модуля Юнга.

Изменчивость модуля Юнга для алмазоподобной структуры *CA2* проиллюстрирована на Рис.5.6, на котором отражены также значения экстремальных значений модуля Юнга. Максимальное значение равно 521 ГПа. Минимальное значение модуля Юнга $E_{\min} = 181$ ГПа наблюдается при $\psi = 46^\circ$ и 134° .

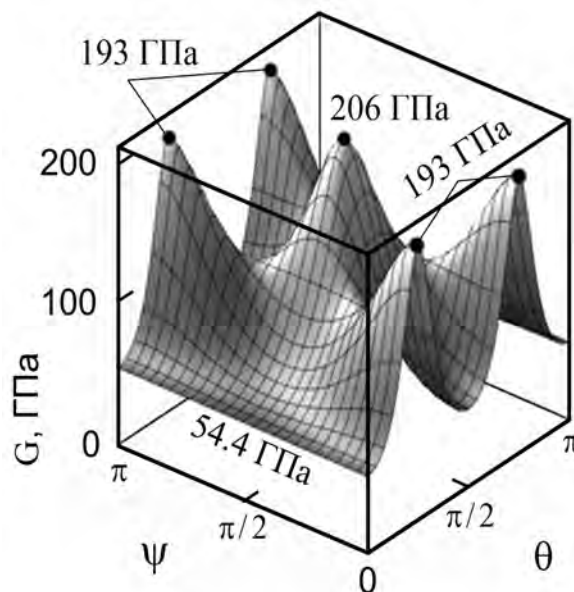


Рис. 5.7: Поверхность модуля сдвига для равновесной алмазоподобной структуры CA2 с гексагональной анизотропией.

Таблица 5.9: Экспериментальные данные (при нормальных условиях) для кубического алмаза.

c_{11} , ГПа	c_{12} , ГПа	c_{44} , ГПа	B , ГПа	Лит. ссылка
1079	124	578	442	[238]
1076.4	125.2	577.4	442.3	[239]
1080.4	127	576.6	444.8	[240]
1080.4	127	576.6	443.9	[241]

Поверхность модуля сдвига для алмазоподобной структуры CA2 изображена на Рис.5.7. Значения модуля сдвига меняются от 54.4 ГПа при $\theta = 0$ и любом ψ , что соответствует плоскости скольжения (100), до 206 ГПа при $\theta = \pi/2$ и $\psi = \pi/2$, что соответствует плоскости скольжения (010) в направлении [001]. Объемный модуль $B = (2c_{11} + c_{33} + 2c_{12} + 4c_{13})/9$ для алмазоподобной фазы CA2 равен 87.1 ГПа. Это значение оказывается одним из самых маленьких в сравнении со значениями объемного модуля для алмазоподобных фаз с кубической анизотропией (см. Табл.5.8). В этой таблице для сравнения приведены также численные значения объемного модуля для таких же алмазоподобных фаз, рассчитанные полуэмпирическими квантовомеханическими методами в работах [207, 213, 214]. Видны существенные количественные различия последних с полученными здесь методом молекулярной динамики значениями B .

Для некоторой оценки полученных выше механических характеристик алмазоподобных фаз, собранных в Табл.5.5 и Табл.5.8, в Табл.5.9 приводятся также экспериментальные данные для кубического алмаза из работ [238–241]. Из сравнения

можно видеть, что объемный модуль кубического алмаза (~ 440 ГПа) превосходит объемные модули всех рассмотренных алмазоподобных фаз. Наименьшее отличие по объемному модулю имеется с фазами *CA3*, *CA6* и *CA7*. Что касается коэффициента жесткости c_{11} , то наблюдается удивительная близость его для алмазоподобной фазы *CA6* к такому коэффициенту жесткости для кубического алмаза (см. Табл.5.5 и Табл.5.9).

5.3. Заключение

Методом молекулярной динамики были получены модули податливости для трех фуллеритов, созданных на основе фуллеренов C_{60} и C_{48} . На основе полученных данных были исследованы их упругие характеристики - модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль сдвига. Показано, что две из исследованных структур (фуллерит C_{48} и фуллерит C_{60} с ГЦК укладкой) являются ауксетиками. Представленные результаты качественно схожи с ранее известными из литературы модулями жесткости фуллерита C_{60} , определенными экспериментально в [228]. Однако, полученные расчетные значения в несколько раз больше. Это можно объяснить тем, что экспериментально полученные монокристаллы фуллерита содержат много дефектов и, кроме того, экспериментальные измерения проводятся при конечных температурах, в то время как представленные расчеты проводились для идеального кристалла при нулевой температуре.

Равновесные алмазоподобные фазы *CA1*, *CA2*, *CA3*, *CA4*, *CA5*, *CA6*, *CA7*, *CA8*, *CA9* и *CB*, полученные сшивкой фуллереноподобных молекул, были исследованы методом молекулярной динамики. Среди названных алмазоподобных фаз восемь (*CA1*, *CA3*, *CA4*, *CA6*, *CA7*, *CA8*, *CA9* и *CB*) являются кубическими. Структура *CA2* имеет гексагональную анизотропию, а структура *CA5* тетрагональную. Равновесная фаза *CA5* оказалась неустойчивой, фаза *CA1* также малоустойчива, в то время как все прочие фазы устойчивы по отношению к малой упругой деформации. Результаты расчета напряжений и упругих констант позволили проанализировать упругие характеристики (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль сдвига и объемный модуль) алмазоподобных фаз на основе кластеров фуллереноподобных молекул. Обнаружено, что три из десяти рассмотренных алмазоподобных фаз, а именно *CA2*, *CA3* и *CA7*, являются ауксетиками. Поскольку коэффициент Пуассона у них оказывается отрицательным только в определенных направлениях, то данные структуры являются частичными ауксетиками.

Фуллериты и УАФ представляют собой новые перспективные материалы, и данные результаты вносят вклад в изучение их механических свойств. При этом поиск материалов-ауксетиков является важной задачей, поскольку они могут использоваться для разработки композитных материалов с заданными упругими свойствами.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Выявлено свыше **450** кристаллических ауксетиков среди **2000** кристаллов, экспериментальные данные о которых собраны в энциклопедическом справочнике Ландолт - Бернштейна (том 29а). Установлены классификационные схемы для ауксетиков из кубических и гексагональных кристаллов и условия для поиска кристаллических ауксетиков и ауксетиков в среднем.

2. Развита аналитическая модель цилиндрически анизотропных нано/микротрубок из кристаллов различных кристаллических систем для описания деформаций растяжения и кручения. Показано, что более **1000** нано/микротрубок проявляют ауксетические свойства.

3. Впервые установлен линейный прямой и обратный эффект Пойнтинга для хиральных нано/микротрубок.

4. Решены задачи растяжения слоистых пластин и слоистых нано/микротрубок, композитов из ауксетиков и неауксетиков. Показано, что для таких композитов нарушается правило смесей, а эффективный модуль Юнга и коэффициент Пуассона могут даже превосходить модули Юнга и коэффициенты Пуассона исходных кристаллов.

5. Проведен сравнительный анализ поверхностных волн Релея и Лява для изотропных материалов с положительным и отрицательным коэффициентом Пуассона.

6. Выявлены ауксетики среди новых фуллеритов и углеродных алмазоподобных материалов.

Приложения

П.1. Таблицы

Таблица П.1: Полные ауксетики.

Кристаллы		δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
Ba	1	0.55	-0.176	-0.45	-0.05
	2	1.05	0.737	-0.29	0.82
Sm _{0.7} Y _{0.3} S	1	-0.86	1.369	-0.59	-0.12
	2	-0.99	0.987	-0.49	0.004
Sm _{0.75} Y _{0.25} S	1	-0.70	1.656	-0.58	-0.17
	2	-0.60	2.251	-0.67	-0.30
	3	-1.05	0.8	-0.42	0.07
Sm _{0.75} La _{0.25} S [175]		-0.65	1.225	-0.40	-0.06
Sm _{0.65} La _{0.35} S [175]		-0.05	12.785	-0.35	-0.32
Sm _{0.75} Tm _{0.25} S [175]		-0.34	2.683	-0.46	-0.25

Таблица П.2: Кубические кристаллы с $0 < \Pi < 0.1$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
UTe	-4.99	0.006	-0.01	0.71
GeTe-SnTe	-3.16	0.007	-0.01	0.61
ReO ₃	-2.94	0.010	-0.01	0.59
SmB ₆	-1.68	0.020	-0.02	0.45
USE	-7.04	0.023	-0.08	0.76
USb	-4.50	0.024	-0.05	0.68
Sm _{0.85} Tm _{0.15} S [175]	-1.06	0.056	-0.03	0.33
SnTe	-3.06	0.058	-0.09	0.57

Таблица П.3: Кубические кристаллы с $0.1 \leq \Pi < 0.2$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
Sm _{0.90} La _{0.10} S [175]	-1.71	0.179	-0.15	0.38

Таблица П.4: Кубические кристаллы с $0.2 \leq \Pi < 0.3$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
FeS ₂	-0.84	0.289	-0.12	0.21

Таблица П.5: Кубические кристаллы с $0.5 \leq \Pi < 0.6$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
Tm _{0.99} Se	-1.79	0.520	-0.47	0.23

Таблица П.6: Кубические кристаллы с $0.6 \leq \Pi < 0.7$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
TmSe	-1.75	0.620	-0.54	0.18
Mn _{85.3} Ni _{8.8} C _{5.9}	1.34	0.664	-0.72	1.34
InTl (27at%Tl, 125 K) [56]	1.50	0.666	-7.41	7.83
CuMn (72at%Mn)	1.29	0.670	-0.61	1.21
InTl (27at%Tl, 200 K) [56]	1.48	0.673	-1.98	3.01
Mn _{84.7} Ni _{9.2} C _{6.1}	1.27	0.678	-0.57	1.18
FePd (28at%Pd)	1.44	0.684	-1.08	1.87
InTl (25at%Tl)	1.45	0.684	-1.17	2.13
Yb	1.04	0.687	-0.34	0.75
InTl (28.13at%Tl)	1.44	0.687	-1.08	2.00
CuAlNi (Cu-14.5wt%Al-3.15wt%Ni)	1.34	0.690	-0.66	1.41
AlNi (60at%Ni)	1.38	0.690	-0.74	1.53
NiCr ₂ O ₄	1.43	0.690	-0.95	1.83
InTl (27at%Tl, 290 K) [56]	1.43	0.691	-0.97	1.89
Cu _{67.7} Zn _{19.4} Al _{12.9}	1.38	0.692	-0.73	1.53
InTl (27at%Tl)	1.44	0.692	-1.02	1.98
CuAlZn (Cu-17at%Al-14.3at%Zn)	1.34	0.693	-0.65	1.42
InTl (30.16at%Tl)	1.43	0.693	-0.94	1.85
PuGa (1wt%Ga)	1.22	0.694	-0.48	1.09
Cu _{66.5} Zn _{20.8} Al _{12.7}	1.33	0.695	-0.65	1.43
Cs	1.09	0.695	-0.36	0.83
CuAuZn ₂	1.41	0.696	-0.81	1.68
Cu ₂₅ Ni ₂₅ Zn ₅₀	1.35	0.699	-0.66	1.46

Таблица П.7: Кубические кристаллы с $0.7 \leq \Pi < 0.8$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
AlNi (63.2at%Ni)	1.29	0.701	-0.55	1.28
	1.49	0.668	-2.48	3.12
Cu ₃₀ Ni ₂₀ Zn ₅₀	1.33	0.703	-0.61	1.41
CuAlNi (Cu-14wt%Al-4.1wt%Ni)	1.32	0.704	-0.58	1.37
CuZn (43at%Zn)	1.33	0.704	-0.59	1.38
Au ₃₀ Cu ₂₃ Zn ₄₇	1.37	0.704	-0.67	1.52
CuZn (46at%Zn)	1.32	0.705	-0.58	1.37
CuZn (47.8at%Zn)	1.32	0.705	-0.57	1.37
β_1 -AgCd (47.9at%Cd)	1.34	0.707	-0.61	1.45
Au ₂₃ Cu ₃₀ Zn ₄₇	1.36	0.707	-0.65	1.51
InTl (35.15at%Tl)	1.39	0.707	-0.71	1.63
Li	1.29	0.708	-0.54	1.29
FeNi (31at%Ni)	1.18	0.708	-0.42	1.01
Cu ₃₅ Ni ₁₅ Zn ₅₀	1.32	0.710	-0.56	1.37
CuZn (44.3at%Zn)	1.31	0.710	-0.55	1.35
LiMg (3.01at%Mg)	1.29	0.711	-0.52	1.30
LiMg (1.09at%Mg)	1.29	0.711	-0.52	1.29
Cu ₅₃ Zn ₄₇	1.21	0.712	-0.53	1.30
β_1 -AgCd (46.7at%Cd)	1.30	0.712	-0.54	1.33
FeAl (25at%Al)	1.21	0.713	-0.44	1.10
LiMg (4.28at%Mg)	1.29	0.713	-0.53	1.31
FeAl (27at%Al)	1.20	0.713	-0.43	1.08
AgZn (42at%Zn)	1.32	0.713	-0.56	1.39
LiMg (2.26at%Mg)	1.29	0.713	-0.52	1.29
LiD	0.51	0.714	-0.10	0.25
FeAl (28.1at%Al)	1.19	0.714	-0.42	1.04
CuZn (48.2at%Zn)	1.29	0.714	-0.52	1.31
AuCuZn (Au-33wt%Cu-47wt%Zn)	1.32	0.715	-0.55	1.39
AgZn (45at%Zn)	1.31	0.715	-0.55	1.37
FePd (34at%Pd)	1.31	0.716	-0.54	1.37
CuZn (48.3at%Zn)	1.28	0.716	-0.50	1.27
AgZn (47at%Zn)	1.31	0.716	-0.53	1.35
Au ₂₀ Cu ₃₃ Zn ₄₇	1.33	0.716	-0.65	1.51
Cu ₄₀ Ni ₁₀ Zn ₅₀	1.29	0.717	-0.51	1.29
Au ₁₅ Cu ₃₈ Zn ₄₇	1.30	0.717	-0.53	1.34
AgZn (53at%Zn)	1.29	0.719	-0.51	1.31
MnFe (61.5at%Fe)	1.02	0.720	-0.29	0.75
CuZn (48.1at%Zn)	1.28	0.720	-0.49	1.27
CuZn (45at%Zn)	1.32	0.720	-0.54	1.39

Таблица П.7 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
LiH	0.52	0.721	-0.10	0.25
CuSn (15at%Sn)	1.30	0.721	-0.52	1.34
InTl (39.06at%Tl)	1.36	0.722	-0.61	1.54
AgZn (51at%Zn)	1.28	0.723	-0.50	1.29
AgZn (49at%Zn)	1.28	0.724	-0.49	1.29
FeAl (23.6at%Al)	1.18	0.725	-0.39	1.04
Cu ₄₅ Ni ₅ Zn ₅₀	1.26	0.725	-0.47	1.23
FeNi (32.1at%Ni)	1.06	0.726	-0.31	0.82
FeNi (33.3at%Ni)	1.08	0.726	-0.32	0.85
FeNi (30.4at%Ni)	1.03	0.728	-0.29	0.77
FeNi (34.2at%Ni)	1.10	0.729	-0.33	0.89
CuZn (48.8at%Zn)	1.30	0.729	-0.50	1.34
AuZn (47at%Zn)	1.31	0.729	-0.52	1.38
FeNi (32.7at%Ni)	1.08	0.731	-0.31	0.86
FeAl (22.4at%Al)	1.14	0.732	-0.36	0.98
CuZn (47.5at%Zn)	1.24	0.733	-0.43	1.19
Na	1.24	0.733	-0.44	1.20
CuZn (50at%Zn)	1.14	0.734	-0.35	0.96
FeAl (34at%Al)	1.08	0.734	-0.31	0.87
FeNi (29at%Ni)	1.02	0.736	-0.29	0.77
Au ₅₀ Mn ₂₂ Zn ₂₈	1.25	0.737	-0.44	1.24
AlNi (55at%Ni)	1.20	0.738	-0.39	1.10
AgZn (50at%Zn)	1.25	0.738	-0.43	1.22
Cu ₂ MnAl	1.13	0.739	-0.36	0.92
K	1.24	0.740	-0.42	1.21
	1.27	0.731	-0.46	1.26
FePt (28at%Pt)	1.14	0.741	-0.34	0.98
Rb	1.22	0.742	-0.40	1.15
FeAl (19.8at%Al)	1.10	0.744	-0.32	0.92
Cu ₅₀ Zn ₅₀	1.21	0.744	-0.39	1.13
FeNi (36.5at%Ni)	1.12	0.745	-0.32	0.94
AuZn (50at%Zn)	1.26	0.748	-0.43	1.28
FeCrNi (70at%Fe,18at%Cr,12at%Ni)	1.01	0.749	-0.26	0.77
AgZn (46.5at%Zn)	1.21	0.749	-0.38	1.14
FeNi (38.8at%Ni)	1.12	0.751	-0.32	0.96
CoFe (10at%Fe)	1.14	0.752	-0.33	0.99
CuMn (40at%Mn)	1.08	0.752	-0.29	0.88
AgZn (48.5at%Zn)	1.18	0.753	-0.36	1.09
FeNi (27.2at%Ni)	0.99	0.755	-0.24	0.74
FeAl (40.1at%Al)	1.02	0.756	-0.25	0.78

Таблица П.7 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
FeAl (17.8at%Al)	1.06	0.757	-0.28	0.86
Ca	1.06	0.760	-0.27	0.86
	0.99	0.803	-0.19	0.78
FeNi (41.3at%Ni)	1.11	0.763	-0.30	0.95
PbTl (61.41at%Tl)	1.26	0.763	-0.41	1.31
Ni ₃ Al	0.90	0.765	-0.19	0.69
	0.97	0.804	-0.18	0.76
	0.98	0.814	-0.18	0.78
	0.98	0.815	-0.18	0.78
	0.98	0.821	-0.17	0.78
Sr	1.05	0.766	-0.26	0.85
	1.10	0.748	-0.31	0.92
PbTl (71.68at%Tl)	1.22	0.771	-0.36	1.21
PbTl (52.66at%Tl)	1.25	0.771	-0.38	1.27
FeCrNi (62.4at%Fe, 19.5at%Cr,18at%Ni)	0.98	0.779	-0.21	0.74
FeNiCrMo (14.5at%Ni, 14.5at%Cr,2.5at%Mo)	1.02	0.779	-0.23	0.81
FeAl (14.5at%Al)	1.01	0.779	-0.22	0.79
Th	1.01	0.780	-0.22	0.79
	1.00	0.799	-0.20	0.79
FeNi (44at%Ni)	1.09	0.780	-0.26	0.93
FeCrNi (71at%Fe, 9at%Cr,10at%Ni)	1.09	0.781	-0.23	0.83
BaTiO ₃	1.04	0.782	-0.24	0.85
	0.87	0.882	-0.09	0.68
CoAlNi (14.48at%Al,6.55at%Ni)	1.06	0.785	-0.24	0.89
CoAl (13.7at%Al)	1.07	0.785	-0.25	0.91
InTl (76.5at%Tl)	1.22	0.785	-0.33	1.22
CoAlNi (13.3at%Al,2.92at%Ni)	1.07	0.786	-0.25	0.90
CoAlNi (13.33at%Al,4.59at%Ni)	1.06	0.787	-0.24	0.90
CoAlNi (12.5at%Al,4.66at%Ni)	1.05	0.789	-0.24	0.88
PbTl (40.5at%Tl)	1.20	0.789	-0.31	1.17
CoAlNi (12.68at%Al, 6.57at%Ni)	1.05	0.790	-0.23	0.87
CoAl (12.59at%Al)	1.06	0.790	-0.24	0.89
CuAl (14at%Al)	1.09	0.791	-0.25	0.94
AlNi (50at%Ni)	1.03	0.791	-0.22	0.84
	0.95	0.824	-0.16	0.74
	0.96	0.826	-0.16	0.76
FeCrNi (67.3at%Fe,	0.97	0.792	-0.20	0.81

Таблица П.7 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
19.3at%Cr,13.3at%Ni)				
FeCrNi (70.5at%Fe, 17.5at%Cr, 12at%Ni)	1.01	0.792	-0.21	0.81
PbTl (31.77at%Tl)	1.17	0.793	-0.29	1.13
Ni _{0.73} Zn _{0.37} Cr ₂ O ₄	1.18	0.794	-0.30	1.14
Ce	0.89	0.794	-0.17	0.64
CoAlNi (10.58at%Al,6.57at%Ni)	1.03	0.797	-0.22	0.85
CoAlNi (10.39at%Al,4.72at%Ni)	1.03	0.798	-0.22	0.86
CoAl (10.49at%Al)	1.04	0.799	-0.22	0.87

Таблица П.8: Кубические кристаллы с $0.8 \leq \Pi < 0.9$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
FeNi (48.8at%Ni)	0.97	0.803	-0.18	0.75
FeSi (24.85at%Si)	0.97	0.803	-0.18	0.75
CuAl (13.25at%Al)	1.07	0.803	-0.23	0.92
AgMg	1.00	0.803	-0.20	0.80
	1.00	0.800	-0.20	0.79
C ₁₀ H ₁₆	1.00	0.803	-0.20	0.80
	0.88	0.906	-0.07	0.71
	0.77	0.981	-0.01	0.61
CoFe (14at%Fe)	1.03	0.805	-0.21	0.85
CuAl (12.55at%Al)	1.06	0.805	-0.22	0.92
FeSi (11.68at%Si)	0.96	0.810	-0.17	0.75
CoFe (12at%Fe)	1.02	0.810	-0.20	0.84
CuAl (11.77at%Al)	1.05	0.810	-0.21	0.90
CuZn (22.7at%Zn)	1.05	0.810	-0.21	0.90
FeNi (50.2at%Ni)	1.02	0.811	-0.20	0.85
InTl (81.5at%Tl)	1.17	0.811	-0.26	1.13
FeAl (9.6at%Al)	0.94	0.811	-0.17	0.72
FeSi (11at%Si)	0.96	0.811	-0.18	0.76
CuZn (19at%Zn)	1.07	0.812	-0.21	0.93
FeSi (12.91at%Si)	0.95	0.813	-0.17	0.74
FeSi (8.89at%Si)	0.96	0.814	-0.17	0.76
FeSi (10.1at%Si)	0.98	0.815	-0.18	0.78
CuAl (10.8at%Al)	1.05	0.815	-0.20	0.89
SiC	0.70	0.816	-0.10	0.44
	0.67	0.814	-0.09	0.41
CoFe (8at%Fe)	1.00	0.817	-0.18	0.81
	1.07	0.777	-0.26	0.89
CuAl (9.86at%Al)	1.04	0.817	-0.20	0.89
CuZn (29at%Zn)	1.05	0.817	-0.20	0.90
LiIn	1.05	0.817	-0.20	0.90
PbTl (17.6at%Tl)	1.14	0.817	-0.24	1.07
FeCrNi (76at%Fe, 12at%Cr,12at%Ni)	1.00	0.818	-0.18	0.83
CuAl (10.3at%Al)	1.04	0.818	-0.20	0.89
CuAl (10.22at%Al)	1.04	0.818	-0.20	0.89
FeNi (58.8at%Ni)	0.95	0.819	-0.16	0.74
CuAl (9at%Al)	1.04	0.819	-0.20	0.89
CuAl (9.85at%Al)	1.04	0.819	-0.20	0.89
CoFe (6at%Fe)	0.99	0.820	-0.17	0.80

Таблица П.8 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
	0.98	0.812	-0.18	0.78
CuAl (9.98at%Al)	1.03	0.820	-0.19	0.88
PbTl (20.5at%Tl)	1.14	0.820	-0.24	1.09
CuSi (7.69at%Si)	1.05	0.822	-0.20	0.91
FePd (37at%Pd)	1.07	0.824	-0.20	0.94
PbTl (14.9at%Tl)	1.12	0.824	-0.23	1.05
CuAl (8.4at%Al)	1.03	0.826	-0.18	0.87
CuZn (17.4at%Zn)	1.02	0.826	-0.18	0.87
FeSi (8.59at%Si)	0.93	0.827	-0.15	0.71
Ni _{50.6} Al	0.98	0.828	-0.16	0.79
NiCo (32at%Co)	0.95	0.828	-0.16	0.75
CuSi (5.16at%Si)	1.03	0.829	-0.18	0.87
PbIn (5.5at%In)	1.12	0.829	-0.22	1.05
PbTl (5.01at%Tl)	1.10	0.831	-0.21	1.02
CuAl (7.5at%Al)	1.02	0.832	-0.17	0.86
CuAl (7.05at%Al)	1.02	0.833	-0.17	0.86
CuAl (7.4at%Al)	1.02	0.834	-0.17	0.86
CuAl (6.5at%Al)	1.01	0.834	-0.17	0.86
CuZn (14.3at%Zn)	1.02	0.834	-0.17	0.86
Co	0.95	0.835	-0.15	0.76
CuAl (6.9at%Al)	1.01	0.835	-0.17	0.85
PbTl (1.77at%Tl)	1.10	0.835	-0.20	1.03
PbTl (6.1at%Tl)	1.10	0.836	-0.20	1.03
Pb	1.10	0.837	-0.20	1.02
PbTl (3.5at%Tl)	1.10	0.837	-0.20	1.02
PbTl (1.06at%Tl)	1.10	0.838	-0.20	1.03
FeSi (6.29at%Si)	0.92	0.839	-0.14	0.71
PbTl (2.35at%Tl)	1.10	0.839	-0.20	1.02
FeSi (7at%Si)	0.91	0.840	-0.13	0.71
CuAl (5at%Al)	1.00	0.840	-0.16	0.85
NiCo (62at%Co)	0.93	0.841	-0.14	0.73
FeAl ₂ O ₄	0.97	0.841	-0.15	0.79
CuAl (4.85at%Al)	1.00	0.841	-0.16	0.85
CuMn (5.8at%Mn)	1.00	0.842	-0.16	0.84
NiFeSi (2.7at%FeSi)	0.88	0.843	-0.12	0.66
CuAl (4.34at%Al)	1.00	0.843	-0.16	0.84
CuAl (4.0at%Al)	1.00	0.843	-0.16	0.84
CuGe (1.71at%Ge)	1.00	0.843	-0.16	0.84
CuMn (5at%Mn)	1.00	0.843	-0.16	0.84
CuSi (4.17at%Si)	1.01	0.843	-0.16	0.86

Таблица П.8 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
CuSn (3.30at%Sn)	1.01	0.843	-0.16	0.86
CuAl (4.81at%Al)	1.00	0.844	-0.16	0.85
FeCoCrMo (25at%Co, 30at%Cr,3.4at%Mo)	1.02	0.845	-0.06	0.32
CuZn (4.59at%Zn)	1.00	0.845	-0.15	0.84
CuZn (9.1at%Zn)	0.99	0.845	-0.15	0.83
Na ₈ [Al ₆ SiO ₂₄](OH) ₂ ·nH ₂ O	0.96	0.845	-0.14	0.78
FeSi (4.42at%Si)	0.89	0.846	-0.12	0.68
CuGa (5.9at%Ga)	1.00	0.846	-0.15	0.84
FeSi (25.1at%Si)	0.86	0.847	-0.12	0.64
CuAl (3.1at%Al)	0.99	0.847	-0.15	0.83
CuMn (3.5at%Mn)	0.99	0.847	-0.15	0.83
CuGa (4.15at%Ga)	1.00	0.847	-0.15	0.84
FeSi (6.3at%Si)	0.89	0.848	-0.12	0.68
FeSi (5.86at%Si)	0.89	0.848	-0.12	0.69
CuAl (3.4at%Al)	0.99	0.848	-0.15	0.83
CuSn (1.84at%Sn)	1.00	0.849	-0.15	0.84
CuZn (5.02at%Zn)	0.99	0.850	-0.15	0.83
CuAl (2.21at%Al)	0.99	0.850	-0.15	0.83
ThC _{0.063}	0.92	0.850	-0.13	0.72
CuNi (6.04at%Ni)	0.97	0.851	-0.14	0.81
CuZn (4.1at%Zn)	0.98	0.851	-0.14	0.82
CuGe (1.03at%Ge)	0.99	0.851	-0.15	0.83
CuGa (3.27at%Ga)	0.99	0.851	-0.15	0.83
CuMn (2.6at%Mn)	0.98	0.852	-0.14	0.83
CuAl (2.14at%Al)	0.98	0.853	-0.14	0.83
CuAl (0.75at%Al)	0.98	0.854	-0.14	0.82
CuAl (1.95at%Al)	0.98	0.854	-0.14	0.83
CuMn (1.25at%Mn)	0.98	0.854	-0.14	0.82
CuGa (1.35at%Ga)	0.98	0.854	-0.14	0.83
CuGa (2.15at%Ga)	0.99	0.854	-0.14	0.83
CuGa (1.58at%Ga)	0.98	0.854	-0.14	0.82
CuSn (0.86at%Sn)	0.99	0.854	-0.14	0.83
NiAl (12.5at%Al)	0.93	0.855	-0.13	0.74
CuNi (31.1at%Ni)	0.96	0.855	-0.13	0.79
CuNi (9.73at%Ni)	0.97	0.855	-0.14	0.81
CuNi (3.02at%Ni)	0.98	0.855	-0.14	0.82
CuAl (1at%Al)	0.98	0.855	-0.14	0.82
CuZn (1.93at%Zn)	0.98	0.855	-0.14	0.82
CuAu (10at%Au)	1.00	0.855	-0.15	0.86

Таблица П.8 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
	1.00	0.859	-0.14	0.85
CuNi (4.49at%Ni)	0.98	0.856	-0.14	0.82
CuAl (0.2at%Al)	0.98	0.856	-0.14	0.82
CuNi (53.8at%Ni)	0.95	0.857	-0.13	0.77
CuNi (6.02at%Ni)	0.98	0.857	-0.14	0.82
CuGa (0.36at%Ga)	0.98	0.857	-0.14	0.82
CuAu (2.8at%Au)	0.99	0.857	-0.14	0.83
CuAu (5at%Au)	0.99	0.857	-0.14	0.83
CuNi (2.34at%Ni)	0.98	0.858	-0.14	0.82
CuZn (0.87at%Zn)	0.98	0.858	-0.14	0.82
CuAu (7.5at%Au)	0.99	0.858	-0.14	0.85
NiCo (43.5at%Co)	0.89	0.859	-0.11	0.70
CuAl (0.04at%Al)	0.97	0.860	-0.13	0.82
Cu	0.98	0.860	-0.13	0.82
CuAu (2at%Au)	0.98	0.860	-0.13	0.83
CuNi (65.5at%Ni)	0.94	0.861	-0.12	0.76
CuNi (23at%Ni)	0.97	0.861	-0.13	0.82
KO ₂ PbCu(NO ₂)O ₆	1.07	0.861	-0.16	0.99
FeAl (4at%Al)	0.87	0.863	-0.11	0.66
NiCo (38.45at%Co)	0.89	0.864	-0.11	0.69
CuAu (0.23at%Au)	0.97	0.864	-0.13	0.82
CuNi (77.2at%Ni)	0.92	0.866	-0.11	0.74
Mg _{0.75} Fe _{0.35} Al _{1.90} O ₄	0.87	0.869	-0.10	0.67
AgAl (5.2at%Al)	1.00	0.869	-0.13	0.87
FeNi (73at%Ni)	0.88	0.870	-0.10	0.69
CrNi (80.4at%Ni)	0.88	0.871	-0.10	0.68
NiO ₃ Fe (73.8at%Ni)	0.89	0.871	-0.10	0.69
CuNi (82.2at%Ni)	0.90	0.871	-0.11	0.72
AgIn (8.36at%In)	0.99	0.871	-0.13	0.86
AgIn (7.9at%In)	0.98	0.872	-0.12	0.84
FeNi (79.2at%Ni)	0.88	0.873	-0.10	0.68
NiCo (26.35at%Co)	0.87	0.876	-0.10	0.67
AgIn (4at%In)	0.97	0.876	-0.12	0.83
AgSn (3.17at%Sn)	0.98	0.880	-0.12	0.85
NiAl (7.9at%Al)	0.88	0.881	-0.09	0.69
CuNi (9at%Ni)	0.94	0.882	-0.10	0.77
AgSn (5.9at%Sn)	0.99	0.883	-0.11	0.87
Ba(NO ₃) ₂	0.93	0.883	-0.10	0.77
AgMg (7.33at%Mg)	0.97	0.885	-0.11	0.83
AgZn (3.53at%Zn)	0.97	0.885	-0.11	0.84

Таблица П.8 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
AgAl (3.9at%Al)	0.98	0.885	-0.11	0.85
AgSn (4at%Sn)	0.98	0.885	-0.11	0.85
AgSn (7.8at%Sn)	1.01	0.885	-0.12	0.89
Ag ₆ Sn ₄ P ₁₂ Ge ₆	0.77	0.887	-0.07	0.56
AgIn (6at%In)	0.97	0.888	-0.11	0.84
PdAg (10at%Ag)	0.98	0.889	-0.11	0.85
AgIn (1.2at%In)	0.96	0.889	-0.10	0.82
AgMg (3.07at%Mg)	0.96	0.889	-0.10	0.83
AgZn (2.4at%Zn)	0.97	0.889	-0.10	0.84
MgAl ₂ O ₄	0.79	0.890	-0.07	0.59
CuNi (92.7at%Ni)	0.87	0.890	-0.08	0.68
AgAu (6at%Au)	0.94	0.891	-0.10	0.79
AgAl (1.6at%Al)	0.97	0.891	-0.10	0.85
AgSn (0.9at%Sn)	0.96	0.892	-0.10	0.83
AgCd (1.34at%Cd)	0.96	0.895	-0.10	0.82
AgIn (2at%In)	0.98	0.895	-0.10	0.85
CuAu (25at%Au)	0.96	0.896	-0.10	0.83
AgCd (1.92at%Cd)	0.96	0.896	-0.10	0.82
NiAl (4.1at%Al)	0.85	0.897	-0.08	0.66
AgAu (2at%Au)	0.96	0.897	-0.09	0.82
AgPd (6.22at%Pd)	0.95	0.898	-0.09	0.82
AgAu (4at%Au)	0.95	0.899	-0.09	0.81
Ag	0.95	0.899	-0.09	0.81

Таблица П.9: Кубические кристаллы с $0.9 \leq \Pi < 1$.

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
NiCo (10.11at%Co)	0.84	0.900	-0.07	0.65
FeNi (89.5at%Ni)	0.84	0.900	-0.07	0.65
AgSn (2at%Sn)	0.98	0.900	-0.10	0.86
ZnFe ₂ O ₄	0.82	0.904	-0.07	0.63
Ni	0.85	0.904	-0.07	0.66
CeAg	0.95	0.905	-0.09	0.82
Tl (FCC)	1.00	0.906	-0.09	0.91
(BCC)	1.02	0.915	-0.09	0.94
Fe	0.81	0.911	-0.13	0.82
AlNi (47.5at%Ni)	0.81	0.914	-0.06	0.62
CeSn ₃	0.74	0.923	-0.05	0.54
AgAu (25at%Au)	0.94	0.920	-0.07	0.81
CuCl	0.96	0.924	-0.07	0.86
AgAu (50at%Au)	0.93	0.928	-0.06	0.81
PdAg (2at%Ag)	0.93	0.933	-0.06	0.82
Fe _{2.05} Ti _{0.95} O ₄	0.95	0.934	-0.06	0.85
Pb(NO ₃) ₂	0.91	0.935	-0.05	0.78
HgSe	0.91	0.935	-0.05	0.77
Ge _{0.72} Si _{0.28}	0.73	0.936	-0.04	0.54
PdRh (1at%Rh)	0.93	0.936	-0.06	0.82
FeCrCo (35at%Cr,15at%Co)	0.77	0.937	-0.04	0.58
MgO·2.61Al ₂ O ₃	0.72	0.940	-0.03	0.53
AuNi (42.42at%Ni)	0.93	0.940	-0.05	0.82
PdRh (5at%Rh)	0.92	0.942	-0.05	0.80
AgAu (75at%Au)	0.94	0.942	-0.05	0.84
β -HgS	0.91	0.948	-0.04	0.80
Pd	0.92	0.949	-0.04	0.81
LiF	0.61	0.950	-0.02	0.41
CuI	0.85	0.954	-0.03	0.70
MgO·3.5Al ₂ O ₃	0.73	0.957	-0.02	0.55
	0.72	0.941	-0.03	0.53
	0.72	0.952	-0.03	0.53
HgTe	0.85	0.957	-0.03	0.71
ZnS	0.81	0.959	-0.03	0.66
ZnSe	0.78	0.960	-0.03	0.62
FeCr (19.43at%Cr)	0.72	0.962	-0.02	0.54
AuNi (9.72at%Ni)	0.95	0.962	-0.03	0.87
AuNi (2.95at%Ni)	0.95	0.966	-0.03	0.87

Таблица П.9 – Продолжение

Кристаллы	δ	Π	ν_{\min}	ν_{\max}
Au	0.95	0.969	-0.03	0.88
CuBr	0.90	0.969	-0.03	0.79
	1.02	0.870	-0.14	0.91
AuNi (24.2at%Ni)	0.91	0.976	-0.02	0.82
Cu ₃ Au	0.86	0.983	-0.01	0.74
	0.96	0.895	-0.10	0.83
	0.91	0.930	-0.06	0.77
	0.88	0.962	-0.03	0.75
CuAu (80at%Au)	0.92	0.983	-0.01	0.82
CdTe	0.83	0.986	-0.01	0.70
LaAg	0.84	0.994	-0.004	0.72
PdRh (20at%Rh)	0.82	0.999	-0.001	0.70
Sr(NO ₃) ₂	0.82	0.999	-0.001	0.69

Таблица П.10: Результаты численного анализа экстремальных значений коэффициента Пуассона для кубических кристаллов, попадающие в области значений δ и ν_0 , соответствующих случаям 1 и 2.

Кристаллы	δ	ν_0	$\nu_{01\bar{1}}$	ν_{\min}	ν_{100}	ν_{\max}	p_1	p_2	Случай
Li и его сплавы с Mg 1.09-4.28 % ат. (4 сплава)									
Li	1.29	0.457	-0.530	-0.532	1.286	1.286	0.20	0	1
Li4.28aMg	1.29	0.460	-0.521	-0.522	1.296	1.296	0.17	0	1
Сплавы Mn (3 сплава)									
Mn8.8Ni5.9C	1.34	0.445	-0.682	-0.732	1.348	1.348	0.49	0	1
Mn28Cu	1.29	0.432	-0.600	-0.612	1.217	1.217	0.36	0	1
Сплавы Fe-Pd									
Fe28Pd	1.44	0.492	-0.813	-1.079	1.759	1.928	0.66	0.60	1+2
Fe34Pd	1.31	0.469	-0.539	-0.541	1.359	1.359	0.23	0	1
Сплавы Ni с Al, Cu и C (5 сплавов)									
Ni40Al	1.38	0.476	-0.690	-0.753	1.536	1.538	0.50	0.22	1+2
Ni12.5Cu8.6Al	1.32	0.465	-0.575	-0.582	1.367	1.367	0.31	0	1
Сплавы Cu с Zn 44.3-48.8 % ат. (8 сплавов)									
Cu44.3Zn	1.31	0.465	-0.551	-0.554	1.348	1.348	0.26	0	1
Cu48.8Zn	1.30	0.474	-0.503	-0.503	1.354	1.354	0.07	0	1
Сплавы Cu с Zn 14.3-20.8 % ат. и Al 17-12.9 % ат. (3 сплава)									
Cu14.3Zn17Al	1.34	0.464	-0.623	-0.646	1.407	1.407	0.40		1
Cu19.4Zn12.9Al	1.38	0.477	-0.685	-0.746	1.540	1.543	0.50	0.23	1+2
Сплав Cu с Sn									
Cu15Sn	1.30	0.469	-0.518	-0.519	1.339	1.339	0.16	0	1
Сплавы Zn с Cu 25-40 % ат. и Ni 10-25 % ат. (4 сплава)									
Zn2CuNi	1.35	0.472	-0.625	-0.649	1.452	1.452	0.41	0	1
Zn40Cu10Ni	1.29	0.462	-0.514	-0.514	1.303	1.303	0.14	0	1
Сплавы Zn с Cu 23-38.8 % ат. и Au 7.6-53 % ат. (8 сплавов)									

Таблица П.10 – Продолжение

Кристаллы	δ	ν_0	ν_{01}	ν_{\min}	ν_{100}	ν_{\max}	p_1	p_2	Случай
Zn53Au	1.31	0.477	-0.514	-0.515	1.384	1.384	0.14	0	1
Zn2CuAu	1.41	0.491	-0.726	-0.832	1.663	1.715	0.554	0.47	1+2
Сплавы Ag с Zn 42-50 % ат. (4 сплава)									
Ag42Zn	1.32	0.471	-0.557	-0.561	1.384	1.384	0.275	0	1
AgZn	1.29	0.464	-0.510	-0.510	1.306	1.306	0.12	0	1
Сплавы Ag с Cd 46.7-47.9 % ат. (2 сплава)									
Ag47.9Cd	1.34	0.474	-0.595	-0.608	1.435	1.435	0.35	0	1
Сплавы In с Tl 25-39.06 % ат., T=125-290 К (5 сплавов)									
In25Tl	1.45	0.496	-0.833	-1.171	1.803	2.07	0.69	0.66	1+2
In27Tl	1,44	0.498	-0.792	-1.018	1.779	1.982	0.62	0.63	1+2
In27Tl, 200 К	1.48	0.498	-0.931	-1.982	1.915	2.851	0.814	0.802	1+2
In27Tl, 125 К	1.50	0.499	-	-	-	-	-	-	-
In39.06Tl	1.36	0.491	-0.591	-0.603	1.534	1.536	0.348	0.214	1+2
Шпинель NiCr ₂ O ₄									
NiCr ₂ O ₄	1.43	0.493	-0.778	-0.965	1.731	1.853	0.619	0.566	1+2

Таблица П.11: Экстремальные значения модуля Юнга для гексагональных кристаллов и значения угла θ_0 , при которых достигается значение E_3 .

Кристаллы	E_1		E_2		E_3		θ_0
	ГПа		ГПа		ГПа		град
$\text{Al}(\text{IO}_3)_3 \cdot 2\text{HIO}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	22.4	min	30.1	min	38.4	max	51.8
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$	139	max	114	max	107	min	54.7
	117	max	112	max	107	min	50.0
$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$	143	max	116	max	114	min	60.9
$\text{Ba}(\text{NO}_2) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	22.2	min	37.0	max	-	-	-
$\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$	191	max	234	max	187	min	29.7
$\text{BaSc}_{1.05}\text{Fe}_{10.95}\text{O}_{19}$	169	min	229	max	-	-	-
$\text{BaSc}_{1.25}\text{Fe}_{10.75}\text{O}_{19}$	164	min	226	max	-	-	-
$\text{BaSc}_{1.65}\text{Fe}_{10.35}\text{O}_{19}$	164	min	221	max	-	-	-
$\text{BaSc}_{2.2}\text{Fe}_{9.8}\text{O}_{19}$	164	min	214	max	-	-	-
$\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$	221	max	237	max	184	min	42.9
Be	348	max	290	min	-	-	-
Be-Cu at 0% Cu	356	max	293	min	-	-	-
Be-Cu at 1.1% Cu	360	max	292	min	-	-	-
Be-Cu at 2.4% Cu	355	max	290	min	-	-	-
BeO	451	max	397	max	379	min	54.0
	465	max	417	max	373	min	49.6
$\text{K}(\text{Mg},\text{Fe})_3\text{-AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH},\text{F})_2$	52.9	max	179	max	20.5	min	42.4
$\text{Bi}_2\text{Ge}_3\text{O}_9$	59.9	min	98.0	max	-	-	-
BN_3	136	min	138	min	165	max	45.5
Cd	28.9	min	80.6	max	-	-	-
Cd-Mg at 0.07% Mg	32.4	min	82.0	max	-	-	-
Cd-Mg at 0.5% Mg	30.4	min	82.0	max	-	-	-
Cd-Mg at 3.33% Mg	29.9	min	76.9	max	-	-	-
Cd-Mg at 14.01% Mg	22.4	min	47.8	max	-	-	-
Cd-Mg 25(Cd3Mg)	31.7	max	32.4	max	28.4	min	43.9
Cd-Mg 33.3(Cd3Mg)	35.1	max	41.3	max	34.1	min	32.3
CdSe	59.2	max	43.1	max	37.9	min	52.7
	57.6	max	42.8	max	37.5	min	52.3
	59.9	max	43.1	max	37.9	min	52.9
CdSe	59.5	max	43.3	max	38.9	min	53.7
$\text{CdSe}_{0.95}\text{Te}_{0.05}$	61.0	max	43.7	max	39.5	min	54.2
$\text{CdSe}_{0.9}\text{Te}_{0.1}$	57.5	max	41.7	max	39.5	min	57.5
$\text{CdSe}_{0.7}\text{Te}_{0.3}$	58.8	max	42.0	max	38.2	min	54.5
$\text{CdSe}_{0.55}\text{Te}_{0.45}$	57.1	max	38.5	max	34.0	min	53.8
CdS	62.9	max	48.8	max	42.7	min	51.8
	58.9	max	48.3	max	34.4	min	47.6

Таблица П.11 – Продолжение

Кристаллы	E_1		E_2		E_3		θ_0
	ГПа		ГПа		ГПа		град
	63.3	max	49.0	max	43.9	min	52.6
	64.0	max	51.8	max	43.3	min	49.9
	65.9	max	52.3	max	43.5	min	50.0
CdTe	51.5	max	38.8	max	33.0	min	51.3
Cd _{0.9982} Zn _{0.018}	28.1	min	79.7	max	-	-	-
Cd _{0.952} Zn _{0.048}	28.7	min	82.4	max	-	-	-
Cd _{0.751} Zn _{0.249}	31.4	min	87.0	max	-	-	-
CaMg ₂	55.6	max	49.8	max	46.2	min	51.1
(Na ₂ Ca) ₄ (AlSiO ₄) ₆ ·CO ₃ ·nH ₂ O	76.9	max	50.0	min	-	-	-
Na ₆ Ca(AlSiO ₄) ₆ CO ₃ ·nH ₂ O	82.6	max	57.5	max	53.5	min	56.4
	81.3	max	84.0	max	62.9	min	44.2
CeF ₃	195	max	131	max	100	min	50.2
CeNi ₅	210	max	152	min	-	-	-
CsCuCl ₃	41.2	max	23.7	max	16.7	min	50.0
	41.5	max	23.3	max	16.6	min	50.3
CsS ₂ O ₆	14.6	min	21.0	max	-	-	-
CsNiCl ₃	58.5	max	30.1	max	18.8	min	49.2
CsNiF ₃	90.9	max	34.5	max	15.9	min	48.1
	94.3	max	39.2	max	8.9	min	46.1
Co	271	max	196	max	185	min	57.3
Co-32 wt% Ni	321	min	240	min	475	max	39.9
CuCl	40.0	max	18.9	max	18.2	min	63.3
Dy	69.0	max	62.5	max	60.8	min	55.2
Er	75.8	max	70.9	max	68.1	min	51.7
Gd	62.1	max	54.6	max	52.7	min	55.2
	62.1	max	55.6	max	53.0	min	53.1
Gd-40 at%Y	67.1	max	57.1	max	55.0	min	56.1
GaN	150	max	196	max	82.6	min	43.2
GaSe	33.6	max	95.2	max	28.5	min	34.2
GaS	37.7	max	111	max	30.2	min	35.9
C (графит)	36.4	max	1020	max	14.2	min	41.6
C(NH ₂) ₃ I	5.95	max	16.3	max	5.85	min	21.5
Hf	163	max	140	max	139	min	65.5
Ho	71.4	max	65.4	max	63.9	min	55.9
In ₂ Bi	35.2	max	16.4	min	-	-	-
InN	82.6	max	104	max	35.5	min	44.0
InSe	25.8	min	86.2	max	-	-	-
	15.5	min	44.4	min	44.5	max	82.4
LaF ₃	196	max	133	max	100	min	50.0

Таблица П.11 – Продолжение

Кристаллы	E_1		E_2		E_3		θ_0
	ГПа		ГПа		ГПа		град
Pb ₅ Ge ₃ O ₁₁	82.0	max	56.2	max	54.0	min	59.9
Pb ₅ GeO ₄ (VO ₄) ₂	61.7	max	57.1	max	48.6	min	47.5
Pb ₅ SiO ₄ (VO ₄) ₂	58.5	max	56.82	max	56.81	min	73.2
β -LiAlSiO ₄	67.1	min	112	min	138	max	55.5
α -LiIO ₃	46.7	max	66.2	max	45.7	min	27.5
	58.1	min	65.8	min	69.9	max	53.3
LiClO ₄ ·3H ₂ O	23.8	max	32.5	max	19.8	min	39.0
LiClO ₄ ·3D ₂ O	23.6	max	32.5	max	19.8	min	38.6
LiKSO ₄	54.05	min	40.2	min	54.08	max	11.0
Lu at 0.6% H	67.6	max	69.9	max	67.1	min	32.7
Lu at 1.5% H	68.0	max	71.4	max	67.4	min	32.0
Mg	50.8	max	45.5	max	42.9	min	52.2
Mg-Li at 0%Li	50.5	max	45.2	max	42.7	min	52.2
Mg-Li at 1.51%Li	50.3	max	45.0	max	42.5	min	52.2
Mg-Li at 3.02%Li	50.0	max	44.8	max	42.3	min	52.0
Mg-Li at 5.10%Li	49.5	max	44.4	max	41.9	min	52.1
Mg-Li at 7.00%Li	49.0	max	44.1	max	41.6	min	52.0
Mg-Li at 10.0%Li	48.5	max	43.5	max	41.1	min	52.2
Mg-Li at 12.05%Li	48.1	max	43.3	max	40.8	min	51.8
Mg-Li at 14.15%Li	47.6	max	42.7	max	40.3	min	52.1
Mg-Li at 15.94%Li	47.2	max	42.4	max	39.9	min	51.9
Mg-E E at 0%	50.8	max	45.5	max	42.9	min	52.2
Mg-E Ag at 0.07%	51.5	max	45.2	max	42.9	min	53.3
Mg-E Ag at 0.26%	50.8	max	45.5	max	43.3	min	52.9
Mg-E Ag at 0.37%	50.8	max	45.5	max	42.9	min	52.2
Mg-E Ag at 0%	50.5	max	45.2	max	42.7	min	52.1
Mg-E Ag at 0.26%	50.8	max	45.5	max	43.1	min	52.5
Mg-E Ag at 0.37%	51.0	max	45.5	max	43.1	min	52.8
Mg-E Sn at 0.21%	51.0	max	45.2	max	42.8	min	52.6
Mg-E Sn at 0.27%	50.8	max	45.2	max	42.9	min	52.6
Mg-E Sn at 0.43%	50.8	max	45.2	max	42.8	min	52.5
Mg-E Sn at 0.52%	50.8	max	45.0	max	42.5	min	52.5
Mg-E Sn at 0.72%	50.0	max	45.2	max	42.6	min	51.5
Mg-E Sn at 1.00%	49.8	max	44.8	max	42.2	min	51.7
Mg-E Sn at 0.21%	50.5	max	45.2	max	42.7	min	52.2
Mg-E Sn at 0.46%	50.3	max	45.0	max	42.5	min	52.2
Mg-E Sn at 0.67%	50.3	max	45.2	max	42.7	min	52.0
Mg-E Sn at 0.94%	50.5	max	45.0	max	42.4	min	52.2
Mg-E In at 0.83%	52.4	max	45.0	max	42.5	min	53.5

Таблица П.11 – Продолжение

Кристаллы	E_1		E_2		E_3		θ_0
	ГПа		ГПа		ГПа		град
Mg-E In at 1.96%	50.3	max	45.0	max	42.4	min	52.0
Mg-E In at 1.02%	51.0	max	45.0	max	42.6	min	52.8
Mg-E In at 1.35%	50.3	max	45.0	max	42.5	min	52.2
Mg-E In at 1.96%	50.3	max	44.8	max	42.3	min	52.3
MgZn ₂	107	max	79.4	max	69.7	min	52.4
	107	max	77.9	max	67.4	min	52.2
MnAs	108	max	38.5	min	-	-	-
Mn ₅ Si ₃	192	max	149	min	-	-	-
MoS ₂	45.2	max	209	max	44.9	min	17.9
KAl ₂ Si ₃ AlO ₁₀ (OH,F) ₂	52.9	max	167	max	37.2	min	38.2
Nd	54.1	max	42.2	max	39.0	min	54.2
NdCo ₅	149	max	111	min	-	-	-
Na ₃ KAl ₄ Si ₄ O ₁₆	116	max	58.8	min	-	-	-
NbF ₃	208	max	141	max	111	min	50.6
C ₇ H ₁₂	1.64	min	0.74	min	1.84	max	28.2
KMg ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH,F) ₂	45.5	max	164	max	19.7	min	41.9
	48.8	max	170	max	22.3	min	41.6
Pr	51.8	max	37.6	max	34.9	min	55.6
PrF ₃	202	max	134	max	103	min	50.5
Re	588	max	474	max	429	min	52.4
RbMnCl ₃	42.7	max	35.3	max	10.1	min	45.5
RbNiCl ₃	50.8	max	28.1	max	9.16	min	46.4
Ru	550	max	479	max	459	min	54.9
SmCo ₅	167	max	129	max	128	min	64.8
Sc	94.3	max	80.0	max	72.4	min	51.4
SiC	556	max	481	max	421	min	49.7
Ag ₂ Al	120	max	84.0	min	-	-	-
β -AgI	20.0	max	12.5	max	10.8	min	53.7
Tc	345	min	313	min	402	max	41.1
Tb	61.0	max	55.9	max	54.5	min	55.5
	64.1	max	57.5	max	55.3	min	54.0
Tb-50% Ho	70.4	max	61.0	max	58.3	min	54.6
Tl	30.8	max	9.62	min	-	-	-
	32.2	max	9.62	min	-	-	-
Ti	146	max	103	min	-	-	-
TiB ₂	254	min	388	min	510	max	53.2
WC	826.4	min	595	min	826.8	max	10.0
UPt ₃	159	max	200	max	119	min	41.6
Y	69.4	max	64.9	max	60.9	min	49.9

Таблица П.11 – Продолжение

Кристаллы	E_1		E_2		E_3		θ_0
	ГПа		ГПа		ГПа		град
	63.7	max	63.7	max	62.7	min	45.0
Zn	36.1	min	122	min	126	max	71.2
ZnO	148	max	128	max	121	min	54.1
	139	max	126	max	122	min	53.3
	179	max	131	max	125	min	57.8
ZnSe	100	max	84.7	max	69.6	min	48.8
α -ZnS	116	max	90.9	max	78.9	min	51.3
ZnS	116	max	89.5	max	78.4	min	51.7
	116	max	89.7	max	78.7	min	51.9
ZnS-MgS	113	max	88.3	max	76.0	min	51.1
	116	max	88.7	max	76.3	min	51.3
ZnTe	78.1	max	66.2	max	55.9	min	49.3
α -Zr	125	max	99.0	max	90.9	min	53.5
Zr-O at 0%O	124	max	98.0	max	95.4	min	59.6
Zr-O at 7%O	121	min	110	min	122	max	28.9
Zr-O at 8%O	121	min	112	min	127	max	38.8
Zr-O at 24%O	164	min	159	min	192	max	43.5

Таблица П.12: Экстремальные значения коэффициента Пуассона для гексагональных кристаллов.

Кристаллы	ν_1		ν_2		ν_3		ν_4		ν_5		ν_6		ν_7		ν_8	
Al(IO ₃) ₃ ·2HIO ₃ ·6H ₂ O	0.37	-	0.50	max	0.11	min	-	-	0.17	min	0.41	max	-	-	-	-
Ca ₁₀ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	0.31	-	0.25	-	0.205		0.37	max	-	-	-	-	0.20	min	-	-
	0.45	-	0.43	-	-0.12	min	0.48	max	-	-	-	-	-	-	-	-
Ca ₁₀ (PO ₄) ₆ F ₂	0.30	-	0.24	-	0.232	-	0.34	max	-	-	-	-	0.229	min	-	-
Ba(NO ₂) ₂ ·2H ₂ O	0.22	min	0.36	-	0.39	max	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
BaFe ₁₂ O ₁₉	0.24	min	0.29	min	0.36	max	0.33	max	-	-	-	-	-	-	0.32	-
BaSc _{1.05} Fe _{10.95} O ₁₉	0.23	min	0.32	min	0.35	max	0.32	-	-	-	-	-	-	-	-	-
BaSc _{1.25} Fe _{10.75} O ₁₉	0.23	min	0.32	min	0.35	max	0.32	-	-	-	-	-	-	-	-	-
BaSc _{1.65} Fe _{10.35} O ₁₉	0.23	min	0.31	min	0.36	max	0.32	-	-	-	-	-	-	-	-	-
BaSc _{2.2} Fe _{9.8} O ₁₉	0.23	min	0.31	min	0.37	max	0.31	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Be ₃ Al ₂ Si ₆ O ₁₈	0.21	-	0.22	min	0.30	max	0.37	max	-	-	-	-	0.20	min	0.27	-
Be	0.02	-	0.01	-	0.08	max	-	-	-0.005	min	-	-	-	-	-	-
Be-Cu at 0% Cu	0.00	-	0.00	-	0.09	max	-0.03	min	-	-	-	-	-	-	-	-
Be-Cu at 1.1% Cu	0.00	-	0.00	-	0.09	max	0.00	-	-0.005	min	-	-	-	-	-	-
Be-Cu at 2.4% Cu	0.011	-	0.009	-	0.102	max	-	-	-0.04	min	-	-	-	-	-	-
BeO	0.18	-	0.16	min	0.32	max	0.25	max	-	-	-	-	-	-	0.24	-
	0.15	-	0.13	min	0.25	max	0.27	max	-	-	-	-	-	-	0.21	-
K(Mg,Fe) ₃ - AlSi ₃ O ₁₀ (OH,F) ₂	0.06	-	0.20	-	0.16	-	0.79	max	-	-	-	-	0.02	min	-	-
Bi ₂ Ge ₃ O ₉	0.23	-	0.37	max	0.08	min	-	-	0.22	-	-	-	-	-	-	-
BN ₃	0.39	-	0.39	-	0.55	-	-	-	0.27	min	0.58	max	-	-	-	-
Cd	0.26	-	0.73	max	0.10	min	-	-	0.25	min	0.27	max	-	-	-	-
Cd-Mg at 0.07% Mg	0.26	-	0.65	max	0.13	min	-	-	0.25	min	0.26	max	-	-	-	-
Cd-Mg at 0.5% Mg	0.22	-	0.58	max	0.17	min	-	-	0.19	min	0.23	max	-	-	-	-

Таблица П.12 – Продолжение

Кристаллы	ν_1		ν_2		ν_3		ν_4		ν_5		ν_6		ν_7		ν_8	
	0.089	min	0.092	min	0.45	max	0.31	max	-	-	-	-	-	-	0.28	-
CeF ₃	0.24	-	0.16	min	0.43	max	0.48	max	-	-	-	-	0.21	min	0.33	-
CeNi ₅	0.29	-	0.21	min	0.41	max	0.30	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CsCuCl ₃	0.26	-	0.15	min	0.34	max	0.55	max	-	-	-	-	0.17	min	0.28	-
	0.20	-	0.11	min	0.37	max	0.53	max	-	-	-	-	0.16	min	0.29	-
CsS ₂ O ₆	0.18	-	0.26	-	0.45	max	-	-	0.14	min	-	-	-	-	-	-
CsNiCl ₃	0.20	-	0.11	min	0.35	max	0.60	max	-	-	-	-	0.13	min	0.28	-
CsNiF ₃	0.16	-	0.06	min	0.45	max	0.72	max	-	-	-	-	0.10	min	0.32	-
	0.12	-	0.05	min	0.33	max	0.86	max	-	-	-	-	0.04	min	0.26	-
Co	0.25	-	0.18	min	0.46	max	0.35	max	-	-	-	-	-	-	-	-
Co-32 wt% Ni	1.96	-	1.46	min	4.51	-	2.23	-	-	-	5.93	max	-	-	-	-
CuCl	0.36	-	0.17	min	0.68	max	0.44	max	-	-	-	-	0.36	-	0.42	-
Dy	0.22	-	0.20	min	0.29	max	0.26	max	-	-	-	-	-	-	0.25	-
Er	0.20	-	0.18	min	0.30	max	0.24	max	-	-	-	-	-	-	0.24	-
Gd	0.24	-	0.21	min	0.31	max	0.29	max	-	-	-	-	0.24	min	0.27	-
	0.22	-	0.20	min	0.32	max	0.28	max	-	-	-	-	-	-	0.27	-
Gd-40 at%Y	0.17	-	0.15	min	0.33	max	0.24	max	-	-	-	-	-	-	0.24	-
GaN	0.37	-	0.49	-	0.18	-	0.72	max	-	-	-	-	0.13	min	-	-
GaSe	0.09	min	0.26	-	0.26	-	0.50	max	-	-	-	-	-	-	0.26	-
GaS	0.08	-	0.24	min	0.26	max	0.54	max	-	-	-	-	0.07	min	0.25	-
C (графит)	0.01	-	0.34	-	0.16	-	0.86	max	-	-	-	-	0.004	min	-	-
C(NH ₂) ₃ I	0.152	-	0.42	-	0.40	-	0.46	max	-	-	-	-	0.149	min	-	-
Hf	0.26	-	0.22	min	0.35	max	0.28	max	-	-	-	-	-	-	-	-
Ho	0.21	-	0.19	min	0.28	max	0.24	max	-	-	-	-	-	-	0.24	-
In ₂ Bi	0.33	-	0.15	min	0.72	max	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
InN	0.41	-	0.52	-	0.22	-	0.79	max	-	-	-	-	0.12	min	-	-

Таблица П.12 – Продолжение

Кристаллы	ν_1		ν_2		ν_3		ν_4		ν_5		ν_6		ν_7		ν_8	
InSe	0.19	-	0.65	max	0.22	-	-	-	-	-	-	-	0.17	min	-	-
	0.33	-	0.93	max	-0.03	min	-	-	0.28	min	0.34	max	-	-	-	-
LaF ₃	0.22	-	0.15	min	0.44	max	0.47	max	-	-	-	-	0.20	min	0.33	-
Pb ₅ Ge ₃ O ₁₁	0.20	-	0.14	min	0.33	max	0.30	max	-	-	-	-	0.20	min	0.26	-
Pb ₅ GeO ₄ (VO ₄) ₂	0.35	-	0.32	-	0.14	min	0.45	max	-	-	-	-	-	-	-	-
Pb ₅ SiO ₄ (VO ₄) ₂	0.415	-	0.40	-	0.06	min	0.416	max	-	-	-	-	-	-	-	-
β -LiAlSiO ₄	0.35	-	0.58	max	0.14	min	-	-	0.13	min	0.42	max	-	-	-	-
α -LiIO ₃	0.1869	-	0.26	min	0.31	max	0.33	max	-	-	-	-	0.1876	min	0.29	-
	0.25	-	0.28	-	0.316	-	-	-	0.18	min	0.325	max	-	-	-	-
LiClO ₄ ·3H ₂ O	0.13	min	0.18	min	0.40	max	0.39	max	-	-	-	-	-	-	0.30	-
LiClO ₄ ·3D ₂ O	0.13	min	0.18	min	0.40	max	0.38	max	-	-	-	-	-	-	0.30	-
LiKSO ₄	0.28	-	0.20	-	0.4137	-	-	-	0.17	min	0.414	max	-	-	-	-
Lu at 0.6% H	0.237	min	0.245	min	0.29	max	0.26	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lu at 1.5% H	0.22	min	0.24	min	0.30	max	0.25	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Mg	0.25	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-Li at 0%Li	0.25	-	0.23	min	0.36	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-Li at 1.51%Li	0.26	-	0.23	min	0.36	max	0.32	max	-	-	-	-	0.26	min	0.30	-
Mg-Li at 3.02%Li	0.26	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-Li at 5.10%Li	0.26	-	0.23	min	0.36	max	0.32	max	-	-	-	-	0.26	min	0.30	-
Mg-Li at 7.00%Li	0.25	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-Li at 10.0%Li	0.26	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.26	min	0.30	-
Mg-Li at 12.05%Li	0.25	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-Li at 14.15%Li	0.26	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.26	min	0.30	-
Mg-Li at 15.94%Li	0.25	-	0.23	min	0.35	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-E E at 0%	0.25	-	0.23	min	0.36	max	0.32	max	-	-	-	-	0.25	min	0.30	-
Mg-E Ag at 0.07%	0.26	-	0.23	min	0.36	max	0.32	max	-	-	-	-	0.26	min	0.30	-

Таблица П.12 – Продолжение

Кристаллы	ν_1		ν_2		ν_3		ν_4		ν_5		ν_6		ν_7		ν_8	
KAl ₂ Si ₃ AlO ₁₀ (OH,F) ₂	0.06	-	0.20	min	0.22	max	0.59	max	-	-	-	-	0.05	min	0.21	-
Nd	0.21	-	0.16	min	0.40	max	0.32	max	-	-	-	-	-	-	0.30	-
NdCo ₅	0.35	-	0.26	min	0.41	max	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Na ₃ KAl ₄ Si ₄ O ₁₆	0.19	-	0.094	-	0.46	max	-	-	0.088	min	-	-	-	-	-	-
NbF ₃	0.23	-	0.15	min	0.44	max	0.46	max	-	-	-	-	0.21	min	0.33	-
C ₇ H ₁₂	0.39	-	0.18	-	0.76	-	-	-	-0.15	min	0.99	max	-	-	-	-
KMg ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH,F) ₂	0.12	-	0.44	-	0.11	-	0.80	max	-	-	-	-	0.03	min	-	-
	0.07	-	0.25	-	0.15	-	0.76	max	-	-	-	-	0.03	min	-	-
Pr	0.20	-	0.14	min	0.42	max	0.32	max	-	-	-	-	-	-	0.30	-
PrF ₃	0.22	-	0.15	min	0.45	max	0.47	max	-	-	-	-	0.21	min	0.34	-
Re	0.24	-	0.19	min	0.38	max	0.35	max	-	-	-	-	0.23	min	0.30	-
RbMnCl ₃	0.29	-	0.24	min	0.32	max	0.81	max	-	-	-	-	0.08	min	0.29	-
RbNiCl ₃	0.49	-	0.27	-	0.12	-	0.84	max	-	-	-	-	0.06	min	-	-
Ru	0.23	-	0.20	min	0.278	max	0.284	max	-	-	-	-	0.22	min	0.25	-
SmCo ₅	0.35	-	0.27	min	0.381	max	0.377	max	-	-	-	-	0.33	min	0.34	-
Sc	0.21	-	0.18	min	0.34	max	0.32	max	-	-	-	-	0.21	min	0.28	-
SiC	0.09	-	0.08	min	0.18	max	0.25	max	-	-	-	-	-	-	0.16	-
Ag ₂ Al	0.34	-	0.24	min	0.48	max	0.35	-	-	-	-	-	-	-	-	-
β -AgI	0.38	-	0.24	min	0.56	max	0.50	max	-	-	-	-	0.33	min	0.42	-
Tc	0.31	-	0.28	-	0.34	-	-	-	0.14	min	0.40	max	-	-	-	-
Tb	0.25	-	0.23	min	0.279	max	0.284	max	-	-	-	-	0.25	min	0.26	-
	0.23	-	0.21	min	0.30	max	0.28	max	-	-	-	-	0.23	min	0.26	-
Tb-50% Ho	0.17	-	0.15	min	0.29	max	0.24	max	-	-	-	-	-	-	0.23	-
Tl	0.38	-	0.12	-	0.779	-	-	-	0.10	min	0.783	max	-	-	-	-
	0.37	-	0.11	-	0.798	-	-	-	0.10	min	0.799	max	-	-	-	-
Ti	0.27	-	0.19	min	0.49	max	0.27	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Таблица П.12 – Продолжение

Кристаллы	ν_1		ν_2		ν_3		ν_4		ν_5		ν_6		ν_7		ν_8	
TiB ₂	0.29	-	0.45	max	0.38	min	-	-	-0.03	min	0.54	max	-	-	0.40	-
WC	0.27	-	0.20	-	0.28	-	-	-	0.15	min	0.30	max	-	-	-	-
UPt ₃	0.38	-	0.48	-	0.19	-	0.61	max	-	-	-	-	0.18	min	-	-
Y	0.19	-	0.18	min	0.33	max	0.26	max	-	-	-	-	-	-	0.25	-
	0.261	-	0.261	min	0.27	max	-	-	-	-	-	-	0.2609	min	-	-
Zn	0.25	-	0.85	max	-0.07	min	-	-	0.07	min	0.28	max	-	-	-	-
ZnO	0.32	-	0.27	min	0.44	max	0.37	max	-	-	-	-	0.32	min	0.36	-
	0.33	-	0.30	min	0.42	max	0.36	max	-	-	-	-	0.33	min	0.36	-
	0.30	-	0.22	min	0.47	max	0.38	max	-	-	-	-	0.30	min	0.36	-
ZnSe	0.23	-	0.19	min	0.35	max	0.40	max	-	-	-	-	0.21	min	0.29	-
α -ZnS	0.24	-	0.19	min	0.41	max	0.39	max	-	-	-	-	0.24	min	0.32	-
ZnS	0.26	-	0.20	min	0.398	max	0.395	max	-	-	-	-	0.25	min	0.32	-
	0.26	-	0.20	min	0.40	max	0.39	max	-	-	-	-	0.25	min	0.32	-
ZnS-MgS	0.27	-	0.21	min	0.44	max	0.41	max	-	-	-	-	0.26	min	0.34	-
	0.26	-	0.20	min	0.45	max	0.41	max	-	-	-	-	0.26	min	0.34	-
ZnTe	0.24	-	0.21	min	0.36	max	0.39	max	-	-	-	-	0.23	min	0.30	-
α -Zr	0.30	-	0.24	min	0.40	max	0.39	max	-	-	-	-	0.28	min	0.34	-
Zr-O at 0%O	0.32	-	0.25	min	0.40	max	0.36	max	-	-	-	-	0.31	min	0.34	-
Zr-O at 7%O	0.35	max	0.32	max	0.27	min	-	-	0.30	min	-	-	-	-	-	-
Zr-O at 8%O	0.36	max	0.34	max	0.22	min	-	-	0.29	min	-	-	-	-	-	-
Zr-O at 24%O	0.39	max	0.38	max	0.10	min	-	-	0.27	min	-	-	-	-	-	-

Таблица П.13: Экстремальные значения модуля сдвига для гексагональных кристаллов и значения углов θ_0 , ψ_0 (в градусах), при которых достигается значение G_4 , а также значения безразмерных параметров Π_3 , Π_{03} и $\alpha_3 = \Pi_{03}(2\Pi_{03} - \Pi_3)$.

Кристаллы	Π_{03}	Π_3	α_3	G_1 , ГПа	G_2 , ГПа	G_3 , ГПа	G_4 , ГПа	θ_0	ψ_0
Al(IO ₃) ₃ ·2HIO ₃ ·6H ₂ O	0.78	0.18	1.08	16.0	13.6	9.0	13.7	76.1	75.6
Ca ₁₀ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	-0.19	-0.16	0.04	39.7	47.2	49.0	45.4	62.8	59.1
	-0.09	-0.43	-0.02	36.2	63.5	39.7	-	-	-
Ca ₁₀ (PO ₄) ₆ F ₂	-0.13	-0.07	0.03	43.7	47.1	50.4	46.6	68.3	66.6
Ba(NO ₂) ₂ ·2H ₂ O	0.02	-0.16	0.01	11.2	13.3	10.9	-	-	-
BaFe ₁₂ O ₁₉	-0.14	-0.17	0.02	71.9	86.2	83.4	81.4	56.7	49.0
BaSc _{1.05} Fe _{10.95} O ₁₉	-0.07	-0.16	0.00	70.9	84.7	76.6	-	-	-
BaSc _{1.25} Fe _{10.75} O ₁₉	-0.06	-0.16	0.00	69.9	83.5	74.7	-	-	-
BaSc _{1.65} Fe _{10.35} O ₁₉	-0.08	-0.16	0.00	68.5	81.4	74.3	-	-	-
BaSc _{2.2} Fe _{9.8} O ₁₉	-0.08	-0.14	0.00	67.6	78.2	73.3	73.2	48.5	27.8
Be ₃ Al ₂ Si ₆ O ₁₈	-0.28	-0.26	0.09	67.6	90.9	94.1	84.3	61.5	57.1
Be	0.04	0.21	-0.01	163	134	156	-	-	-
Be-Cu at 0% Cu	0.06	0.27	-0.01	171	135	161	-	-	-
Be-Cu at 1.1% Cu	0.05	0.27	-0.01	170	134	161	-	-	-
Be-Cu at 2.4% Cu	0.10	0.31	-0.01	173	132	158	-	-	-
BeO	-0.15	0.02	0.05	153	151	180	-	-	-
	-0.23	-0.11	0.08	148	167	193	164	69.6	68.1
K(Mg,Fe) ₃ - AlSi ₃ O ₁₀ (OH,F) ₂	-0.84	-0.92	0.65	5.80	76.9	37.5	17.7	58.5	52.1
Bi ₂ Ge ₃ O ₉	0.11	-0.29	0.06	32.2	45.5	29.0	-	-	-
BN ₃	0.32	0.46	0.06	64.9	44.5	49.2	50.2	53.2	41.5
Cd	0.23	-0.49	0.21	18.8	36.8	15.3	-	-	-
Cd-Mg at 0.07% Mg	0.19	-0.44	0.16	20.3	36.2	17.0	-	-	-
Cd-Mg at 0.5% Mg	0.23	-0.41	0.20	20.8	35.0	16.9	-	-	-
Cd-Mg at 3.33% Mg	0.24	-0.39	0.21	20.5	33.3	16.5	-	-	-
Cd-Mg at 14.01% Mg	0.29	-0.42	0.29	13.9	23.8	10.8	-	-	-
Cd-Mg 25(Cd3Mg)	-0.17	-0.07	0.04	10.2	11.0	12.2	10.9	70.8	69.6
Cd-Mg 33.3(Cd3Mg)	-0.13	-0.04	0.03	13.3	13.8	15.4	13.8	74.9	74.4
CdSe	-0.32	-0.08	0.17	13.4	14.5	19.6	14.5	75.5	75.0
	-0.31	-0.09	0.17	13.2	14.5	19.2	14.4	74.6	74.0
	-0.32	-0.07	0.18	13.4	14.5	19.7	14.4	76.2	75.8
CdSe	-0.29	-0.05	0.16	13.9	14.7	19.6	14.6	77.7	77.5
CdSe _{0.95} Te _{0.05}	-0.30	-0.03	0.17	14.5	15.0	20.7	15.0	80.6	80.5
CdSe _{0.9} Te _{0.1}	-0.23	0.10	0.13	14.9	13.6	19.5	-	-	-
CdSe _{0.7} Te _{0.3}	-0.29	-0.02	0.16	13.8	14.0	19.4	14.0	82.8	82.8
CdSe _{0.55} Te _{0.45}	-0.35	-0.01	0.24	12.3	12.5	18.9	12.5	84.6	84.6

Таблица П.13 – Продолжение

Кристаллы	Π_{03}	Π_3	α_3	$G_1,$ ГПа	$G_2,$ ГПа	$G_3,$ ГПа	$G_4,$ ГПа	θ_0	ψ_0
CdS	-0.30	-0.09	0.15	15.0	16.4	21.3	16.3	74.1	73.5
	-0.61	-0.08	0.69	15.0	16.3	38.4	16.3	79.7	79.6
	-0.27	-0.04	0.14	15.6	16.3	21.4	16.3	78.5	78.3
	-0.32	-0.14	0.16	14.9	17.4	22.1	17.1	70.5	69.3
	-0.34	-0.14	0.18	15.0	17.4	22.7	17.1	71.4	70.3
CdTe	-0.34	-0.12	0.19	11.6	13.2	17.7	13.0	73.0	72.3
Cd _{0.9982} Zn _{0.018}	0.36	-0.47	0.43	20.1	37.8	14.8	-	-	-
Cd _{0.952} Zn _{0.048}	0.31	-0.47	0.33	20.0	37.8	15.3	-	-	-
Cd _{0.751} Zn _{0.249}	0.20	-0.47	0.18	20.3	38.6	16.9	-	-	-
CaMg ₂	-0.18	-0.10	0.05	18.1	20.2	22.0	19.8	67.5	65.5
(Na ₂ Ca) ₄ (AlSiO ₄) ₆ - CO ₃ ·nH ₂ O	-0.07	-0.05	0.01	23.8	25.0	25.6	24.8	65.9	63.4
Na ₆ Ca(AlSiO ₄) ₆ CO ₃ nH ₂ O	-0.30	-0.69	-0.03	21.7	70.4	31.0	-	-	-
	-0.37	-0.17	0.21	24.0	29.0	37.9	28.3	70.1	68.7
CeF ₃	-0.48	-0.25	0.34	34.2	45.7	65.7	43.8	68.8	67.2
CeNi ₅	-0.09	0.19	0.03	64.5	54.1	70.7	-	-	-
CsCuCl ₃	-0.57	-0.38	0.43	5.5	8.8	12.7	8.0	65.9	63.4
	-0.57	-0.35	0.46	5.6	8.5	13.0	7.9	67.1	65.0
CsS ₂ O ₆	0.15	0.13	0.02	8.2	7.2	7.1	7.4	61.7	57.5
CsNiCl ₃	-0.66	-0.46	0.56	6.0	11.2	17.5	9.7	65.1	62.4
CsNiF ₃	-0.80	-0.61	0.78	4.7	11.9	22.9	9.2	64.1	61.0
	-0.91	-0.84	0.89	2.4	14.8	25.8	6.7	61.3	56.8
Co	-0.24	0.06	0.13	70.9	66.8	93.6	-	-	-
CuCl	-0.33	0.24	0.30	7.0	5.6	10.4	-	-	-
Dy	-0.10	0.00	0.02	24.3	24.3	27.1	24.3	90.0	90.0
Er	-0.11	0.01	0.02	27.5	27.3	30.8	-	-	-
Gd	-0.13	-0.01	0.03	20.7	20.8	23.8	20.8	83.7	83.7
	-0.14	-0.01	0.04	20.8	21.1	24.2	21.1	80.8	80.6
Gd-40 at%Y	-0.16	0.05	0.06	22.5	21.5	26.6	-	-	-
GaN	-0.60	-0.71	0.29	24.1	83.1	59.7	48.1	56.9	49.4
GaSe	-0.54	-0.73	0.18	10.2	37.9	21.9	19.6	54.2	43.9
GaS	-0.58	-0.76	0.23	10.4	44.3	25.1	21.5	55.1	45.7
С (графит)	-0.88	-0.99	0.69	4.00	439	34.3	13.9	58.0	51.4
C(NH ₂) ₃ I	-0.34	-0.60	0.03	2.30	5.80	3.60	3.50	48.7	28.4
Hf	0.47	1.18	-0.12	55.6	25.5	37.8	-	-	-
Ho	-0.09	0.02	0.02	25.9	25.5	28.5	-	-	-
In ₂ Bi	0.04	1.01	-0.03	9.62	4.79	9.28	-	-	-
InN	-0.69	-0.77	0.41	9.90	42.7	31.5	22.2	58.1	51.4
InSe	-0.24	-0.67	-0.05	11.7	35.2	15.3	-	-	-

Таблица П.13 – Продолжение

Кристаллы	Π_{03}	Π_3	α_3	$G_1,$ ГПа	$G_2,$ ГПа	$G_3,$ ГПа	$G_4,$ ГПа	θ_0	ψ_0
	0.51	-0.49	0.76	11.7	22.9	7.80	-	-	-
LaF ₃	-0.49	-0.25	0.35	34.5	46.1	67.3	44.2	69.0	67.4
Pb ₅ Ge ₃ O ₁₁	-0.24	0.02	0.12	21.6	21.2	28.6	-	-	-
Pb ₅ GeO ₄ (VO ₄) ₂	-0.25	-0.33	0.04	16.8	25.1	22.3	21.5	54.6	44.6
Pb ₅ SiO ₄ (VO ₄) ₂	-0.01	-0.24	0.00	20.2	26.7	20.4	-	-	-
β -LiAlSiO ₄	0.95	0.16	1.67	57.2	49.1	29.3	49.4	78.0	77.7
α -LiIO ₃	-0.20	-0.29	0.02	18.0	25.3	22.5	22.1	53.0	41.2
	0.21	0.18	0.05	29.4	25.0	24.4	25.8	62.4	58.5
LiClO ₄ ·3H ₂ O	-0.39	-0.38	0.16	7.20	11.6	11.9	10.1	60.7	55.8
LiClO ₄ ·3D ₂ O	-0.38	-0.37	0.15	7.30	11.6	11.8	10.2	60.5	55.6
LiKSO ₄	0.15	0.51	-0.03	21.4	14.2	18.7	-	-	-
Lu at 0.6% H	-0.03	-0.01	0.00	26.8	27.0	27.7	27.0	75.5	75.0
Lu at 1.5% H	-0.04	-0.01	0.00	27.1	27.5	28.3	27.4	73.8	73.1
Mg	-0.15	-0.02	0.04	16.4	16.8	19.3	16.8	79.2	79.0
Mg-Li at 0%Li	-0.15	-0.02	0.04	16.3	16.7	19.3	16.7	79.7	79.5
Mg-Li at 1.51%Li	-0.15	-0.02	0.04	16.2	16.6	19.1	16.6	78.8	78.6
Mg-Li at 3.02%Li	-0.15	-0.03	0.04	16.1	16.6	19.0	16.5	78.2	77.9
Mg-Li at 5.10%Li	-0.15	-0.02	0.04	16.0	16.4	18.8	16.4	78.5	78.2
Mg-Li at 7.00%Li	-0.15	-0.03	0.04	15.9	16.3	18.7	16.3	78.2	77.9
Mg-Li at 10.0%Li	-0.15	-0.03	0.04	15.7	16.1	18.5	16.1	78.2	78.0
Mg-Li at 12.05%Li	-0.15	-0.03	0.04	15.6	16.0	18.3	16.0	78.0	77.7
Mg-Li at 14.15%Li	-0.15	-0.02	0.04	15.4	15.8	18.1	15.8	78.3	78.1
Mg-Li at 15.94%Li	-0.15	-0.03	0.04	15.2	15.7	18.0	15.7	77.8	77.5
Mg-E E at 0%	-0.15	-0.02	0.04	16.4	16.7	19.3	16.7	79.7	79.5
Mg-E Ag at 0.07%	-0.16	-0.02	0.05	16.4	16.7	19.4	16.7	80.7	80.5
Mg-E Ag at 0.26%	-0.15	-0.02	0.04	16.4	16.7	19.3	16.7	79.3	79.1
Mg-E Ag at 0.37%	-0.15	-0.02	0.04	16.4	16.8	19.3	16.8	78.8	78.6
Mg-E Ag at 0%	-0.15	-0.02	0.04	16.3	16.7	19.3	16.7	78.5	78.2
Mg-E Ag at 0.26%	-0.15	-0.02	0.04	16.5	16.8	19.3	16.8	80.4	80.2
Mg-E Ag at 0.37%	-0.15	-0.01	0.04	16.5	16.8	19.4	16.8	80.9	80.7
Mg-E Sn at 0.21%	-0.15	-0.03	0.04	16.3	16.7	19.3	16.7	78.2	77.9
Mg-E Sn at 0.27%	-0.15	-0.02	0.04	16.4	16.7	19.2	16.7	79.1	78.9
Mg-E Sn at 0.43%	-0.15	-0.02	0.04	16.3	16.7	19.2	16.7	78.4	78.2
Mg-E Sn at 0.52%	-0.16	-0.02	0.04	16.2	16.6	19.2	16.6	78.6	78.4
Mg-E Sn at 0.72%	-0.15	-0.02	0.04	16.2	16.6	19.1	16.6	78.8	78.6
Mg-E Sn at 1.00%	-0.15	-0.02	0.04	16.1	16.4	19.0	16.4	79.3	79.2
Mg-E Sn at 0.21%	-0.15	-0.02	0.04	16.3	16.7	19.3	16.7	79.7	79.5
Mg-E Sn at 0.46%	-0.15	-0.02	0.04	16.2	16.6	19.1	16.6	78.8	78.6
Mg-E Sn at 0.67%	-0.15	-0.02	0.04	16.3	16.7	19.2	16.7	79.1	78.9

Таблица П.13 – Продолжение

Кристаллы	Π_{03}	Π_3	α_3	$G_1,$ ГПа	$G_2,$ ГПа	$G_3,$ ГПа	$G_4,$ ГПа	θ_0	ψ_0
Mg-E Sn at 0.94%	-0.16	-0.02	0.05	16.2	16.6	19.2	16.5	78.7	78.4
Mg-E In at 0.83%	-0.17	-0.02	0.06	16.2	16.6	19.6	16.5	79.9	79.8
Mg-E In at 1.96%	-0.15	-0.03	0.04	16.1	16.7	19.0	16.6	76.7	76.4
Mg-E In at 1.02%	-0.16	-0.02	0.05	16.2	16.6	19.2	16.6	78.7	78.4
Mg-E In at 1.35%	-0.15	-0.02	0.04	16.2	16.6	19.1	16.6	78.8	78.6
Mg-E In at 1.96%	-0.15	-0.03	0.04	16.1	16.6	19.0	16.5	77.8	77.5
MgZn ₂	-0.33	-0.07	0.20	26.2	28.0	39.1	27.9	77.2	76.8
	-0.36	-0.09	0.22	25.1	27.7	39.0	27.5	75.3	74.8
MnAs	0.36	1.14	-0.15	34.5	16.1	25.4	-	-	-
Mn ₅ Si ₃	-0.01	0.47	0.01	73.5	50.0	74.6	-	-	-
MoS ₂	-0.40	-0.87	-0.03	18.6	146	30.8	-	-	-
KAl ₂ Si ₃ AlO ₁₀ (OH,F) ₂	-0.67	-0.82	0.34	12.2	68.5	36.6	28.3	56.3	48.1
Nd	-0.25	0.00	0.12	15.0	15.1	20.0	15.1	87.8	87.8
NdCo ₅	-0.04	0.19	0.01	46.9	39.3	48.8	-	-	-
Na ₃ KAl ₄ Si ₄ O ₁₆	0.06	0.83	-0.04	36.9	20.2	34.7	-	-	-
NbF ₃	-0.46	-0.21	0.32	38.5	49.0	70.9	47.5	70.0	68.6
C ₇ H ₁₂	1.22	3.33	-1.09	0.90	0.20	0.40	-	-	-
KMg ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH,F) ₂	-0.81	-0.92	0.57	5.60	73.5	29.9	16.5	57.8	50.9
	-0.81	-0.91	0.57	6.50	73.5	34.0	18.8	57.9	51.2
Pr	-0.27	0.03	0.16	13.6	13.2	18.7	-	-	-
PrF ₃	-0.48	-0.22	0.35	35.7	45.9	68.4	44.4	70.1	68.7
Re	-0.26	-0.06	0.12	161	172	217	171	75.7	75.2
RbMnCl ₃	-0.82	-0.79	0.69	2.80	13.4	15.4	7.00	60.5	55.6
RbNiCl ₃	-0.81	-0.80	0.67	2.50	12.6	13.4	6.30	60.2	55.1
Ru	-0.14	-0.03	0.04	181	187	211	187	75.9	75.4
SmCo ₅	-0.13	0.03	0.04	48.3	46.7	55.7	-	-	-
Sc	-0.24	-0.07	0.10	27.7	29.8	36.4	29.6	74.4	73.7
SiC	-0.29	-0.17	0.12	169	204	237	198	67.2	65.2
Ag ₂ Al	-0.12	0.20	0.05	34.1	28.4	38.7	-	-	-
β -AgI	-0.37	-0.07	0.25	3.70	4.00	6.00	4.00	77.8	77.5
Tc	0.39	0.51	0.10	175	116	127	131	55.0	45.5
Tb	-0.09	-0.02	0.01	21.4	21.8	23.5	21.8	76.6	76.2
	-0.13	-0.02	0.03	21.7	22.1	24.9	22.1	79.3	79.1
Tb-50% Ho	-0.16	0.00	0.05	23.7	23.7	28.2	23.7	90.0	90.0
Tl	0.17	1.68	-0.23	7.20	2.70	6.20	-	-	-
	0.14	1.69	-0.20	7.20	2.70	6.30	-	-	-
Ti	-0.06	0.34	0.03	46.5	34.7	49.5	-	-	-
TiB ₂	1.21	0.79	1.96	250	140	113	151	66.2	63.8
WC	0.16	0.41	-0.01	328	233	282	-	-	-

Таблица П.13 – Продолжение

Кристаллы	Π_{03}	Π_3	α_3	$G_1,$ ГПа	$G_2,$ ГПа	$G_3,$ ГПа	$G_4,$ ГПа	θ_0	ψ_0
UPt ₃	-0.40	-0.55	0.10	37.2	83.5	62.2	58.4	54.0	43.5
Y	-0.14	0.00	0.04	24.3	24.4	28.4	24.4	86.3	86.3
	-0.02	-0.01	0.00	24.6	25.0	25.3	24.9	67.2	65.2
Zn	0.97	-0.40	2.28	39.5	65.6	20.0	–	–	–
ZnO	-0.16	0.01	0.05	44.6	44.4	53.0	–	–	–
	-0.11	0.01	0.03	44.8	44.6	50.5	–	–	–
	-0.22	0.05	0.11	46.7	44.4	60.1	–	–	–
ZnSe	-0.34	-0.21	0.16	25.0	31.4	37.9	30.3	67.2	65.1
α -ZnS	-0.32	-0.11	0.17	28.7	32.3	42.0	31.9	72.9	72.1
ZnS	-0.31	-0.11	0.15	28.5	32.0	41.1	31.7	72.5	71.7
	-0.31	-0.11	0.16	28.7	32.0	41.3	31.7	73.0	72.1
ZnS-MgS	-0.32	-0.11	0.17	27.2	30.6	40.1	30.3	72.9	72.1
	-0.33	-0.11	0.18	27.4	30.6	40.9	30.3	73.5	72.8
ZnTe	-0.31	-0.17	0.14	20.2	24.4	29.3	23.7	68.2	66.4
α -Zr	-0.24	-0.06	0.10	33.2	35.5	43.7	35.3	75.1	74.6
Zr-O at 0%O	-0.15	0.03	0.05	36.0	35.0	42.6	–	–	–
Zr-O at 7%O	0.07	0.07	0.00	46.1	43.1	43.1	43.8	60.0	54.7
Zr-O at 8%O	0.14	0.07	0.03	49.0	45.9	43.1	46.2	69.3	67.8
Zr-O at 24%O	0.29	0.04	0.16	75.2	72.5	58.1	72.5	79.7	79.5

Таблица П.14: Экстремальные значения и средние значения коэффициента Пуассона для 6-ти константных тетрагональных кристаллов.

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
Al ₂ Cu	0.19	0.54	0.34
	0.17	0.49	0.31
NH ₄ H ₂ AsO ₄	-0.06	0.66	0.35
	-0.34	0.73	0.33
NH ₄ H ₂ AsO ₄ 44% deuterated	-0.46	1.10	0.35
NH ₄ H ₂ PO ₄	-0.12	0.66	0.34
ND ₄ D ₂ PO ₄ S^E	-0.11	0.59	0.32
BaClF	-0.05	0.73	0.31
BaLaGa ₃ O ₇	0.16	0.63	0.35
Ba ₂ Si ₂ TiO ₈ S^E	0.13	0.29	0.20
	0.14	0.42	0.27
BaTiO ₃ S^E	-0.13	1.03	0.38
	-0.18	0.98	0.35
BaTiO ₃ S^D	0.04	0.77	0.34
	-0.16	0.77	0.32
	-0.22	0.44	0.06
CdGeAs ₂	-0.09	0.78	0.33
	-0.05	0.73	0.33
β -CdP ₂ (300K)	0.02	0.52	0.33
Ca ₂ Sr(C ₂ H ₅ CO ₂) ₆	0.12	0.54	0.34
	0.14	0.51	0.34
CsH ₂ AsO ₄	-0.11	0.88	0.32
CsNiF ₃	0.06	0.72	0.36
CoF ₂	-0.12	0.69	0.34
CoPt	-0.003	0.57	0.31
GeO ₂	-0.12	0.51	0.26
In	-0.42	1.31	0.45
	-0.71	1.64	0.47
InBi	-0.21	0.97	0.37
In-3.4 at% Cd	-0.32	1.22	0.45
In-3.42 at% Cd	-0.33	1.22	0.45
In-5 at% Pb	-0.30	1.17	0.45
In-17 at% Pb	0.30	0.49	0.41
In-10 at% Tl	-0.47	1.35	0.46
In-11.5 at% Tl	-0.41	1.32	0.46
In-15 at% Tl	-0.48	1.38	0.46
FeF ₂	-0.13	0.70	0.36
FeGe ₂	-0.77	0.39	-0.13
La _{1.86} Sr _{0.14} CuO ₄	0.11	0.37	0.24

Таблица П.14 – Продолжение

Кристаллы		ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
Pb _{0.37} Ba _{0.63} Nb ₂ O ₆	S^E	0.18	0.33	0.24
	S^D	0.08	0.29	0.15
Pb _{0.346} Ba _{0.59} Na _{0.036} Li _{0.028} -Nb ₂ O ₆	S^E	-0.04	0.35	0.07
	S^D	0.02	0.31	0.09
Li ₂ B ₄ O ₇	S^E	-0.15	0.61	0.15
LuAsO ₄		-0.08	0.80	0.32
LuPO ₄		-0.11	0.83	0.33
MgF ₂		-0.01	0.57	0.28
MnF ₂		-0.07	0.75	0.36
Hg ₂ Br ₂		-1.02	1.94	0.40
Hg ₂ Cl ₂		-0.91	1.75	0.40
HgI ₂		-0.11	0.80	0.34
Hg ₂ I ₂		-0.96	1.98	0.40
MoSi ₂		0.10	0.22	0.15
NiF ₂		-0.04	0.71	0.35
α -NiSO ₄ ·6H ₂ O		-0.06	0.72	0.22
		0.0006	0.76	0.35
PdPb ₂		0.22	0.59	0.39
C(CH ₂ ONO ₂) ₄		0.06	0.58	0.30
KD ₂ AsO ₄		-0.07	0.64	0.37
KD ₂ PO ₄		-0.13	0.65	0.27
KH ₂ AsO ₄		-0.05	0.63	0.29
KH ₂ PO ₄		-0.13	0.65	0.28
K _{2.89} Li _{1.55} Nb _{5.11} O ₁₅	S^E	0.06	0.40	0.22
	S^D	0.09	0.30	0.22
(K _{1/6} Na _{1/6} Sr _{1/2} Ba _{1/6})Nb ₂ O ₆	S^E	0.21	0.36	0.27
	S^D	-0.16	0.33	0.05
RbD ₂ AsO ₄		-0.41	0.56	0.19
RbH ₂ AsO ₄		-0.37	0.58	0.16
RbH ₂ PO ₄		-0.14	0.76	0.29
Scapolite		0.15	0.58	0.33
		0.21	0.47	0.31
AgGaS ₂		-0.06	0.83	0.38
Ag ₂ SO ₄ ·4NH ₃		0.22	0.47	0.34
Na ₂ S·9H ₂ O		0.27	0.42	0.32
Stishovite		-0.04	0.44	0.22
Sr _{1-x} Ba _x Nb ₂ O ₆	x=0.25	0.17	0.33	0.24
	x=0.29	0.19	0.36	0.26
	S^E	0.12	0.33	0.23
	S^P	0.26	0.42	0.32

Таблица П.14 – Продолжение

Кристаллы			ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
	x=0.50	S^E	0.09	0.30	0.19
	x=0.55		0.14	0.40	0.25
SrClF			0.08	0.51	0.29
Sr ₄ LiKNb ₁₀ O ₃₀		S^E	0.17	0.36	0.28
TeO ₂			-0.80	1.49	0.35
			-0.85	1.55	0.35
TlSe			-0.22	0.66	0.28
			-0.18	0.49	0.18
Sn			-0.03	0.80	0.36
SnO ₂			-0.11	0.62	0.30
TiO ₂			-0.03	0.68	0.29
WSi ₂			0.10	0.25	0.15
(NH ₂) ₂ CO			-0.80	1.89	0.44
			-0.98	1.73	0.37
Vesuvian			0.20	0.26	0.23
ZnF ₂			-0.05	0.65	0.35
			-0.05	0.66	0.35
Zn[C(NH ₂) ₃] ₂ (SO ₄) ₂			-0.14	0.67	0.31
α -ZnP ₂			0.08	0.38	0.26
ZrSiO ₄			0.07	0.62	0.30
Zr ₂ Ni			0.10	0.81	0.42

Таблица П.15: Экстремальные значения и средние значения коэффициента Пуассона для орторомбических ауксетиков.

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
$C_{10}H_6(CH_2)_2$	0.03	0.53	0.30
	-0.28	0.43	0.13
$NH_4B_5O_8 \cdot 4H_2O$	-0.10	0.85	0.38
$CaSO_4$	-0.05	0.76	0.29
SbSI	0.02	0.54	0.27
	-0.01	0.54	0.26
$CaCO_3$	-0.06	0.44	0.18
$BaMnF_4, s^E$	-0.05	0.87	0.34
$C_{14}H_{12}N_2$	-0.02	0.76	0.36
$(C_6H_5)_2CO$	-0.02	0.55	0.30
$(CH_3)_3NCH_2COO \cdot H_3BO_3$	-0.39	1.22	0.41
$(CH_3)_3NCH_2COO \cdot CaCl_2 \cdot 2H_2O$	-0.08	0.79	0.36
$(CH_3)_3NCH_2COO \cdot (CH)_2(COOH)_2$	-0.05	0.91	0.39
$Cd(COOH)_2$	-0.09	0.98	0.35
$Ca(COOH)_2$	-0.23	0.81	0.31
$C_6H_4COOHCOOCs$	-0.07	0.74	0.32
$CuCl_2 \cdot 2H_2O$	-0.02	0.52	0.29
Cu-14 wt% Al 3.0 wt% Ni	-0.70	1.43	0.40
$C_6H_4(NO_2)_2$	-0.01	0.60	0.28
$Gd_2(MoO_4)_3$	-0.03	0.35	0.20
$[CN_3H_6]C_4H_6NO_4$	-0.18	0.77	0.34
$[CN_3H_6]_2C_8H_4O_4$	-0.28	0.94	0.39
In_4Se_3	-0.06	0.73	0.26
HIO_3	0	0.40	0.17
	-0.02	0.51	0.20
DIO_3	-0.02	0.51	0.20
I	-0.48	1.31	0.30
Iododurene	-0.27	0.91	0.33
<i>N</i> -Isopropylcarbazole	-0.16	0.84	0.35
$PbBr_2$	-0.19	0.90	0.36
$LiGaO_2, s^E$	-0.03	0.26	0.15
$Li_2GeO_3 + 4 \text{ at}\% \text{ Si}, s^E$	-0.12	0.27	0.11
$MgSO_4 \cdot 7H_2O$	-0.10	0.75	0.37
	-0.05	0.65	0.33
$C_6N_2O_3H_6$	-0.91	1.05	0.20
$NiSO_4 \cdot 7H_2O$	-0.09	0.69	0.33
$C_6H_4(OH)_2$	-0.08	0.83	0.35
$KNaC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$	-0.06	0.81	0.36

Таблица П.15 – Продолжение

Кристаллы	ν_{\min}	ν_{\max}	$\langle \nu \rangle$
$C_6H_4COOHCOORb$	-0.04	0.74	0.34
	-0.12	0.59	0.24
$AgTlSe$	-0.42	1.07	0.39
$NaNH_4C_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$	-0.08	0.92	0.38
	0.01	0.83	0.41
Na_2CoGeO_4, s^D	-0.03	0.73	0.36
$NaBF_4$ (293K)	-0.05	0.71	0.29
Na_2GeO_3, s^E	-0.02	0.57	0.28
$Na_2C_4H_4O_6 \cdot 2H_2O$	-0.05	0.88	0.40
$(Fe, Mg)_2(Al, Fe^{+3})_9O_6SiO_4(O, OH)_2$	-0.20	0.95	0.32
$Sr(COOH)_2 \cdot 2H_2O$	-0.39	0.28	0.03
	0.13	0.50	0.32
TbF_3	-0.02	0.62	0.33
$Tb_2(MoO_4)_3, s^E$	-0.01	0.57	0.26
$C_8H_4O_4HTl$	-0.24	0.77	0.29
$SC(NH_2)_2$	-0.28	1.00	0.36
$SC(NH_2)_2$ (293K)	-0.37	1.07	0.36
Ni_3B	-0.04	0.65	0.34
$C_{24}H_{18}$	-0.06	0.77	0.34
$(CH_3NHCH_2COOH)_3 \cdot CaCl_2$	-0.48	0.76	0.22
$\alpha-U$	-0.02	0.54	0.20
$ZnSO_4 \cdot 7H_2O$	-0.15	0.71	0.27
	-0.04	0.66	0.34

Таблица П.16: Коэффициенты Пуассона для кристаллов гидрофталатов (минимальные (ν_{\min}), максимальные (ν_{\max}) и соответствующие им направления продольного растяжения \mathbf{n} и поперечной деформации \mathbf{m} , вдоль направлений, средние $\langle \nu \rangle$ по всем направлениям). Примечание. В символе, обозначающем коэффициент Пуассона, первые три индекса указывают направление поперечной деформации, последние три – направление растяжения. В случае GPhCs при точности определения коэффициента Пуассона 1% $\nu_{[010],[100]} = 0.726$, $\nu_{\max} = \nu_{[010],[503]} = 0.733$. Также приняты обозначения: $\nu_1 = \nu_{[010],[100]}$, $\nu_2 = \nu_{[001],[100]}$, $\nu_3 = \nu_{[011],[100]}$, $\nu_4 = \nu_{[100],[010]}$, $\nu_5 = \nu_{[001],[010]}$, $\nu_6 = \nu_{[101],[010]}$, $\nu_7 = \nu_{[100],[001]}$, $\nu_8 = \nu_{[010],[001]}$, $\nu_9 = \nu_{[110],[001]}$

Соединение	ν_{\min}	\mathbf{n}	\mathbf{m}	ν_{\max}	\mathbf{n}	\mathbf{m}	$\langle \nu \rangle$	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6	ν_7	ν_8	ν_9
GPhK	0.06	$[0\bar{4}3]$	$[043]$	0.56	$[001]$	$[100]$	0.33	0.37	0.50	0.48	0.38	0.06	0.12	0.56	0.07	0.39
GPhRb	-0.12	$[0\bar{4}3]$	$[043]$	0.58	$[1\bar{1}0]$	$[001]$	0.24	0.35	0.55	0.48	0.43	0.01	0.09	0.50	0.01	0.34
GPhCs	-0.07	$[0\bar{7}3]$	$[073]$	0.73	$[503]$	$[010]$	0.32	0.73	0.37	0.47	0.50	0.11	0.14	0.35	0.15	0.32
GPhNH ₄	-0.01	$[0\bar{5}2]$	$[052]$	0.63	$[001]$	$[100]$	0.33	0.49	0.50	0.50	0.54	0.01	0.04	0.63	0.01	0.55

Таблица П.17: Коэффициенты Пуассона ν_{rz} и $\nu_{\varphi z}$ для тонкой кубической нано/микротрубки и значения параметра толщины ρ_0 , при которых происходит смена знака коэффициентов Пуассона.

Кристаллы	П	δ	ν_{rz}	$\nu_{\varphi z}$	ρ_0 при $\nu_{rz} = 0$		ρ_0 при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$\rho - 1 \ll 1$		$r = r_0$	$r = r_0$	$r = R_0$	
ZnO	3.06	0.233	0.40	0.27	–	13.3	–	–
Al	2.80	0.259	0.42	0.27	–	10	–	–
Pt	1.59	0.528	0.57	0.21	–	2.5	–	–
Ta	1.51	0.496	0.50	0.17	–	2.26	–	–
Ir	1.28	0.469	0.39	0.08	–	1.78	–	–
Si	1.22	0.457	0.36	0.06	–	1.47	–	–
Rh	1.19	0.533	0.43	0.07	–	1.41	–	–
AuGa ₂	1.08	0.786	0.70	0.05	–	1.16	–	–
Ge	1.07	0.506	0.36	0.02	–	1.15	–	–
Cd _{0.55} Mn _{0.45} Te	1.02	0.796	0.68	0.02	–	1.05	–	–
CdTe	0.986	0.829	0.70	–0.01	–	–	–	1.01
Pd	0.981	0.953	0.81	–0.04	–	–	–	1.04
Au	0.969	0.953	0.88	–0.03	–	–	–	1.07
AuNi (2.95%atNi)	0.966	0.950	0.87	–0.03	–	–	–	1.07
ZnSe	0.960	0.783	0.62	–0.03	–	–	–	1.09
LiF	0.950	0.608	0.41	–0.02	–	–	–	1.11
CeSn ₃	0.923	0.741	0.54	–0.05	–	–	–	1.77
Fe	0.911	0.810	0.62	–0.06	–	–	–	1.21
Tl (FCC)	0.906	1.00	0.92	–0.09	–	–	–	1.22
Ni	0.904	0.846	0.66	–0.07	–	–	–	1.23
Ag	0.900	0.948	0.81	–0.09	–	–	–	1.24
CrNi (80.4%atNi)	0.871	0.879	0.68	–0.10	–	–	–	1.33
Cu	0.860	0.977	0.82	–0.13	–	–	–	1.37

Таблица П.17 – Продолжение

Кристаллы	П	δ	ν_{rz}	$\nu_{\varphi z}$	ρ_0 при $\nu_{rz} = 0$	ρ_0 при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$\rho - 1 \ll 1$		$r = r_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
CuGe (1.71%atGe)	0.843	0.996	0.84	-0.16	-	-	1.43
Pb	0.837	1.10	1.02	-0.20	-	-	1.45
Co	0.835	0.954	0.76	-0.15	-	-	1.46
LiIn	0.817	1.05	0.90	-0.20	-	-	1.53
SiC	0.816	0.701	0.44	-0.10	-	-	1.54
FeNi (48.8%atNi)	0.803	0.966	0.75	-0.18	-	-	1.60
Ce	0.794	0.895	0.64	-0.17	-	-	1.64
Th	0.780	1.01	0.79	-0.22	-	-	1.72
Sr	0.766	1.05	0.85	-0.26	-	-	1.8
Ca	0.760	1.06	0.86	-0.27	-	-	1.83
AgZn (46.5%atZn)	0.749	1.21	1.14	-0.38	-	-	1.90
Rb	0.742	1.22	1.15	-0.40	-	-	1.95
K	0.740	1.24	1.21	-0.42	-	-	1.96
Au ₅₀ Mn ₂₂ Zn ₂₈	0.737	1.25	1.24	-0.44	-	-	1.98
Ba	0.737	1.05	0.82	-0.29	-	-	1.99
Na	0.733	1.24	1.20	-0.44	-	-	2.02
Li	0.708	1.29	1.29	-0.53	-	-	2.25
Cs	0.695	1.09	0.83	-0.36	-	-	2.41
Yb	0.687	1.04	0.75	-0.34	-	-	2.51
FePd (28%atPd)	0.684	1.44	1.74	-0.80	-	-	2.48
CuMn (72%atMn)	0.670	1.29	1.21	-0.60	-	-	2.88
Mn _{85.3} Ni _{8.8} C _{5.9}	0.664	1.34	1.34	-0.68	-	-	3.08
TmSe	0.62	-1.75	-0.29	0.18	7.03	-	3.03
Tm _{0.99} Se	0.52	-1.8	-0.25	0.23	6.5	-	5.60

Таблица П.17 – Продолжение

Кристаллы	П	δ	ν_{rz}	$\nu_{\varphi z}$	ρ_0 при $\nu_{rz} = 0$	ρ_0 при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$\rho - 1 \ll 1$		$r = r_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
Sm _{0.90} La _{0.10} S [175]	0.179	-1.71	-0.08	0.38	5.32	-	-
Sm _{0.85} Tm _{0.15} S [175]	0.056	-1.06	-0.02	0.33	9.24	-	-
SmB ₆	0.020	-1.68	-0.009	0.45	6.68	-	-
Pb _{0.71} Sn _{0.29} Te	-0.008	-3.04	0.005	0.61	2.63	-	-
Li ₂ O	-0.331	-0.586	0.08	0.30	26.5	-	-
Nb	-0.523	-1.33	0.21	0.61	3.91	-	-
AgCl	-0.621	-1.21	0.23	0.61	4.16	-	-
Cr	-0.676	-0.475	0.13	0.32	41.3	-	-
FeTi	-0.734	-0.594	0.17	0.40	19.2	-	-
CeAl ₂	-0.858	-0.395	0.14	0.31	75.7	-	-
Mo	-1.05	-0.490	0.21	0.40	12.72	-	-

Таблица П.18: Коэффициенты Пуассона для тонких нано/микротрубок ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ из 6-ти константных тетрагональных кристаллов при нулевом угле хиральности $\alpha = 0$, и критические значения параметра толщины ρ_{cr} .

Трубки из кристаллов		ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$		
				$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$	
Al ₂ Cu		0.33	0.27	–	–	217	–	
		0.20	0.33	201	–	–	–	
NH ₄ H ₂ AsO ₄		0.66	–0.06	–	–	*	1.18**	
		0.73	–0.34	–	–	*	2.66**	
NH ₄ H ₂ AsO ₄ 44% deuterated		1.10	–0.46	–	–	*	2.39**	
NH ₄ H ₂ PO ₄		0.66	–0.12	–	–	*	1.43**	
ND ₄ D ₂ PO ₄	S^E	0.58	–0.11	–	–	*	1.42**	
BaClF		0.72	–0.04	–	–	*	1.11**	
BaLaGa ₃ O ₇		0.50	0.33	–	–	18.0	–	
Ba ₂ Si ₂ TiO ₈		S^E	0.22	0.21	–	–	–	–
		S^E	0.32	0.26	–	–	–	–
BaTiO ₃		S^E	0.65	0.29	–	–	3.59	–
		S^E	0.67	0.19	–	–	1.94	–
BaTiO ₃		S^D	0.45	0.43	–	–	–	–
		S^D	0.48	0.42	–	–	–	–
		S^D	0.03	0.44	12.7	–	–	–
CdGeAs ₂		0.48	0.33	–	–	15.2	–	
		0.45	0.35	–	–	80.1	–	
β -CdP ₂ (300K)		0.35	0.35	–	–	–	–	
Ca ₂ Sr(C ₂ H ₅ CO ₂) ₆		0.31	0.43	563	–	–	–	
		0.44	0.27	–	–	7.95	–	
CsH ₂ AsO ₄		0.03	0.01	–	–	2.01	–	
CsNiF ₃		0.06	0.45	5.41	–	–	–	

Таблица П.18 – Продолжение

Трубки из кристаллов	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$		
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$	
CoF ₂	0.15	0.64	2.93	–	–	–	
CoPt	0.32	0.43	303	–	–	–	
GeO ₂	0.17	0.47	7.57	–	–	–	
In	0.64	0.31	–	–	3.87	–	
	1.04	-0.07	–	–	*	1.14**	
InBi	0.61	0.35	–	–	7.19	–	
In-3.4 at% Cd	0.46	0.50	6·10 ⁵	–	–	–	
In-3.42 at% Cd	0.47	0.49	–	–	–	–	
In-5 at% Pb	0.21	0.75	2.13	–	–	–	
In-17 at% Pb	0.45	0.33	–	–	20.1	–	
In-10 at% Tl	0.53	0.43	–	–	112	–	
In-11.5 at% Tl	0.56	0.40	–	–	18.7	–	
In-15 at% Tl	0.46	0.50	3·10 ⁵	–	–	–	
FeF ₂	0.19	0.62	3.38	–	–	–	
FeGe ₂	0.39	-0.04	–	–	*	1.21**	
La _{1.86} Sr _{0.14} CuO ₄	0.27	0.11	–	–	2.98	–	
Pb _{0.37} Ba _{0.63} Nb ₂ O ₆	S^E	0.29	0.29	Не зависит от ρ			
	S^D	0.13	0.29	–	–	–	–
Pb _{0.346} Ba _{0.59} Na _{0.036} Li _{0.028} -Nb ₂ O ₆	S^E	-0.03	0.35	19.4**	*	–	–
	S^D	0.04	0.31	218	–	–	–
Li ₂ B ₄ O ₇	S^E	0.61	-0.13	–	–	*	1.54**
LuAsO ₄		0.32	-0.02	–	–	*	1.16**
LuPO ₄		0.30	0.01	–	–	1.04	–
MgF ₂		0.13	0.57	3.77	–	–	–
MnF ₂		0.13	0.70	2.24	–	–	–

Таблица П.18 – Продолжение

Трубки из кристаллов	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
Hg ₂ Br ₂	0.02	0.90	1.23	–	–	–
Hg ₂ Cl ₂	0.02	0.91	1.20	–	–	–
HgI ₂	0.80	–0.11	–	–	*	1.31**
Hg ₂ I ₂	0.02	0.88	1.30	–	–	–
MoSi ₂	0.13	0.22	585	–	–	–
NiF ₂	0.13	0.68	2.44	–	–	–
	α -NiSO ₄ ·6H ₂ O	0.02	0.72	1.92	–	–
	0.14	0.75	1.97	–	–	–
PdPb ₂	0.35	0.38	–	–	–	–
C(CH ₂ ONO ₂) ₄	0.58	0.06	–	–	1.26	–
KD ₂ AsO ₄	0.52	–0.07	–	–	*	1.29**
KD ₂ PO ₄	0.25	–0.13	–	–	*	2.80**
KH ₂ AsO ₄	0.30	–0.05	–	–	*	1.37**
KH ₂ PO ₄	0.28	–0.13	–	–	*	2.40**
K _{2.89} Li _{1.55} Nb _{5.11} O ₁₅	S^E	0.40	0.21	–	–	5.97
	S^D	0.30	0.26	–	–	–
(K _{1/6} Na _{1/6} Sr _{1/2} Ba _{1/6})Nb ₂ O ₆	S^E	0.36	0.26	–	–	498
	S^D	–0.15	0.33	7.26**	*	–
RbD ₂ AsO ₄	0.18	–0.41	–	–	*	*
RbH ₂ AsO ₄	0.08	–0.37	–	–	*	*
RbH ₂ PO ₄	0.27	–0.14	–	–	*	3.55**
Scapolite	0.23	0.27	6·10 ⁵	–	–	–
	0.22	0.29	981	–	–	–
AgGaS ₂	0.55	0.29	–	–	4.97	–
Ag ₂ SO ₄ ·4NH ₃	0.25	0.42	27.3	–	–	–

Таблица П.18 – Продолжение

Трубки из кристаллов			ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$	
					$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
Na ₂ S·9H ₂ O			0.31	0.32	–	–	–	–
Stishovite			0.16	0.40	13.1	–	–	–
Sr _{1-x} Ba _x Nb ₂ O ₆	x=0.25		0.28	0.27	–	–	–	–
	x=0.29		0.26	0.36	–	–	–	–
		S^E	0.33	0.27	–	–	–	–
		S^P	0.42	0.30	–	–	41.9	–
	x=0.50	S^E	0.22	0.28	–	–	–	–
	x=0.55		0.15	0.36	43.3	–	–	–
SrClF			0.50	0.10	–	–	1.53	–
Sr ₄ LiKNb ₁₀ O ₃₀		S^E	0.36	0.34	–	–	–	–
TeO ₂			0.02	0.91	1.22	–	–	–
			0.02	0.92	1.19	–	–	–
TlSe			0.53	–0.22	–	–	*	2.16**
			0.45	–0.10	–	–	*	1.55**
Sn			0.10	0.76	1.81	–	–	–
SnO ₂			0.14	0.59	3.44	–	–	–
TiO ₂			0.13	0.59	3.38	–	–	–
WSi ₂			0.11	0.25	104	–	–	–
(NH ₂) ₂ CO			0.53	–0.17	–	–	*	1.81**
			0.16	–0.07	–	–	*	2.27**
Vesuvian			0.20	0.26	5•104	–	–	–
ZnF ₂			0.16	0.63	3.16	–	–	–
			0.16	0.63	3.09	–	–	–
Zn[C(NH ₂) ₃] ₂ (SO ₄) ₂			0.67	–0.14	–	–	*	1.47**
α -ZnP ₂			0.36	0.08	–	–	1.65	–

Таблица П.18 – Продолжение

Трубки из кристаллов	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
ZrSiO ₄	0.28	0.07	–	–	1.71	–
Zr ₂ Ni	0.15	0.74	2.04	–	–	–

Таблица П.19: Коэффициенты Пуассона для тонких нано/микротрубок ν_{rz} , $\nu_{\varphi z}$ из 6-ти константных тетрагональных кристаллов при нулевом угле хиральности $\alpha = \pi/4$, и критические значения параметра толщины ρ_{cr} .

Трубки из кристаллов		ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$		
				$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$	
Al ₂ Cu		0.29	0.35	105	–	–	–	
		0.19	0.35	85.4	–	–	–	
NH ₄ H ₂ AsO ₄		0.26	0.59	6.20	–	–	–	
		0.27	0.50	16.5	–	–	–	
NH ₄ H ₂ AsO ₄ 44% deuterated		0.42	0.45	–	–	–	–	
NH ₄ H ₂ PO ₄		0.23	0.60	4.67	–	–	–	
ND ₄ D ₂ PO ₄	S^E	0.21	0.59	4.82	–	–	–	
BaClF		0.73	–0.06	–	–	*	1.16**	
BaLaGa ₃ O ₇		0.63	0.16	–	–	1.77	–	
Ba ₂ Si ₂ TiO ₈		S^E	0.23	0.17	–	–	6•103	–
		S^E	0.37	0.14	–	–	2.73	–
BaTiO ₃		S^E	1.04	–0.13	–	–	*	1.27**
		S^E	0.98	–0.18	–	–	*	1.42**
BaTiO ₃		S^D	0.77	0.04	–	–	1.11	–
		S^D	0.77	0.07	–	–	1.20	–
		S^D	0.04	0.22	–	–	–	–
CdGeAs ₂		0.78	–0.09	–	–	*	1.24**	
		0.72	–0.05	–	–	*	1.15**	
β -CdP ₂ (300K)		0.52	0.02	–	–	1.10	–	
Ca ₂ Sr(C ₂ H ₅ CO ₂) ₆		0.26	0.52	11.1	–	–	–	
		0.36	0.41	–	–	–	–	
CsH ₂ AsO ₄		0.004	0.88	1.29	–	–	–	
CsNiF ₃		0.06	0.45	5.47	–	–	–	

Таблица П.19 – Продолжение

Трубки из кристаллов	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$		
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$	
CoF ₂	0.47	-0.12	-	-	*	1.63**	
CoPt	0.57	-0.003	-	-	*	1.01**	
GeO ₂	0.35	-0.11	-	-	*	1.87**	
In	1.31	-0.42	-	-	*	1.85**	
	1.64	-0.69	-	-	*	2.25**	
InBi	0.97	-0.05	-	-	*	1.10**	
In-3.4 at% Cd	1.22	-0.32	-	-	*	1.65**	
In-3.42 at% Cd	1.22	-0.33	-	-	*	1.67**	
In-5 at% Pb	0.55	0.35	-	-	10.2	-	
In-17 at% Pb	0.47	0.30	-	-	9.47	-	
In-10 at% Tl	1.35	-0.47	-	-	*	1.93**	
In-11.5 at% Tl	1.32	-0.41	-	-	*	1.80**	
In-15 at% Tl	1.38	-0.48	-	-	*	1.94**	
FeF ₂	0.58	-0.13	-	-	*	1.51**	
FeGe ₂	0.35	0.07	-	-	1.67	-	
La _{1.86} Sr _{0.14} CuO ₄	0.19	0.37	62.9	-	-	-	
Pb _{0.37} Ba _{0.63} Nb ₂ O ₆	S^E	0.33	0.20	-	-	16.2	-
	S^D	0.13	0.27	-	-	-	-
Pb _{0.346} Ba _{0.59} Na _{0.036} Li _{0.028} -Nb ₂ O ₆	S^E	-0.04	0.14	*	*	-	-
	S^D	0.06	0.11	-	-	-	-
Li ₂ B ₄ O ₇	S^E	0.52	0.03	-	-	1.13	-
LuAsO ₄		0.09	0.72	2.03	-	-	-
LuPO ₄		0.08	0.74	1.91	-	-	-
MgF ₂		0.31	-0.01	-	-	*	1.09**
MnF ₂		0.47	-0.07	-	-	*	1.34**

Таблица П.19 – Продолжение

Трубки из кристаллов	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$		
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$	
Hg ₂ Br ₂	0.21	0.01	–	–	1.08	–	
Hg ₂ Cl ₂	0.18	0.13	–	–	9.37	–	
HgI ₂	0.25	0.65	3.69	–	–	–	
Hg ₂ I ₂	0.25	–0.19	–	–	*	3.78**	
MoSi ₂	0.14	0.12	–	–	186	–	
NiF ₂	0.44	–0.04	–	–	*	1.21**	
α -NiSO ₄ ·6H ₂ O	0.06	0.22	–	–	–	–	
	0.46	0.20	–	–	3.54	–	
PdPb ₂	0.35	0.37	–	–	–	–	
C(CH ₂ ONO ₂) ₄	0.46	0.26	–	–	6.28	–	
KD ₂ AsO ₄	0.18	0.63	3.26	–	–	–	
KD ₂ PO ₄	0.08	0.65	2.53	–	–	–	
KH ₂ AsO ₄	0.11	0.63	2.86	–	–	–	
KH ₂ PO ₄	0.09	0.65	2.51	–	–	–	
K _{2.89} Li _{1.55} Nb _{5.11} O ₁₅	S^E	0.40	0.20	–	–	5.29	–
	S^D	0.29	0.28	–	–	–	–
(K _{1/6} Na _{1/6} Sr _{1/2} Ba _{1/6})Nb ₂ O ₆	S^E	0.33	0.32	–	–	–	–
	S^D	–0.16	0.31	8.29**	*	–	–
RbD ₂ AsO ₄	0.06	0.56	3.33	–	–	–	
RbH ₂ AsO ₄	0.02	0.58	2.99	–	–	–	
RbH ₂ PO ₄	0.05	0.76	1.77	–	–	–	
Scapolite	0.17	0.45	9.65	–	–	–	
	0.21	0.30	278	–	–	–	
AgGaS ₂	0.84	–0.06	–	–	*	1.16**	
Ag ₂ SO ₄ ·4NH ₃	0.33	0.23	–	–	15.6	–	

Таблица П.19 – Продолжение

Трубки из кристаллов		ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$	
				$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
Na ₂ S·9H ₂ O		0.27	0.42	140	–	–	–
Stishovite		0.27	–0.04	–	–	*	1.32**
Sr _{1-x} Ba _x Nb ₂ O ₆	x=0.25	0.26	0.33	–	–	–	–
	x=0.29		0.26	0.36	–	–	–
		S^E	0.31	0.30	–	–	–
		S^P	0.41	0.33	–	–	5·10 ³
	x=0.50	S^E	0.22	0.30	–	–	–
x=0.55		0.14	0.40	18.0	–	–	–
SrClF		0.51	0.08	–	–	1.39	–
Sr ₄ LiKNb ₁₀ O ₃₀	S^E	0.36	0.34	–	–	–	–
TeO ₂		0.26	–0.18	–	–	*	4.36**
		0.26	–0.18	–	–	*	3.98**
TlSe		0.53	–0.22	–	–	*	2.16**
		0.33	0.18	–	–	4.53	–
Sn		0.28	0.36	6·10 ³	–	–	–
SnO ₂		0.38	–0.11	–	–	*	1.74**
TiO ₂		0.32	–0.03	–	–	*	1.23**
WSi ₂		0.13	0.11	–	–	128	–
(NH ₂) ₂ CO		0.08	0.82	1.53	–	–	–
		0.01	0.91	1.21	–	–	–
Vesuvian		0.20	0.24	–	–	–	–
ZnF ₂		0.46	–0.05	–	–	*	1.21**
		0.46	–0.05	–	–	*	1.23**
Zn[C(NH ₂) ₃] ₂ (SO ₄) ₂		0.43	0.28	–	–	9.33	–
α -ZnP ₂		0.25	0.37	218	–	–	–

Таблица П.19 – Продолжение

Трубки из кристаллов	ν_{rz} ($\rho - 1 \ll 1$)	$\nu_{\varphi z}$ ($\rho - 1 \ll 1$)	ρ_{cr} при $\nu_{rz} = 0$		ρ_{cr} при $\nu_{\varphi z} = 0$	
			$r = r_0$	$r = R_0$	$r = r_0$	$r = R_0$
ZrSiO ₄	0.12	0.61	3.02	–	–	–
Zr ₂ Ni	0.11	0.81	1.62	–	–	–

Таблица П.20: Значения модулей Юнга нано/микротрубок из 6-ти константных тетрагональных кристаллов при двух различных значениях угла хиральности α и параметрах толщины ρ .

Трубки из кристаллов		E , ГПа				
		$\alpha = 0$		$\alpha = \pi/4$		
		$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$	$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$	
Al ₂ Cu		135.5	135.6	120.4	120.5	
		128.2	128.7	124.7	125.4	
NH ₄ H ₂ AsO ₄		50.5	54.3	19.7	20.3	
		51.8	61.3	19.3	19.5	
NH ₄ H ₂ AsO ₄ 44% deuterated		40.5	58.0	15.3	15.3	
NH ₄ H ₂ PO ₄		54.6	59.7	19.3	20.1	
ND ₄ D ₂ PO ₄	S^E	52.6	56.4	19.5	20.3	
BaClF		61.7	67.7	62.7	69.3	
BaLaGa ₃ O ₇		99.7	100.3	125.1	129.8	
Ba ₂ Si ₂ TiO ₈		S^E	131.6	131.6	137.9	138.0
		S^E	136.4	136.5	158.7	160.1
BaTiO ₃		S^E	124.2	127.1	197.6	237.7
		S^E	136.1	141.4	197.5	237.6
BaTiO ₃		S^D	137.9	137.9	234.7	253.6
		S^D	160.3	160.4	256.2	275.3
		S^D	182.1	187.7	253.3	254.5
CdGeAs ₂		46.3	46.5	74.6	84.3	
		50.3	50.5	80.3	88.7	
β -CdP ₂ (300K)		53.5	53.5	79.9	83.8	
Ca ₂ Sr(C ₂ H ₅ CO ₂) ₆		7.04	7.07	5.93	6.03	
		7.25	7.29	5.87	5.87	
CsH ₂ AsO ₄		51.5	51.6	6.39	11.0	
CsNiF ₃		34.4	35.9	34.5	36.0	
CoF ₂		50.3	54.7	155.6	166.2	
CoPt		175.4	176.0	310.6	328.3	
GeO ₂		218.3	223.9	456.1	476.9	
In		6.72	6.87	13.9	23.1	
		4.83	5.99	7.62	21.9	
InBi		18.9	19.2	30.3	35.3	
In-3.4 at% Cd		5.71	5.72	15.2	22.5	
In-3.42 at% Cd		5.75	5.75	15.1	22.5	
In-5 at% Pb		5.46	6.16	14.1	14.2	
In-17 at% Pb		20.4	20.5	21.2	21.3	
In-10 at% Tl		4.46	4.47	11.5	20.5	
In-11.5 at% Tl		5.32	5.35	12.5	20.7	

Таблица П.20 – Продолжение

Трубки из кристаллов		E , ГПа			
		$\alpha = 0$		$\alpha = \pi/4$	
		$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$	$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$
In-15 at% Tl		3.76	3.76	11.2	20.3
FeF ₂		46.1	49.1	138.2	151.5
FeGe ₂		209.2	211.2	187.6	188.4
La _{1.86} Sr _{0.14} CuO ₄		222.2	223.2	158.7	159.8
Pb _{0.37} Ba _{0.63} Nb ₂ O ₆	S^E	172.4	172.4	194.2	194.7
	S^D	172.4	173.3	177.0	177.6
Pb _{0.346} Ba _{0.59} Na _{0.036} Li _{0.028} -Nb ₂ O ₆	S^E	196.1	201.2	259.7	261.0
	S^D	196.1	198.6	253.2	253.3
Li ₂ B ₄ O ₇	S^E	112.4	121.1	95.9	99.3
LuAsO ₄		244.5	250.5	66.8	79.6
LuPO ₄		285.7	290.8	75.4	91.9
MgF ₂		79.4	84.3	187.8	191.6
MnF ₂		36.2	41.5	130.7	138.4
Hg ₂ Br ₂		2.21	4.68	22.5	22.8
Hg ₂ Cl ₂		2.78	6.26	28.2	28.2
HgI ₂		24.4	27.5	7.63	8.01
Hg ₂ I ₂		1.85	3.45	18.1	19.0
MoSi ₂		383.0	383.8	434.1	434.1
NiF ₂		58.1	65.2	189.6	198.0
α -NiSO ₄ ·6H ₂ O		15.4	18.4	43.4	43.6
		15.1	17.3	48.2	48.7
PdPb ₂		676.6	676.8	684.2	684.3
C(CH ₂ ONO ₂) ₄		12.5	13.1	9.90	9.98
KD ₂ AsO ₄		57.8	61.7	20.1	21.5
KD ₂ PO ₄		63.3	65.0	19.6	22.0
KH ₂ AsO ₄		61.0	62.3	21.6	23.6
KH ₂ PO ₄		67.1	69.2	20.6	23.1
K _{2.89} Li _{1.55} Nb _{5.11} O ₁₅	S^E	166.9	167.9	168.1	169.1
	S^D	184.8	184.9	179.5	179.5
(K _{1/6} Na _{1/6} Sr _{1/2} Ba _{1/6})Nb ₂ O ₆	S^E	188.7	189.0	175.4	175.4
	S^D	196.1	205.3	202.0	210.7
RbD ₂ AsO ₄		40.5	43.5	12.7	13.8
RbH ₂ AsO ₄		43.9	45.7	13.6	15.0
RbH ₂ PO ₄		59.2	60.7	12.5	15.8
Scapolite		81.3	81.3	61.4	62.7
		81.3	81.4	79.3	79.5
AgGaS ₂		38.2	38.7	57.6	65.8
Ag ₂ SO ₄ ·4NH ₃		21.6	21.7	28.7	28.7

Таблица П.20 – Продолжение

Трубки из кристаллов			E , ГПа			
			$\alpha = 0$		$\alpha = \pi/4$	
			$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$	$\rho - 1 \ll 1$	$\rho = 10$
Na ₂ S·9H ₂ O			26.4	26.4	22.8	22.9
Stishovite			337.8	342.9	580.6	592.3
Sr _{1-x} Ba _x Nb ₂ O ₆	x=0.25		189.8	189.8	175.0	175.1
	x=0.29		174.2	174.6	174.4	174.7
		S^E	188.0	188.0	180.8	180.8
		S^P	191.9	192.5	184.3	184.6
		S^E	185.2	185.3	179.4	179.6
	x=0.50	S^E	185.2	185.3	179.4	179.6
x=0.55		155.3	156.8	145.7	147.9	
SrClF			80.0	82.3	81.6	84.3
Sr ₄ LiKNb ₁₀ O ₃₀		S^E	180.2	180.2	180.2	180.2
TeO ₂			8.55	17.3	108.4	112.5
			8.26	18.0	117.3	121.5
TlSe			24.3	27.5	24.3	27.6
			37.7	39.9	28.2	28.4
Sn			23.6	28.8	64.4	64.5
SnO ₂			134.6	144.2	368.3	386.5
TiO ₂			147.1	158.1	370.7	380.0
WSi ₂			402.9	404.8	482.0	482.1
(NH ₂) ₂ CO			10.5	11.8	1.64	2.32
			22.3	22.6	1.91	4.17
Vesuvian			132.5	132.5	134.5	134.6
ZnF ₂			54.9	59.2	153.8	161.7
			54.3	58.7	154.4	162.5
Zn[C(NH ₂) ₃] ₂ (SO ₄) ₂			21.9	24.7	14.0	14.0
α -ZnP ₂			124.1	125.9	85.4	85.7
ZrSiO ₄			377.4	380.9	156.0	169.9
Zr ₂ Ni			46.3	53.2	34.7	44.0

П.2. К экспериментальному изучению ауксетического поведения вогнутой ячеистой решетки [47–49]

В 1987 году впервые был получен ауксетик – полимерная пена [110]. С этого момента началось активное теоретическое и экспериментальное изучение физических и механических свойств конструкций с отрицательным коэффициентом Пуассона. В исследовании ауксетиков можно выделить одно из важных направлений – построение ауксетических стержневых моделей и структур (метаматериалов) [103,108,114–116]. Впервые в работах [114–116] были рассмотрены плоские ауксетические конструкции. При исследовании механических свойств ячеистых структур в качестве ячейки часто используют вогнутый шестиугольник с «прямыми» элементами (см. [103,108]). В данном разделе Приложения предложен дизайн ауксетической двумерной плоскости, состоящей из вогнутых шестиугольников, и использованной нами для исследования изменчивости коэффициента Пуассона. Производящий шестиугольник этой плоскости имеет часть сторон «синусоидальной» формы (Рис.П.1).

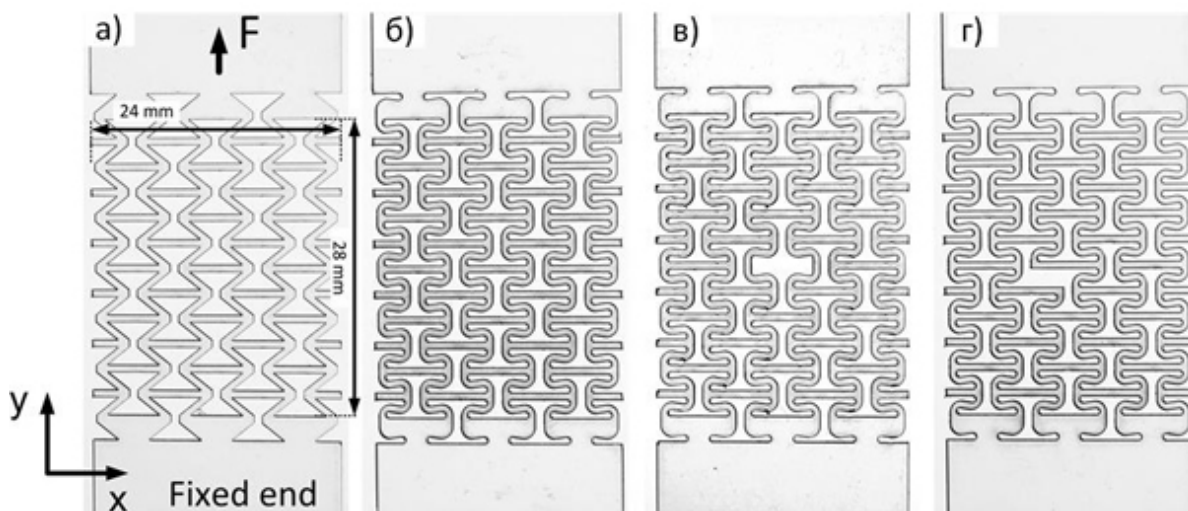


Рис. П.1: Четыре плоских образца с центральной зоной $28 \times 24 \times 0.7$ мм и следующими дизайнами: вогнутые шестиугольники с прямолинейными элементами, образец zz (а); вогнутые шестиугольники с криволинейными элементами, образец ss (б); вогнутые шестиугольники с криволинейными элементами и отсутствующим одним горизонтальным элементом, образец ssH (в); вогнутые шестиугольники с криволинейными элементами и отсутствующим одним вертикальным элементом, образец ssV (г).

Программа экспериментальных исследований включала проведение механических испытаний на одноосное растяжение серии плоских образцов, полученных

из неауксетического полиэтилентерефталата (ПЭТ-а аморфный) толщиной 0.7 мм, методом резки фемтосекундным лазером. Лазерная установка позволяла осуществлять перемещения заготовки с микронной точностью, средняя мощность излучения 3 Вт. Длительность импульсов излучения 500 фс, энергия импульса 120 мкДж. Мощность излучения в импульсе достигала 240 МВт. В результате были вырезаны четыре плоских образца размерами $112.5 \times 24 \times 0.7$ мм с центральной зоной $28 \times 24 \times 0.7$ мм (Рис.П.1). Образцы имели следующий дизайн: образец zz – вогнутые шестиугольники с прямолинейными элементами (Рис.П.1а), образец ss – вогнутые шестиугольники с криволинейными элементами (Рис.П.1б), образец ssH – вогнутые шестиугольники с криволинейными элементами и отсутствующим одним горизонтальным элементом (Рис.П.1в), образец ssV – вогнутые шестиугольники с криволинейными элементами и отсутствующим одним вертикальным элементом (Рис.П.1г). Дизайн образцов был таким, что поперечный размер элементов конструкции выбирался равным толщине исходной пластины.

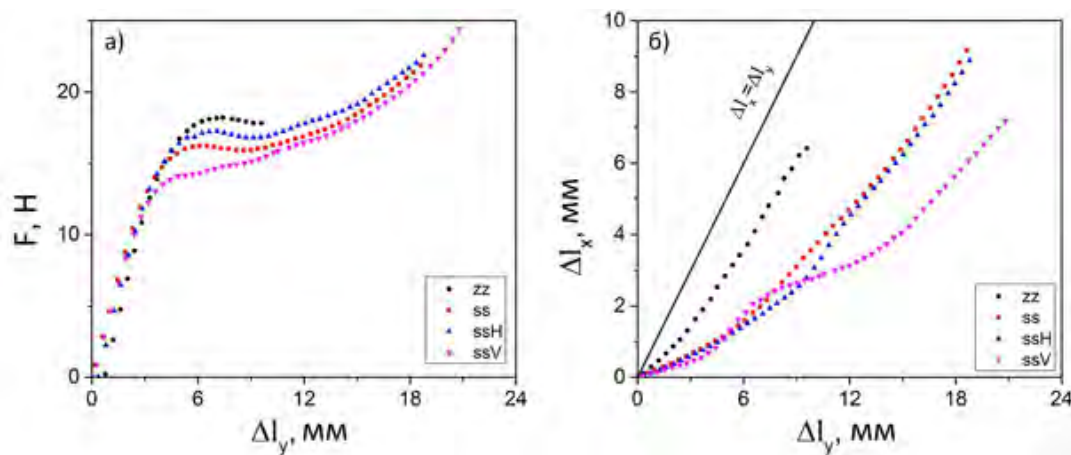


Рис. П.2: Диаграмма растягивающая сила – перемещение ($F - \Delta l_y$) (а) и изменение поперечного перемещения Δl_x в зависимости от продольного перемещения Δl_y (б).

Все четыре образца подвергали монотонному одноосному растяжению на установке MTS Synergie 400 со скоростью 1 мм/мин с одновременной регистрацией перемещений и усилий. Образцы растягивались до момента, когда они оставались плоскими. Изменение геометрии образца регистрировалось с помощью 12-Мегапиксельной камерой Dahua IPC-HF81200E. Сила и перемещения балансирной балки верхнего захвата также регистрировались встроенными датчиками установки. Смещения и деформации были рассчитаны после получения видео и фотоизображений с использованием метода цифровой корреляции изображений в программном обеспечении Ncorr [242].

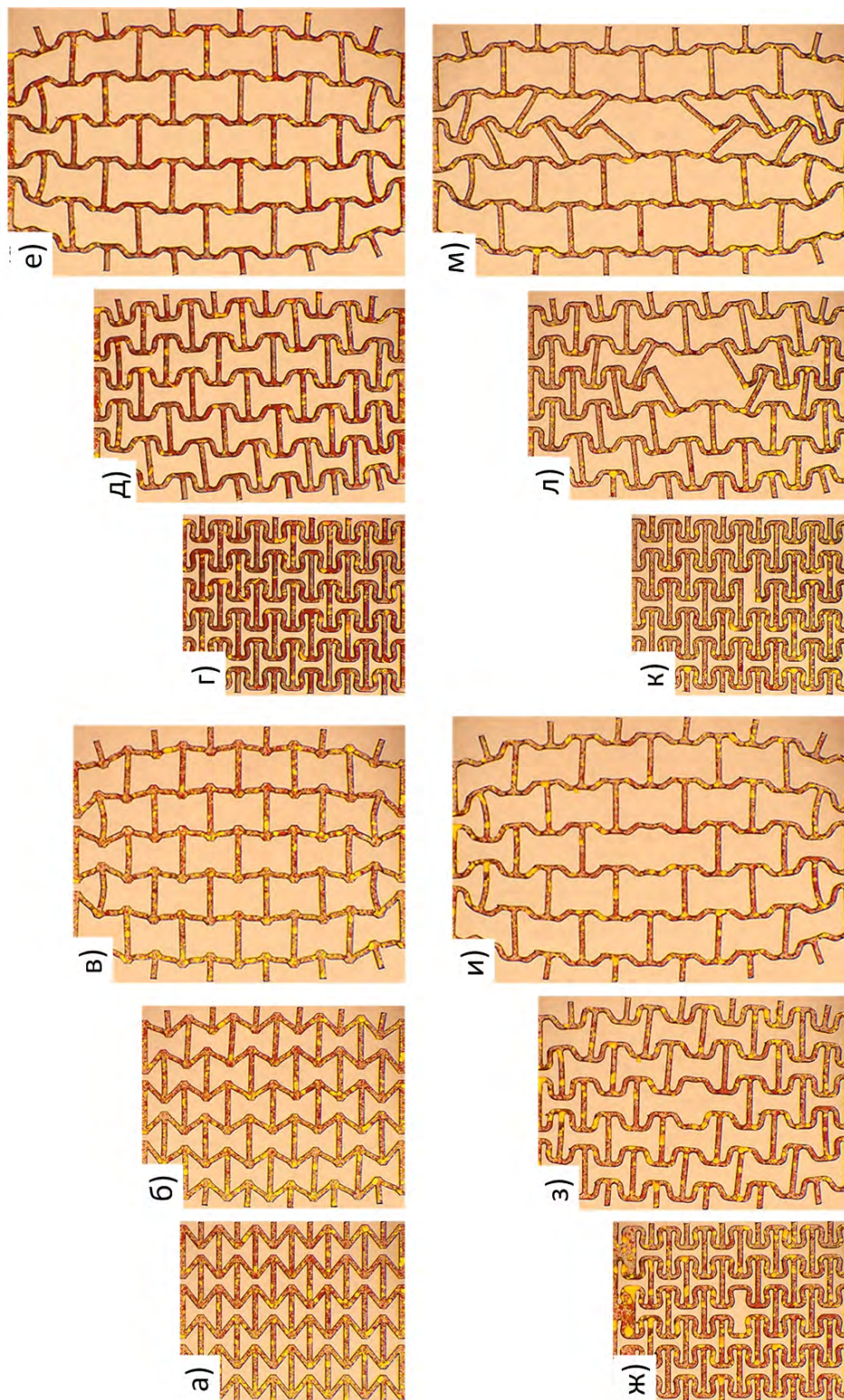


Рис. П.3: Фотографии образца zz на различных стадиях деформирования $\epsilon_x = 0, \epsilon_y = 0$ (а), $\epsilon_x = 0.110, \epsilon_y = 0.172$ (б), $\epsilon_x = 0.319, \epsilon_y = 0.400$ (в); Фотографии образца ss на различных стадиях деформирования $\epsilon_x = 0, \epsilon_y = 0$ (г), $\epsilon_x = 0.167, \epsilon_y = 0.396$ (д), $\epsilon_x = 0.457, \epsilon_y = 0.785$ (е); Фотографии образца ssH на различных стадиях деформирования $\epsilon_x = 0, \epsilon_y = 0$ (ж), $\epsilon_x = 0.139, \epsilon_y = 0.47$ (з), $\epsilon_x = 0.443, \epsilon_y = 0.800$ (и); Фотографии образца ssV на различных стадиях деформирования $\epsilon_x = 0, \epsilon_y = 0$ (к), $\epsilon_x = 0.145, \epsilon_y = 0.445$ (л), $\epsilon_x = 0.360, \epsilon_y = 0.881$ (м). Ось y соответствует оси растяжения, а ось x – поперечному направлению.

П.2.1. Результаты и обсуждение

На Рис.П.2а представлены диаграммы растягивающая сила – перемещение ($F - \Delta l_y$) для четырех плоскостных образцов. Как видно из рисунка, диаграммы исследуемых образцов подобны до значения перемещения равного 12 мм. Максимальное продольное перемещение образца zz оказывается гораздо меньше, чем у образцов с криволинейными элементами. Различие связано с особенностью конструкции криволинейных элементов. Ячеистые конструкции, содержащие криволинейные элементы, испытывают большие пластические деформации. На Рис.П.3 представлены снимки для четырех исследуемых образцов на разных стадиях деформирования.

На Рис.П.2б показано изменение поперечного перемещения Δl_x в зависимости от продольного перемещения Δl_y для четырех образцов. Образец zz имеет меньшие перемещения по сравнению с образцами, содержащими криволинейные элементы. Максимальное изменение продольного перемещения для образца с прямолинейными элементами составило 9.6 мм. В случае образцов с криволинейными элементами максимальное изменение продольного перемещения оказалось более 18 мм (образец ss – 18.6 мм, образец ssH – 18.8 мм, образец ssV – 20.8 мм). Образец с отсутствующим вертикальным элементом удлинился гораздо сильнее по сравнению с другими образцами, содержащими криволинейные элементы. Это связано с тем, что из-за отсутствия горизонтального элемента образец позже терял устойчивость (см. Рис.П.3). Изменения поперечного перемещения также оказывается большим у образцов с криволинейными элементами по сравнению с образцом zz. Максимальные изменения поперечных перемещений соответствовали 6.4 мм для образца zz, 9.2 мм для образца ss, 8.9 мм для образца ssH и 7.2 мм для образца ssV. Из Рис.П.3 видно, что дефект, представленный в образце ssV, уменьшает поперечные перемещения по сравнению с образцом ss и образцом ssH.

В теории упругости малых деформаций коэффициент Пуассона определяется по формуле $\nu = -\varepsilon_x/\varepsilon_y$, где ε_y - продольная деформация, ε_x - поперечная деформация. Аналогично рассчитывался коэффициент Пуассона при пластической деформации для образцов с ячеистой решеткой. В этом случае $\varepsilon_y = \Delta l_y/L_0$ - продольная деформация, $L_0 = 28$ мм – длина центральной зоны, $\varepsilon_x = \Delta l_x/l_0$ - поперечная деформация, $l_0 = 24$ мм – ширина центральной зоны.

Расчет зависимости коэффициента Пуассона от продольных и поперечных деформаций для четырех образцов приведен на Рис.П.4. Как видно из Рис.П.4а плоские ячеистые структуры, содержащие криволинейные элементы, могут испытывать более сильные продольные деформации. В результате растяжения двумерной ячеистой структуры с прямыми элементами максимальные продольные деформации равны 40%, а максимальные поперечные деформации – 32%. В случае образцов с криволинейными элементами максимальные продольные и максимальные поперечные деформации составили 78% и 46% для образца ss, 80% и 44% для об-

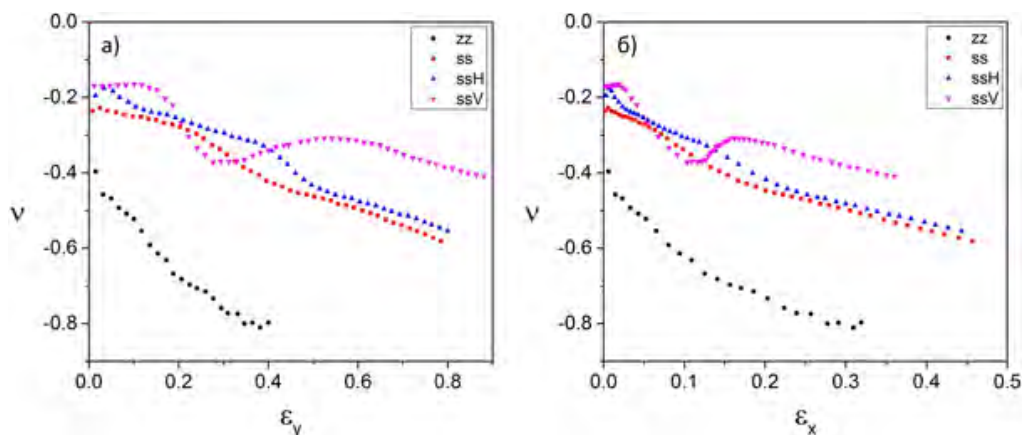


Рис. П.4: Коэффициент Пуассона как функция от (а) продольных деформаций ϵ_y и (б) поперечных деформаций ϵ_x для четырех образцов.

разца ssH, 88% и 36% для образца ssV). Для образца ss и образца ssH продольные и поперечные деформации имеют близкие значения, т.е. можно утверждать, что отсутствие горизонтального элемента в ячеистой структуре слабо влияет на механические свойства при одноосном растяжении. Отсутствие вертикального дефекта (образец ssV) позволяет сильнее удлиняться по сравнению с образцом ss и образцом ssH (см. Рис.П.3).

Коэффициент Пуассона для ячеистой структуры с прямыми элементами при малых деформациях равен -0.4 и далее быстро уменьшается до -0.8 с ростом деформаций. У образца ss и образца ssH минимальное значение коэффициента Пуассона оказываются равными -0.58 и -0.55 соответственно. Отметим, что у образца zz, образца ss и образца ssH коэффициент Пуассона в зависимости от продольных и поперечных деформаций монотонно уменьшаются в отличие от образца ssV, у которого коэффициент Пуассона имеет сложный характер поведения. Отметим, что у образца ssV из-за отсутствия вертикального элемента, значения поперечного смещения и, следовательно, поперечной деформации оказываются меньше чем у образца ss, что отражается на коэффициенте Пуассона. Минимальное значение коэффициента Пуассона для образца ssV равно -0.41 .

Также проведено экспериментальное исследование влияние дефектов на образцы с конструкциями из вогнутых шестиугольников с прямолинейными элементами, в которых отсутствовал один горизонтальный или вертикальный элемент в центральной зоне образца. В результате лазерной резки были получены три плоских ячеистых образца размерами $112.5 \times 24 \times 0.7$ мм с центральной зоной $28 \times 24 \times 0.7$ мм (Рис.П.5): бездефектный образец zz (Рис.П.5), образец zzH с отсутствующим одним горизонтальным элементом (Рис.П.5), образец zzV с отсутствующим одним вертикальным элементом (Рис.П.5). Поперечный размер элементов ячеистой конструкции равнялся толщине исходной пластины.

На Рис.П.6 показано изменение поперечного перемещения Δl_x в зависимо-

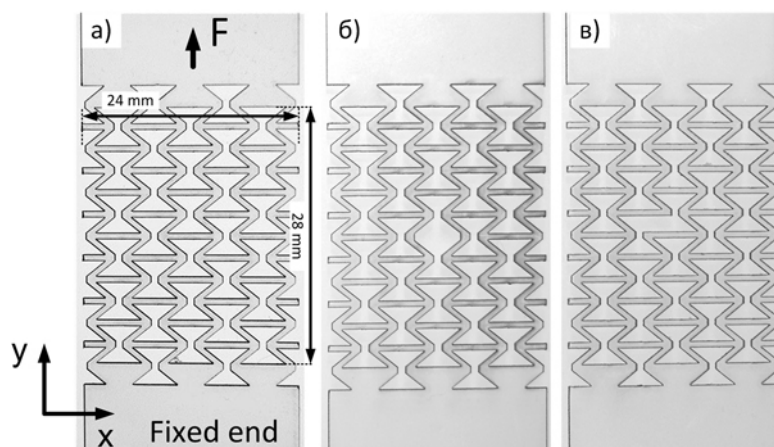


Рис. П.5: Три плоских ячеистых образца с центральной зоной $28 \times 24 \times 0.7$ мм: бездефектный образец *zz* (а); образец с отсутствующим одним горизонтальным элементом, образец *zzH* (б); образец с отсутствующим одним вертикальным элементом, образец *zzV* (в).

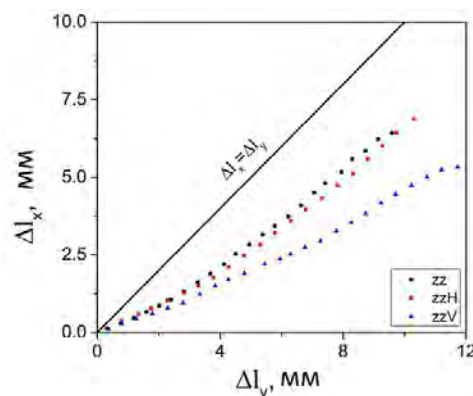


Рис. П.6: Изменение поперечного перемещения Δl_x в зависимости от продольного перемещения Δl_y .

сти от продольного перемещения Δl_y для трех ячеистых образцов. Образец с отсутствующим вертикальным элементом (образец *zzV*) удлинился гораздо сильнее по сравнению с другими образцами. Максимальное изменение продольного перемещения оказалось 9.6 мм для образца *zz*, 10.3 мм для образца *zzH* и 11.7 мм для образца *zzV*. Отсутствие одного горизонтального элемента в образце *zzH* позволило ему позже терять устойчивость по сравнению с образцом *zz*. Это привело к тому, что образец *zzH* чуть сильнее удлинился по сравнению с бездефектной конструкцией. Отсутствие одного вертикального элемента у образца *zzV* приводит к тому, что этот образец слабо расширяется в поперечном направлении по сравнению с двумя другими образцами. Максимальные изменения поперечных перемещений соответствовали 6.4 мм для образца *zz*, 6.9 мм для образца *zzH* и 5.3 мм для образца *zzV*. На Рис.П.7 представлены снимки для трех исследуемых образцов на разных стадиях деформирования.

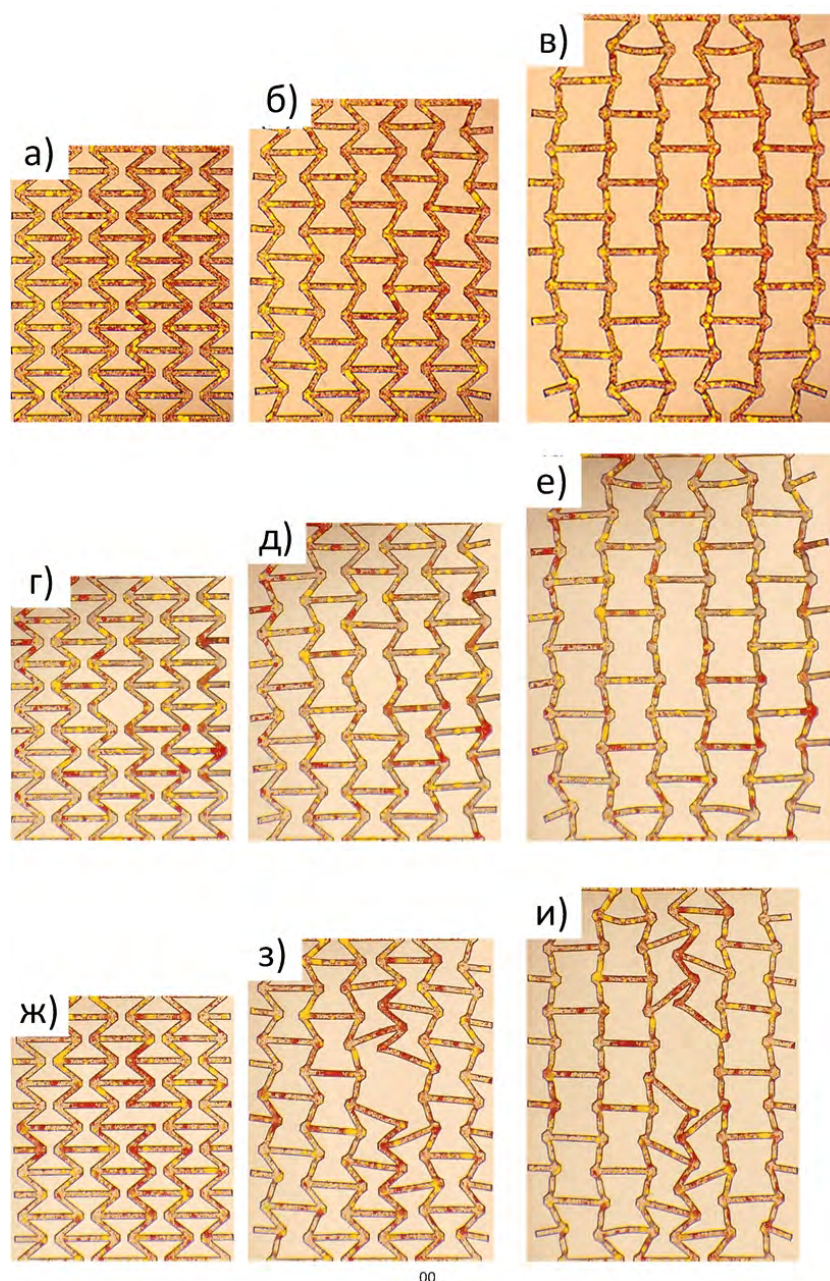


Рис. П.7: Фотографии образца zz на различных стадиях деформирования $\varepsilon_x = 0$, $\varepsilon_y = 0$ (а), $\varepsilon_x = 0.110$, $\varepsilon_y = 0.172$ (б), $\varepsilon_x = 0.319$, $\varepsilon_y = 0.400$ (в); Фотографии образца zzH на различных стадиях деформирования $\varepsilon_x = 0$, $\varepsilon_y = 0$ (г), $\varepsilon_x = 0.118$, $\varepsilon_y = 0.188$ (д), $\varepsilon_x = 0.287$, $\varepsilon_y = 0.365$ (е); Фотографии образца ssV на различных стадиях деформирования $\varepsilon_x = 0$, $\varepsilon_y = 0$ (ж), $\varepsilon_x = 0.098$, $\varepsilon_y = 0.210$ (з), $\varepsilon_x = 0.218$, $\varepsilon_y = 0.395$ (и). Ось y соответствует оси растяжения, а ось x – поперечному направлению.

Зависимости коэффициента Пуассона от продольных и поперечных деформаций для трех ячеистых образцов приведен на Рис.П.8. Как видно из Рис.П.8а образец zz и образец zzV испытывают большие продольные деформации по сравнению с образцом zzH . В случае поперечных деформаций (см. Рис.П.8б) отсутствие од-

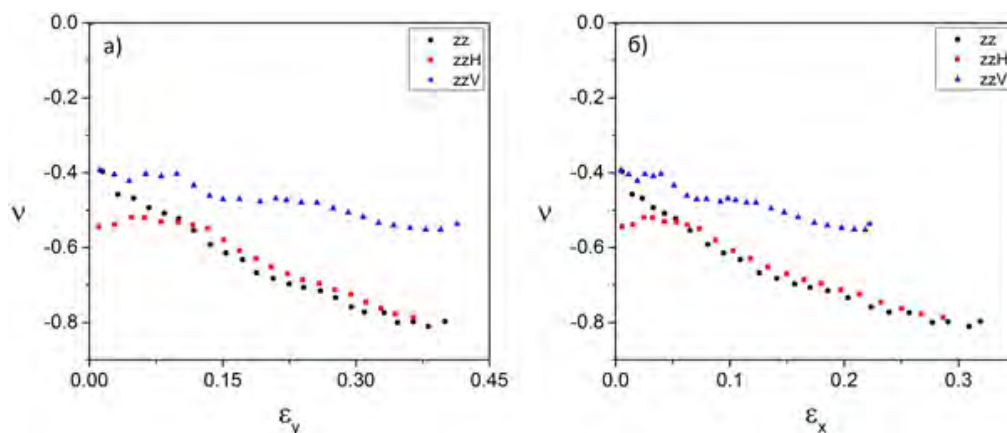


Рис. П.8: Коэффициент Пуассона как функция от (а) продольных деформаций ϵ_y и (б) поперечных деформаций ϵ_x для трех образцов.

ного вертикального элемента приводит к тому, что образец zzV имеет существенно меньшую поперечную деформацию по сравнению с двумя другими образцами. Максимальные продольные и максимальные поперечные деформации составили 40% и 32% для образца zz, 36% и 29% для образца zzH, 41% и 22% для образца zzV).

Коэффициент Пуассона для образца zz меняется в большем диапазоне (от -0.40 до -0.81), чем у двух других образцов. В случае образца zzH коэффициент Пуассона уменьшает свое значение от -0.54 до -0.79 . Отсутствие одного горизонтального элемента в ячеистой плоскости (образец zzH) слабо влияет на механические свойства. Различие в коэффициенте Пуассона имеет место при продольных деформациях, не превышающих 13%. Меньше всего коэффициент Пуассона изменяется у образца zzV (от -0.40 до -0.54). Это связано с тем, что этот образец сильнее удлиняется и менее расширяется по сравнению с образцом zz и образцом zzH (Рис.П.6).

П.2.2. Заключение

Экспериментально исследованы механические свойства плоских ячеистых конструкций с ауксетическим поведением при одноосном растяжении. Растяжение образца, состоящего из прямолинейных элементов, и бездефектного образца, содержащего криволинейные элементы, показало, что ячеистые конструкции с криволинейными элементами более сильно удлиняются по сравнению с конструкциями с прямолинейными элементами. Это связано с тем, что конструкции с криволинейными элементами могут испытывать более сильные пластические деформации за счет особенностей конструкции. С другой стороны ячеистые конструкции с прямолинейными элементами имеют большие отрицательные значения коэффициента Пуассона. Анализ экспериментальных данных показал, что отсутствие горизонтального элемента в ячеистой конструкции слабо влияет на механические свойства при одноосном растяжении в отличие от конструкции с отсутствующим вертикальным

элементом.

Литература

1. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Ауксетическая механика кристаллических материалов // Изв. РАН. МТТ. 2010. № 4. С. 43–62.
2. Лисовенко Д. С. Аномальные величины коэффициента Пуассона анизотропных кристаллов // Деформация и разрушение материалов. 2011. № 7. С. 1–10.
3. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Об отрицательности коэффициента Пуассона для анизотропных материалов // ДАН. 2009. Т. 429, № 5. С. 614–616.
4. Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Коэффициент Пуассона для анизотропных наночастиц // Изв. ВУЗов. Физика. 2010. Т. 53, № 3/2. С. 61–66.
5. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Аномальные величины коэффициента Пуассона для наночастиц // Вестник Тамбовского Университета. Серия: Естественные и технические науки. 2010. Т. 15, № 3-2. С. 1177–1181.
6. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Кубические ауксетики // ДАН. 2011. Т. 439, № 2. С. 184–187.
7. Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Кубические кристаллы с отрицательными коэффициентами Пуассона (кубические ауксетики) // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 4(2). С. 488–489.
8. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Classification of cubic auxetics // Phys. Status Solidi B. 2013. Vol. 250, no. 10. P. 2038–2043.
9. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С., Волков М. А. Отрицательный коэффициент Пуассона для кубических кристаллов и нано/микротрубок // Физ. Мезомех. 2013. Т. 16, № 6. С. 13–31.
10. Лисовенко Д. С., Баимова Ю. А., Рысаева Л. Х. и др. Равновесные структуры из углеродных алмазоподобных кластеров и их упругие свойства // ФТТ. 2017. Т. 59, № 4. С. 801–809.

11. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Связь среднего коэффициента Пуассона с модулем Юнга для кубических кристаллов // ДАН. 2012. Т. 443, № 6. С. 677–681.
12. Епишин А. И., Лисовенко Д. С. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов // ЖТФ. 2016. Т. 86, № 10. С. 74–82.
13. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Модуль сдвига кубических кристаллов // Письма о материалах. 2012. Т. 2, № 1. С. 21–24.
14. Городцов В. А., Лисовенко Д. С. К механике углеродных и других слоистых нанотрубок // Инженерная Физика. 2009. № 4. С. 36–38.
15. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Изменчивость упругих свойств гексагональных ауксетиков // ДАН. 2011. Т. 441, № 4. С. 468–471.
16. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Komarova M. A., Lisovenko D. S. Extreme values of the shear modulus for hexagonal crystals // Scripta Mater. 2017. Vol. 140. P. 55–58.
17. Komarova M. A., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Variability of Young's modulus and Poisson's ratio of hexagonal crystals // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2018. Vol. 347. P. 012019.
18. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. The elastic properties of hexagonal auxetics under pressure // Phys. Status Solidi B. 2016. Vol. 253, no. 7. P. 1261–1269.
19. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Изменчивость коэффициента Пуассона для гексагональных кристаллов под давлением // Труды МАИ. 2016. Т. 87. С. 1(22).
20. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С., Волков М. А. Ауксетики среди 6-ти константных тетрагональных кристаллов // Письма о материалах. 2015. Т. 5, № 4. С. 409–413.
21. Каримов Д. Н., Лисовенко Д. С., Сизова Н. Л., Соболев Б. П. Анизотропия механических свойств кристаллов TbF_3 // Кристаллография. 2018. Т. 63, № 1. С. 106–113.
22. Новикова Н. Е., Лисовенко Д. С., Сизова Н. Л. Особенности структуры, упругие модули и картина деформации и разрушения по Кнупу монокристаллов гидрофталатов калия, рубидия, цезия и аммония // Кристаллография. 2018. Т. 63, № 3. С. 425–440.

23. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона для 7-ми константных тетрагональных кристаллов и нано/микротрубок из них // Физ. Мезомех. 2014. Т. 17, № 5. С. 5–14.
24. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С., Волков М. А. Механические характеристики 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов и нано/микротрубок из них // Письма о материалах. 2016. Т. 6, № 2. С. 93–97.
25. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Средний коэффициент Пуассона для кристаллов. Гексагональные ауксетики // Письма о материалах. 2013. Т. 3, № 1. С. 7–11.
26. Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Об изменчивости упругих свойств многослойных углеродных нанотрубок // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31, № 1. С. 35–41.
27. Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Упругие свойства графитовых стержней и многослойных углеродных нанотрубок (растяжение и кручение) // Изв. РАН, МТТ. 2005. № 4. С. 42–56.
28. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Мезомеханика многослойных углеродных нанотрубок и наносуов // Физ. Мезомех. 2008. Т. 11, № 6. С. 25–42.
29. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. К описанию многослойных нанотрубок в рамках моделей цилиндрически анизотропной упругости // Физ. Мезомех. 2009. Т. 12, № 5. С. 5–14.
30. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Модули Юнга и коэффициенты Пуассона криволинейно анизотропных гексагональных и ромбоэдрических нанотрубок. Нанотрубки-ауксетики // ДАН. 2013. Т. 452, № 3. С. 279–283.
31. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S., Volkov M. A. Negative Poisson's ratio for six-constant tetragonal nano/microtubes // Phys. Status Solidi B. 2015. Vol. 252, no. 7. P. 1580–1586.
32. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S., Volkov M. A. Auxeticity in nano/microtubes produced from orthorhombic crystals // Smart Mater. Struct. 2016. Vol. 25, no. 5. P. 054006.
33. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Кручение цилиндрически-анизотропных нано/микротрубок из кубических материалов, полученных сворачиванием кристаллографических плоскостей (011) // Письма о материалах. 2016. Т. 6, № 4. С. 249–252.

34. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С., Волков М. А. Двухслойные трубки из кубических кристаллов // ДАН. 2016. Т. 471, № 4. С. 414–420.
35. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S., Volkov M. A. Two-layered tubes from cubic crystals: Auxetic tubes // Phys. Status Solidi B. 2017. Vol. 254, no. 12. P. 1600815.
36. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Линейный эффект Пойнтинга при кручении и растяжении криволинейно-анизотропных трубок // ДАН. 2015. Т. 464, № 1. С. 35–38.
37. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Эффект Пойнтинга для цилиндрически-анизотропных нано/микротрубок // Физ. Мезомех. 2016. Т. 19, № 1. С. 5–14.
38. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Кручение цилиндрически анизотропных нано/микротрубок из 7-константных тетрагональных кристаллов. Эффект Пойнтинга // Физ. Мезомех. 2015. Т. 18, № 6. С. 5–11.
39. Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Tension of thin two-layered plates of hexagonal crystals // Compos. Struct. 2019. Vol. 209. P. 453–459.
40. Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Longitudinal elastic tension of two-layered plates from isotropic auxetics-nonauxetics and cubic crystals // Eur. J. Mech. A Solids. 2017. Vol. 63. P. 122–127.
41. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С., Волков М. А. Тонкие однородные двухслойные пластины из кубических кристаллов с различной ориентацией слоев // Физ. Мезомех. 2018. Т. 21, № 2. С. 5–13.
42. Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S., Lim T.-C. Three-layered plate exhibiting auxeticity based on stretching and bending modes // Compos. Struct. 2018. Vol. 194. P. 643–651.
43. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Поверхностные волны Релея и Лява при отрицательном коэффициенте Пуассона изотропных сред // Изв. РАН. МТТ. 2014. № 4. С. 74–89.
44. Рысаева Л. Х., Баимова Ю. А., Лисовенко Д. С. и др. Упругие свойства фуллерита // Фунд. проблемы совр. материаловедения. 2016. Т. 13, № 1. С. 105–109.
45. Rysaeva L. Kh., Vaimova J. A., Lisovenko D. S. et al. Elastic properties of fullerites and diamond-like phases // Phys. Status Solidi B. 2019. Vol. 256, no. 1. P. 1800049.
46. Lisovenko D. S., Vaimova J. A., Rysaeva L. Kh. et al. Equilibrium diamond-like carbon nanostructures with cubic anisotropy: Elastic properties // Phys. Status Solidi B. 2016. Vol. 253, no. 7. P. 1295–1302.

47. Гольдштейн Р. В., Лисовенко Д. С., Ченцов А. В., Лаврентьев С. Ю. Экспериментальное изучение ауксетического поведения вогнутой ячеистой решетки с криволинейными элементами // Письма о материалах. 2017. Т. 7, № 2. С. 81–84.
48. Гольдштейн Р. В., Лисовенко Д. С., Ченцов А. В., Лаврентьев С. Ю. Экспериментальное изучение влияния дефектов на ауксетическое поведение ячеистой конструкции с криволинейными элементами // Письма о материалах. 2017. Т. 7, № 4. С. 355–358.
49. Chentsov A. V., Lisovento D. S. Experimental study of auxetic behavior of cellular structure // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. Vol. 991. P. 012017.
50. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т.7. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248с.
51. Wojciehowski K. W. Negative Poisson ratios at negative pressures // Mol. Phys. Rep. 1995. Vol. 10. P. 129–136.
52. Ting T. C. T., Chen T. Poisson's ratio for anisotropic elastic materials can have no bounds // Quart. J. Mech. Appl. Math. 2005. Vol. 58, no. 1. P. 73–82.
53. Love A. E. H. A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity. 4th edn edition. Dover, New York, 1944.
54. Зубов В. Г., Фирсова М. М. Об особенностях упругого поведения кварца в области α - β перехода // Кристаллография. 1962. Т. 7, № 3. С. 469–471.
55. Поперека М. Я., Балагуров В. Г. Ферромагнитные пленки с отрицательным коэффициентом Пуассона // ФТТ. 1969. Т. 11, № 12. С. 3507–3513.
56. Gunton D. J., Saunders G. A. Stability limits on the Poisson ratio: application to a martensitic transformation // Proc. R. Soc. Lond. Ser.A. 1975. Vol. 343, no. 1632. P. 63–83.
57. Milstein F., Huang K. Existence of a negative Poisson ratio in fcc crystals // Phys. Rev. B. 1979. Vol. 19, no. 4. P. 2030–2033.
58. Baughman R. H., Shacklette J. M., Zakhidov A. A., Stafström S. Negative Poisson's ratios as a common feature of cubic metals // Nature. 1998. Vol. 392, no. 6674. P. 362–365.
59. Norris A. N. Poisson's ratio in cubic materials // Proc. Roy. Soc. A. 2006. Vol. 462, no. 2075. P. 3385–3405.

60. Светлов И. Л., Епишин А. И., Кривко А. И. и др. Анизотропия коэффициента Пуассона монокристаллов никелевого сплава // ДАН СССР. 1988. Т. 302, № 2. С. 1372–1375.
61. Yeganeh-Haeri A., Weidner D. J., Parise J. B. Elasticity of α -cristobalite: a silicon dioxide with negative Poisson's ratio // Science. 1992. Vol. 257, no. 5070. P. 650–652.
62. Keskar N. R., Chelikowsky J. R. Negative Poisson ratios in crystalline SiO_2 from first-principles calculations // Nature. 1992. Vol. 358, no. 6383. P. 222–224.
63. Grima J. N., Gatt R., Alderson A., Evans K. E. On the origin of auxetic behaviour in the silicate α -cristobalite // J. Mater. Chem. 2005. Vol. 15. P. 4003–4005.
64. Grima J. N., Gatt R., Alderson A., E. Evans K. An alternative explanation for the negative Poisson's ratios in α -cristobalite // Mater. Sci. Eng. A. 2006. Vol. 423, no. 1-2. P. 219–224.
65. Schärer U., Wachter P. Brillouin spectroscopy on doped SmS // Physica B. 1997. Vol. 230-232. P. 721–724.
66. Lubarda V. A., Meyers M. A. On the negative poisson ratio in monocrystalline zinc // Scripta Mater. 1999. Vol. 40, no. 8. P. 975–977.
67. Kellogg R. A., Russell A. M., Lograsso T. A. et al. Tensile properties of magnetostrictive iron-gallium alloys // Acta Mater. 2004. Vol. 52, no. 17. P. 5043–5050.
68. Grima J. N., Jackson R., Alderson A., Evans K. E. Do zeolites have negative Poisson's ratios? // Adv. Mater. 2000. Vol. 12, no. 24. P. 1912–1918.
69. Grima J. N., Cassar R. N., Gatt R. On the effect of hydrostatic pressure on the auxetic character of NAT-type silicates // J. Non-Cryst. Solids. 2009. Vol. 355, no. 24-27. P. 1307–1312.
70. Jiang J.-W., Park H. S. Negative Poisson's ratio in single-layer black phosphorus // Nat. Commun. 2014. Vol. 5, no. 1. P. 4727.
71. Ballato A. Poisson's ratio for tetragonal, hexagonal, and cubic crystals // IEEE Trans. on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control. 1996. Vol. 43, no. 1. P. 56–62.
72. Ballato A. Alteration of Poisson's ratio in high coupling piezoelectrics // Proc. IEEE Ultrasonics Symposium. 2002. P. 1011–1014.
73. Rovati M. On the negative Poisson's ratio of an orthorhombic alloy // Scripta Mater. 2003. Vol. 48, no. 3. P. 235–240.

74. Rovati M. Directions of auxeticity for monoclinic crystals // Scripta Mater. 2004. Vol. 51, no. 11. P. 1087–1091.
75. Tokmakova S. P. Stereographic projections of Poisson's ratio in auxetic crystals // Phys. Status Solidi B. 2005. Vol. 242, no. 3. P. 721–729.
76. Aouni N., Wheeler L. Auxeticity of calcite and aragonite polymorphs of CaCO_3 and crystals of similar structure // Phys. Status Solidi B. 2008. Vol. 245, no. 11. P. 2454–2462.
77. Ballato A. Poisson's ratios of auxetic and other technological materials // IEEE Trans. on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control. 2010. Vol. 57, no. 1. P. 7–15.
78. Lethbridge Z. A. D., Walton R. I., Marmier A. S. H. et al. Elastic anisotropy and extreme Poisson's ratios in single crystals // Acta Mater. 2010. Vol. 58, no. 19. P. 6444–6451.
79. Беломестных В. Н., Соболева Э. Г. Коэффициенты поперечных деформаций кубических ионных кристаллов // Письма о материалах. 2011. Т. 1, № 2. С. 84–87.
80. Беломестных В. Н., Соболева Э. Г. Нетрадиционный подход к определению анизотропных коэффициентов Пуассона кубических кристаллов // Письма о материалах. 2012. Т. 2, № 1. С. 13–16.
81. Беломестных В. Н., Соболева Э. Г. Особенности поведения коэффициентов Пуассона ауксетичных материалов // Вестник Бурятского Гос. Университета. 2013. № 3. С. 79–87.
82. Волков М. А. Экстремальные значения коэффициента Пуассона триклинных и моноклинных кристаллов // Письма о материалах. 2014. Т. 4, № 3. С. 167–170.
83. Krasavin V. V., Krasavin A. V. Auxetic properties of cubic metal single crystals // Phys. Status Solidi B. 2014. Vol. 251, no. 11. P. 2314–2320.
84. Azzopardi K. M., Brincat J. P., Grima J. N., Gatt R. Anomalous elastic properties in stishovite // RSC Adv. 2015. Vol. 12. P. 8974–8980.
85. Раранский Н. Д., Балазюк В. Н., Гунько М. Н., Струк А. Я. Анализ особенностей ауксетических свойств фуллерита C_{60} // Восточно-европейский журнал передовых технологий. 2015. Т. 5, № 5(77). С. 18–23.
86. Гунько М. Н., Олейнич-Лисюк А. В., Раранский Н. Д., Тащук А. Ю. Анализ особенностей деформации ауксетического бериллия // Восточно-европейский журнал передовых технологий. 2015. Т. 5, № 5. С. 13–17.

87. Raransky M. D., Balazyuk V. N., Gunko M. M. et al. Formation of auxetic surfaces in rhombic syngony single crystals // Proc. SPIE. 2015. Vol. 9809. P. 98090Q.
88. Raransky M. D., Balazyuk V. N., Gunko M. M. Auxeticity properties of hexagonal syngony crystals // Phys. Chem. Solid State. 2015. Vol. 16, no. 1. P. 34–43.
89. Раранский Н. Д., Балазюк В. Н., Гунько М. Н. и др. Аномальные деформационные свойства и ауксетичность монокристаллов тригональной сингонии // Металлофизика и новейшие технологии. 2017. Т. 39, № 2. С. 245–263.
90. Dagdelen J., Montoya J., de Jong M., Persson K. Computational prediction of new auxetic materials // Nat. Commun. 2017. Vol. 8, no. 1. P. 323.
91. Boulanger Ph., Hayes M. Poisson's Ratio for orthorhombic materials // J. Elasticity. 1998. Vol. 50, no. 1. P. 87–89.
92. Hayes M., Shuvalov A. On the extreme values of Young's modulus, the shear modulus, and Poisson's ratio for cubic materials // J. Appl. Mech. 1998. Vol. 65, no. 3. P. 786–787.
93. Cazzani A., Rovati M. Extrema of Young's modulus for cubic and transversely isotropic solids // Int. J. Solids Struct. 2003. Vol. 40, no. 7. P. 1713–1744.
94. Ting T. C. T. Very large Poisson's ratio with a bounded transverse strain in anisotropic elastic materials // J. Elasticity. 2004. Vol. 77, no. 2. P. 163–176.
95. Cazzani A., Rovati M. Extrema of Young's modulus for elastic solids with tetragonal symmetry // Int. J. Solids Struct. 2005. Vol. 42, no. 18-19. P. 5057–5096.
96. Ting T. C. T. On anisotropic elastic materials for which Young's modulus $E(n)$ is Independent of n or the shear modulus $G(n,m)$ is independent of n and m // J. Elasticity. 2005. Vol. 81, no. 3. P. 271–292.
97. Ting T. C. T. The stationary values of Young's modulus for monoclinic and triclinic materials // J. Mechanics. 2005. Vol. 21, no. 4. P. 249–253.
98. Ting T. C. T. Explicit expression of the stationary values of Young's modulus and the shear modulus for anisotropic elastic materials // J. Mechanics. 2005. Vol. 21, no. 4. P. 255–266.
99. Аннин Б. Д., Остробаблин Н. И. Анизотропия упругих свойств материалов // ПМТФ. 2008. Т. 49, № 6. С. 131–151.
100. Ting T. C. T., Barnett D. M. Negative Poisson's ratios in anisotropic linear elastic media // J. Appl. Mech. 2005. Vol. 72, no. 6. P. 929–931.

101. Branka A. C., Heyes D. M., Wojciechowski K. W. Auxeticity of cubic materials // *Phys. Status Solidi B*. 2009. Vol. 246, no. 9. P. 2063–2071.
102. Branka A. C., Heyes D. M., Wojciechowski K. W. Auxeticity of cubic materials under pressure // *Phys. Status Solidi B*. 2011. Vol. 248, no. 1. P. 96–104.
103. Lim T. C. *Auxetic Materials and Structures*. Springer Singapore, 2015. ISBN: 978-981-287-274-6. 588p.
104. Конек Д. А., Войцеховски К. В., Плескачевский Ю. М., Шилько С. В. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона (обзор) // *Механика композитных материалов и конструкций*. 2004. Т. 10, № 1. С. 35–69.
105. Prawoto Y. Seeing auxetic materials from the mechanics point of view: A structural review on the negative Poisson's ratio // *Comp. Mater. Sci*. 2012. Vol. 58. P. 140–153.
106. Carneiro V. H., Meireles J., Puga H. Auxetic materials - A review // *Mater. Sci.-Pol*. 2013. Vol. 31, no. 4. P. 561–571.
107. Saxena K. K., Das R., Calius E. P. Three decades of auxetics research - materials with negative Poisson's ratio: A review // *Adv. Eng. Mater*. 2016. Vol. 18, no. 11. P. 1847–1870.
108. Kolken H. M. A., Zadpoor A. A. Auxetic mechanical metamaterials // *RSC Adv*. 2017. Vol. 7, no. 9. P. 5111–5129.
109. Ren X., Das R., Tran P. et al. Auxetic metamaterials and structures: a review // *Smart Mater. Struct*. 2018. Vol. 27, no. 2. P. 023001.
110. Lakes R. S. Foam structures with a negative Poisson's ratio // *Science*. 1987. Vol. 235, no. 4792. P. 1038–1040.
111. Evans K. E., Alderson A. Auxetic materials: functional materials and structures from lateral thinking! // *Adv. Mater*. 2000. Vol. 12, no. 9. P. 617–628.
112. Choi J. B., Lakes R. S. Non-linear properties of polymer cellular materials with a negative Poisson's ratio // *J. Mater. Sci*. 1992. Vol. 27, no. 17. P. 4678–4684.
113. Choi J. B., Lakes R. S. Fracture toughness of re-entrant foam materials with a negative Poisson's ratio: experiment and analysis // *Int. J. Fract*. 1996. Vol. 80, no. 1. P. 73–83.
114. Almgren R. F. An isotropic three-dimensional structure with Poisson's ratio = -1 // *J. Elast*. 1985. Vol. 15, no. 4. P. 427–430.

115. Колпаков А. Г. К определению усредненных характеристик упругих каркасов // ПММ. 1985. Т. 99, № 6. С. 969–977.
116. Gibson L. J., Ashby M. F., Schajer G. S., Robertson C. I. The mechanics of two-dimensional cellular materials // Proc. Royal Society A. 1982. Vol. 382, no. 1782. P. 25–42.
117. Акасака Т. Эластичные композиты: Тканые конструкционные композиты. М.: Мир, 1991. 432с.
118. Herakovich C. T. Composite laminates with negative through-the-thickness Poisson's ratios // J. Compos. Mater. 1984. Vol. 18, no. 5. P. 447–455.
119. Hine P. J., Duckett R. A., Ward I. M. Negative Poisson's ratios in angle-ply laminates // J. Mater. Sci. Lett. 1997. Vol. 16, no. 7. P. 541–544.
120. Milton G. W. Composite materials with Poisson's ratios close to -1 // J. Mech. Phys. Solids. 1992. Vol. 40, no. 5. P. 1105–1137.
121. Theocaris P. S., Stavroulakis G. E., Panagiotopoulos P. D. Negative Poisson's ratios in composites with star-shaped inclusions: a numerical homogenization approach // Arc. Appl. Mech. 1997. Vol. 67, no. 4. P. 274–286.
122. Lim T. C. On simultaneous positive and negative Poisson's ratio laminates // Phys. Status Solidi B. 2007. Vol. 244, no. 3. P. 910–918.
123. Kocer C., McKenzie D. R., Bilek M. M. Elastic properties of a material composed of alternating layers of negative and positive Poisson's ratio // Mater. Sci. Eng. A. 2009. Vol. 505, no. 1-2. P. 111–115.
124. Chirima G. T., Zied K. M., Ravirala N. et al. Numerical and analytical modelling of multi-layer adhesive-film interface systems // Phys. Status Solidi B. 2009. Vol. 246, no. 9. P. 2072–2082.
125. Lim T. C. Out-of-plane modulus of semi-auxetic laminates // Eur. J. Mech. A Solids. 2009. Vol. 28, no. 4. P. 752–756.
126. Lim T. C. In-plane stiffness of semiauxetic laminates // J. Eng. Mech. 2010. Vol. 136, no. 9. P. 1176–1180.
127. Lim T. C., Acharya U. R. Counterintuitive modulus from semi-auxetic laminates // Phys. Status Solidi B. 2011. Vol. 248, no. 1. P. 60–65.
128. Strek T., Jopek H., Maruszewski B. T., Nienartowicz M. Computational analysis of sandwich-structured composites with an auxetic phase // Phys. Status Solidi B. 2014. Vol. 251, no. 2. P. 354–366.

129. Strek T., Jopek H., Idczak E. Computational design of two-phase auxetic structures // *Phys. Status Solidi B*. 2016. Vol. 253, no. 7. P. 1387–1394.
130. Strek T., Jopek H. Effective mechanical properties of concentric cylindrical composites with auxetic phase // *Phys. Status Solidi B*. 2012. Vol. 249, no. 7. P. 1359–1365.
131. Ali M. N., Rehman I. U. An Auxetic structure configured as oesophageal stent with potential to be used for palliative treatment of oesophageal cancer; development and in vitro mechanical analysis // *J. Mater. Sci.: Mater. in Medicine*. 2011. Vol. 22, no. 11. P. 2573–2581.
132. Carneiro V. H., Puga H. Modeling and elastic simulation of auxetic magnesium stents // *IEEE 4th Portuguese Meeting on Bioengineering (ENBENG)*. 2015.
133. Ren X., Shen J., Tran P. et al. Auxetic nail: Design and experimental study // *Compos. Struct.* 2018. Vol. 184. P. 288–298.
134. Alderson A., Rasburn J., Evans K. E., Grima J. N. Auxetic polymeric filters display enhanced de-fouling and pressure compensation properties // *Membrane Technology*. 2001. Vol. 2001, no. 137. P. 6–8.
135. Attard D., Casha A., Grima J. Filtration properties of auxetics with rotating rigid units // *Materials*. 2018. Vol. 11, no. 5. P. 725.
136. Zhou L., Jiang L., Hu H. Auxetic composites made of 3D textile structure and polyurethane foam // *Phys. Status Solidi B*. 2016. Vol. 253, no. 7. P. 1331–1341.
137. Jiang N., Hu H. Auxetic yarn made with circular braiding technology // *Phys. Status Solidi B*. 2019. Vol. 256, no. 1. P. 1800168.
138. Sanami M., Ravirala N., Alderson K., Alderson A. Auxetic materials for sports applications // *Procedia Engineering*. 2014. Vol. 72. P. 453–458.
139. Smardzewski J., Jasińska D., Janus-Michalska M. Structure and properties of composite seat with auxetic springs // *Compos. Struct.* 2014. Vol. 113. P. 354–361.
140. Радущкевич Л. В., Лукьянович В. М. О структуре углерода, образующегося при термическом разложении окиси углерода на железном контакте // *ЖФХ*. 1952. Т. 26, № 1. С. 88–95.
141. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature*. 1991. Vol. 354, no. 6348. P. 56–58.
142. Bacon R. Growth, structure, and properties of graphite whiskers // *J. Appl. Phys.* 1960. Vol. 31, no. 2. P. 283–290.

143. Tenne R., Margulis L., Genut M., Hodes G. Polyhedral and cylindrical structures of tungsten disulphide // *Nature*. 1992. Vol. 360, no. 6403. P. 444–446.
144. Margulis L., Salitra G., Tenne R., Talianker M. Nested fullerene-like structures // *Nature*. 1993. Vol. 365, no. 6442. P. 113–114.
145. Chopra N. G., Luyken R. J., Cherrey K. et al. Boron nitride nanotubes // *Science*. 1995. Vol. 269, no. 5226. P. 966–967.
146. Pokropivny V. V. Non-Carbon nanotubes (Review). Part 2. Types and structure // *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. 2001. Vol. 40, no. 11/12. P. 582–594.
147. Rao C. N. R., Govindaraj A. *Nanotubes and nanowires*. 2nd edition. Royal Society of Chemistry, 2011.
148. Чернозатонский Л. А., Артюх А. А. Квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов: структура, синтез, свойства и применение // *УФН*. 2017. Vol. 188, no. 1. P. 3–30.
149. Kim J. H., Pham T. V., Hwang J. H. et al. Boron nitride nanotubes: synthesis and applications // *Nano Convergence*. 2018. Vol. 5, no. 1. P. 17.
150. Prinz V. Ya., Seleznev V. A., Gutakovsky A. K. et al. Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays // *Physica E*. 2000. Vol. 6, no. 1-4. P. 828–831.
151. Golod S. V., Prinz V. Ya., Mashanov V. I., Gutakovsky A. K. Fabrication of conducting GeSi/Si micro- and nanotubes and helical microcoils // *Semicond. Sci. Technol.* 2001. Vol. 16, no. 3. P. 181–185.
152. Schmidt O. G., Schmarje N., Deneke C. et al. Three-dimensional nano-objects evolving from a two-dimensional layer technology // *Adv. Mater.* 2001. Vol. 13, no. 10. P. 756–759.
153. Schmidt O. G., Eberl K. Thin solid films roll up into nanotubes // *Nature*. 2001. Vol. 410, no. 6825. P. 168.
154. Schmidt O. G., Deneke C., Kiravittaya S. et al. Self-assembled nanoholes, lateral quantum-dot molecules, and rolled-up nanotubes // *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 2002. Vol. 8, no. 5. P. 1025–1034.
155. Фрицлер К. Б., Принц В. Я. Методы трёхмерной печати микро- и наноструктур // *УФН*. 2019. Т. 189, № 1. С. 55–71.
156. Songmuang R., Deneke Ch., Schmidt O. G. Rolled-up micro- and nanotubes from single-material thin films // *Appl. Phys. Lett.* 2006. Vol. 89, no. 22. P. 223109.

157. Koonce S. E., Arnold S. M. Metal whiskers // *J. Appl. Phys.* 1954. Vol. 25, no. 1. P. 134–135.
158. Tibbetts G. G. Why are carbon filaments tubular? // *J. Crystal Growth.* 1984. Vol. 66, no. 3. P. 632–638.
159. Dasgupta N. P., Sun J., Liu C. и др. 25th Anniversary article: Semiconductor nanowires - Synthesis, characterization, and applications // *Adv. Mater.* 2014. Т. 26, № 14. С. 2137–2184.
160. Елецкий А. В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // *УФН.* 2007. Т. 177, № 3. С. 233–274.
161. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука, 1977. 416с.
162. Poynting J. H. On pressure perpendicular to the shear planes in finite pure shears, and on the lengthening on loaded wires when twisted // *Proc. Roy. Soc. London. A.* 1909. Vol. 82, no. 557. P. 546–559.
163. Poynting J. H. On the changes in the dimensions of a steel wire when twisted, and on the pressure of distortional waves in steel // *Proc. Roy. Soc. A.* 1912. Vol. 86, no. 590. P. 534–561.
164. Лурье А. И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 386с.
165. Dell'Isola F., Ruta G. C., Batra R. C. Generalized Poynting effects in predeformed prismatic bars // *J. Elast.* 1998. Vol. 50, no. 2. P. 181–196.
166. Астапов В. Ф., Маркин А. А., Соколова М. Ю. Кручение сплошного цилиндра из изотропного упругого материала // *Изв. Тульского ГУ. Сер. Математика. Механика. Информатика.* 1999. Т. 5, № 2. С. 43–48.
167. Akinola A. An energy function for transversely-isotropic elastic material and the Poynting effect // *Korean J. Comput. Appl. Math.* 1999. Vol. 6, no. 3. P. 639–649.
168. Зубов Л. М. О прямом и обратном эффектах Пойнтинга в упругих цилиндрах // *ДАН.* 2001. Т. 380, № 2. С. 194–196.
169. Георгиевский Д. В. Порядок малости эффекта пойнтинга с позиций аппарата тензорно нелинейных функций // *Изв. РАН. МТТ.* 2018. № 4. С. 29–33.
170. Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640с.
171. Най Дж. Физические свойства кристаллов. М.: ИЛ, 1960. 385с.

172. Second and Higher Order Elastic Constants / Ed. by D. F. Nelson. Springer, 1992. Vol. 29a of Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter.
173. Buchenau U., Heiroth M., Schober H. R. et al. Lattice dynamics of strontium and barium // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 30, no. 6. P. 3502–3505.
174. Mizuki J., Chen Y., Ho K.-M., Stassis C. Phonon dispersion curves of bcc Ba // Phys. Rev. B. 1985. Vol. 32, no. 2. P. 666–670.
175. Schärer U., Jung A., Wachter P. Brillouin spectroscopy with surface acoustic waves on intermediate valent, doped SmS // Physica B. 1998. Vol. 244. P. 148–153.
176. Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Модуль Юнга кубических ауксетиков // Письма о материалах. 2011. Т. 1, № 3. С. 127–132.
177. Nayeb-Hashemi A. A., Clark J. B., Pelton A. D. The Li-Mg (Lithium-Magnesium) system // Bulletin of Alloy Phase Diagrams. 1984. Vol. 5, no. 4. P. 365–374.
178. Stanford N., Bate P. S. Crystallographic variant selection in α - β brass // Acta Mater. 2005. Vol. 53, no. 3. P. 859–867.
179. Rosen S., Gobel J. A. The crystal structure of nickel-rich NiAl and martensitic NiAl // Trans. AIME. 1968. Vol. 242, no. 4. P. 722–724.
180. Ahlers M. The martensitic transformation in the Cu-Zn based shape memory alloys as a tool for the evaluation of transformation mechanisms and phase stabilities // Mater. Sci. Eng. A. 2008. Vol. 481–482. P. 500–503.
181. Sathish S., Mallik U. S., Raju T. N. Microstructure and shape memory effect of Cu-Zn-Ni shape memory alloys // J. Minerals and Mater. Characterization and Eng. 2014. Vol. 2, no. 2. P. 71–77.
182. Perkins J., Muesing W. E. Martensitic transformation cycling effects in Cu-Zn-Al shape memory alloys // Metall. Trans. A. 1983. Vol. 14, no. 1. P. 33–36.
183. Righi L., Albertini F., Fabbrici S., Paoluzi A. Crystal structures of modulated martensitic phases of FSM Heusler alloys // Mater. Science Forum. 2011. Vol. 684. P. 105–116.
184. Crottaz O., Kubel F., Schmid H. Jumping crystals of the spinels NiCr₂O₄ and CuCr₂O₄ // J. Mater. Chem. 1997. Vol. 7, no. 1. P. 143–146.
185. Kauffmann-Weiss S., Hamann S., Gruner M. E. et al. Understanding the magnetic shape memory system Fe-Pd-X by thin film experiments and first principle calculations // Advanced Engin. Mater. 2012. Vol. 14, no. 8. P. 724–749.

186. Luo Z. P. An overview on the Indium-Thallium (In-Tl) shape memory alloy nanowires // *Metallogr. Microstruct. Anal.* 2012. Vol. 1, no. 6. P. 320–326.
187. Stipcich M., Manosa L., Planes A. et al. Elastic constants of Ni-Mn-Ga magnetic shape memory alloys // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 70, no. 5. P. 054115(5).
188. Смирнов В. И. Курс высшей математики, Том 1. М.: Наука, 1974. 479с.
189. Li Y. The anisotropic behavior of Poisson's ratio, Young's modulus, and shear modulus in hexagonal materials // *Phys. Status Solidi A.* 1976. Vol. 38, no. 1. P. 171–175.
190. Wallace D. C. *Thermodynamics of crystals.* Wiley, N.Y., 1972.
191. Еремина Т. А., Фурманова Н. Г., Малахова Л. Ф. // *Кристаллография.* 1993. Т. 38, № 4. С. 236.
192. Smith R. A. The crystal structures of a series of salts of phthalic acid. III. The crystal structure of rubidium acid phthalate // *Acta Crystallogr. B.* 1975. Vol. 31, no. 9. P. 2347–2348.
193. Теплова Т. Б., Шабанова Т. А., Молчанова В. Н. // *Кристаллография.* 1990. Т. 35, № 1. С. 215.
194. Smith R. A. The crystal structures of a series of salts of phthalic acid. IV. The crystal structure of ammonium hydrogen phthalate // *Acta Crystallogr. B.* 1975. Vol. 31, no. 10. P. 2508–2509.
195. Okotrub A. V., Bulusheva L. G., Mazalov L. N. // *Mol. Mater.* 1998. Vol. 10. P. 213.
196. Сорокина Н. И., Молчанов В. И., Турская Т. Н. // *Кристаллография.* 1989. Т. 34, № 1. С. 112.
197. Регель В. Р., Владимиров В. И., Лутфуллаева Н. Л. Сизова Л. А. и др. // *Кристаллография.* 1989. Т. 34, № 6. С. 1490.
198. Regel V. R., Sizova N. L., Belikova G. S., Turskaya T. N. Mechanical properties of organic alkali metal and ammonium hydrophthalate single crystals // *Crystallogr. Rep.* 2001. Vol. 46, no. 5. P. 820–825.
199. Li X. Strain induced semiconductor nanotubes: from formation process to device applications // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008. Vol. 41, no. 19. P. 193001.
200. Mei Y., Solovev A. A., Sanchez S., Schmidt O. G. Rolled-up nanotech on polymers: from basic perception to self-propelled catalytic microengines // *Chem. Soc. Rev.* 2011. Vol. 40, no. 5. P. 2109–2119.

201. Сасин М. Е., Ильинская Н. Д., Задиранов Ю. М. и др. Цилиндрические многослойные металлодиэлектрические структуры // ПЖТФ. 2015. Т. 41, № 22. С. 61–65.
202. Lomakin E. V. Torsion of rods with elastic properties depending on the stress state type // Mech. Solids. 2002. Vol. 37, no. 4. P. 23–30.
203. Ломакин Е. В. Кручение цилиндрических тел с изменяющимися деформационными свойствами // Изв. РАН. МТТ. 2008. no. 4. P. 217–226.
204. Викторов И. А. Звуковые поверхностные волны в твердых телах. М.: Наука, 1981. 287с.
205. Lim T. C., Cheang P., Scarpa F. Wave motion in auxetic solids // Phys. Status Solidi B. 2014. Vol. 251, no. 2. P. 388–396.
206. Lipsett A. W., Beltzer A. I. Reexamination of dynamic problems of elasticity for negative Poisson's ratio // J. Acoust. Soc. Amer. 1988. Vol. 84, no. 6. P. 2179–2186.
207. Грешняков В. А., Беленков Е. А., Березин В. М. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз. Изд. центр ЮУрГУ, Челябинск, 2012. 150с.
208. Плотников В. А., Богданов Д. Г., Макаров С. В. Детонационный алмаз. Изд-во Алтай. гос. ун-та, Барнаул, 2014. 224с.
209. Покропивный В. В., Покропивный А. В. Структура “кубического графита”-простой кубический фуллерит C_{24} // ФТТ. 2004. Т. 46, № 2. С. 380–382.
210. Бекенев В. Л., Покропивный В. В. Электронная структура и модули упругости новой аллотропной модификации углерода - простого кубического фуллерита C_{24} // ФТТ. 2006. Т. 48, № 7. С. 1324–1328.
211. Crain J., Clark S. J., Ackland G. J. et al. Theoretical study of high-density phases of covalent semiconductors. I. Ab initio treatment // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 49, no. 8. P. 5329–5340.
212. Беленков Е. А., Грешняков В. А. Классификация структурных разновидностей углерода // ФТТ. 2013. Т. 55, № 8. С. 1640–1650.
213. Беленков Е. А., Грешняков В. А. Алмазоподобные фазы, получаемые из фуллереноподобных кластеров // ФТТ. 2015. Т. 57, № 11. С. 2262–2271.
214. Грешняков В.А., Беленков Е. А. Структура алмазоподобных фаз // ЖЭТФ. 2011. Т. 140, № 1. С. 99–111.

215. Беленков Е. А., Грешняков В. А. Алмазоподобные фазы, получаемые из нанотрубок и трехмерных графитов // ФТТ. 2015. Т. 57, № 6. С. 1229–1239.
216. Domingos H. S. Carbon allotropes and strong nanotube bundles // J. Phys.: Condens. Matter. 2004. Vol. 16, no. 49. P. 9083–9091.
217. Беленков Е. А., Кочергин А. Е. Структура и электронные свойства кристаллов, состоящих из графеновых слоев L_6 , L_{4-8} , L_{3-12} и L_{4-6-12} // ФТТ. 2015. Т. 57, № 10. С. 2071–2078.
218. Belenkov E. A., Brzhezinskaya Maria M., Greshnyakov Vladimir A. Novel carbon diamond-like phases LA5, LA7 and LA8 // Diamond Relat. Mater. 2014. Vol. 50. P. 9–14.
219. Беленков Е. А., Грешняков В. А. Новые структурные модификации алмаза: LA9, LA10, CA12 // ЖЭТФ. 2014. Т. 146, № 1. С. 116–122.
220. Мулюков Р. Р., Баимова Ю. А. Углеродные наноматериалы. РИЦ БашГУ, Уфа, 2015. 160с.
221. Крылова К. А., Баимова Ю. А., Дмитриев С. В., Мулюков Р. Р. Расчет структуры углеродных кластеров на основе фуллереноподобных молекул C_{24} и C_{48} // ФТТ. 2016. Т. 58, № 2. С. 384–391.
222. Roy R. K., Lee K.-R. Biomedical applications of diamond-like carbon coatings: A review // J. Biomed. Mater. Res. B. 2007. Vol. 83B, no. 1. P. 72–84.
223. Milne W. I. Electronic devices from diamond-like carbon // Semicond. Sci. Technol. 2003. Vol. 18, no. 3. P. S81–S85.
224. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon // Mater. Sci. Eng. R. 2002. Vol. 37, no. 4-6. P. 129–281.
225. Кобелев Н. П., Моравский А. П., Сойфер Я. М. и др. Упругие и диссипативные свойства фуллерита // ФТТ. 1994. Т. 36, № 9. С. 2732–2737.
226. Hoen S., Chopra N. G., Xiang X.-D. et al. Elastic properties of a van der Waals solid: C_{60} // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46, no. 19. P. 12737–12739.
227. Shi X. D., Kortan A. R., Williams J. M. et al. Sound velocity and attenuation in single-crystal C_{60} // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68, no. 6. P. 827–830.
228. Кобелев Н. П., Николаев Р. К., Сойфер Я. М., Хасанов С. С. Упругие модули монокристаллического C_{60} // ФТТ. 1998. Т. 40, № 1. С. 173–175.
229. Кобелев Н. П. О релаксационном вкладе в сдвиговые модули упругости низкотемпературной фазы твердого C_{60} // ФТТ. 2002. Т. 44, № 1. С. 188–191.

230. Кобелев Н. П., Николаев Р. К., Сидоров Н. С., Соيفер Я. М. Особенности температурного поведения упругих модулей твердого C_{60} // ФТТ. 2002. Т. 44, № 3. С. 415–416.
231. Кобелев Н. П., Николаев Р. К., Сидоров Н. С., Соифер Я. М. Температурная зависимость упругих модулей твердого C_{60} // ФТТ. 2001. Т. 43, № 12. С. 2244–2250.
232. Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // J. Chem. Phys. 2000. Vol. 112, no. 14. P. 6472–6486.
233. Singh A. K., Hennig R. G. Scaling relation for thermal ripples in single and multilayer graphene // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 87, no. 9. P. 094112.
234. Costamagna S., Neek-Amal M., Los J. H., Peeters F. M. Thermal rippling behavior of graphene // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86, no. 4. P. 041408.
235. Baimova J. A., Liu B., Dmitriev S. V. et al. Mechanical properties of bulk carbon nanostructures: effect of loading and temperature // Phys. Chem. Chem. Phys. 2014. Vol. 16, no. 36. P. 19505.
236. Баимова Ю. А., Мурзаев Р. Т., Дмитриев С. В. Механические свойства объемных углеродных наноматериалов // ФТТ. 2014. Т. 56, № 10. С. 1946–1952.
237. Рысаева Л. Х., Баимова Ю. А. Слоистые структуры на основе фуллеренов // Фунд. проблемы совр. материаловедения. 2015. Т. 12, № 4. С. 439–443.
238. McSkimin H. J., Andreatch P. Elastic moduli of diamond as a function of pressure and temperature // J. Appl. Phys. 1972. Vol. 43, no. 7. P. 2944–2948.
239. Grimsditch M. H., Ramdas A. K. Brillouin scattering in diamond // Phys. Rev. B. 1975. Vol. 11, no. 8. P. 3139–3148.
240. Zouboulis E. S., Grimsditch M., Ramdas A. K., Rodriguez S. Temperature dependence of the elastic moduli of diamond: A Brillouin-scattering study // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57, no. 5. P. 2889–2896.
241. Migliori A., Ledbetter H., Leisure R. G. et al. Diamond's elastic stiffnesses from 322 K to 10 K // J. Appl. Phys. 2008. Vol. 104, no. 5. P. 053512.
242. Blaber J., Adair B., Antoniou A. Ncorr: Open-source 2D digital image correlation Matlab software // Exp. Mech. 2015. Vol. 55, no. 6. P. 1105–1122.