

УДК 539.22, 539.32

Изменчивость коэффициента Пуассона для гексагональных кристаллов под давлением

Гольдштейн Р.В.*, Городцов В.А.**, Лисовенко Д.С.***

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
проспект Вернадского, 101, корп. 1. Москва, 119526, Россия*

**e-mail: goldst@ipmnet.ru*

***e-mail: gorod@ipmnet.ru*

****e-mail: lisovenk@ipmnet.ru*

Аннотация

Проанализирована изменчивость коэффициента Пуассона для гексагональных кристаллов под давлением. Выявлено семь гексагональных ауксетиков (кристаллов с отрицательным коэффициентом Пуассона) при нулевом давлении - MoS₂, Zn, Be, сплав BeCu (2.4% at.Cu), TiB₂, C₇H₁₂, MnAs. Для этих ауксетиков при нулевом давлении и двух неауксетиков при нулевом давлении (графита и SiC) проанализирована изменчивость коэффициента Пуассона под давлением и построены поверхности ауксетичности (поверхности нулевого коэффициента Пуассона). Показано, что все семь гексагональных ауксетиков могут стать полными ауксетиками при определенных давлениях. Кристаллы графита и SiC также становятся частичными или полными ауксетиками при некотором отрицательном давлении. В результате анализа показано, что все гексагональные кристаллы могут стать ауксетиками.

Ключевые слова: гексагональные кристаллы, аусетики, давление, упругие свойства.

1. Введение

Влиянию начальных напряжений (давления, в частности) на упругие свойства, структурную устойчивость и идеальную прочность кристаллов посвящена большая литература. Наиболее ранний критерий структурной устойчивости при отсутствии начальных напряжений известен как критерий Борна [1, 2]. Он представляет собой совокупность неравенств для коэффициентов упругости, следующих из требования положительности упругой энергии. Обобщение борновского критерия на случай действия начального внешнего напряжения дано в целом ряде исследований [3-6]. Обобщенный критерий устойчивости состоит из аналогичных неравенств для эффективных коэффициентов упругости, включающих в себя начальные напряжения. В дальнейшем в серии работ [7-10] выполнен анализ обобщенной структурной устойчивости различных кристаллов, находящихся под действием давления, и использованы различные методики расчетов упругих постоянных 2-го, 3-го и 4-го порядков.

В современных исследованиях механического поведения материалов и структур большое внимание уделяется аусетикам. На аусетические свойства материалов существенно влияет изотропное напряжение, как при отрицательном, так и положительном давлении [11-14]. В [12] выполнен детальный анализ такого

влияния для кубических кристаллов. Ниже аналогичный анализ проведен для гексагональных кристаллов с использованием экспериментальных данных по упругим константам, собранных в справочнике [15]. Рассмотрены условия структурной устойчивости при нулевом и ненулевых начальных давлениях и оценены изменения ауксетичности с изменением давления.

2. Упругие свойства гексагональных кристаллов при нулевом давлении

Коэффициент Пуассона $\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ кристаллов при одноосном растяжении зависит от единичного вектора \mathbf{n} , характеризующего направление деформирования кристалла, и ортогонального ему единичного вектора \mathbf{m} . Общий вид этих зависимостей для произвольных анизотропных материалов хорошо известен [16]:

$$\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{s_{ijkl} n_i n_j m_k m_l}{s_{ijkl} n_i n_j n_k n_l}.$$

Удобно использовать взамен тензорных упругих коэффициентов четвертого ранга s_{ijkl} матричные коэффициенты податливости s_{mn} [16,17]. От указанной параметризации ориентации кристаллов с помощью компонент векторов \mathbf{n} , \mathbf{m} можно перейти к использованию трех углов Эйлера φ , θ , ψ .

В случае гексагональных кристаллов число независимых матричных коэффициентов упругости равно пяти (s_{11} , s_{12} , s_{13} , s_{33} , s_{44} ; $s_{66} = 2(s_{11} - s_{12})$) и зависимость коэффициента Пуассона от модулей податливости и углов Эйлера можно представить в виде

$$\nu = -\frac{s_{13} + ((s_{12} - s_{13}) \sin^2 \psi + \delta \cos^2 \theta \cos^2 \psi) \sin^2 \theta}{s_{11} + ((s_{33} - s_{11}) - \delta \sin^2 \theta) \cos^2 \theta}, \quad (1)$$

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

Здесь размерный параметр δ - характеристика степени анизотропии гексагональных кристаллов (он исчезает в пределе изотропной среды). Коэффициент Пуассона оказывается зависящим от двух углов Эйлера. Эта зависимость является периодической функцией угловых переменных с периодами $T_\theta = T_\psi = \pi$.

Численный анализ коэффициента Пуассона показал, что среди гексагональных кристаллов лишь небольшое число оказывается ауксетиками (материалами с отрицательным коэффициентом Пуассона). Поверхность ауксетичности $\nu(\theta, \psi) = 0$ для гексагональных ауксетиков, на которой коэффициент Пуассона обращается в нуль, описывается согласно (1) уравнением вида

$$\left(\Pi_2 \sin^2 \psi + \Pi_{02} \cos^2 \theta \cos^2 \psi \right) \sin^2 \theta = -1. \quad (2)$$

$$\Pi_{02} \equiv \frac{\delta}{s_{13}}, \quad \Pi_2 \equiv \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{13}}.$$

Это уравнение позволяет оценить направления растяжения, для которых имеет место отрицательные значения коэффициента Пуассона. На основе экспериментальных данных для коэффициентов податливости гексагональных кристаллов, собранных в [15] выявлены семь гексагональных ауксетиков - MoS_2 , C_7H_{12} , Zn , MnAs , BeCu (2.4at%Cu), TiB_2 , Be . На Рис.1 приведены поверхности коэффициентов Пуассона для гексагональных ауксетиков MoS_2 , Zn , Be , TiB_2 , C_7H_{12} и MnAs . Поверхность коэффициента Пуассона для сплава BeCu не приведена, так как слабо отличается от поверхности Be .

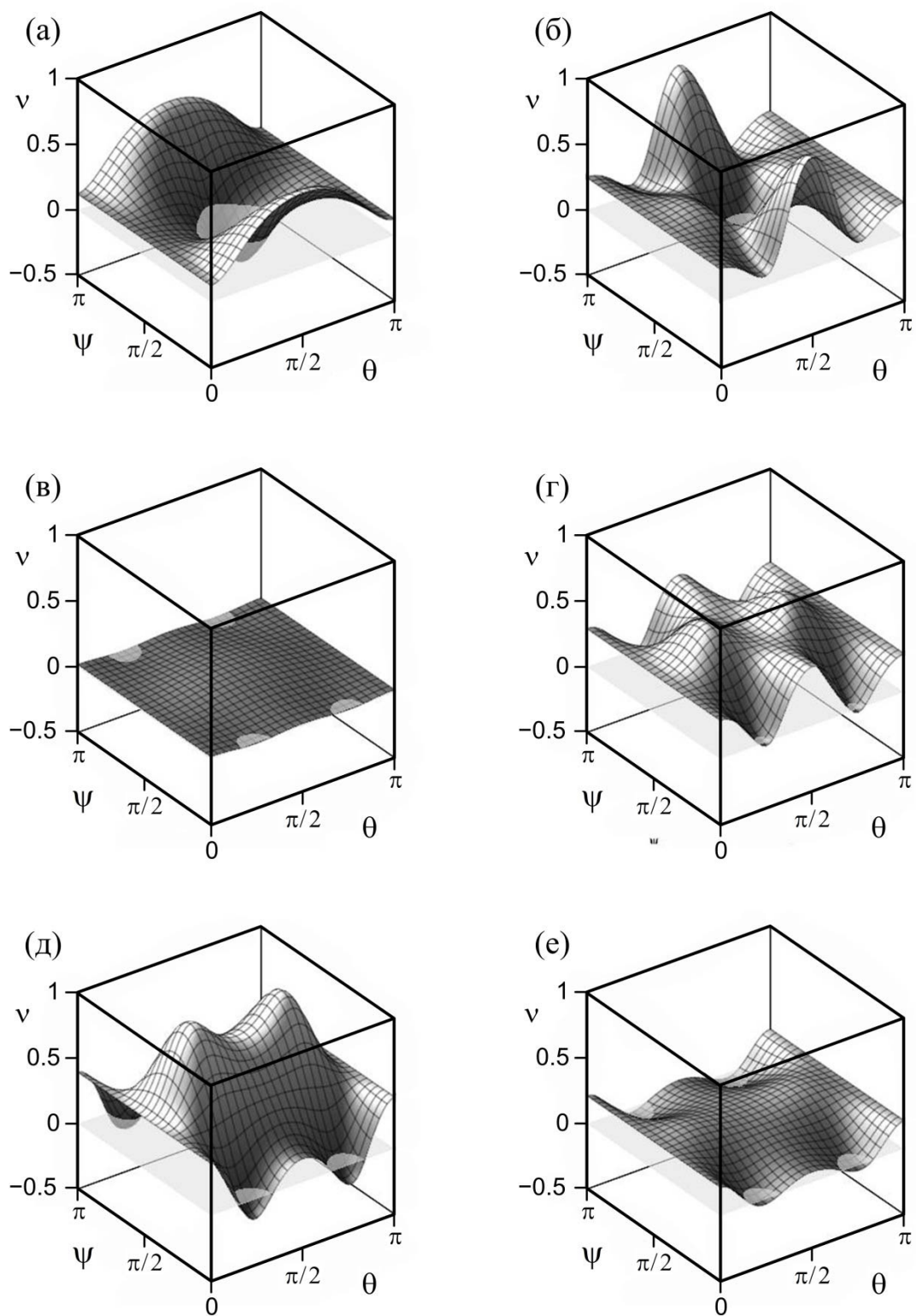


Рис.1. Поверхности коэффициентов Пуассона гексагональных ауксетиков MoS_2 (а), Zn (б), Be (в), TiB_2 (г), C_7H_{12} (д) и MnAs (е) при нулевом давлении

Экстремальные значения коэффициента Пуассона и их положения на плоскости углов θ , ψ находятся с помощью формулы (2) и решений системы уравнений

$$\sin^2 \theta \sin 2\psi (\Pi_2 - \Pi_{02} \cos^2 \theta) = 0, \quad (3)$$

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

$$\Pi_{01} \equiv \frac{\delta}{s_{11}}, \quad \Pi_1 \equiv \frac{s_{33} - s_{11}}{s_{11}}.$$

Значение

$$v_1 = -\frac{s_{13}}{s_{33}} \quad (5)$$

достигается на прямой линии $\theta = 0$ при произвольном угле ψ , что соответствует растяжению в направлении $[001]$ ($v_1 = v_{[001]}$). Значения

$$v_2 = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \quad (6)$$

и

$$v_3 = -\frac{s_{12}}{s_{11}} \quad (7)$$

в точках $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$ и $\theta = \psi = \pi/2$, соответственно. Последние два значения получаются при растяжении в направлении $[010]$, и $v_2 = v_{[100],[010]}$, $v_3 = v_{[00\bar{1}],[010]}$.
Существование других экстремумов возможно при выполнении определенных ограничений на безразмерные комплексы коэффициентов податливости, т.е. для

некоторых конкретных гексагональных кристаллов. Экстремальные значения коэффициента Пуассона имеют вид

$$v_{4,5} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \frac{1 + 0.25\Pi_{02} \sin^2 2\theta}{1 + \Pi_1 \cos^2 \theta - 0.25\Pi_{01} \sin^2 2\theta} \quad (8)$$

при следующих ограничениях

$$\psi = 0, \quad 0 \leq \cos^2 \theta_{4,5} = \frac{-(\Pi_{01} + \Pi_{02}) \pm \sqrt{D_1}}{\Pi_1 \Pi_{02}} \leq 1, \quad (9)$$

$$D_1 = (\Pi_{01} + \Pi_{02})^2 - \Pi_1 \Pi_{02} (\Pi_1 - \Pi_{01} - \Pi_{02}) \geq 0. \quad (10)$$

При ограничениях

$$\psi = \pi/2, \quad 0 \leq \sin^2 \theta_{6,7} = \frac{-\Pi_{01} \pm \sqrt{D_2}}{\Pi_{01} \Pi_2} \leq 1, \quad (11)$$

$$D_2 = \Pi_{01}^2 + \Pi_{01} \Pi_2 (\Pi_1 + \Pi_{01} + \Pi_2 + \Pi_1 \Pi_2) \geq 0 \quad (12)$$

имеют место экстремальные значения коэффициента Пуассона

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

Для

$$\cos^2 \theta = \frac{\Pi_2}{\Pi_{02}}, \quad \cos^2 \psi = \frac{A}{B}, \quad (14)$$

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

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

определяется экстремальное значение коэффициента Пуассона v_8 .

В Табл.1 приведены числовые значения для всех экстремальных значений коэффициентов Пуассона гексагональных ауксетиков. Полужирным выделены

максимальные и минимальные значения. У MoS_2 и Zn экстремальное значение коэффициента Пуассона ν_3 оказывается отрицательным из-за того, что у этих кристаллов $s_{13} > 0$. Наименьшее отрицательное значение коэффициента Пуассона $\nu_{\min} = -0.28$ достигается в случае монокристалла дисульфида молибдена MoS_2 . Среди указанных выше гексагональных ауксетиков не выявлены экстремумы ν_4 и ν_7 (см. Табл.1).

Табл.1. Экстремальные значения коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов с отрицательным минимальным коэффициентом Пуассона.

Гексаго- нальный кристалл	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6	ν_7	ν_8
MoS_2	0.12	0.58	-0.28	–	–	–	–	–
C_7H_{12}	0.39	0.18	0.76	–	-0.15	0.99	–	–
Zn	0.25	0.85	-0.07	–	0.07	0.28	–	–
MnAs	0.22	0.08	0.19	–	-0.04	0.24	–	–
BeCu сплав (2.4at%Cu)	0.01	0.01	0.10	–	-0.04	–	–	–
TiB_2	0.29	0.45	0.38	–	-0.03	0.54	–	0.40
Be	0.02	0.01	0.08	–	-0.005	–	–	–

3. Влияние давления на упругие свойства гексагональных кристаллов

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 [6]

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

В частном случае гексагональных кристаллов при матричной записи коэффициентов жесткости получим

$$\begin{aligned} C_{11} &= c_{11} - p, & C_{12} &= c_{12} + p, & C_{13} &= c_{13} + p, \\ C_{33} &= c_{33} - p, & C_{44} &= c_{44} - p, & C_{66} &= 0.5(c_{11} - c_{12}) - p. \end{aligned} \quad (15)$$

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 (18), термодинамические ограничения можно записать в виде

$$\begin{aligned} c_{11} &> p, & c_{33} &> p, & c_{44} &> p, & c_{11} - c_{12} - 2p &> 0, \\ 2p^2 + (c_{11} + c_{12} + 4c_{13})p - (c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2) &< 0. \end{aligned} \quad (16)$$

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 модулями податливости и эффективными модулями жесткости [6,17]

$$S_{11} + S_{12} = \frac{C_{33}}{C^2}, \quad S_{11} - S_{12} = \frac{1}{C_{11} - C_{12}}, \quad S_{13} = -\frac{C_{13}}{C^2},$$

$$S_{33} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C^2}, \quad S_{44} = \frac{1}{C_{44}},$$

$$C^2 \equiv C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2.$$

Полученные в пункте 2 формулы можно применять для численного анализа влияния давления на упругие свойства гексагональных кристаллов. Для этого в формулах (1)-(14) необходимо сделать замену s_{ij} на S_{ij} .

Численный анализ поверхностей ауксетичности $v(\theta, \psi; p) = 0$ для гексагональных ауксетиков показывает, что топология этих поверхностей сильно зависит от модулей жесткости материалов и давления (см. Рис.2). Для MoS_2 зона ауксетичности находится под изображенной поверхностью ауксетичности на Рис.2а. 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 v_5 (8).

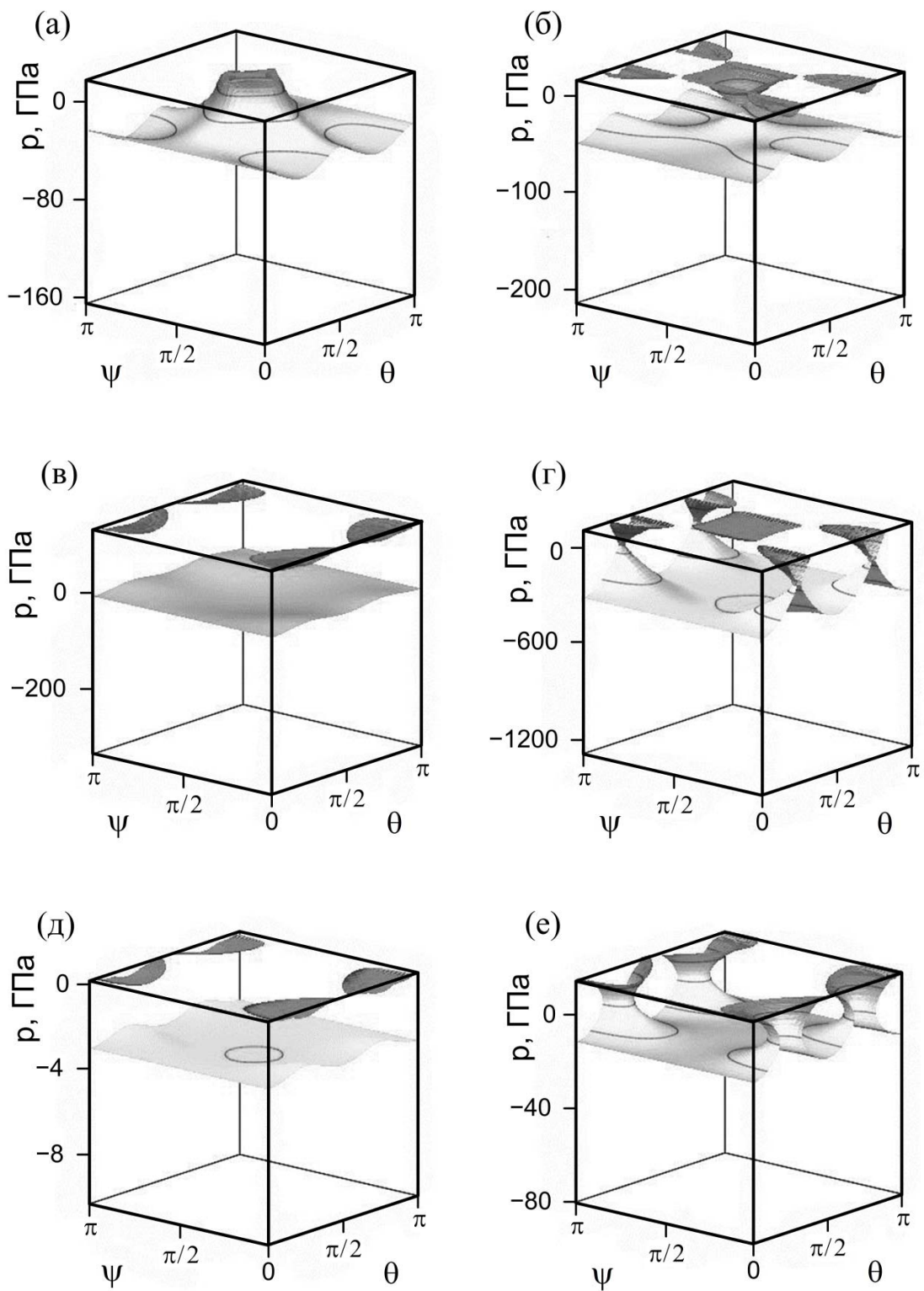


Рис.2. Поверхности ауксетичности $\nu(\varphi, \theta; p) = 0$ гексагональных ауксетиков MoS₂

(a), Zn (б), Be (в), TiB₂ (г), C₇H₁₂ (д) и MnAs (e)

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.

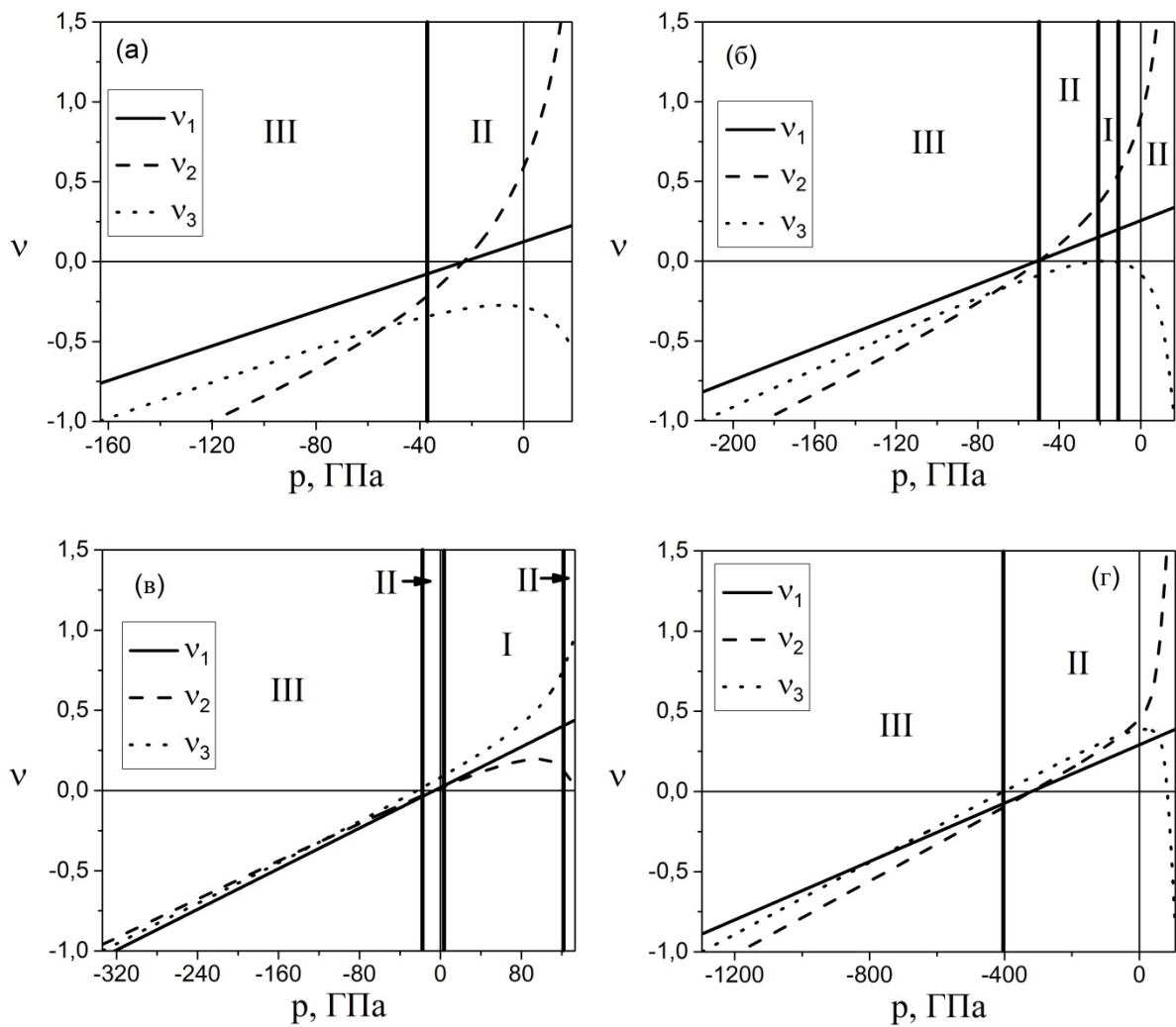
Формулу для экстремального значения коэффициента Пуассона ν_1 (5) можно записать через модули жесткости и давление в виде

$$\nu_1 = -\frac{S_{13}}{S_{33}} = \frac{C_{13}}{C_{11} + C_{12}} = \frac{c_{13} + p}{c_{11} + c_{12}}. \quad (17)$$

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 [15], справедлива положительность модуля 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 модули 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 $3p^2 - (c_{33} - c_{12} - 4c_{13})p - (c_{12}c_{33} + 2c_{13}^2) = 0$.

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.3а изображены зависимости коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла MoS_2 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.



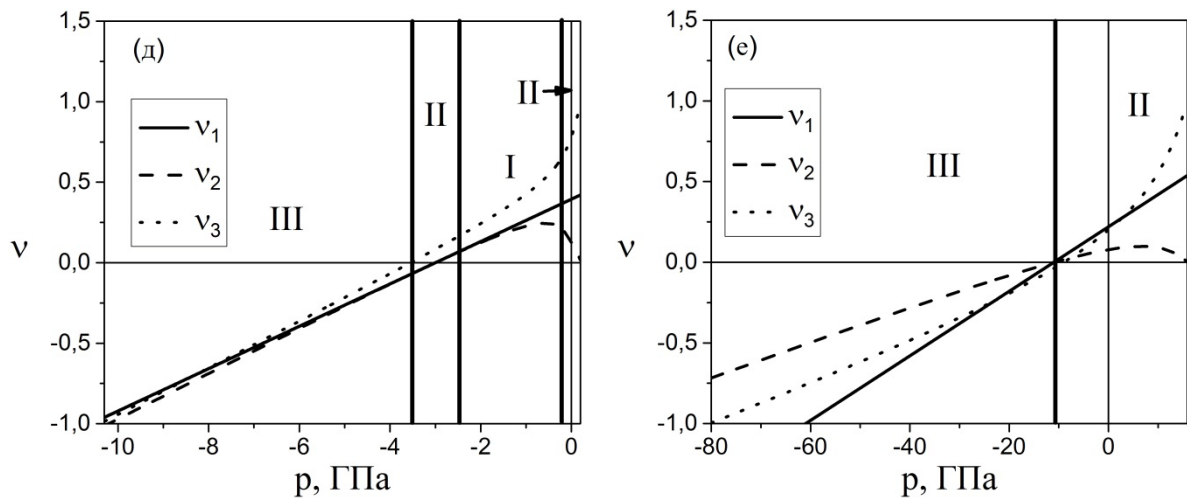


Рис.3. Изменчивость коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 с изменением давления для гексагональных ауксетиков при нулевом давлении MoS_2 (а), Zn (б), Be (в), TiB_2 (г), C_7H_{12} (д) и MnAs (е). Зона I соответствует отсутствию ауксетичности, зона II – частичной ауксетичности и зона III – полной ауксетичности.

У кристалла Zn при увеличении сжимающего давления зона ауксетичности увеличивается (Рис.2б). При значениях $p > 7.59$ ГПа появляется 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.3б). Из Рис.2б 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.3б 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 $\nu_3 = -1$ 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 Ве при нулевом давлении является частичным ауксетиком. При приложении сжимающего давления Ве остается частичным ауксетиком до $p = 2.18$ ГПа (Рис.2в), когда поменяет знак экстремальное значение коэффициента Пуассона ν_5 . При дальнейшем увеличении давления до значения 121 ГПа кристалл Ве остается неауксетиком, когда снова поменяет знак экстремум ν_5 . От 121 ГПа и до 133 ГПа (до границы устойчивости) кристалл Ве 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 Ве 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.3в. 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.3в коэффициенты Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 для кристалла Ве слабо отличаются при фиксированном отрицательном давлении.

При сжимающем давлении кристалл TiB_2 остается частичным ауксетиком (Рис.2г). При увеличении давления зона ауксетичности увеличивается. При значениях 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.3в 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.2д представлена поверхность ауксетичности $\nu(\varphi, \theta; p) = 0$ для кристалла C_7H_{12} . Как видно из рисунка при увеличении сжимающего давления зона

ауксетичности растет. 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.3д 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.2е). При увеличении отрицательных давлений зона ауксетичности всегда увеличивается. Полным ауксетиком кристалл MnAs становится при значениях $p < -c_{13} = -11$ ГПа. На Рис.3е 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.4а и б), 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 Пуассона ν_1 и ν_2 . Полным ауксетиком графит будет при $p < -114$ ГПа, когда коэффициент ν_3 станет отрицательным. На Рис.4в 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 меняются 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_3 . На Рис.4г 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.

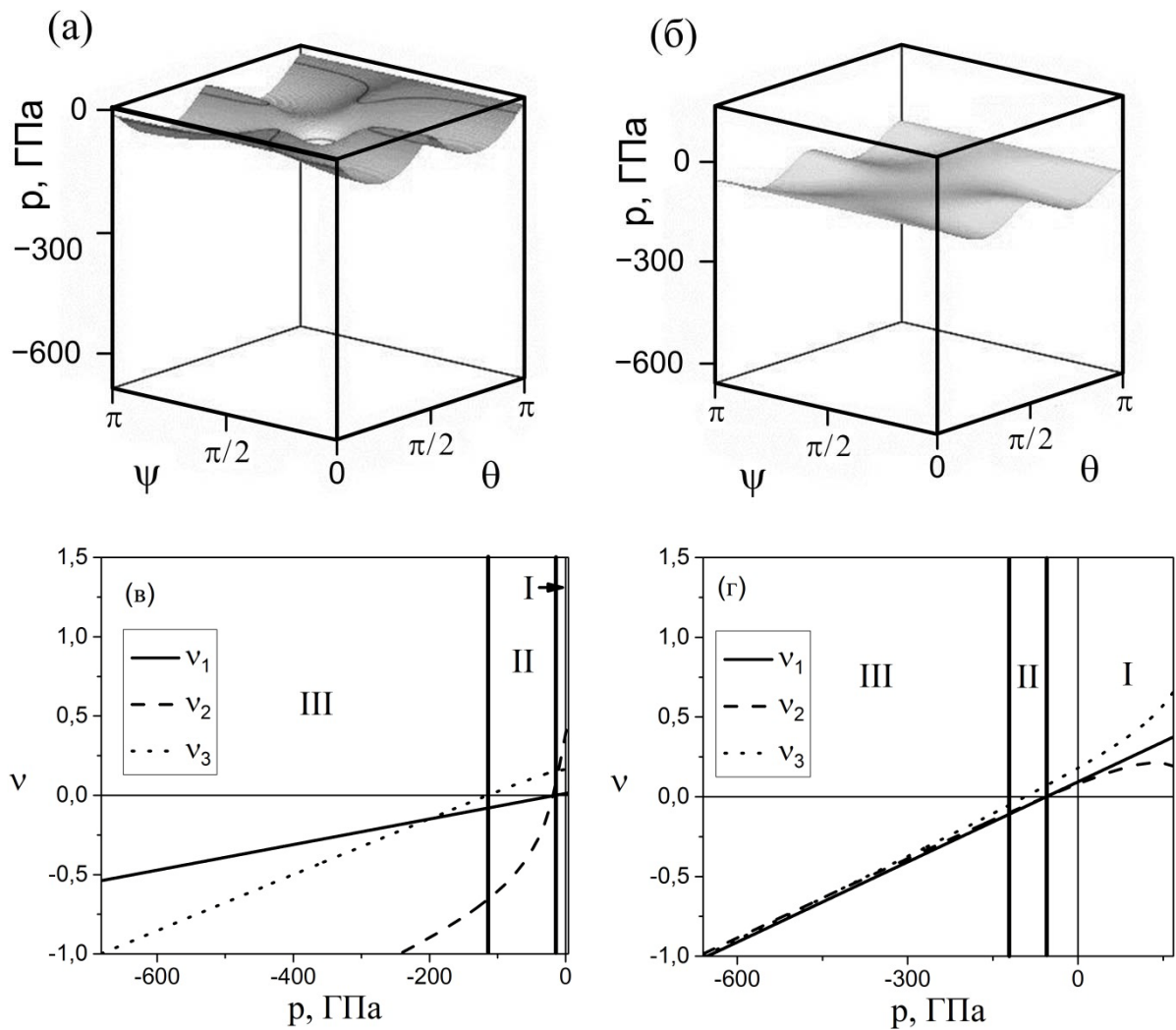


Рис.4. Поверхности ауксетичности $\nu(\varphi, \theta; p) = 0$, и изменчивость коэффициентов Пуассона ν_1 , ν_2 и ν_3 с изменением давления для гексагональных неауксетиков при нулевом давлении графита (а), (в) и SiC (б), (г). Зона I соответствует отсутствию

ауксетичности, зона II – частичной ауксетичности и зона III – полной ауксетичности.

4. Заключение

Численно-аналитический анализ коэффициента Пуассона позволяет выявить семь гексагональных ауксетиков при нулевом давлении - MoS_2 , Zn, TiB_2 , MnAs, Be, сплав BeCu, C_7H_{12} . Анализ влияния давления на коэффициент Пуассона 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. Коэффициент Пуассона, соответствующий растяжению в направлении $[010]$ и поперечной деформации в направлении $[00\bar{1}]$, стремится к -1 при стремлении отрицательного давления к границе устойчивости MoS_2 , Zn, TiB_2 , MnAs, Be, сплава BeCu, C_7H_{12} , графита и SiC кристалла.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1.1, гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских учёных – кандидатов наук МК-5891.2015.1.

Библиографический список

1. Born M. On the stability of crystal lattices // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1940. V.36. N 2. P.160-172.
2. Born M., Huang K. Dynamical theory of crystal lattices. Clarendon, L.-N.Y.: Oxford University Press. 1954. 420p.
3. Huang K. On the atomic theory of elasticity // Proceedings of the Royal Society A. 1950. V.203. N 1073. P.178-194.
4. Leibfried G., Ludwig W. Theory of anharmonic effects in crystals // Solid State Physics. 1961. V.12. P.275-444.
5. Barron T.H.K., Klein M.L. Second-order elastic constants of a solid under stress // Proceedings of the Physical Society. 1965. V.85. N 3. P.523-532.
6. Wallace D.C. Thermodynamics of crystals. New York: Wiley. 1972. 485p.
7. Векилов Ю.Х., Красильников О.М. Структурные превращения в металлах при больших степенях сжатия // Успехи физических наук. 2009. Т.179. № 8. С.883–886.
8. Красильников О.М., Векилов Ю.Х., Мосягин И.Ю. Упругие постоянные твердых тел при высоких давлениях // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. Т.142. № 2. С.266-270.
9. Векилов Ю.Х., Красильников О.М., Белов М.П., Луговской А.В. Деформационные фазовые переходы в металлах при высоких давлениях // Успехи физических наук. 2014. Т.184. № 9. С.967–973.

10. Векилов Ю.Х., Красильников О.М., Луговской А.В. Упругие свойства твёрдых тел при высоких давлениях // Успехи физических наук. 2015. Т.185. № 11. С.1215–1224.
11. Wojciechowski K.W. Negative Poisson ratios at negative pressures // Molecular Physics Reports. 1995. V.10. P.129-136.
12. Branka A.C., Heyes D.M., Wojciechowski K.W. Auxeticity of cubic materials under pressure // Physica Status Solidi B. 2011. V.248. N 1. P.96-104.
13. Grima J.N., Cassar R.N., Gatt R. On the effect of hydrostatic pressure on the auxetic character of NAT-type silicates // Journal of Non-Crystalline Solids. 2009. V.355. N 24-27. P.1307-1312.
14. Grima J.N., Gatt R. On the behaviour of natrolite under hydrostatic pressure // Journal of Non-Crystalline Solids. 2010. V.356, N 37-40. P.1881-1887.
15. Landolt-Börstein - Group III Condensed Matter. Berlin: Springer. 1992. V.29a. P.105-128.
16. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. - М.: Наука, 1975. – 680 с.
17. Най Дж. Физические свойства кристаллов. - М.: Изд-во ИЛ, 1967. – 386 с.