

Упругие постоянные третьего порядка: *ab initio* расчёты и экспериментальные исследования.

А. В. Теличко, С. В. Ерохин, Б. П. Сорокин, П. Б. Сорокин

Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Алмаз - особый материал, обладающий уникальными свойствами, прямо или косвенно связанными со сверхвысокой механической жёсткостью: рекордная твёрдость [1], высокая теплопроводность и радиационная стабильность, низкий коэффициент затухания высокочастотных акустических волн [2]. Большинство агармонических свойств алмаза - температурная зависимость упругих характеристик и сдвиг скоростей акустических волн при изменении давления, термическое расширение, фонон-фононное взаимодействие и др. - невозможно описать, используя только упругие константы 2-ого порядка (SOEC). Необходимо использовать константы третьего порядка (ТОЕС), которые, в отличие от SOEC, определены с гораздо меньшей точностью.

Для получения более точных значений ТОЕС были проведены эксперименты по распространению акустических волн в чистом синтетическом Па монокристалле алмаза под внешним давлением. Мы также провели теоретические расчёты, используя *ab initio* DFT метод, которые показали хорошее согласие с измеренными данными, построили зависимости напряжений от деформаций, приложенных к кристаллу в различных направлениях.

ТОЕС из *ab initio* расчётов были $C_{111} = -7766$, $C_{112} = -2082$, $C_{144} = -687$, $C_{155} = -2651$, $C_{123} = 1989$, $C_{456} = -1151$ (ГПа), в то время как экспериментальные значения были $C_{111} = -(77 \pm 7) \cdot 10^2$, $C_{112} = -(22 \pm 5) \cdot 10^2$, $C_{144} = -(18 \pm 4) \cdot 10^2$, $C_{155} = -(28 \pm 2) \cdot 10^2$, $C_{123} = (21 \pm 2) \cdot 10^2$, $C_{456} = 0 \pm 10^2$ (ГПа).

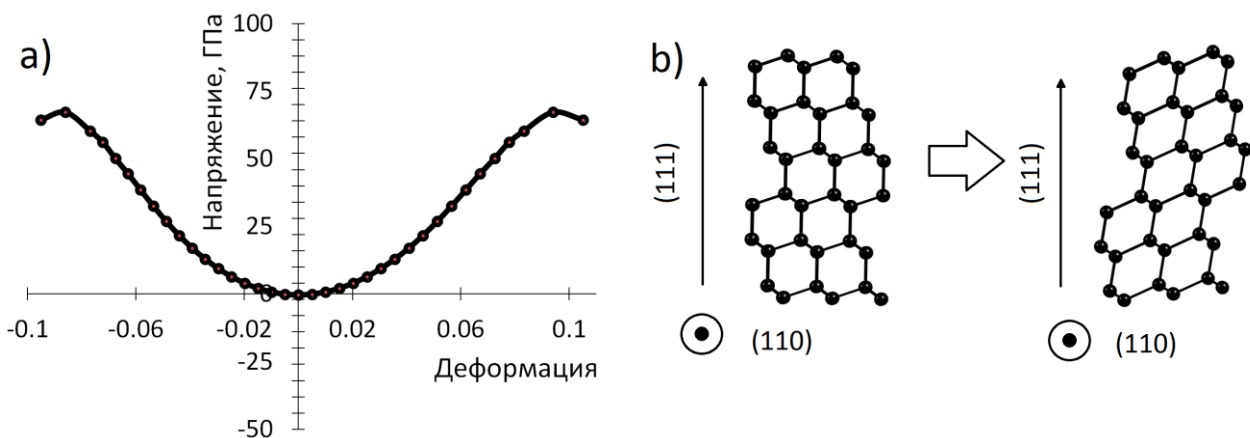


Рис. 1. а) Зависимость напряжения от сдвиговой деформации, приложенной к кристаллу алмаза, полученная из *ab initio* расчётов. б) Пример сдвиговой деформации кристалла алмаза, заданного периодической ячейкой, ориентированной в направлении (111).

Литература

1. *E. Berkenpas [at al.] A langasite SH SAW O157:H7 E. coli sensor. // IEEE Ultrason. Symp. – 2005. – P. 54-57.*
2. *Ballandras S. [at al.] High overtone Bulk Acoustic Resonators built on single crystal stacks for sensors applications. // IEEE Sensors – 2011. – P. 516-519.*