

В. А. Городцов, Д. С. Лисовенко

МОДУЛЬ ЮНГА, КОЭФФИЦИЕНТ ПУАССОНА И МОДУЛЬ СДВИГА ДЛЯ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Россия

Аннотация. Изучена изменчивость модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига гексагональных кристаллов. Получены аналитические выражения для экстремальных значений этих упругих характеристик. На основе экспериментальных данных об упругих постоянных из справочника Ландолта-Бернштейна дан численный анализ экстремумов для гексагональных кристаллов. Предложены классификационные схемы для экстремумов модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига.

Ключевые слова: модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль сдвига, ауксетики, кристаллы, гексагональные кристаллы.

DOI: 10.26293/chgpu.2019.40.2.009

УДК: 539.32

1. Введение

В современном материаловедении активно используются наноматериалы, которые изготовлены из кристаллов. Для анизотропных материалов модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль сдвига зависят от ориентации кристаллических образцов. Термодинамическое требование положительной определенности энергии деформации накладывает на упругие характеристики материалов некоторые ограничения. Для изотропных материалов они сводятся к тому, что модуль Юнга и модуль сдвига должны быть положительными, а коэффициент Пуассона может меняться только в пределах $-1 \leq \nu \leq 0.5$ [1]. В случае анизотропных материалов коэффициенты Пуассона могут иметь произвольные величины [2].

© Городцов В. А., Лисовенко Д. С., 2019

Городцов Валентин Александрович

e-mail: gorod@ipmnet.ru, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Россия

Лисовенко Дмитрий Сергеевич

e-mail: lisovenk@ipmnet.ru, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией, Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, г. Москва, Россия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 18-19-00736 „Развитие механики упругого и пластического деформирования и разрушения для совместного дизайна слоистых композитов“).

Поступила 10.06.2019

Модули Юнга, модули сдвига и коэффициенты Пуассона монокристаллов различных кристаллических систем анализировались во многих работах [3–15]. Экстремальные значения модуля Юнга исследованы с помощью метода множителей Лагранжа для кубических и гексагональных кристаллов в [16]. В результате анализа были получены три экстремальных значения модуля Юнга. В случае тетрагональных кристаллов найдено пять экстремальных значений модуля Юнга [17]. В [18] были исследованы стационарные значения модуля Юнга для орторомбических, тетрагональных, тригональных, гексагональных и кубических кристаллов.

Экстремальные значения коэффициента Пуассона для кубических кристаллов были проанализированы в [19, 20]. В этих работах показано, что кроме стандартных экстремальных значений коэффициентов Пуассона $\nu_{[100],[001]}$, $\nu_{[001],[110]}$, $\nu_{[1\bar{1}0],[110]}$, $\nu_{[111],[111]}$ (первые три числа в квадратных скобках указывают направление поперечной деформации, а последние три числа – направление растяжения) экстремальные значения коэффициента Пуассона могут также наблюдаться при специальных ориентациях. В [20, 21] также показано, что экстремальные значения коэффициента Пуассона свойственны метастабильным кристаллам, например, кристаллам с эффектом памяти формы. Изменчивость коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов также анализировались в [22–28]. В [22] были исследованы модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль сдвига для гексагональных кристаллов Tl и Cd при некоторых частных ориентациях. Для этих кристаллов были построены ориентационные зависимости упругих характеристик, а для кристалла кадмия выявлен отрицательный коэффициент Пуассона. Ошибка в этом утверждении связана с неверным пересчетом коэффициентов податливости в [22]. Отрицательный коэффициент Пуассона при некоторых ориентациях может иметь кристалл цинка [23]. Анализ изменчивости коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов [24–26] выявляет еще шесть кристаллов (MoS_2 , Zn, Be, сплав BeCu (2.4%at.Cu), TiB_2 , C_7H_{12} , MnAs) с отрицательным коэффициентом Пуассона (гексагональных ауксетиков). Наименьшее значение коэффициента Пуассона -0.28 достигается у кристалла MoS_2 . Среди кристаллов других кристаллических систем найдено гораздо большее количество ауксетиков. На данный момент известно свыше 450 кристаллических ауксетиков [24, 25, 30–42]. Более 300 ауксетиков обнаруживается среди кубических кристаллов [43]. В [44–46] предложена классификация кристаллов на основе знака коэффициента Пуассона. Все кристаллические материалы можно разделить на неауксетики (материалы с положительным коэффициентом Пуассона при любой ориентации), полные ауксетики (материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона при любой ориентации) и частичные ауксетики (материалы, у которых коэффициент Пуассона может менять знак в зависимости от ориентации). В [44] были указаны необходимые и достаточные условия для нахождения неауксетиков и полных ауксетиков. В [27] был проведен анализ среднего по поперечным направлениям коэффициента Пуассона. В этой статье обсуждались необходимые и достаточные условия для гексагональных неауксетиков, частичных ауксетиков и полных ауксетиков. Установлено, в частности, что все гексагональные кристаллы имеют положительный средний по поперечным направлениям коэффициент Пуассона.

Ниже анализируются экстремальные значения модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига для гексагональных кристаллов с помощью необходимого и

достаточного условий экстремума и обсуждаются классификационные схемы экстремальных значений модуля Юнга и модуля сдвига, трех стационарных значений коэффициента Пуассона.

2. Упругие характеристики

Модуль Юнга $E(\mathbf{n})$ и коэффициент Пуассона $\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ для анизотропных материалов зависят от единичных векторов \mathbf{n} и \mathbf{m} [47]

$$\frac{1}{E(\mathbf{n})} = s_{ijkl}n_i n_j n_k n_l, \quad \frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{E(\mathbf{n})} = -s_{ijkl}n_i n_j m_k m_l. \quad (1)$$

Здесь s_{ijkl} – тензорные коэффициенты податливости. В случае одноосного растяжения единичный вектор \mathbf{n} направлен вдоль оси растяжения, а вектор \mathbf{m} перпендикулярен ему.

Модуль сдвига $G(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ в линейной упругости определяется двумя единичными векторами \mathbf{n} и \mathbf{m} [47]

$$G^{-1}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 4s_{ijkl}n_i m_j n_k m_l. \quad (2)$$

Вектор \mathbf{n} – единичный вектор нормали к плоскости скольжения, а вектор \mathbf{m} – единичный вектор направления скольжения.

Упругость гексагональных кристаллов характеризуется пятью матричными коэффициентами податливости s_{11} , s_{12} , s_{13} , s_{33} , s_{44} и дополнительным условием $s_{66} = 2(s_{11} - s_{12})$ (далее используем матричные коэффициенты податливости вместо тензорных коэффициентов s_{ijkl}) [48].

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

$$\begin{aligned} E^{-1}(\mathbf{n}) &= s_{11}(1 - n_3^2)^2 + s_{33}n_3^4 + (2s_{13} + s_{44})(1 - n_3^2)n_3^2, \\ -\frac{\nu(\mathbf{n}, \mathbf{m})}{E(\mathbf{n})} &= s_{12}(m_1 n_2 - m_2 n_1)^2 + (s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44})m_3^2 n_3^2 + s_{13}(m_3^2 + n_3^2), \\ G^{-1}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) &= s_{66}(m_1 n_2 - m_2 n_1)^2 + 4(s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44})m_3^2 n_3^2 + s_{44}(m_3^2 + n_3^2). \end{aligned}$$

Если ориентацию кристаллического стержня в кристаллографической системе координат описывать с помощью трех углов Эйлера φ , θ , ψ , то можно использовать следующие выражения единичных векторов \mathbf{n} , \mathbf{m} через углы Эйлера φ , θ , ψ

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

Тогда модуль Юнга E , коэффициент Пуассона ν и модуль сдвига G можно переписать через угловые зависимости следующим образом

$$\frac{1}{s_{11}E} = 1 + (\Pi_1 - \Pi_{01} \sin^2 \theta) \cos^2 \theta, \quad (3)$$

$$-\frac{\nu}{s_{13}E} = 1 + (\Pi_2 \sin^2 \psi + \Pi_{02} \cos^2 \theta \cos^2 \psi) \sin^2 \theta, \quad (4)$$

$$\frac{1}{s_{44}G} = 1 + (\Pi_3 \sin^2 \psi + 4\Pi_{03} \cos^2 \theta \cos^2 \psi) \sin^2 \theta, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{01} &\equiv \frac{\delta}{s_{11}}, & \Pi_{02} &\equiv \frac{\delta}{s_{13}}, & \Pi_{03} &\equiv \frac{\delta}{s_{44}}, \\ \Pi_1 &\equiv \frac{s_{33} - s_{11}}{s_{11}}, & \Pi_2 &\equiv \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{13}}, & \Pi_3 &\equiv \frac{2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}}{s_{44}}, \\ \delta &\equiv s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44}. \end{aligned}$$

Модуль Юнга гексагональных кристаллов зависит лишь от одного угла Эйлера θ . Коэффициент Пуассона и модуль сдвига оказываются зависящим от двух углов Эйлера θ , ψ и не зависят от угла φ . Безразмерные параметры Π_{01} , Π_{02} , Π_{03} , Π_1 , Π_2 , Π_3 являются характеристиками степени анизотропии гексагональных кристаллов. В пределе изотропной среды эти факторы анизотропии обращаются в нуль. Количество факторов анизотропии для гексагональных кристаллов оказывается в два раза больше, чем у кубических кристаллов. Кубические кристаллы характеризуются тремя безразмерными факторами анизотропии $\Pi \equiv -2s_{12}/\Delta$, $\delta \equiv \Delta/s_{11}$, $P = 2(s_{11} - s_{12})/s_{44}$ [15, 43, 46]. Здесь $\Delta \equiv s_{11} - s_{12} - 0.5s_{44}$. Основываясь на термодинамических неравенствах $s_{11} > 0$, $s_{33} > 0$, накладываемых на коэффициенты податливости, находим следующие ограничения для безразмерных параметров гексагональных кристаллов: $\Pi_1 > -1$, $\Pi_3 > -1$. Зависимости модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига являются периодическими функциями θ и ψ с периодами $T_\theta = T_\psi = \pi$.

3. 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 (3) 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

$$E_1 = \frac{1}{s_{33}} = \frac{1}{s_{11}(1 + \Pi_1)}, \quad (6)$$

$$E_2 = \frac{1}{s_{11}}, \quad (7)$$

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

$$E_3 = \frac{4\Pi_{01}}{4\Pi_{01} - (\Pi_1 - \Pi_{01})^2} \frac{1}{s_{11}} \quad (8)$$

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 точкой минимума (и наоборот).

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

$$\frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} = \frac{2(\Pi_1 + \Pi_{01})}{s_{11}(1 + \Pi_1)^2}. \quad (9)$$

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

$$\frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} = \frac{2(\Pi_{01} - \Pi_1)}{s_{11}}. \quad (10)$$

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

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

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 [49], 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.

На Рис.1 представлена классификационная схема для экстремумов модуля Юнга в зависимости от двух безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 , полученная на основе анализа формул (6)-(11). На этом рисунке точками нанесены значения безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 для 143 гексагональных кристаллов, представленных в [49]. Большинство гексагональных кристаллов находятся в интервале $-1 < \Pi_1 < 0$ и зоне с $E_{1m} > E_{2m} > E_{3m}$. Здесь и ниже под E_{im} ($i = 1, 2, 3$) будем обозначать экстремальные значения модуля Юнга E_i . 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 для кристаллов, представленных на Рис.2, даются экстремальные значения модуля Юнга.

Таблица 1. 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

Как видно из Рис.1 существуют две зоны, в которых отсутствует экстремальное значение E_{3m} . Угловые зависимости модуля Юнга для этих зон представлены на Рис.2а и Рис.2г. Материалами, у которых имеется два экстремальных значения E_{1m} и E_{2m} , являются, например, бериллий Be и его сплавы с Cu, кадмий Cd и его сплавы с Mg или Zn, In₂Bi, MnAs, Tl и Ag₂Al. В двух зонах $E_{3m} > E_{2m} > E_{1m}$ (Рис.2б) и $E_{3m} > E_{1m} > E_{2m}$ (Рис.2в) имеем максимальное значение E_{3m} . Два других значения E_{1m} и E_{2m} являются минимальными значениями. Для кристаллов Zn и BN₃ (Рис.2б) значение модуля Юнга E_{1m} является глобальным минимальным значением, а E_{2m} - локальным минимумом. В случае кристаллов Tc и WC (Рис.2в) имеет место обратная ситуация: E_{2m} - глобальный минимум, а E_{1m} - локальный минимум. Для зон $E_{1m} > E_{2m} > E_{3m}$ (Рис.2д) и $E_{2m} > E_{1m} > E_{3m}$ (Рис.2е) 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.2д) и локальным максимумом для кристаллов MoS₂ и GaN (Рис.2е). 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

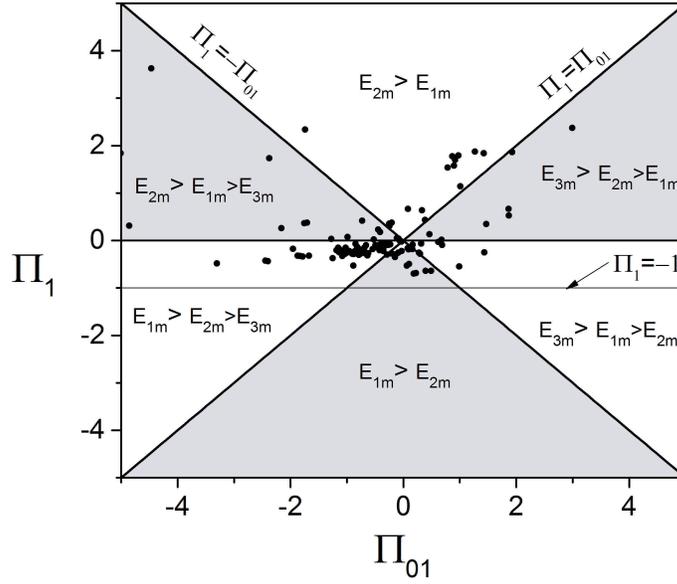


Рис. 1. Классификационная схема экстремальных значений модуля Юнга гексагональных кристаллов на плоскости безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 . Кругами отмечены значения безразмерных параметров Π_{01} и Π_1 для 143 гексагональных кристаллов из [49].

($E_{\max}/E_{\min} = 5.72$ 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).

4. Экстремальные значения коэффициента Пуассона

Проанализируем экстремальные значения коэффициента Пуассона. Выражение (4) 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 (4) по углам θ и ψ эти условия дают следующую систему уравнений для стационарных значений углов

$$\begin{cases} \sin^2 \theta \sin 2\psi (\Pi_2 - \Pi_{02} \cos^2 \theta) = 0 \\ \sin 2\theta [\Pi_1 + \Pi_{01} \cos 2\theta + \Pi_2 \sin^2 \psi (1 + \Pi_1 - \Pi_{01} \sin^4 \theta) + \\ + \Pi_{02} \cos^2 \psi (\cos 2\theta + \Pi_1 \cos^4 \theta)] = 0. \end{cases} \quad (12)$$

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 (12) позволяет найти восемь стационарных точек.

Значение коэффициента Пуассона

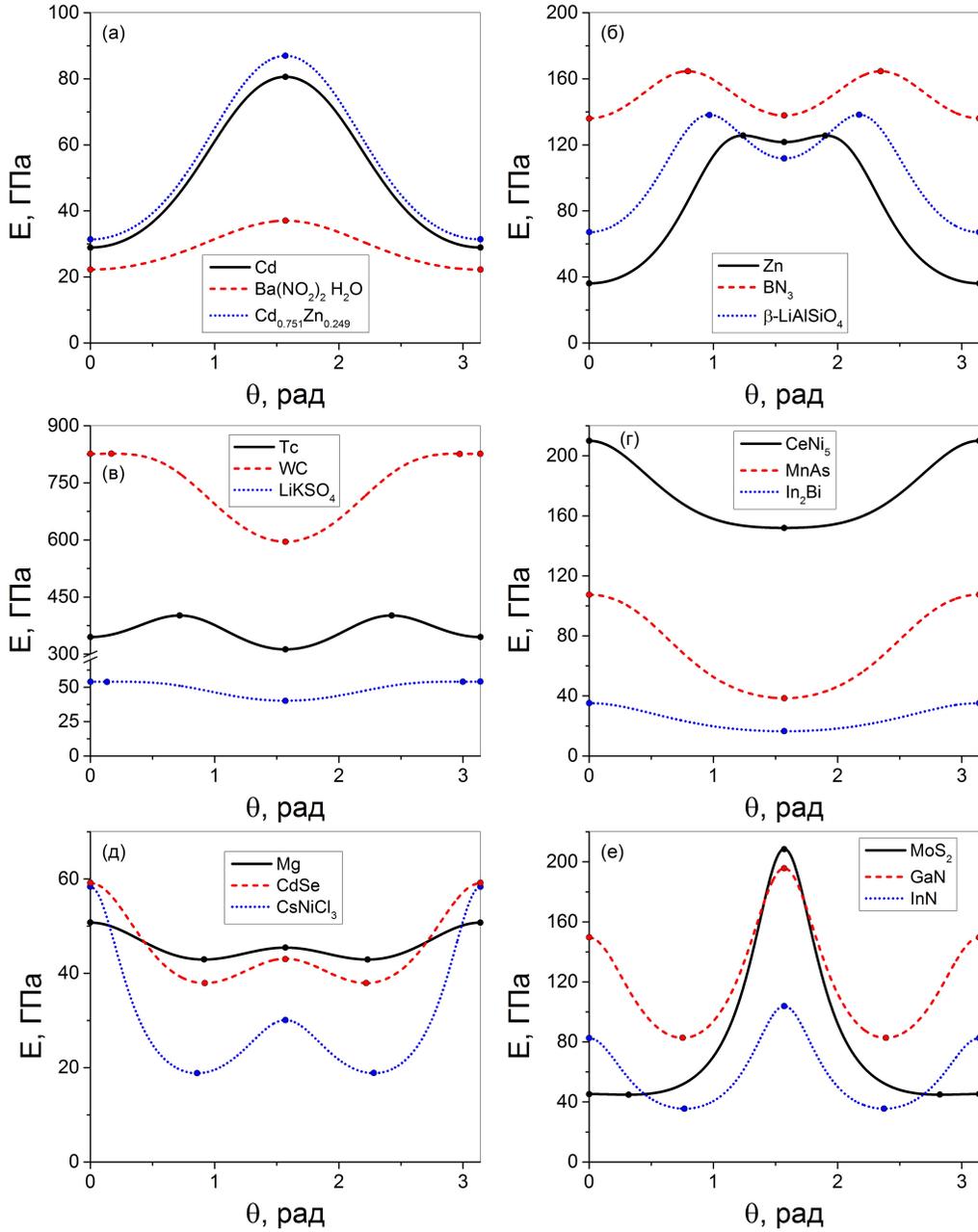


Рис. 2. Угловые зависимости модулей Юнга для некоторых гексагональных кристаллов, попадающих в зоны: $E_{2m} > E_{1m}$ (а), $E_{3m} > E_{2m} > E_{1m}$ (б), $E_{3m} > E_{1m} > E_{2m}$ (в), $E_{1m} > E_{2m}$ (г), $E_{1m} > E_{2m} > E_{3m}$ (д), $E_{2m} > E_{1m} > E_{3m}$ (е).

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

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

$$\nu_2 = \nu_{[2\bar{1}\bar{1}0],[01\bar{1}0]} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \quad (14)$$

и

$$\nu_3 = \nu_{[000\bar{1}],[01\bar{1}0]} = -\frac{s_{12}}{s_{11}} = -\frac{s_{13}(1 + \Pi_2)}{s_{11}} \quad (15)$$

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 эти неравенства и формулы (13)–(15), можно записать ограничения, накладываемые на коэффициенты Пуассона ν_1 , ν_2 , ν_3 ,

$$\begin{aligned} -\sqrt{\frac{s_{11}}{2s_{33}}(1 - \nu_3)} < \nu_1 < \sqrt{\frac{s_{11}}{2s_{33}}(1 - \nu_3)}, \\ -\sqrt{\frac{s_{33}}{2s_{11}}(1 - \nu_3)} < \nu_2 < \sqrt{\frac{s_{33}}{2s_{11}}(1 - \nu_3)}, \\ -1 < \nu_3 < 1 - \frac{2s_{13}^2}{s_{11}s_{33}}. \end{aligned} \quad (16)$$

Численный анализ верхней границы $c = 1 - 2s_{13}^2/(s_{11}s_{33})$ для 173 гексагональных кристаллов показывает, что эти значения для большинства кристаллов находятся в интервале от 0.65 до 0.9. Наименьшее значение c 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 c 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). Стационарные значения коэффициента Пуассона ν_1 , ν_4 , ν_5 , ν_6 , ν_7 , ν_8 не имеют простых ограничений. В [2] было показано, что коэффициент Пуассона для гексагональных кристаллов может иметь сколь угодно большое положительное или отрицательное значение при условии положительной определенности плотности энергии деформации.

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 (12). Два решения уравнения (12) при $\sin 2\psi = 0$, т.е. при $\psi = 0$ и $\psi = \pi/2$, позволяют привести второе уравнение в (12) к двум квадратным уравнениям относительно $\cos^2 \theta$ и $\sin^2 \theta$, решение которых позволяет получить явные формулы стационарных значений.

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

$$\nu_{4,5} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \frac{1 + 0.25\Pi_{02} \sin^2 2\theta}{1 + \Pi_1 \cos^2 \theta - 0.25\Pi_{01} \sin^2 2\theta} \quad (17)$$

при ограничениях

$$0 \leq \cos^2 \theta_{4,5} = \frac{-(\Pi_{01} + \Pi_{02}) \pm \sqrt{D_1}}{\Pi_1 \Pi_{02}} \leq 1, \quad (18)$$

$$D_1 = (\Pi_{01} + \Pi_{02})^2 - \Pi_1 \Pi_{02} (\Pi_1 - \Pi_{01} - \Pi_{02}) \geq 0. \quad (19)$$

Значение ν_4 получается если в формуле (18) брать знак плюс, а ν_5 - минус.

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

$$0 \leq \sin^2 \theta_{6,7} = \frac{-\Pi_{01} \pm \sqrt{D_2}}{\Pi_{01} \Pi_2} \leq 1, \quad (20)$$

$$D_2 = \Pi_{01}^2 + \Pi_{01} \Pi_2 (\Pi_1 + \Pi_{01} + \Pi_2 + \Pi_1 \Pi_2) \geq 0 \quad (21)$$

при которых имеют место стационарные значения коэффициента Пуассона

$$\nu_{6,7} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} \frac{1 + \Pi_2 \sin^2 \theta}{1 + \Pi_1 \cos^2 \theta - 0.25\Pi_{01} \sin^2 2\theta}. \quad (22)$$

Еще одно решение получается из второго уравнения в (12) при

$$\cos^2 \psi = \frac{a}{b}, \quad (23)$$

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

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

используя подстановку в него решения первого уравнения (12) вида $\cos^2 \theta = \Pi_2/\Pi_{02}$. Решение этих двух уравнений позволяет определить из (4) 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 [50].

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

Таблица 2. Значения коэффициентов Пуассона $\nu_1 - \nu_7$ для некоторых гексагональных кристаллов. Глобальные максимальные и минимальные значения выделены полужирным. Приняты обозначения: М – максимум, м – минимум.

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

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 ($\nu_1 = \nu_{\max}$).

В случае стационарной точки $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$ 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.2. 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. Глобальные максимальные и минимальные значения в Табл.2 выделены полужирным.

С помощью численного анализа изменчивости коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов удается 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.3 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 других наборах коэффициент Пуассона оказывается положительным. Наибольшие значения коэффициента Пуассона с $\nu_{\max} \geq 0.8$ выявляются у графита ($\nu_{\max} = 0.86$), RbNiCl₃ ($\nu_{\max} = 0.84$), RbMnCl₃ ($\nu_{\max} = 0.81$) и KMg₃AlSi₃O₁₀(OH,F)₂ ($\nu_{\max} = 0.80$). Обнаруживается 29 кристаллов, у которых максимальное значение коэффициента Пуассона больше 0.5 (больше верхней границы для изотропных материалов).

Анализ стационарных значений коэффициента Пуассона, описываемых формулами (13) - (22), 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 [49]. 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 [49]. 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 (20) и (21) для этих материалов не выполняются.

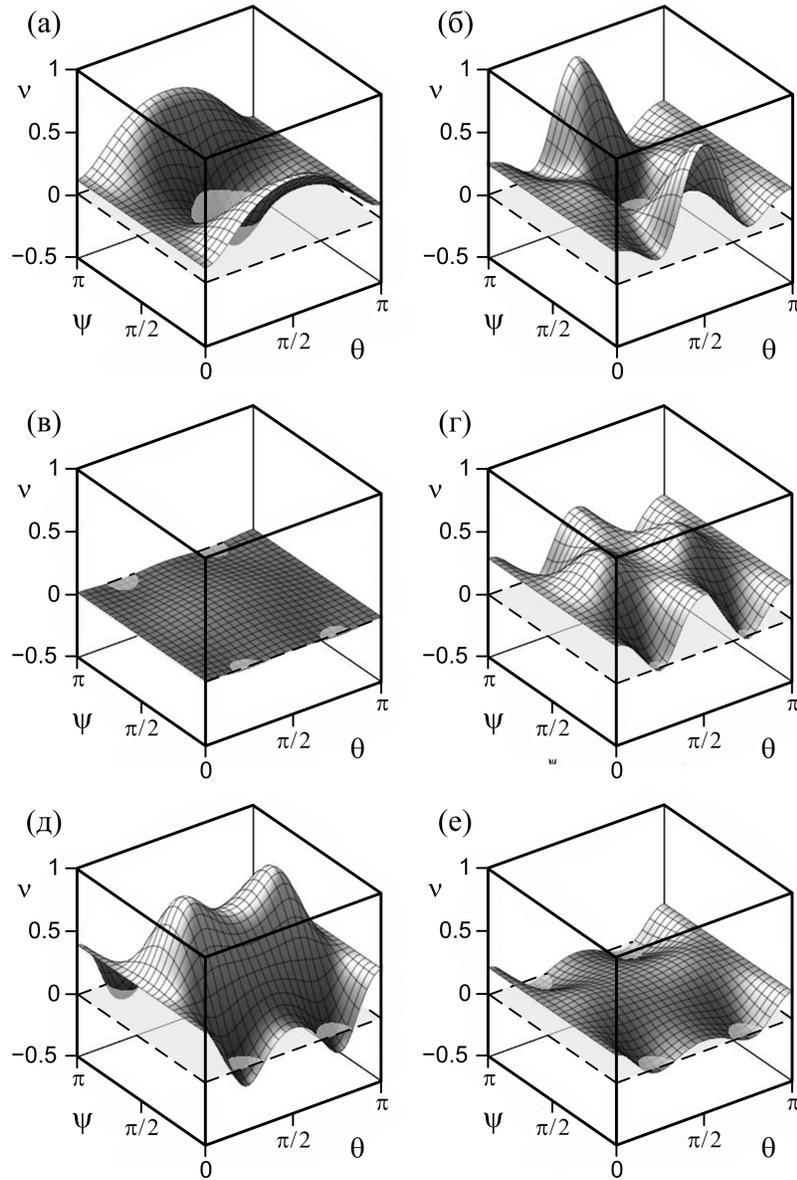


Рис. 3. Поверхности коэффициентов Пуассона гексагональных ауксетиков MoS_2 (а), Zn (б), Be (в), TiB_2 (г), C_7H_{12} (д) и MnAs (е).

На Рис.4, основываясь на формулах (13) - (15), 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 [49]. Другие пять коэффициентов Пуассона $\nu_4 - \nu_8$ зависят от четырех безразмерных параметров Π_1 , Π_2 , Π_{01} , Π_{02} (см. формулы (13)-(22)). На Рис.4 точками нанесены значения безразмерных параметров Π_1 и Π_2 для 143 гексагональных кристаллов из [Ландолт]. Как видно из рисунка большинство кристаллов находится в интервале $-1 < \Pi_1 < 0$ и $\nu_3 > \nu_1 > \nu_2$.

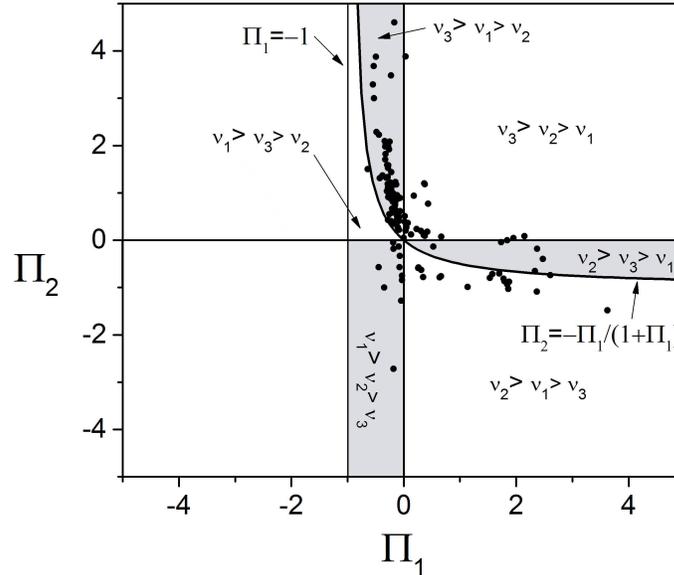


Рис. 4. Классификационная схема трех экстремальных значений коэффициента Пуассона гексагональных кристаллов на плоскости безразмерных параметров Π_1 и Π_2 . Кружками отмечены значения безразмерных параметров Π_1 и Π_2 для 143 гексагональных кристаллов из [49].

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.5 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.5 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 - глобальным максимумом.

5. Экстремальные значения модуля сдвига

Проанализируем экстремальные значения модуля сдвига. Выражение (5) для модуля сдвига гексагональных кристаллов зависит от двух углов Эйлера. Необходимые условия экстремальности (достижения максимумов или минимумов) модуля сдвига состоят в выполнении условий стационарности

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

В результате дифференцирования выражения для модуля сдвига (5) по углам θ и ψ эти условия дают следующую систему уравнений для стационарных значений углов

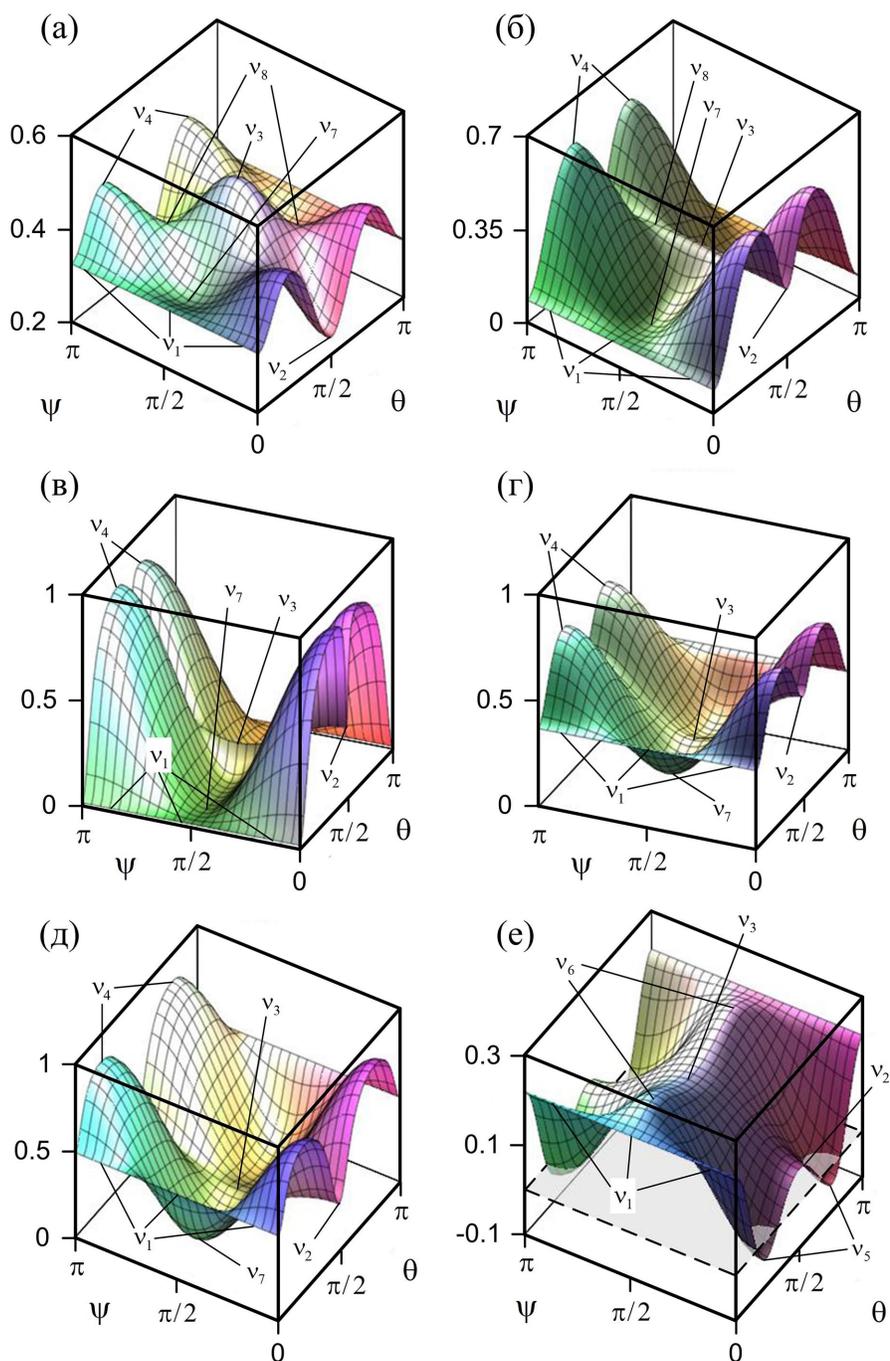


Рис. 5. Поверхности коэффициента Пуассона для некоторых гексагональных кристаллов, попадающих в зоны: $\nu_3 > \nu_1 > \nu_2$ (CdSe) (а), $\nu_3 > \nu_2 > \nu_1$ (GaS) (б), $\nu_2 > \nu_3 > \nu_1$ (C, графит) (в), $\nu_2 > \nu_1 > \nu_3$ (GaN) (г), $\nu_1 > \nu_2 > \nu_3$ (RbNiCl₃) (д), $\nu_1 > \nu_3 > \nu_2$ (MnAs) (е).

$$\begin{cases} \sin^2 \theta \sin 2\psi (\Pi_3 - 4\Pi_{03} \cos^2 \theta) = 0 \\ \sin 2\theta (\Pi_3 \sin^2 \psi + 4\Pi_{03} \cos 2\theta \cos^2 \psi) = 0 \end{cases} \quad (24)$$

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 (24) 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

$$G_1 = \frac{1}{s_{44}} \quad (25)$$

достигается при $\theta = 0$ и любых углах ψ , а также при $\theta = \pi/2$, $\psi = 0$. Это возможно для плоскости скольжения (0001) 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

$$G_2 = \frac{1}{s_{44}(1 + \Pi_3)} = \frac{1}{s_{66}} \quad (26)$$

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

$$G_3 = \frac{1}{s_{44}(1 + \Pi_{03})} = \frac{1}{s_{11} + s_{33} - 2s_{13}} \quad (27)$$

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, обратное значение модуля сдвига

$$G_4^{-1} = s_{44} \left(1 + \Pi_3 - \frac{\Pi_3^2}{4\Pi_{03}} \right) \quad (28)$$

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.100).

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

$$D = \frac{16\Pi_{03}\Pi_3}{s_{44}}, \quad A = -\frac{8\Pi_{03}}{s_{44}}. \quad (29)$$

Определение коэффициентов A, B, C, D представлено на стр.100. 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.

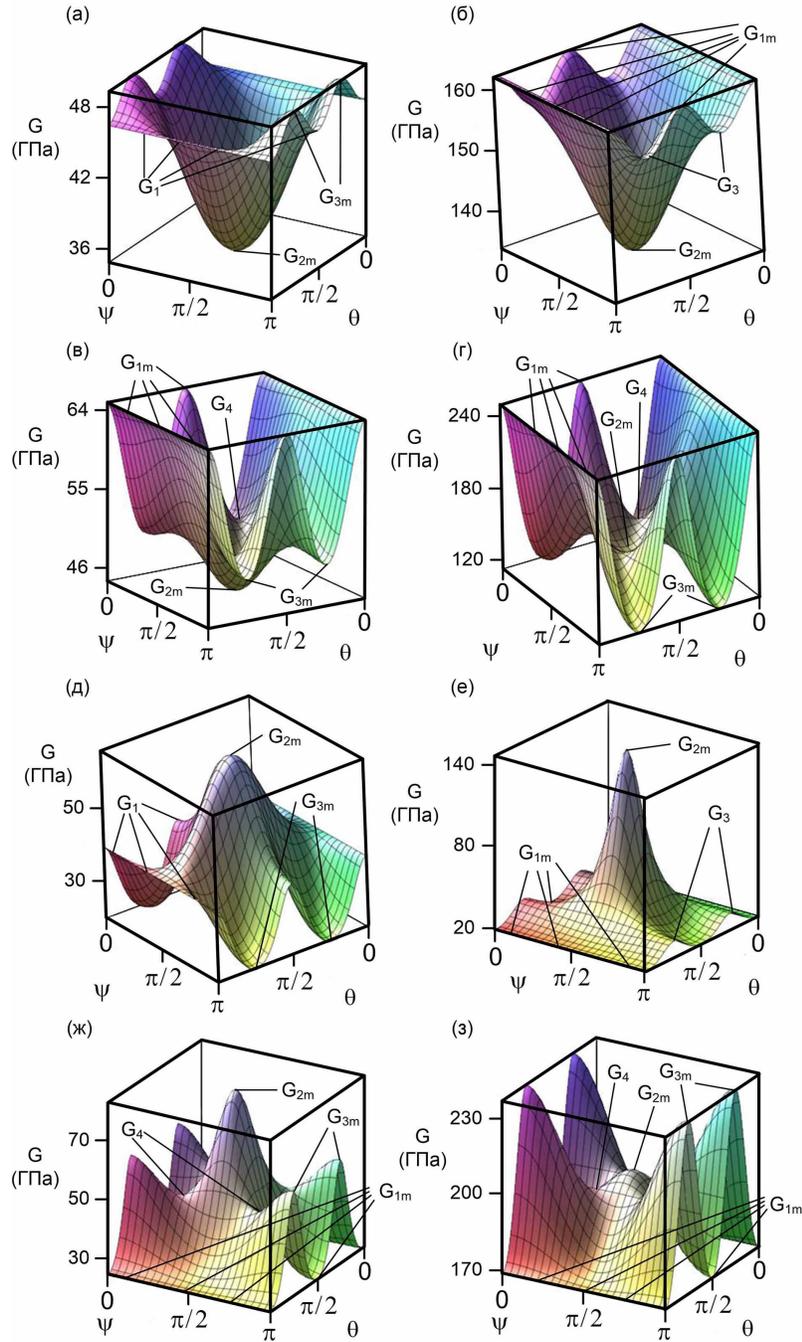


Рис. 6. Зависимость модуля сдвига $G(\theta, \psi)$ от двух углов ориентации гексагональных кристаллов Ti ($G_3 > \bar{G}_1 > G_2$) (а), Be ($G_1 > \bar{G}_3 > G_2$) (б), BN_3 ($G_1 > G_3 > G_2$) (в), TiB_2 ($G_1 > G_2 > G_3$) (г), Zn ($G_2 > \bar{G}_1 > G_3$) (д), MoS_2 ($G_2 > \bar{G}_3 > G_1$) (е), 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.

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

$$A = -\frac{2(4\Pi_{03}\cos^2\psi + \Pi_3\sin^2\psi)}{s_{44}}. \quad (30)$$

Таблица 3. 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.6б и Рис.6г 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.3) и соответственно A отрицательно. Для кристаллов GaN и SiC значение модуля сдвига G_1 при $\theta = 0$ будет минимальным (Рис.6ж и Рис.6з). Кристаллы GaN и SiC характеризуются отрицательными безразмерными параметрами Π_3 , Π_{03} (см. Табл.3) 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.6а и Рис.6д 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

$$D = \frac{4\Pi_3^2}{s_{44}^2(1 + \Pi_3)^4} > 0, \quad A = \frac{2\Pi_3}{s_{44}(1 + \Pi_3)^2}. \quad (31)$$

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

$$D = \frac{8\Pi_{03}(2\Pi_{03} - \Pi_3)}{s_{44}^2(1 + \Pi_{03})^4}, \quad A = \frac{8\Pi_{03}}{s_{44}(1 + \Pi_{03})^2}. \quad (32)$$

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

$$D = -\frac{512(2\Pi_{03} - \Pi_3)(4\Pi_{03} - \Pi_3)\Pi_3^2\Pi_{03}^2}{s_{44}^2(4\Pi_{03} + 4\Pi_3\Pi_{03} - \Pi_3^2)^4}, \quad (33)$$

$$A = \frac{32\Pi_3^2\Pi_{03}}{s_{44}(4\Pi_{03} + 4\Pi_3\Pi_{03} - \Pi_3^2)^2}. \quad (34)$$

Анализ, проведенный для 143 гексагональных кристаллов из справочника [49], показал, что для 43 кристаллов не возможна реализация $G = G_4$ (см. Табл.3). 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.6в, г, ж и з. В Табл.3 даны значения углов θ_0 , ψ_0 , при которых существует G_4 .

В Табл.3 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.3). Для кристаллов CdSe, SiC, TiB₂, указанных в Табл.3, значение G_2 является локальным экстремумом. Это иллюстрирует Рис.6з для кристалла SiC. В Табл.3 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 (графит). Для них значение G_3 является локальным экстремумом. Для кристалла GaN это видно из Рис.6ж. 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 MoS₂.

На Рис.7 изображена классификационная схема для экстремумов модуля сдвига в зависимости от двух безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 , полученная на основе анализа формул (25) – (34). На этом рисунке точками нанесены значения безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 для всех гексагональных кристаллов из [49]. 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.6 дается

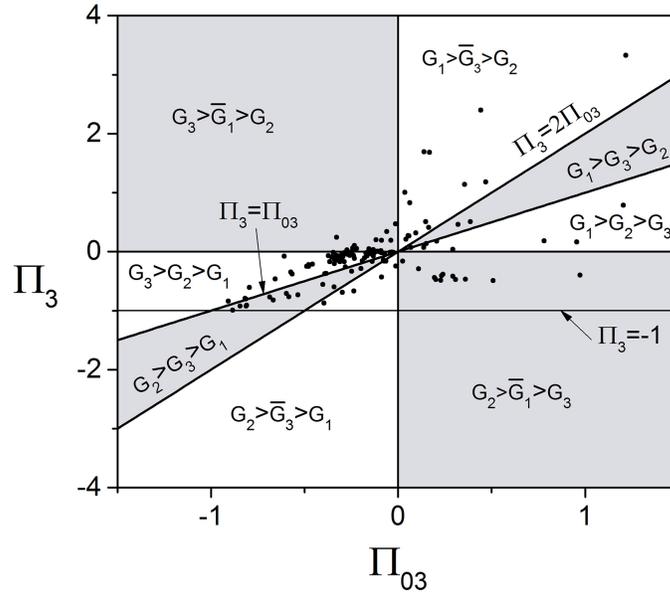


Рис. 7. Классификационная схема экстремальных значений модуля сдвига гексагональных кристаллов в зависимости от безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 . Кругами отмечены значения безразмерных параметров Π_{03} и Π_3 для 143 гексагональных кристаллов из [49]. \bar{G}_n - значения модуля сдвига в стационарных точках, не являющихся экстремальными значениями.

по одному примеру поверхности модуля сдвига. Значения модулей в стационарных точках, не являющихся экстремальными, обозначены через \bar{G}_n .

Как видно из Рис.6 в четырех поверхностях отсутствует значение G_4 (Рис.6а,б,д,е), а на других четырех поверхностях G_4 присутствует (Рис.6в,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.6а и Рис.6б 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.6в) и TiB_2 (Рис.6г) 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 VN_3 и локальный G_2 и глобальный G_3 для TiB_2). Сравнение поверхностей модулей сдвига для Zn (Рис.6д) и MoS_2 (Рис.6е) 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.6ж) и SiC (Рис.6з) 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).

Заключение

В работе проведен аналитический анализ изменчивости модуля Юнга, коэффициентов Пуассона и модуля сдвига. 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 некоторую 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 анизотропии.

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. С помощью численного анализа удалось выявить семь гексагональных ауссетиков Be (-0.005), Be-Cu at 1.1% Cu (-0.005), Be-Cu at 2.4% (-0.04), MnAs (-0.04), MoS₂ (-0.28), C₇H₁₂ (-0.15) и Zn (-0.07). Предложена классификационная схема для трех стационарных значений коэффициентов Пуассона в зависимости от двух безразмерных параметров анизотропии.

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 анизотропии.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука. 195 с.
- [2] 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.
- [3] Turley J., Sines G. The anisotropy of Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio in cubic materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 1971. Vol. 4, no. 2. p. 264–271.
- [4] Gunton D. J., Saunders G. A. The Young's modulus and Poisson's ratio of arsenic, antimony and bismuth // J. Mater. Sci. 1972. Vol. 7, no. 9. p. 1061–1068.
- [5] 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.
- [6] Boulanger P., Hayes M. Poisson's ratio for orthorhombic materials // J. Elasticity. 1998. Vol. 50, no. 1. p. 87–89.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Norris A. N. Extreme values of Poisson's ratio and other engineering moduli in anisotropic materials // J. Mech. Mater. Struc. 2006. Vol. 1, no. 4. p. 793–812.
- [12] Guo C. Y., Wheeler L. Extreme Poisson's ratios and related elastic crystal properties // J. Mech. Phys. Solids. 2006. Vol. 54, no. 4. p. 690–707.

- [13] Аннин Б. Д., Остросаблин Н. И. Анизотропия упругих свойств материалов // ПМТФ. 2008. Т. 49, № 6. С. 131–151.
- [14] Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Модуль Юнга кубических ауксетиков // Письма о материалах. 2011. Т. 1, № 3. с. 127–132.
- [15] Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Модуль сдвига кубических кристаллов // Письма о материалах. 2012. Т. 2, № 1. с. 21–24.
- [16] 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.
- [17] Cazzani A., Rovati M. Extrema of Young's modulus for elastic solids with tetragonal symmetry // *Int. J. Solids Struct.* 2005. Vol. 42. p. 18–19.
- [18] 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.
- [19] Norris A. N. Poisson's ratio in cubic materials // *Proc. Roy. Soc. A.* 2006. Vol. 462, no. 2075. p. 3385–3405.
- [20] Елишин А. И., Лисовенко Д. С. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов // ЖТФ. 2016. Т. 61, № 10. с. 1516–1524.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] Lubarda V. A., Meyers M. A. On the negative Poisson ratio in monocrystalline zinc // *Scripta Mater.* 1999. Vol. 40, no. 8. p. 975–977.
- [24] Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Ауксетическая механика кристаллических материалов // Изв. РАН. МТТ. 2010. № 4. С. 43–62.
- [25] Elastic anisotropy and extreme Poisson's ratios in single crystals / Z. A. D. Lethbridge, R. I. Walton, A. S. H. Marmier et al. // *Acta Mater.* 2010. Vol. 58, no. 19. p. 6444–6451.
- [26] Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Изменчивость упругих свойств гексагональных ауксетиков // ДАН. 2011. Т. 441, № 4. С. 468–471.
- [27] 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.
- [28] 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.
- [29] 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.
- [30] Milstein F., Huang K. Existence of a negative Poisson ratio in fcc crystals // *Phys. Rev. B.* 1979. Vol. 19, no. 4. p. 2030–2033.
- [31] 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.
- [32] Negative Poisson's ratios as a common feature of cubic metals / R. H. Baughman, J. M. Shacklette, A. A. Zakhidov et al. // *Nature.* 1998. Vol. 392, no. 6674. p. 362–365.
- [33] Rovati M. On the negative Poisson's ratio of an orthorhombic alloy // *Scripta Mater.* 2003. Vol. 48, no. 3. p. 235–240.
- [34] Rovati M. Directions of auxeticity for monoclinic crystals // *Scripta Mater.* 2004. Vol. 51, no. 11. p. 1087–1091.
- [35] Elastic constants internal friction, and piezoelectric coefficient of α -TeO₂ / H. Ogi, M. Fukunaga, M. Hirao et al. // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 69, no. 2. p. 024104.
- [36] Tokmakova S. P. Stereographic projections of Poisson's ratio in auxetic crystals // *Phys. Status Solidi B.* 2005. Vol. 242, no. 3. p. 721–729.
- [37] Wojciechowski K. W. Poisson's ratio of anisotropic systems // *Comput. Methods Sci. Techn.* 2005. Vol. 11, no. 1. p. 73–79.
- [38] Гольдштейн Р. В., Городцов В. А., Лисовенко Д. С. Связь среднего коэффициента Пуассона с модулем Юнга для кубических кристаллов. Ауксетики в среднем // ДАН. 2012. Т. 443, № 6. С. 677–681.

- [39] 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.* 2015. Т. 18, № 3. с. 213–222.
- [40] Ауксетики среди 6-ти константных тетрагональных кристаллов / Р. В. Гольдштейн, В. А. Городцов, Д. С. Лисовенко [и др.] // *Письма о материалах.* 2015. Т. 5, № 4. с. 409–413.
- [41] Механические характеристики 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов и нано/микротрубок из них / Р. В. Гольдштейн, В. А. Городцов, Д. С. Лисовенко [и др.] // *Письма о материалах.* 2016. Т. 6, № 2. с. 93–97.
- [42] 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.
- [43] Отрицательный коэффициент Пуассона для кубических кристаллов и нано/микротрубок / Р. В. Гольдштейн, В. А. Городцов, Д. С. Лисовенко [и др.] // *Физ. Мезомех.* 2013. Т. 16, № 6. С. 13–31.
- [44] 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.
- [45] 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.
- [46] 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.
- [47] Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. Наука: Мир, 1979. 640 с.
- [48] Най Дж. Физические свойства кристаллов. М.: ИЛ, 1960. 385 с.
- [49] Second and Higher Order Elastic Constants of Landolt-Börnstein // *Group III Condensed Matter* / Ed. by D. F. Nelson. Springer, 1992. Vol. 29.
- [50] Смирнов В. И. Курс высшей математики. М.: Наука, 1974. Т. 1. 479 с.

V. A. Gorodtsov, D. S. Lisovenko

YOUNG'S MODULUS, POISSON'S RATIO AND SHEAR MODULUS FOR HEXAGONAL CRYSTALS

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of RAS, Moscow, Russia

Abstract. The variability of Young's modulus, Poisson's ratio and shear modulus of hexagonal crystals has been studied. Analytical expressions for extreme values of these elastic characteristics are obtained. Based on experimental data of elastic constants from the Landolt-Börnstein reference book, the numerical analysis of extrema for hexagonal crystals is given. Classification schemes for the extrema of Young's modulus, Poisson's ratio and shear modulus are proposed.

Keywords: Young's modulus, Poisson's ratio, shear modulus, auxetics, crystals, hexagonal crystals

REFERENCES

- [1] Landau L. D., Lifshitz E. M. Theory of elasticity (Course of Theoretical Physics). Butterworth-Heinemann. T. 7.
- [2] 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.
- [3] Turley J., Sines G. The anisotropy of Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio in cubic materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 1971. Vol. 4, no. 2. p. 264–271.
- [4] Gunton D. J., Saunders G. A. The Young's modulus and Poisson's ratio of arsenic, antimony and bismuth // J. Mater. Sci. 1972. Vol. 7, no. 9. p. 1061–1068.
- [5] 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.
- [6] Boulanger P., M.Hayes. Poisson's ratio for orthorhombic materials // J. Elasticity. 1998. Vol. 50, no. 1. p. 87–89.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Norris A. N. Extreme values of Poisson's ratio and other engineering moduli in anisotropic materials // J. Mech. Mater. Struc. 2006. Vol. 1, no. 4. p. 793–812.
- [12] Guo C. Y., Wheeler L. Extreme Poisson's ratios and related elastic crystal properties // J. Mech. Phys. Solids. 2006. Vol. 54, no. 4. p. 690–707.
- [13] Annin B. D., Ostrosablin N. I. Anisotropy of elastic properties of materials // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 2008. Vol. 49, no. 6. p. 998–1014.
- [14] Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Young's modulus of cubic auxetics // Letters on Materials. 2011. Vol. 1, no. 3. p. 127–132.

Gorodtsov Valentin Aleksandrovich

e-mail: gorod@ipmnet.ru, Dr. Sci. Phys. & Math., Professor, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia,

Lisovenko Dmitry Sergeevich

e-mail: lisovenk@ipmnet.ru, Dr.. Sci. Phys. & Math., Head of Laboratory, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia.

- [15] Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Shear modulus of cubic crystals // *Letters on Materials*. 2012. Vol. 2, no. 1. p. 21–24.
- [16] 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.
- [17] Cazzani A., Rovati M. Extrema of Young's modulus for elastic solids with tetragonal symmetry // *Int. J. Solids Struct.* 2005. Vol. 42. p. 18–19.
- [18] 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.
- [19] Norris A. N. Poisson's ratio in cubic materials // *Proc. Roy. Soc. A*. 2006. Vol. 462, no. 2075. p. 3385–3405.
- [20] Epishin A. I., Lisovenko D. S. Extreme values of the Poisson's ratio of cubic crystals // *Tech. Phys.* 2016. Vol. 61, no. 10. p. 1516–1524.
- [21] Gunton D. J., Saunders G. A. Stability limits on the Poisson ratio: application to a martensitic transformation // *Proc.* 1975. Vol. 343, no. 1632. p. 63–83.
- [22] 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.
- [23] Lubarda V. A., Meyers M. A. On the negative Poisson ratio in monocrystalline zinc // *Scripta Mater.* 1999. Vol. 40, no. 8. p. 975–977.
- [24] Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Auxetic mechanics of crystalline materials // *Mech. Solids*. 2010. Vol. 45, no. 4. p. 529–545.
- [25] Elastic anisotropy and extreme Poisson's ratios in single crystals / Z. A. D. Lethbridge, R. I. Walton, A. S. H. Marmier et al. // *Acta Mater.* 2010. Vol. 58, no. 19. p. 6444–6451.
- [26] Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Variability of elastic properties of hexagonal auxetics // *Dokl. Phys.* 2011. Vol. 56, no. 12. p. 602–605.
- [27] Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Average Poisson's ratio for crystals. Hexagonal auxetics // *Letters on Materials*. 2013. Vol. 3, no. 1. p. 7–11.
- [28] 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.
- [29] 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.
- [30] Milstein F., Huang K. Existence of a negative Poisson ratio in fcc crystals // *Phys. Rev. B*. 1979. Vol. 19, no. 4. p. 2030–2033.
- [31] 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.
- [32] Negative Poisson's ratios as a common feature of cubic metals / R. H. Baughman, J. M. Shacklette, A. A. Zakhidov et al. // *Nature*. 1998. Vol. 392, no. 6674. p. 362–365.
- [33] Rovati M. On the negative Poisson's ratio of an orthorhombic alloy // *Scripta Mater.* 2003. Vol. 48, no. 3. p. 235–240.
- [34] Rovati M. Directions of auxeticity for monoclinic crystals // *Scripta Mater.* 2004. Vol. 51, no. 11. p. 1087–1091.
- [35] Elastic constants internal friction, and piezoelectric coefficient of α -TeO₂ / H. Ogi, M. Fukunaga, M. Hirao et al. // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 69, no. 2. p. 024104.
- [36] Tokmakova S. P. Stereographic projections of Poisson's ratio in auxetic crystals // *Phys. Status Solidi B*. 2005. Vol. 242, no. 3. p. 721–729.
- [37] Wojciechowski K. W. Poisson's ratio of anisotropic systems // *Comput. Methods Sci. Techn.* 2005. Vol. 11, no. 1. p. 73–79.
- [38] R. V. Goldstein V. A. Gorodtsov D. S. L. Relation of Poisson's ratio on average with Young's modulus. auxetics on average // *Dokl. Phys.* 2012. Vol. 57, no. 4. p. 174–178.
- [39] Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Lisovenko D. S. Young's modulus and Poisson's ratio for seven-constant tetragonal crystals and nano/microtubes // *Phys. Mesomech.* 2015. Vol. 18, no. 3. p. 213–222.
- [40] Auxetics among 6-constant tetragonal crystals / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov, D. S. Lisovenko et al. // *Letters on Materials*. 2015. Vol. 5, no. 4. p. 409–413.
- [41] Mechanical characteristics for seven-constant rhombohedral crystals and their nano/microtubes / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov, D. S. Lisovenko et al. // *Letters on Materials*. 2016. Vol. 6, no. 2. p. 93–97.

-
- [42] Novikova N. E., Lisovenko D. S., Sizova N. L. Peculiarities of the structure, moduli of elasticity, and knoop indentation patterns of deformation and fracture of single crystals of potassium, rubidium, cesium, and ammonium hydrophthalates // *Crystallogr. Rep.* 2018. Vol. 63, no. 3. p. 438–450.
- [43] Negative Poisson's ratio for cubic crystals and nano/microtubes / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov, D. S. Lisovenko et al. // *Phys. Mesomech.* 2014. Vol. 17, no. 2. p. 97–115.
- [44] 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.
- [45] 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.
- [46] 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.
- [47] Sirotin Y. I., Shaskolskaya M. P. *Fundamentals of Crystal Physics.* Moscow: Mir, 1982. 654 p.
- [48] Nye J. F. *Physical Properties of Crystals.* Oxford: Clarendon Press, 1957. 329 p.
- [49] *Second and Higher Order Elastic Constants of Landolt-Börnstein* // *Group III Condensed Matter* / Ed. by D. F. Nelson. Springer, 1992. Vol. 29.
- [50] Smirnov V. I. *A course of higher mathematics.* Pergamon Press, 1964. Vol. I (Elementary Calculus). 546 p.