вые значения; решаем линейное уравнение или систему уравнений и даём ответ. Широкое применение математики при решении химических задач способствует формированию у учащихся осознанного стремления к применению математических знаний на практике и реализации междисциплинарных связей между науками химией и математикой. О важности приобретения навыка решения разнообразных задач, писал еще Д.Пойа, сравнивая решение задачи с научным открытием – «крупное научное открытие дает решение крупной проблемы, но и в решении любой задачи присутствует крупица открытия. Задача, которую вы решаете, может быть скромной, но, если она бросает вызов вашей любознательности и заставляет вас быть изобретателем и, если вы решаете ее собственными силами, то вы сможете испытать ведущее к открытию напряжение ума и насладиться радостью победы. Такие эмоции, пережитые в восприимчивом возрасте, могут побудить вкус к умственной работе и на всю жизнь оставить свой отпечаток на уме и характере». Конечно, одну и ту же задачу можно решить с использованием различных идей и методов. Но первым способом должен быть самый рациональный, быстрый, оптимальный, опирающийся на знание законов химии и культуру математического мышления.

Литература.

1. Берман, Н.И. Решение задач по химии / Н.И. Берман. – М: Слово, 2006. – 234 с.
2. Егоров, А.С. Самоучитель по решению химических задач / А.С. Егоров. – Ростов-на-Дону: Феликс, 2010. – 256 с.
3. Кузьменко, Н.Е. Сборник задач и упражнений по химии / Н.Е. Кузьменко, В.В. Ерёмин. – М.: Экзамен, 2012. – 345 с.
4. Кузьменко, Н.Е. Сборник конкурсных задач по химии / Н.Е. Кузьменко, В.В Ерёмин, С.С Гуранов. – М.: Экзамен, 2011. – 321 с.
5. Лидин, Р.А. Химия / Р.А. Лидин, В.А. Молочко, Л.Л. Андреева. – М.: Дрофа, 2012. –268 с.
6. Свитанько, И.В. Нестандартные задачи по химии. И.В. Свитанько. – М.: Вентана-Граф, 2009. – 217 с.

АУКСЕТИКИ – МАТЕРИАЛЫ С АНОМАЛЬНЫМИ ДЕФОРМАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ

А.Г. Ткачев, студент группы 10Б20
Научный руководитель: Соболева Э.Г., к.ф.-м.н., доцент
Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского Томского политехнического университета
652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26, тел. (38451) 64432

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

В частности, к таковым можно отнести ауксетики - материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона σ, способные расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном одноосному растяжению/сжатию соответственно, иначе называемые ауксетичными или ауксетики.

Коэффициент Пуассона (коэффициент поперечной деформации) является характеристикой состояния твердого тела, мерой стремления материала сохранять в процессе упругой деформации свой первоначальный объем, взаимосвязанной со свойствами хрупкости и текучести.

В свое время предлагались несколько вариантов названий веществ с отрицательными коэффициентами Пуассона: антирезины, дилатантные, ауксетичные. С 1990 года за материалами с отрицательным коэффициентом Пуассона по предложению ученого из Великобритании К. Эванса закрепилось название «ауксетичные» или проще «ауксетики» от греческого слова «ауксетос», что означает «растущий». У большинства конструкционных материалов значения коэффициента Пуассона колеблются в пределах 0,2-0,4. Тем не менее, теоретические значения для изотропного материала лежат в пределах $-1 \le \sigma \le 0{,}5$.

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.

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

В настоящее время известно немало случаев проявления отрицательных значений коэффициента Пуассона в кристаллах и композиционных материалах. Выделяются три структурных уровня реализации данной аномалии деформационного поведения: макро-, мезо-, и микроскопический.

1. Макроскопический. Возникновение отрицательного коэффициента Пуассона объясняется на основе известных соотношений теории упругости анизотропных тел. Макроскопический анализ охватывает, например, композиты, образованные косоугольным армированием эластичной матрицы (ауксетичные ламинаты).

2. Мезоскопический. Ауксетичные свойства обусловлены формой структурных единиц в масштабе ячеек, пор, включений и др. Периодические неоднородности мезоуровня имеют пены и гранулированные материалы.

3. Микроскопический. В этом случае особенности упругого поведения объясняются внутри- и межмолекулярным взаимодействием, что характерно для многих монокристаллов и наполненных полимеров. Например, термопластичный полиуретан с ультрадисперсными (0,3 – 1 мкм) частицами вольфрама, железа и молибдена, имеющими $\sigma \approx -0{,}2 \div -0{,}4$.

Реализация отрицательных значений коэффициента Пуассона 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 квантовомеханических задач. Простейший способ их решения – перенесение принципа сочетания жестких и податливых элементов, реализованного на макро- и мезоскопическом уровнях в композитных материалах и пенопластах на молекулярный уровень. Так методами молекулярной механики была предсказана структура макромолекулы полимера, обладающего такими свойствами (рис. 1). Путем варьирования «продольных» и «поперечных» тройных связей от одной до трех можно получить различные отрицательные значения коэффициента Пуассона.

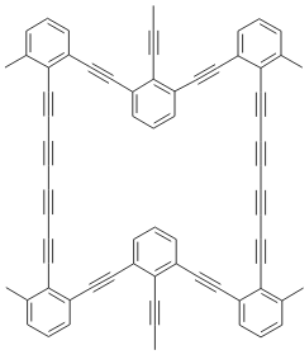

Рис. 1. Структура макромолекулы полимера [1]

Такими свойствами может обладать олигомер, в котором также возможно управление величиной коэффициента Пуассона 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. 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 жидких кристаллах, у которых оси молекул ориентированы параллельно друг другу. Если общую структуру представить в виде жестких стержней, соединенных упругими нитями, то для реализации отрицательных значений коэффициента Пуассона при растяжении необходимо наличие в полимере определенного свободного объема (рис. 2). Т.к. коэффициент Пуассона связан с решеточным параметром Грюнайзена и флуктуационным свободным объемом, то полимеры с более интенсивным межмолекулярным взаимодействием при прочих равных условиях должны иметь меньшие значения коэффициента Пуассона. При фиксированном числе полимерных цепей в единице объема для достижения минимальных значений коэффициента Пуассона необходимо увеличить расстояние между взаимодействующими цепями, т.е. расстояние между несвязными атомами.

Рис. 2. Механическая модель деформационного поведения нематического жидкокристаллического ауксетика [1]

Помимо описанных жидких кристаллов и гипотетических структур ауксетичное поведение на данном уровне проявляют многие монокристаллы металлов. 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.

С целью упрощения и систематизации поиска кристаллических фаз, проявляющих отрицательные значения коэффициента Пуассона хотя бы для одного из кристаллографических направлений предложен критерий ауксетичного поведения кристаллов.

$$S_{11} + S_{33} + 2S_{13} - S_{44} > 0,$$

где S_{ij} – постоянные податливости для данного кристалла.

Выполнение неравенства – необходимое и достаточное условие существования отрицательных значений коэффициента Пуассона для гексагональных и кубических кристаллических фаз, когда значения коэффициента Пуассона для <100> направлений кристалла положительны.

Актуальность исследования ауксетичных материалов мотивируется возможностью получения ряда ценных деформационно-прочностных характеристик материалов и изделий. В условиях стесненного деформирования они позволяют повысить несущую способность фрикционных соединений, что делает их наиболее предпочтительными для использования в крепежных изделиях в качестве “интеллектуальных” фиксаторов и заклепок, которые при наложении нагрузки плотнее прилегают к материалу, увеличивая несущую нагрузку соединения. Так, в композите, армированном ауксетичными волокнами, значительно повышается адгезионная прочность, что делает такие композиционные материалы перспективными для применения в ударо- и энергопоглощающих конструкциях, а также в средствах защиты (шлемы, щитки, наколенники и т.д.).

Возможно использование пористого политетрафторэтилена в качестве протезов для крупных кровеносных сосудов, а также в качестве подушек и прокладок для лежачих больных, позволяя подолгу избежать «пролежней». Пористые ауксетики применяются в качестве фильтров и сит: при растяжении размер пор возрастает, позволяя проходить более крупным частицам. Ауксетичные кристаллы могут применяться в пьезоэлектрических устройствах, усиливая отклик пьезоэлектрика, помещенного между двумя ауксетичными электродами, на прилагаемую нагрузку.

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

Таким образом, в данной работе описаны примеры успешной реализации методов молекулярной механики и молекулярного дизайна для решения макромеханических задач по созданию аномально упругих материалов нового типа.

Литература.

1. Конек Д. А., Войцеховски К. В., Плескачевский Ю. М., Шилько С. В. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона (Обзор). Механика композитных материалов и конструкций. 2004. Т.10. №1 – . С.35 – 69.
2. Беломестных В. Н. , Соболева Э. Г. Poissons ratios of the cubic ion crystals // Joint Conferences on Advanced Materials: FNMA2011, IMIM2011, AUXETICS2011 , Щецин, 6-9 Сентября 2011. - Гданьск: Гданьский технологический университет, 2011 - С. 97-99.
3. Беломестных В.Н. Беломестных Л.А., Соболева Э.Г. Пуассон и коэффициент его имени // Сборник трудов Международной научно-практической конференции с элементами научной школы для молодых ученых «Инновационные технологии и экономика в машиностроении». – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2010. – С. 236 – 240.