

На правах рукописи

**Волков Михаил Андреевич**

**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛОВ  
И НАНОТРУБОК С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ КОЭФФИЦИЕНТОМ  
ПУАССОНА НЕКОТОРЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Специальность 01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва-2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН (ИПМех РАН)

Научный руководитель: **Городцов Валентин Александрович**, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник лаб. механики жидкостей Института проблем механики им А.Ю. Ишлинского РАН

Официальные  
оппоненты **Кривцов Антон Мирославович**, член-корр. РАН, зав. лаб. дискретных моделей механики Института проблем машиноведения РАН

**Белов Александр Юрьевич**, к.ф.-м.н., с.н.с. теоретического отдела Института кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН

Ведущая организация Механико-математический факультет московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Защита состоится 15.02.2018 в 15.00 на заседании диссертационного совета Д002.240.01 на базе ИПМех РАН по адресу: просп. Вернадского 101, корп.1, Москва.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМех РАН (<http://www.ipmnet.ru/diss/diss/>)

Автореферат разослан «25» декабря 2017 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 002.240.01,

к.ф.-м.н.

Сысоева Е.Я.

## ОБЩАЯ ХРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы

В современных приложениях механики твердого тела все большее внимание уделяется аномальным свойствам материалов. Это касается прежде всего отрицательности коэффициента Пуассона.

В линейной теории упругости изотропного тела определяющими являются два параметра, в качестве которых можно выбрать модуль Юнга (отношение напряжения к деформации при одноосном растяжении) и коэффициент Пуассона (взятое с обратным знаком отношение поперечной деформации к продольной). Вследствие термодинамических ограничений, модуль Юнга всегда положителен, а коэффициент Пуассона ограничен интервалом между  $-1$  и  $0.5$ . Долгое время господствовало мнение, что коэффициент Пуассона реальных материалов не может принимать отрицательные значения. В случае анизотропных материалов число независимых параметров возрастает, их количество, в зависимости от вида анизотропии, меняется от 3 до 21. Величина модуля Юнга анизотропных материалов зависит от направления растяжения, но всегда остается положительной. Коэффициент Пуассона таких материалов зависит и от направления растяжения, и от выбранного поперечного направления, а на его величину и знак вообще не накладываются теоретические ограничения. Труды Сен-Венана, В. Фойгта, П.В. Бехтерева, С.А. Амбрацумяна, С.Г. Лехницкого, Я.Х. Рыхлевского, Ф.И. Федорова, Ю.И. Сиротина, Е.В. Ломакина, Т. Тинга, В.И. Альшица, Б.Д. Аннина, Н.И. Остросаблина были разработаны основные разделы теории упругости анизотропных сред. В конце 80-х годов прошлого века началось активное исследование, как теоретическое, так и экспериментальное, материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона (ауксетиков). Было установлено, что ауксетики обладают преимуществом над материалами с положительным

коэффициентом Пуассона при их использовании в качестве крепежа, применении в защитном и спортивном обмундировании. Слоистые композиты, содержащие слои с отрицательным коэффициентом Пуассона, обладают лучшими эффективными характеристиками по сравнению со слоистыми композитами, у которых коэффициент Пуассона всех слоев положителен. Нанотрубки с отрицательным предлагается использовать в качестве молекулярных фильтров. Актуальность данного исследования состоит в оценках величины коэффициента Пуассона множества кристаллов различных систем и нанотрубок из них, основываясь на экспериментальных данных.

**Целями работы являются:**

- получение аналитических зависимостей механических характеристик цилиндрически-анизотропных nano/микротрубок от их толщины, хиральности и упругих постоянных кристалла;
- исследование изменчивости модуля Юнга и коэффициента Пуассона прямолинейно- и цилиндрически-анизотропных кристаллов шестиконстантной тетрагональной, семиконстантной ромбоэдрической, орторомбической, моноклинной и триклинной систем;
- выявление кристаллов с отрицательным коэффициентом Пуассона.

**Научную новизну составляют следующие результаты:**

- оценка значений модуля Юнга коэффициентов Пуассона (соответствующих деформации в радиальном и угловом направлениях) хиральных цилиндрически-анизотропных трубок из

- кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической и моноклинной систем;
- показано, что более половины трубок из проанализированных кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической и моноклинной систем имеют отрицательный коэффициент Пуассона;
  - выявлены ауксетики среди прямолинейно-анизотропных кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической, моноклинной систем. Установлено, что коэффициент Пуассона не менее трети кристаллов данных систем принимает отрицательные значения.

### **Достоверность результатов исследования обеспечена**

- использованием при решении поставленных задач известных методов теории упругости;
- использование при численном анализе полученных зависимостей экспериментальных данных;
- совпадением ряда результатов, полученных в диссертации, с результатами, полученными другими авторами, в том числе, экспериментальными.

### **Практическая ценность работы**

Оценки, полученные в диссертации, значительно расширяют список известных ауксетических материалов.

Научные исследования, проведенные в диссертационной работе, осуществлялись в рамках гранта РФФИ 14-01-32145 мол\_а «Теоретическое исследование влияния отрицательности коэффициента Пуассона на

деформационные свойства для изотропных материалов и кристаллов различных систем при прямолинейной и криволинейной анизотропии», программы фундаментальных исследований Президиума РАН №25 «Фундаментальные проблемы механики и смежных наук в изучении многомасштабных процессов в природе и технике», гранта Президента РФ на поддержку ведущих научных школ НШ-1275.2014.1 «Разработка механических моделей, методов расчета и диагностики процессов деформирования и разрушения материалов, конструкций и природных объектов с учетом образования и развития трещин и трещиноподобных дефектов, многомасштабной структуры и текстуры», гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук и докторов наук МК-5891.2015.1 «Численно-аналитическое моделирование механического поведения углеродных и неуглеродных нано/микрообъектов в рамках теории упругости анизотропного тела и дискретно-континуального подхода» и программы Президиума РАН I.1 «Фундаментальные основы технологий наноструктур и наноматериалов».

### **Методы исследования**

- теория упругости;
- метод уровней;
- методы численного интегрирования;
- численные методы оптимизации.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. В рамках теории упругости в приближении Сен-Венана установлен вид зависимостей модуля Юнга и коэффициентов Пуассона цилиндрически-анизотропных трубок из кристаллов нескольких

кристаллических систем (ромбоэдрической с семью константами упругости, орторомбической, тетрагональной с шестью константами упругости и моноклинной) от величин упругих констант, относительной толщины стенок и хиральности трубок. Дано описание радиального изменения величины и знака коэффициентов Пуассона;

2. Численным анализом формул для коэффициента Пуассона в случае прямолинейной анизотропии показано, что для многих известных кристаллических систем, экспериментальные значения упругих констант которых собраны в обширном справочнике Ландолта-Бернштейна, (для 51 из 136 орторомбических кристаллов, для 49 из 85 шестиконстантных тетрагональных кристаллов, для 43 из 69 моноклинных кристаллов) коэффициент Пуассона оказывается отрицательным;
3. Впервые выполнено сравнение глобальных и локальных экстремумов коэффициента Пуассона при частных ориентациях для семиконстантных ромбоэдрических, орторомбических, шестиконстантных тетрагональных, моноклинных и триклинных кристаллов;
4. Численно-аналитическим анализом коэффициентов Пуассона в случае цилиндрической анизотропии впервые установлено, что многие цилиндрические полые трубки из кристаллов, экспериментальные данные об упругих константах которых собраны в обширном справочнике Ландолта-Бернштейна, имеют отрицательные коэффициенты Пуассона. Установлено, что это справедливо для трубок из 91 среди 136 орторомбических кристаллов, из 59 среди 85 шестиконстантных тетрагональных кристаллов, из 53 среди 69 моноклинных кристаллов. Найдено, что отрицательный

коэффициент Пуассона встречается чаще в случае цилиндрической анизотропии.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы были представлены на международных и российских конференциях, таких как: XLII Summer School-Conference “Advanced Problems in Mechanics”. Saint-Petersburg, June 30 – July 5, 2014; 5th International Conference. Auxetics and other materials and models with “negative” characteristics. Poland, Poznan, 15-19 September, 2014; Международная молодежная научная конференция XLI Гагаринские чтения Москва, 7-9 апреля 2015; Международная молодежная научная конференция XLII Гагаринские чтения. Москва, 12-15 апреля 2016; заседание семинара по механике сплошной среды им. Л.А. Галина ИПМех РАН под руководством профессора А.В. Манжирова.

### **Структура и объем работы**

Диссертационная работа состоит из введения, трех Глав, заключения, списка литературы и трех Приложений.

Количество страниц в диссертации – 165, в том числе 18 таблиц и 12 иллюстраций. В приложениях содержится 18 таблиц и 5 иллюстраций.

### **Содержание работы**

В диссертации исследована изменчивость коэффициента Пуассона и модуля Юнга прямолинейно- и цилиндрически-анизотропных кристаллов различных кристаллических систем (семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной). Выявлены многочисленные кристаллы с отрицательным коэффициентом Пуассона.

Во **Введении** обоснована актуальность исследования, приводится обзор литературы, касающейся темы диссертации. В данный обзор вошли теоретические и экспериментальные работы, в которых показано, что коэффициент Пуассона метаматериалов – материалы, чьи аномальные свойства достигаются за счет искусственно созданной структуры – и кристаллов принимает отрицательные значения. В обзор включены работы, посвященные методам синтеза нанотрубок, в том числе метод сворачивания прямолинейно-анизотропных кристаллических пластин в цилиндрически-анизотропные трубки. Метод сворачивания позволяет создавать трубки нанометровой толщины практически из любых материалов, что позволяет использовать методы теории упругости для описания их деформирования. В литературный обзор включены работы, посвященные практическому использованию материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона. Во **Введении** указаны цели работы, апробация результатов, основные публикации автора, описана структура работы и дано краткое содержание.

В **Главе 1** обсуждаются задачи растяжения прямолинейно- и цилиндрически-анизотропных кристаллов триклинной, моноклинной, орторомбической, шестиконстантной тетрагональной и семиконстантной ромбоэдрической систем. В **разделе 1.1** анализируются зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона от направления растяжения и поперечного направления, заданные с помощью углов Эйлера. В **разделе 1.2** на основании выражений, представленных в **разделе 1.1**, аналитически определены экстремумы модуля Юнга и коэффициента Пуассона при растяжении вдоль кристаллографических осей. В **разделе 1.3** в рамках теории упругости выполнена постановка задачи растяжения хиральных цилиндрически-анизотропных трубок, при условии, что поверхности трубки свободны от напряжений, а крутящий момент отсутствует. Для

решения используется полуобратный метод Сен-Венана. В соответствии с принципом Сен-Венана, считается, что на отдалении от торцов трубки можно пренебречь зависимостью от продольной координаты. Принимая во внимание симметрию граничных условий и поперечного сечения, пренебрегаем зависимостью от угловой координаты, считаем напряженно-деформированное состояние трубки радиально-неоднородным. На торцах трубок, предполагается равномерное распределение нагрузки по сечению. На боковых поверхностях предполагается отсутствие усилий, что приводит, благодаря уравнениям равновесия, к отсутствию компонент напряжений  $\sigma_{rz}$  и  $\sigma_{r\varphi}$  во всем объеме трубки. Закон Гука, в цилиндрической системе координат, имеет вид

$$\begin{cases} u_{zz}(r) = s'_{11} \sigma_{zz}(r) + s'_{12} \sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{13} \sigma_{rr}(r) - s'_{16} \sigma_{\varphi z}(r) \\ u_{\varphi\varphi}(r) = s'_{12} \sigma_{zz}(r) + s'_{22} \sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{23} \sigma_{rr}(r) - s'_{26} \sigma_{\varphi z}(r) \\ u_{rr}(r) = s'_{13} \sigma_{zz}(r) + s'_{23} \sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{33} \sigma_{rr}(r) - s'_{36} \sigma_{\varphi z}(r) \\ 2u_{r\varphi}(r) = -s'_{14} \sigma_{zz}(r) - s'_{24} \sigma_{\varphi\varphi}(r) - s'_{34} \sigma_{rr}(r) + s'_{46} \sigma_{\varphi z}(r) \\ 2u_{rz}(r) = s'_{15} \sigma_{zz}(r) + s'_{25} \sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{35} \sigma_{rr}(r) - s'_{56} \sigma_{\varphi z}(r) \\ 2u_{\varphi z}(r) = -s'_{16} \sigma_{zz}(r) - s'_{26} \sigma_{\varphi\varphi}(r) + s'_{36} \sigma_{rr}(r) + s'_{66} \sigma_{\varphi z}(r) \end{cases}$$

где  $u_{ij}$  – компоненты тензора деформаций,  $\sigma_{ij}$  – компоненты тензора напряжений,  $s'_{ijkl}$  – матричные коэффициенты податливости, учитывающие влияние хиральности. В разделе 1.4 решена задача радиально-неоднородного растяжения хиральных трубок из кристаллов различных кристаллических систем, поставленная в разделе 1.3. Для радиального нормального напряжения  $\sigma_{rr}(r)$  получено дифференциальное уравнение второго порядка, решение которого носит степенной характер

$$\sigma_{rr}(r) = a_1 \varepsilon + a_2 \tau r_0 \frac{r}{r_0} + a_+ \left( \frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_+} + a_- \left( \frac{r}{r_0} \right)^{\lambda_-},$$

здесь

$$a_0 \equiv \frac{t_{11}t_{33} - t_{13}^2}{t_{11}t_{22} - t_{12}^2}, \quad a_1 \equiv \frac{t_{13} - t_{12}}{t_{11}(t_{22} - t_{33}) + t_{13}^2 - t_{12}^2},$$

$$a_2 \equiv \frac{1}{s'_{66}} \frac{s'_{16}(t_{13} - 2t_{12}) + (2s'_{26} - s'_{36})t_{11}}{t_{11}(4t_{22} - t_{33}) + t_{13}^2 - 4t_{12}^2},$$

$$t_{mn} \equiv s'_{mn} - \frac{s'_{m6}s'_{n6}}{s'_{66}}, \quad \lambda_{\pm} = -1 \pm \sqrt{a_0},$$

где  $a_+$  и  $a_-$  – постоянные, определяемые из условий на поверхностях трубки. Через эту компоненту напряжений выражены другие компоненты напряжений и получены, используя закон Гука, компоненты деформаций. При помощи краевых условий, уравнений равновесия и закона Гука затем получены зависимости модуля Юнга  $E$  и коэффициентов Пуассона  $\nu_{rz}$  и  $\nu_{\varphi z}$  (характеризующих деформации в радиальном и угловом направлениях, соответственно) от упругих постоянных кристалла, угла хиральности, параметра толщины  $\rho$  (отношения внешнего радиуса трубки к внутреннему), радиальной координаты  $r$  и внутреннего радиуса трубки  $r_0$

$$\begin{aligned} E = & \frac{1}{t_{11}} - a_1 \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} + \frac{2}{3} \Lambda \left( \frac{s'_{16}}{s'_{66} t_{11}} - a_2 \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \frac{\rho^3 - 1}{\rho^2 - 1} - \\ & - 2 \frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_+)}{t_{11}} \frac{a_1(\rho^{\lambda_-} - 1) + \Lambda a_2(\rho^{\lambda_-} - \rho)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-})} \frac{\rho^{\lambda_+ + 2} - 1}{\lambda_+ + 2} - \\ & - 2 \frac{t_{13} + t_{12}(1 + \lambda_-)}{t_{11}} \frac{a_1(\rho^{\lambda_+} - 1) + \Lambda a_2(\rho^{\lambda_+} - \rho)}{(\rho^2 - 1)(\rho^{\lambda_-} - \rho^{\lambda_+})} \frac{\rho^{\lambda_- + 2} - 1}{\lambda_- + 2}, \\ -\nu_{rz} = & \frac{t_{13}}{t_{11}} + a_1 \left( t_{23} + t_{33} - t_{13} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \Lambda \left[ \frac{s'_{16} t_{13}}{s'_{66} t_{11}} - \frac{s'_{36}}{s'_{66}} + a_2 \left( 2t_{23} + t_{33} - t_{13} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}_0} \right) + \\
& + \left[ t_{33} - \frac{t_{13}^2}{t_{11}} + \left( t_{23} - \frac{t_{13} t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_+) \right] \frac{a_1 (\rho^{\lambda_-} - 1) + \Lambda a_2 (\rho^{\lambda_-} - \rho)}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}_0} \right)^{\lambda_+} + \\
& + \left[ t_{33} - \frac{t_{13}^2}{t_{11}} + \left( t_{23} - \frac{t_{13} t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_-) \right] \frac{a_1 (\rho^{\lambda_+} - 1) + \Lambda a_2 (\rho^{\lambda_+} - \rho)}{\rho^{\lambda_-} - \rho^{\lambda_+}} \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}_0} \right)^{\lambda_-}, \\
- v_{\varphi z} & = \frac{t_{12}}{t_{11}} + a_1 \left( t_{22} + t_{23} - t_{12} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) + \\
& + \Lambda \left[ \frac{s'_{16} t_{12}}{s'_{66} t_{11}} - \frac{s'_{26}}{s'_{66}} + a_2 \left( 2t_{22} + t_{23} - t_{12} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \right] \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}_0} \right) + \\
& + \left[ t_{23} - \frac{t_{12} t_{13}}{t_{11}} + \left( t_{22} - \frac{t_{12}^2}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_+) \right] \frac{a_1 (\rho^{\lambda_-} - 1) + \Lambda a_2 (\rho^{\lambda_-} - \rho)}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}_0} \right)^{\lambda_+} + \\
& + \left[ t_{23} - \frac{t_{12} t_{13}}{t_{11}} + \left( t_{22} - \frac{t_{12}^2}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_-) \right] \frac{a_1 (\rho^{\lambda_+} - 1) + \Lambda a_2 (\rho^{\lambda_+} - \rho)}{\rho^{\lambda_-} - \rho^{\lambda_+}} \left( \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}_0} \right)^{\lambda_-},
\end{aligned}$$

где

$$\Lambda = -\frac{\Lambda_1}{\Lambda_2},$$

$$\begin{aligned}
\Lambda_1 & = \frac{s'_{16} \rho^3 - 1}{t_{11} 3} + a_1 \left\{ \left( s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \frac{\rho^3 - 1}{3} + \right. \\
& + \left[ s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left( s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_+) \right] \frac{\rho^{\lambda_+ + 3} - 1}{\lambda_+ + 3} \frac{\rho^{\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left( s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_-) \right] \frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3} \frac{\rho^{\lambda_-} - 1}{\rho^{\lambda_-} - \rho^{\lambda_+}} \left. \vphantom{\frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3}} \right\}, \\
\Lambda_2 = & \left( 1 + \frac{s'_{16}{}^2}{s'_{66} t_{11}} \right) \frac{\rho^4 - 1}{4} + a_2 \left\{ \left( 2s'_{26} + s'_{36} - s'_{16} \frac{2t_{12} + t_{13}}{t_{11}} \right) \frac{\rho^4 - 1}{4} + \right. \\
& + \left[ s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left( s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_+) \right] \frac{\rho^{\lambda_+ + 3} - 1}{\lambda_+ + 3} \frac{\rho^{\lambda_+} - \rho}{\rho^{\lambda_+} - \rho^{\lambda_-}} + \\
& \left. + \left[ s'_{36} - s'_{16} \frac{t_{13}}{t_{11}} + \left( s'_{26} - s'_{16} \frac{t_{12}}{t_{11}} \right) (1 + \lambda_-) \right] \frac{\rho^{\lambda_- + 3} - 1}{\lambda_- + 3} \frac{\rho^{\lambda_-} - \rho}{\rho^{\lambda_-} - \rho^{\lambda_+}} \right\},
\end{aligned}$$

В **Главе 2** обсуждаются результаты анализа изменчивости аналитических выражений для модуля Юнга и коэффициента Пуассона, представленных в **разделах 1.1** и **1.2**, который выполнен на основе экспериментальных данных, собранных в справочнике Ландолта-Бернштейна. Среди всех данных из справочника Ландолта-Бернштейна, для анализа были отобраны те, что получены при нормальных условиях. У кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической, моноклинной и триклинной систем определены глобальные экстремумы модуля Юнга и коэффициента Пуассона. Для коэффициента Пуассона дополнительно определены экстремумы при частных ориентациях и осредненные по всем углам значения коэффициенты Пуассона. В каждом разделе проведено сравнение результатов, полученных в диссертации, с результатами публикаций, обсуждаемых во **Введении**. В **разделе 2.1** анализируется изменчивость модуля Юнга и коэффициента Пуассона семиконстантных ромбоэдрических кристаллов. Из 9 кристаллов, представленных в справочнике Ландолта-Бернштейна, ауксетиками являются 3:  $\text{SbI}_3$ ,  $\text{Pb}_{4.7}\text{Ba}_{0.3}\text{Ge}_3\text{O}_{11}$  и  $\text{MgSiO}_3$ . При растяжении вдоль кристаллографических

осей ауксетичность обнаружена только у кристалла  $SbI_3$ . У всех семиконстантных ромбоэдрических кристаллов осредненный коэффициент Пуассона положителен и лежит в диапазоне от 0.1 до 0.3. Модуль Юнга большинства семиконстантных ромбоэдрических кристаллов не превышает 100 ГПа. В **разделе 2.2** анализируется изменчивость модуля Юнга и коэффициента Пуассона шестиконстантных тетрагональных кристаллов. Из 85 кристаллов, представленных в справочнике Ландолта-Бернштейна, ауксетиками являются 49. Среди них обнаружен один кристалл с отрицательным осредненным коэффициентом Пуассона:  $FeGe_2$ . При растяжении вдоль кристаллографических осей ауксетиком является 21 кристалл. Если направление растяжения меняется в одной из кристаллографических плоскостей (100), (010) и (001), коэффициент Пуассона может принимать отрицательные значения уже у 46 кристаллов. Модуль Юнга шестиконстантных тетрагональных кристаллов характеризуется большой изменчивостью. Более чем в 2 раза он возрастает у 54 кристаллов, причем у кристаллов  $Hg_2I_2$ ,  $Hg_2Br_2$ ,  $Hg_2Cl_2$ ,  $TeO_2$ ,  $(NH_2)_2CO$ ,  $FeGe_2$  он возрастает более чем на порядок. В **разделе 2.3** выполнен анализ изменчивости модуля Юнга и коэффициента Пуассона орторомбических кристаллов. Из 136 орторомбических кристаллов, представленных в справочнике Ландолта-Бернштейна, ауксетиками являются 51. При растяжении вдоль кристаллографических осей ауксетичность обнаружена для 14 кристаллов. В случае растяжения в кристаллографических плоскостях (100), (010) и (001) коэффициент Пуассона принимает отрицательные значения у 41 кристалла. Модуль Юнга орторомбических кристаллов так же характеризуются большой изменчивостью. Более чем в 2 раза он возрастает у кристаллов у 73 кристаллов (более половины). Модуль Юнга кристаллов  $CH_3NCH_2COO \cdot H_3BO_3$ , I и  $SC(NH_2)_2$  возрастает на порядок. В **разделе 2.4**

обсуждается изменчивость коэффициента Пуассона моноклинных и триклинных кристаллов. Среди 69 моноклинных кристаллов ауксетиками являются 43, а 27 являются ауксетиками при растяжении вдоль кристаллографических осей. Необходимо отметить, что практически все моноклинные ауксетика имеют отрицательный коэффициент Пуассона при растяжении по нормали к плоскости симметрии в моноклинном кристалле (вдоль оси 2). Среди 5 триклинных кристаллов ( $\text{CuSO}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{KH}_3\text{C}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{LiHC}_2\text{O}_4$ ,  $\text{NaHC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_4\text{H}_3(\text{C}_2\text{O}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) обнаружен один ауксетик ( $\text{NaHC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ). Коэффициент Пуассона всех триклинных кристаллов положителен при растяжении вдоль кристаллографических осей.

В **Главе 3** обсуждаются результаты анализа изменчивости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона в случае трубок из кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической и моноклинной систем. Для каждой системы определены значения модуля Юнга и коэффициентов Пуассона тонкостенных трубок и значения угла хиральности и параметра толщины, при которых коэффициенты Пуассона равны нулю. При анализе изменчивости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона хиральных трубок акцент сделан на тонкостенных трубках ( $\rho - 1 \ll 1$ ). В **разделе 3.1** анализируется изменчивость коэффициентов Пуассона и модуля Юнга трубок из семиконстантных ромбоэдрических кристаллов. Для таких трубок показано, что угол хиральности не оказывает влияния на их модуль Юнга и коэффициенты Пуассона. Обе эти характеристики монотонно изменяются с параметром толщины. С переходом от прямолинейной к цилиндрической анизотропии количество ауксетиков увеличивается и равно 6 ( $\text{SbI}_3$ ,  $\text{BiI}_3$  (83K),  $\text{Pb}_{4.7}\text{Ba}_{0.3}\text{Ge}_3\text{O}_{11}$ ,  $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$ ,  $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}(\text{s}^E)$ ,  $\text{MgSiO}_3$ ). Отрицательные значения может принимать как радиальный, так и окружной коэффициенты

Пуассона. В тонкостенном случае ауксетиком является только трубка из кристалла  $SbI_3$ , окружной коэффициент Пуассона которой меньше нуля. Модуль Юнга превосходит 250 ГПа только для  $Be_2SiO_4$  и  $MgSiO_3$ . В разделе 3.2 анализируется изменчивость модуля Юнга и коэффициентов Пуассона 85 трубок из шестиконстантных тетрагональных кристаллов, значения упругих постоянных которых собраны в справочнике Ландолта-Бернштейна. Эти характеристики монотонно изменяются с параметром толщины и периодически меняются с углом хиральности. Поверхности модуля Юнга и коэффициентов Пуассона симметричны относительно угла хиральности  $\pi/4$ . Определены значения коэффициентов Пуассона тонкостенных трубок при нулевом угле хиральности и при угле хиральности равном  $\pi/4$ . При нулевой хиральности коэффициент Пуассона отрицателен у 21 тонкостенной трубки, а с ростом параметра толщины их количество возрастает до 55. При угле хиральности равном  $\pi/4$  насчитывается 24 тонкостенные ауксетические трубки, а с увеличением параметра толщины их количество достигает 59. У тонкостенных трубок из шестиконстантных тетрагональных кристаллов отрицательным может быть, как окружной, так и радиальный коэффициент Пуассона. Примером сильного влияния параметра толщины и угла хиральности на величину коэффициентов Пуассона служит трубка из кристалла  $Hg_2I_2$ . Поверхности коэффициентов Пуассона данной трубки представлены на Рис. 1. В тонкостенном случае, с изменением угла хиральности, величина окружного коэффициента Пуассона меняется с 0.88 ( $\alpha = 0$ ) до -0.19 ( $\alpha = \pi/4$ ). При  $\rho = 10$  данный коэффициент Пуассона по своей абсолютной величине в несколько раз превосходит значения у тонкостенных трубок. При нулевой хиральности он возрастает до 3.19, а при  $\alpha = \pi/4$  убывает до -1.33. На Рис. 1 (в)-(г) продемонстрировано, что существуют области, где  $\nu_{\varphi z}$  принимает

отрицательные значения на обеих поверхностях трубки. Не обнаружено ни

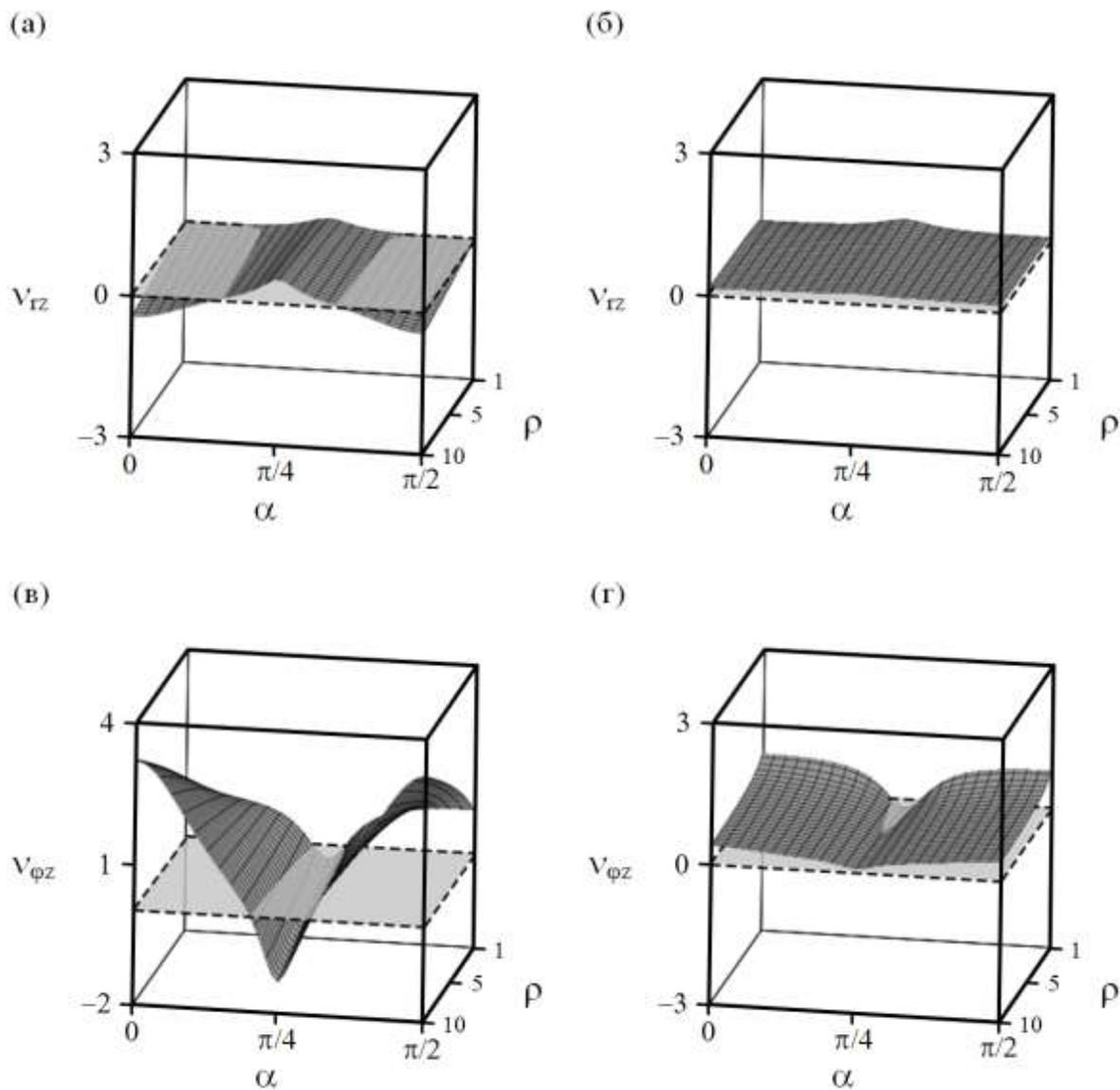


Рис. 1 Поверхности коэффициентов Пуассона  $v_{gz}$  и  $v_{\phi z}$  на внутренней (а, в) и внешней (б, г) поверхностях трубки из шестиконстантного тетрагонального кристалла  $Hg_2I_2$  ( $\alpha$ –угол хиральности,  $\rho$ –отношение внешнего радиуса трубки к внутреннему)

одной трубки из шестиконстантных тетрагональных кристаллов, для которой оба коэффициента Пуассона одновременно принимают отрицательные значения на внешней или внутренней поверхности. Модуль Юнга трубок из шестиконстантных тетрагональных кристаллов возрастает с параметром толщины. У большинства трубок он увеличивается не более чем на 10%. Значения модуля Юнга практически всех трубок в тонкостенном случае совпадают с экстремумами модуля Юнга прямолинейно-анизотропных шестиконстантных тетрагональных кристаллов. В разделе 3.3 изучена изменчивость модуля Юнга и коэффициентов Пуассона хиральных трубок из 136 орторомбических кристаллов из справочника Ландолта-Бернштейна. Данные характеристики являются периодическими функциями угла хиральности с периодом  $\pi$  (симметричны относительно  $\pi/2$ ). Изменение модуля Юнга и коэффициентов Пуассона с углом хиральности и параметром толщины у трубок из орторомбических кристаллов носит более сложный характер, чем у трубок из шестиконстантных тетрагональных кристаллов. В диссертации установлено, что эти характеристики изменяются немонотонно с изменением угла хиральности от 0 до  $\pi/2$ . Коэффициенты Пуассона некоторых трубок немонотонно изменяются и с параметром толщины. Это установлено для трубок из кристаллов Cu-14 wt% Al-3.0 wt% Ni, I,  $C_6N_2O_3H_6$ ,  $(CH_3)_3NCH_2COO \cdot H_3BO_3$ ,  $C_8H_4O_4NTl$ ,  $(CH_3)_3NCH_2COO \cdot CaCl_2 \cdot 2H_2O$ ,  $(CH_3)_3NCH_2COO \cdot (CH)_2(COOH)_2$ ,  $SC(NH_2)_2$ ,  $CaSO_4$ ,  $Ca(COOH)_2$ ,  $(Fe,Mg)_2(Al,Fe^{3+})_9O_6SiO_4(O,OH)_2$  и  $Cd(COOH)_2$ . При нулевом угле хиральности обнаружено 11 тонкостенных ауксетических трубок, с ростом параметра толщины их количество возрастает до 91. При угле хиральности равном  $\pi/2$  эти значения составляют 5 и 89, соответственно. Коэффициенты Пуассона трубок из орторомбических кристаллов характеризуются большой изменчивостью своих величин.

Большая изменчивость окружного коэффициента Пуассона характерна для трубки из кристалла I (Рис. 2). Наибольшая изменчивость  $\nu_{rz}$  и  $\nu_{\varphi z}$  достигается на внутренней поверхности (Рис. 2 (а),(в)). Минимальное значение  $\nu_{\varphi z}$  составляет -1.03 ( $\rho = 10$ ,  $\alpha \approx 0.22\pi$ ), а максимальное 4.19 ( $\rho = 10$ ,  $\alpha = \pi/2$ ), у  $\nu_{rz}$  минимальное и максимальное значения равны -2.22 ( $\rho = 10$ ,  $\alpha = \pi/2$ ) и 0.65 ( $\rho = 10$ ,  $\alpha \approx 0.21\pi$ ), соответственно. При этом, в некоторой окрестности  $\alpha = \pi/2$   $\nu_{rz}$  отрицателен на обеих поверхностях трубки (Рис. 2 (а),(б)). Ни у одной трубки из орторомбических кристаллов оба коэффициента Пуассона одновременно не принимают отрицательные значения на внутренней или внешней поверхности. На одной поверхности трубки разница между максимальным и минимальным значением разница может составлять несколько единиц. Модуль Юнга нескольких трубок может превосходить 300 ГПа. У двух трубок (из кристаллов  $((\text{CH}_3)_3\text{NCH}_2\text{COO}\cdot(\text{CH})_2(\text{COOH})_2$  и I) максимальное значение модуля Юнга более чем на порядок превосходит минимальное. В **разделе 3.4** изучена изменчивость модуля Юнга и коэффициентов Пуассона трубок из моноклинных кристаллов при угле хиральности равному нулю и  $\pi/2$ . Так же, как и в случае трубок из орторомбических кристаллов, модуль Юнга и коэффициенты Пуассона трубок из моноклинных кристаллов являются периодическими функциями угла хиральности с периодом  $\pi$  и симметричны относительно  $\pi/2$ . При нулевой хиральности насчитывается 7 ауксетических тонкостенных трубок, количество которых возрастает до 48 с ростом параметра толщины. При угле хиральности равном  $\pi/2$  количество тонкостенных ауксетических трубок равно 16, при больших параметрах толщины их количество составляет 53. Значительной изменчивостью обладают коэффициенты Пуассона трубки из кристалла  $\text{LaNbO}_4$ . При  $\alpha = 0$  и  $\rho = 1.01$  радиальный и окружной коэффициенты Пуассона трубки из  $\text{LaNbO}_4$  равны 1.42 и -0.25, соответственно. С возрастанием параметра

толщины до 10 радиальный коэффициент Пуассона на внутренней поверхности возрастает, до 3.33, а на внешней убывает до 0.91.

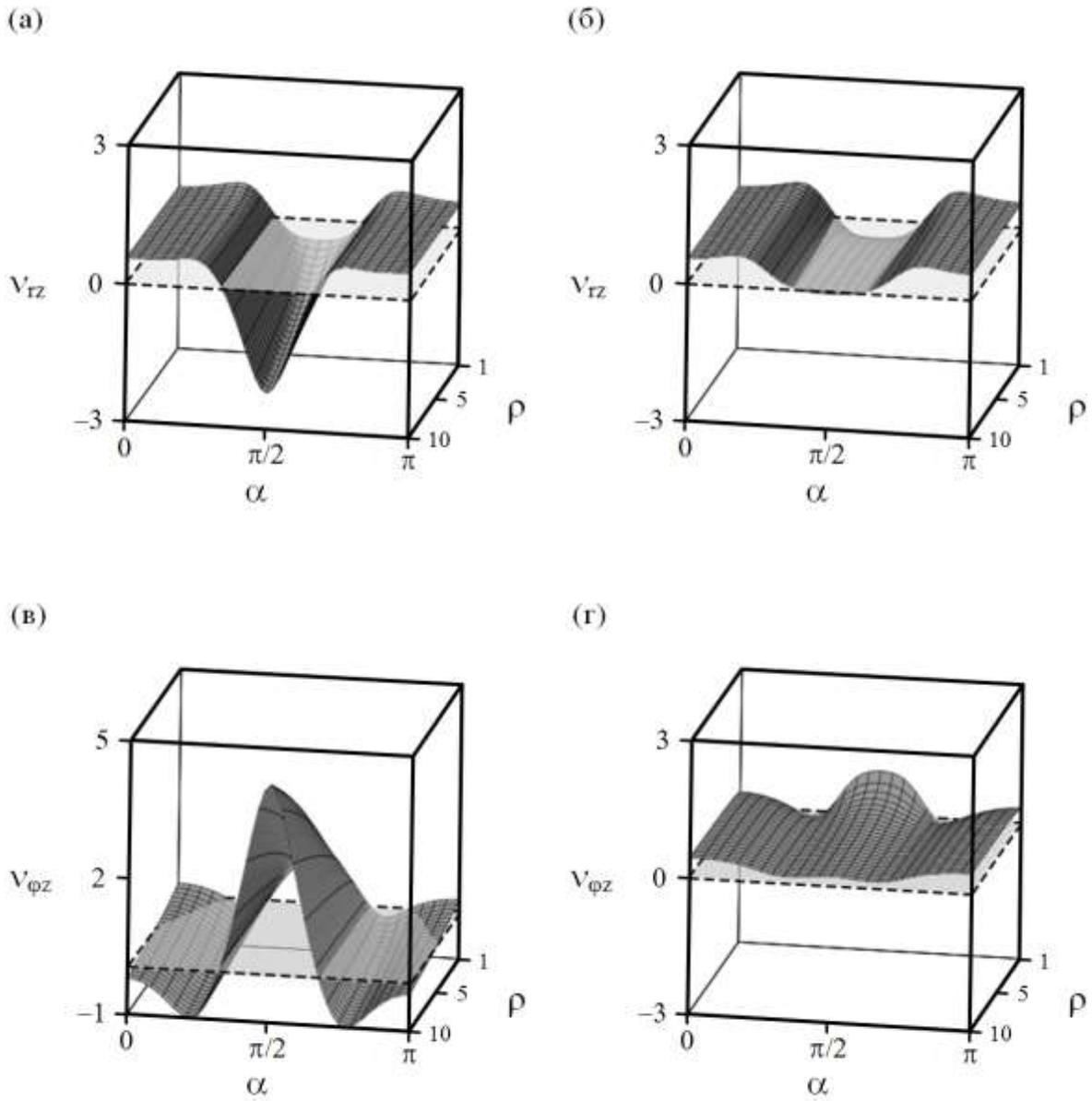


Рис. 2 Поверхности коэффициентов Пуассона  $v_{rz}$  и  $v_{\phi z}$  на внутренней (а, в) и внешней (б, г) поверхностях трубки из орторомбического кристалла I ( $\alpha$ — угол хиральности,  $\rho$ —отношение внешнего радиуса трубки к внутреннему)

Окружной коэффициент Пуассона, при этом, на внутренней поверхности убывает до -3.21, а на внешней возрастает до 0.53. При  $\alpha = \pi/2$  и  $\rho = 1.01$  радиальный и окружной коэффициенты Пуассона равны 2.08 и -1.14, соответственно. С ростом параметра толщины до 10,  $\nu_{\varphi z}$  на внутренней поверхности увеличивается в 5 раз, а  $\nu_{rz}$  увеличивается почти в 4 раза на этой же поверхности. Модуль Юнга трубок из моноклинных кристаллов может значительно (в несколько раз) меняться как с углом хиральности, так и с параметром толщины. Так, у трубки из кристалла  $\text{LaNbO}_4$  при нулевой хиральности модуль Юнга толстостенной трубки в 5 раз выше чем у тонкостенной (15.0 ГПа). При значении угла хиральности в  $\pi/2$  у толстостенной трубки модуль Юнга почти в 2 раза больше чем у тонкостенной (67.6 ГПа). У тонкостенных трубок значения модуля Юнга при нулевой хиральности и при  $\pi/2$  различаются в 5 раз.

### Заключение

Основные результаты диссертационной работы:

- В рамках теории упругости, при помощи полуобратного метода Сен-Венана, решена задача радиально-неоднородного растяжения цилиндрически-анизотропных хиральных трубок из кристаллов моноклинной, орторомбической, шестиконстантной тетрагональной и семиконстантной ромбоэдрической систем. Получены зависимости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона таких трубок от упругих постоянных кристалла, угла хиральности, параметра толщины и радиальной координаты;
- На основании экспериментальных данных для упругих постоянных, получена численная оценка изменчивости коэффициента Пуассона прямолинейно-анизотропных кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной,

орторомбической, моноклинной и триклинной систем. Для всех возможных направлений растяжения и поперечных направлений, и при растяжении вдоль кристаллографических осей, определены экстремумы коэффициента Пуассона. При растяжении в кристаллографических плоскостях (100), (010) и (001), с помощью численных методов, определены экстремальные значения коэффициента Пуассона шестиконстантных тетрагональных и орторомбических кристаллов;

- Для прямолинейно-анизотропных кристаллов, на основании экспериментальных данных, определены осредненные по всем углам Эйлера значения коэффициента Пуассона. Обнаружен один кристалл, средний коэффициент Пуассона которого является отрицательным:  $\text{FeGe}_2$ , относящийся к шестиконстантной тетрагональной системе;
- На основании экспериментальных данных, определены экстремальные значения модуля Юнга семиконстантных ромбоэдрических, шестиконстантных тетрагональных и орторомбических кристаллов при прямолинейной анизотропии;
- Установлено, что более половины проанализированных прямолинейно-анизотропных кристаллов являются ауксетиками;
- Установлено, что максимальный модуль Юнга большинства прямолинейно-анизотропных ауксетиков более чем в 2 раза превосходит минимальный модуль Юнга;
- Для трубок из кристаллов семиконстантной ромбоэдрической, шестиконстантной тетрагональной, орторомбической и моноклинной систем, на основании экспериментальных данных для упругих постоянных, выполнен анализ изменчивости модуля Юнга и коэффициентов Пуассона;

- Установлено, что при переходе от прямолинейной к цилиндрической анизотропии количество кристаллов с отрицательным коэффициентом Пуассона увеличивается;
- Показано, что угол хиральности и параметр толщины могут оказывать сильное влияние на величину модуля Юнга и коэффициентов Пуассона. Разница между максимальной и минимальной величиной коэффициента Пуассона на одной из поверхностей трубки может составлять несколько единиц. Модуль Юнга некоторых трубок увеличивается более чем в 4 раза с изменением параметра толщины и угла хиральности.

**Публикации**

1. **Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С., Волков М.А. Механические характеристики 7-ми константных ромбоэдрических кристаллов и нано/микротрубок из них // Письма о материалах, 2016, Т.6, Вып.2, С.93-97.**
2. **Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Auxetics among 6-constant tetragonal crystals // Письма о материалах, 2015, Т.5, Вып 4, С.409-413.**
3. **Волков М.А. Экстремальные значения коэффициента Пуассона триклинных и моноклинных кристаллов // Письма о материалах, 2014, Т.3, Вып.4, С.167-170.**
4. **Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Negative Poisson's ratio for six-constant tetragonal nano/microtubes // Physica Status Solidi (b), 2015, V.252, P.1580-1586.**
5. **Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Auxeticity in nano/microtubes produced from orthorhombic crystals // Smart Materials and Structures, 2016, V.25, N.5, P.054006.**
6. **Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С., Волков М.А. Прямолинейно-анизотропные ауксетики. Растяжение и кручение цилиндрически анизотропных хиральных нано/микротрубок из орторомбических кристаллов // Препринт №1107, 58с., 2015 (ISBN 978-5-91741-153-8).**
7. **Волков М.А. Изменчивость некоторых упругих характеристик прямолинейно- и цилиндрически-анизотропных моноклинных кристаллов // Международная молодежная научная конференция XLII Гагаринские чтения. Москва, 12-15 апреля 2016, Материалы секции №4. Механика и моделирование материалов и технологий, С.18-19.**