

ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЭФФЕКТА ОТРИЦАТЕЛЬНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

© 2002 г. Д.А. КОНЁК

Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого
Национальной академии наук Беларуси

Одной из актуальных задач современного материаловедения является создание принципиально новых материалов, способных проявлять программируемые, существенно нелинейные деформационные свойства, вплоть до получения адаптивной (приспособительной) реакции на внешнее воздействие [1].

В частности, к таковым можно отнести ауксетики - материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона ν , способные расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном одноосному растяжению/сжатию соответственно, иначе называемые ауксетичные или ауксетики. У большинства конструкционных материалов значения колеблются в пределах 0,2-0,4. Тем не менее, теоретические значения ν для изотропного материала лежат в пределах $-1 \leq \nu \leq 0,5$.

Что касается реализации программируемого деформационного поведения, ауксетики, в частности, позволяют в условиях стесненного деформирования достичь высокую несущую способность фрикционных соединений, что делает их наиболее предпочтительными для использования в крепежных изделиях [2].

Целью работы является анализ механизмов, приводящих к отрицательным значениям ν в твердых телах для дальнейшего использования ауксетиков в технике.

На сегодняшний день известно немало случаев проявления отрицательных значений ν в кристаллах и композиционных материалах [3, 4], и нами выделялись три структурных уровня реализации данной аномалии деформационного поведения: макро-, мезо- и микроскопический [3]. Также известны стержневые модели материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона, в частности [5]. Несмотря на то, что коэффициент Пуассона является структурно более чувствительной характеристикой по сравнению с модулями упругости, в литературе мало внимания уделяется изучению причин, ведущих к

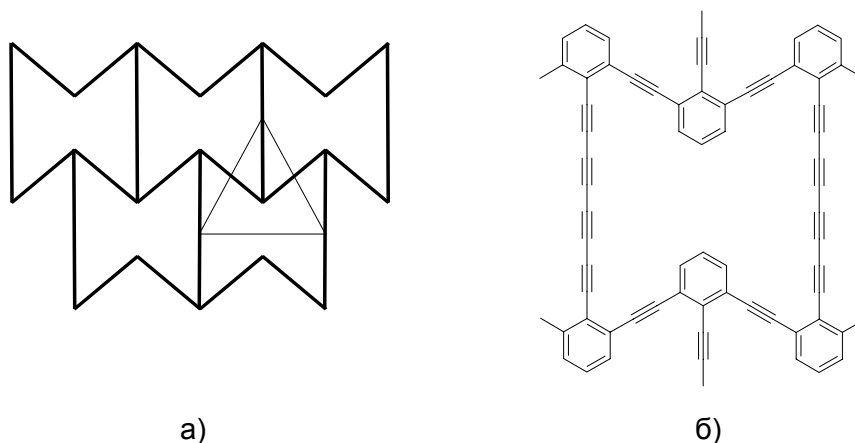
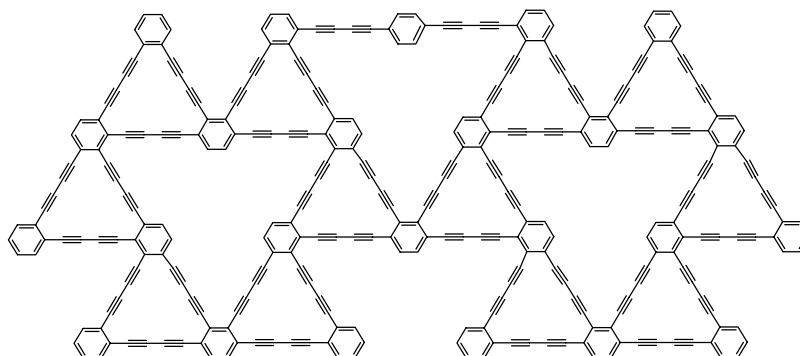


Рис.1. 2-D стержневая конструкция (а) и макромолекула (б) ауксетика.

ауксетичному поведению на атомно-молекулярном уровне.

Реализация отрицательных значений ν на атомно-молекулярном уровне позволит создавать конструкционные материалы с программируемыми свойствами, а также избежать дефектности структуры и нарушения адгезионного контакта между компонентами. Однако для решения задач по выявлению данного эффекта на уровне молекул и макромолекул требуется решение сложных квантовомеханических задач. Простейший способ их решения – перенесение принципа сочетания жестких и податливых элементов, реализованного на макро– [3] и мезоскопическом [3, 5] уровнях в композитных материалах и пенопластах (рис. 1 а) на молекулярный уровень. Так методами молекулярной механики в [6] была предсказана структура макромолекулы полимера, обладающего такими свойствами (рис. 1 б). Путем варьирования "продольных" и "поперечных" тройных связей от одной до трех можно получить различные отрицательные значения ν .

Позже в работе [7] было показано, что такими свойствами может обладать олигомер следующего строения:



Здесь также возможно управление величиной ν путем изменения числа тройных связей.

К сожалению, синтезировать такие вещества непросто, несмотря на достижения химии в этой области. К тому же данные структуры являются модельными, т.к. упругие свойства молекул моделировались в 2 D постановке. В реальном случае часть тройных связей подвергнется окислению, структура молекулы будет искажена, и мы не сможем достичь желаемого эффекта. Кроме того, на упругие свойства материала будет существенно влиять способ «укладки» молекул.

Данный эффект может проявляться и в нематических жидких кристаллах, у которых оси молекул ориентированы параллельно друг другу. Если общую структуру нематической фазы представить в виде жестких стержней, соединенных упругими нитями (рис. 2а), то для реализации отрицательных значений ν при растяжении необходимо наличие в полимере определенного свободного объема. Т.к. ν связан с решеточным параметром Грюнайзена и флуктуационным свободным объемом, то, как было показано в [8], полимеры с более интенсивным межмолекулярным взаимодействием при прочих равных условиях должны иметь меньшие значения ν . При фиксированном числе полимерных цепей в единице объема для достижения минимальных значений ν необходимо увеличить расстояние между взаимодействующими цепями, т.е. расстояние между несвязанными атомами [9]. С этой целью было предложено к центру молекулы жидкого кристалла "присоединить" объемный заместитель (рис. 2б) [9]. При этом для реализации ауксетичного поведения должны соблюдаться следующие требования:

$$\begin{aligned} d_r/2 + 2d_v &< L_r/2 + d_v \\ L_r &> d_r + 2d_v \end{aligned} \quad (1)$$

где L_r и d_r – длина и диаметр присоединенной группы соответственно, а d_v – ван-дер-ваальсовское расстояние, соответствующее плотнейшей упаковке, который обычно составляет 4 Å. Т.к. диаметр заместителя составляет ~5 Å, то минимальная длина поперечно присоединенного заместителя L_r для ауксетичного полимера должна составлять $L_r > 13$ Å. Данные результаты были подтверждены экспериментально путем оценки межцепного расстояния методом рассеяния рентгеновских лучей на тримере, структура которого показана на рис. 2б.

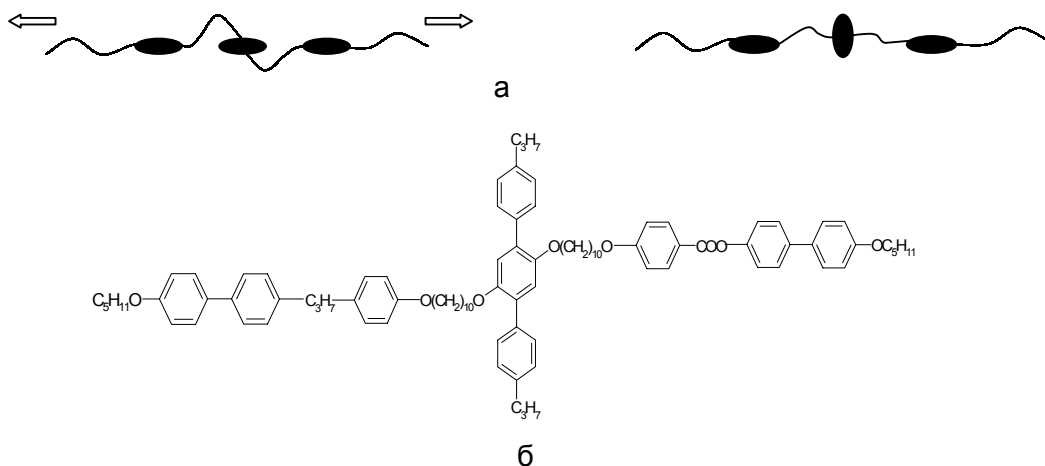


Рис. 2. Механическая модель деформационного поведения (а) и структура нематического жидкокристаллического ауксетика (б).

Помимо описанных выше жидких кристаллов и гипотетических структур, ауксетичное поведение на данном уровне проявляют многие монокристаллы металлов [10]. Так, среди тригональных монокристаллов такими свойствами обладают мышьяк и висмут.

Среди гексагональных плотноупакованных фаз металлов – цинк и бериллий. В большинстве случаев такие эффекты проявляются в кубических кристаллах вдоль некоторых кристаллографических направлений. В большинстве случаев такие свойства проявляются в объемноцентрированных кубических (ОЦК) кристаллах вдоль $(110, 1\bar{1}0)$ направлениях, что соответствует растяжению вдоль плоскости (110) в $(1\bar{1}0)$ поперечном направлении (рис. 3).

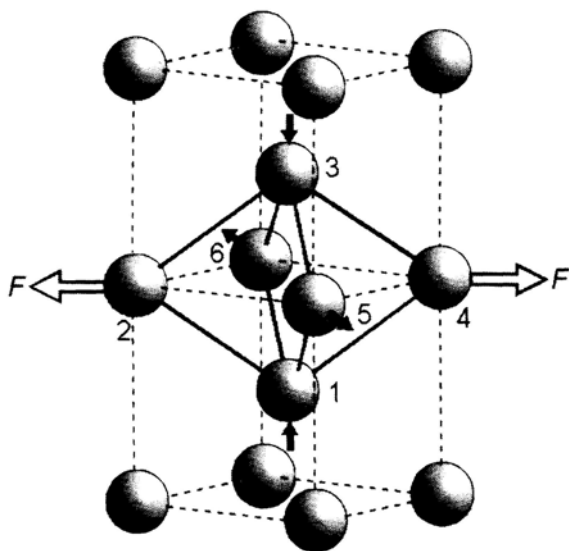


Рис. 3. Схема происхождения отрицательного коэффициента Пуассона в ОЦК кристаллах на примере двух элементарных ячеек с жесткими сферами. Белыми стрелками показано направление действия силы F , черными – смещения атомов 1-6 в ответ на силу F , приложенную вдоль $\langle 110 \rangle$ направления.

С целью упрощения и систематизации поиска кристаллических фаз, проявляющих отрицательные значения ν хотя бы для одного из кристаллографических направлений в работе [10] был предложен критерий ауксетичного поведения кристаллов.

$$S_{11} + S_{33} + 2S_{13} - S_{44} > 0, \quad (2)$$

где S_{ij} – компоненты матрицы податливости для данного кристалла.

Выполнение неравенства (2) – необходимое и достаточное условие существования отрицательных значений ν для гексагональных и кубических кристаллических фаз, когда значения ν для $\langle 100 \rangle$ направлений кристалла положительны.

В заключение отметим, что существуют альтернативные подходы к созданию ауксетичных фаз, основанные на моделировании упругих свойств термодинамически стабильных изотропных систем, состоящих из сферических частиц (молекул, атомов), опи-

санных в [11]. А в работе [12] был предложен механизм реализации отрицательных значений ν в фрактальных средах.

Таким образом, в данной работе были описаны примеры успешной реализации методов молекулярной механики и молекулярного дизайна для решения макромеханических задач по созданию аномально упругих материалов нового типа, которые, возможно, в будущем смогут применяться в различных областях науки и техники, в том числе и нанотехнологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект T00M –020).

Автор выражает благодарность Шилько С.В. за полезные замечания, высказанные в процессе подготовки доклада.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pleskachevsky Yu.M., Shilko S.V., Stelmakh S.V.* // Journal of Wave - Material Interaction.- 1999.- Vol. 14, № 1 – 2, p. 49 - 58.
2. *Шилько С.В.* // Трение и износ. - 1995. - Т. 15, № 3. - с. 429 - 437.
3. *Конёк Д.А., Черноус Д.А., Бодрунов Н.Н.* // Материаловедение, технологии и экология на рубеже веков /Материалы Всерос. научн. конф.- Томск, 2000.- с.105 - 108.
4. *Lakes R. S.* // Advanced Materials.– 1993.–Vol.5.– P.293-296.
5. *Черноус Д.А., Шилько С.В., Плескачевский Ю.М.* // Механика композитных материалов и конструкций. - 1998. -№3. - с. 28 - 38.
6. *Evans K.E., Nkansah M.A., Hutchinson I.J., Rogers S.C.* // Nature.–1991.– vol.353. – p. 124.
7. *Grima J. N., Evans K. E.* // Chemical Communications.- 2000, №17.- P.1531-1532.
8. *Сандитов Д.С., Сангадиев С.Ш.* // Высокомолекулярные соединения.Серия А.– 1998. –том 40, № 12. – с.1996 – 2003.
9. *He C.B, Liu P.W., Griffin A.C.* // Macromolecules.- 1998.- Vol. 31, № 9- P. 3145-3147
10. *Baughman R.H., Stafstrom S., Zakhidov A.A., Mitchell T.B., Dubin D.H. E.* // Science.– 2000.– vol. 288.– p.2018 - 2022.
11. *Wojciechowski K.W., Branka A.C.* // Physical Review A. – 1989.–vol. 40, № 12.– p. 7222 - 7225.
12. *Новиков В.В., Wojciechowski K.W.* // Физика твердого тела.– 1999.– том 41., № 12. – с. 2147 - 2153.