DOI: 10.18411/vntr2023-171-1

УДК 539.3

# ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПУАССОНА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ИЗ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

**© Игорь Сергеевич Павлов, Владимир Иванович Ерофеев, Анна Викторовна Муравьева, Анна Викторовна Леонтьева**
*Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (ИПМ РАН), Нижний Новгород, Россия*
ispavlov@mail.ru

***Аннотация.*** *В рамках построенной трехмерной модели анизотропной кристаллической среды с простой кубической решетки из сферических частиц получены аналитические соотношения между коэффициентами Пуассона вдоль основных кристаллографических направлений данной среды и параметрами ее микроструктуры. Показано, что при размерах частиц, близких к нулю, некоторые из рассмотренных коэффициентов Пуассона при определенных значениях параметров силовых и моментных взаимодействий между частицами могут принимать значения, превосходящие 0.5, а в случае частиц с большими размерами один из коэффициентов Пуассона может достигать значений, меньших -1.*
***Ключевые слова:*** *простая кубическая решетка, параметры микроструктуры, экстремальные значения коэффициентов Пуассона.*

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИПФ РАН на выполнение фундаментальных научных исследований по теме № 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).*

# EXTREME VALUES OF POISSON'S RATIOS OF THE SIMPLE CUBIC LATTICE CONSISTING OF SPHERICAL PARTICLES

**© I.S. Pavlov, V.I. Erofeev, A.V. Muravieva, A.V. Leontyeva**
*Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Science – Branch of Federal Research Center «A.V. Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics of the Russian Academy of Sciences», Nizhny Novgorod, Russian Federation*
ispavlov@mail.ru

***Abstract.*** *In the framework of the elaborated 3D model for an anisotropic crystalline medium with a simple cubic lattice consisting of spherical particles, analytical relationships between Poisson's ratios along the main crystallographic directions of this medium and the parameters of its microstructure have been obtained. When particle sizes are close to zero, it has been shown that some of the considered Poisson's ratios can exceed 0.5 for certain values of the parameters of force and couple interactions between particles, whereas in the case of particles with large sizes, one of the Poisson's ratios can reach values less than -1.*
***Keywords:*** *a simple cubic lattice, microstructure parameters, extreme values of Poisson's ratios.*

***Acknowledgements.*** *The work was carried out within the state assignment for fundamental scientific research on the topic no. 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).*

**1. Введение.** Среди всех модулей упругости материала особую роль играет коэффициент Пуассона, характеризующий отношение поперечной деформации к продольной. Изотропный материал обладает единственным коэффициентом Пуассона и его теоретически обоснованные значения лежат в интервале $-1 \le \nu \le 0,5$ [1]. Верхний предел соответствует несжимаемым материалам (например, резине), сохраняющим в процессе деформации свой объем при значительном изменении формы. Нижний предел соответствует материалам, сохраняющим геометрические пропорции, но изменяющим объем при деформации. Для обычных упругих материалов, увеличивающих свой объем при растяжении и уменьшающих при сжатии, величина коэффициента Пуассона может лежать только в пределах от 0 до 0,5 [2]. Практически для большинства материалов коэффициент Пуассона находится еще в более узком интервале: от 0,2 до 0,4 [3].

Анизотропный материал имеет несколько коэффициентов Пуассона, поскольку растяжение или сжатие вдоль одной оси может сильно отличаться от растяжения или сжатия вдоль другой. Для анизотропных материалов нередко возникает ситуация, когда один или несколько коэффициентов Пуассона принимают отрицательные значения. Такие материалы получили название “ауксетики” от греческого *auxetos* — «разбухающий» [4]. Ауксетические материалы обладают уникальными геометрическими и механическими характеристиками, такими как повышенное сопротивление сдвигу [5, 6] и вдавливанию [5, 7], высокое сопротивление хрупкому разрушению [8, 9], улучшенное демпфирование и звукопоглощение [10, 11] и др. Благодаря таким характеристикам, ауксетики отличаются высокой потребительской ценностью (низкая плотность, высокая прочность, хорошие изоляционные свойства) и находят широчайшее применение, например, в медицинском и спортивном оборудовании, в защитном снаряжении (например, подушках безопасности в автомобилях). Они прекрасно проявляют себя при использовании в качестве крепежа, демонстрируя увеличенное, в сравнении с обычными материалами, сопротивление извлечению, в частности, из них делают заклепки и гвозди.

Более того, значения всех коэффициентов Пуассона анизотропных материалов, кроме $\nu_{<100,\ 001>}$, могут выходить за пределы известного интервала $-1 \le \nu \le 0,5$ (см., например, [12, 13]). Наиболее часто такая ситуация наблюдается, если растяжение/сжатие материала происходит вдоль каких-то специфических направлений. Например, в работе [14] найдено направление, вдоль которого коэффициент Пуассона дентина зубов достигает значения 0,53. Тем не менее, среднее значение коэффициентов Пуассона обязательно будет содержаться в интервале $-1 \le \nu \le 0,5$ [1, 15].

В данной работе предложена трехмерная модель анизотропного материала в виде кубической решетки из сферических частиц, при определенных значениях параметров микроструктуры которого некоторые из основных коэффициентов Пуассона могут принимать значения меньшее -1 или больше 0,5. Последнее означает, что при сжатии локальных областей такого материала вдоль соответствующего направления их объем будет увеличиваться, а при растяжении – наоборот, уменьшаться [14].

**2. Коэффициенты Пуассона анизотропной кристаллической среды с кубической симметрией.** Различные коэффициенты Пуассона анизотропного материала обозначаются индексами, содержащими наименование двух осей: той, вдоль которой происходит

первоначальное растяжение или сжатие, и той, вдоль которой наблюдается ответная реакция. В анизотропном монокристаллическом материале с кубической решеткой коэффициенты Пуассона в особых кристаллографических направлениях <100>, <110> и <111> находятся по известным соотношениям [16-18]:

$$\nu_{<100,\ 001>} = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}}, \tag{1}$$

$$\nu_{<110,\ 001>} = \frac{4C_{12}C_{44}}{2C_{11}C_{44}+(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}, \tag{2}$$

$$\nu_{<110,\ 1\bar{1}0>} = \frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})-2C_{11}C_{44}}{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})+2C_{11}C_{44}}, \tag{3}$$

$$\nu_{<111,\ 111>} = \frac{C_{11}+2C_{12}-2C_{44}}{2(C_{11}+2C_{12}+C_{44})}. \tag{4}$$

Выражения (1)-(4) содержат константы упругости второго порядка $C_{11}$, $C_{12}$ и $C_{44}$, которые являются также и коэффициентами уравнений Ламе для трехмерной “классической” среды, состоящей из материальных точек:

$$\begin{gathered}\rho u_{tt} - C_{11}u_{xx} - C_{44}\left(u_{yy}+u_{zz}\right) - \left(C_{12}+C_{44}\right)\left(v_{xy}+w_{xz}\right) = 0,\\ \rho v_{tt} - C_{11}v_{yy} - C_{44}\left(v_{xx}+v_{zz}\right) - \left(C_{12}+C_{44}\right)\left(u_{xy}+w_{yz}\right) = 0,\\ \rho w_{tt} - C_{11}w_{zz} - C_{44}\left(w_{xx}+w_{yy}\right) - \left(C_{12}+C_{44}\right)\left(u_{xz}+v_{yz}\right) = 0\end{gathered} \tag{5}$$

Здесь ρ - плотность среды, *u*, *v*, *w* – перемещения частиц среды вдоль, соответственно, осей координат *x*, *y*, *z*.

Для краткости коэффициенты Пуассона (1)-(4) обозначим $\nu_1$, $\nu_2$, $\nu_3$ и $\nu_4$, соответственно. В изотропной среде, как известно, $C_{11}-C_{12}=2C_{44}$. В этом случае среда имеет единственный коэффициент Пуассона $\nu=\nu_1=\nu_2=\nu_3=\nu_4$, определяемый формулой (1).

Для того чтобы кристаллическая решетка была стабильной, её упругие постоянные $C_{11}$, $C_{12}$ и $C_{44}$ должны удовлетворять следующим соотношениям:

$$C_{11}+2C_{12}>0, \tag{6}$$

$$C_{11}-C_{12}>0, \tag{7}$$

$$C_{44}>0. \tag{8}$$

Из условий (6)-(8) следует положительность констант $C_{11}$ и $C_{44}$. Постоянная $C_{12}$ иногда, хотя и очень редко, может быть отрицательной [19]. Из 1100 кубических кристаллов, приведенных в [20], таким свойством обладают менее 20. Если при этом и все остальные коэффициенты Пуассона отрицательны, то такой материал называют полным ауксетиком [21], но таких меньше 8 [19]. Если же лишь некоторые из коэффициентов Пуассона

принимают отрицательные значения, то такой материал называют частичным ауксетиком [21]. Их значительно больше, чем полных ауксетиков - примерно 25% от всех кубических кристаллов [19]. В основном, ауксетические свойства они приобретают за счет отрицательности $\nu_3$ (см., например, [22]). Однако имеется один частичный ауксетик, у которого $\nu_4<0$. Это $Mn_{85.3}Ni_{8.8}C_{5.9}$, у него $\nu_4$=-0.01 [20].

Далее постараемся выяснить, какие из коэффициентов Пуассона (1)-(4) при положительных константах упругости $C_{11}$, $C_{12}$ и $C_{44}$ могут принимать значения, выходящие за пределы интервала $-1 \le \nu \le 0,5$.

Очевидно, что в этом случае коэффициенты Пуассона $\nu_1$ и $\nu_2$ положительны, причем $\nu_1 > 0.5$ лишь при $C_{11} < C_{12}$, но это неравенство противоречит условию (7). $\nu_2 > 0.5$ при $C_{44} > \frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}{2(4C_{12}-C_{11})}$, что, в принципе, возможно, например, при $C_{11} = 2C_{12}$, если $C_{44} > C_{12}$.

Анализ выражений (3) и (4) показывает, что коэффициенты Пуассона $\nu_3$ и $\nu_4$ могут быть отрицательными даже при положительных константах упругости $C_{11}$, $C_{12}$ и $C_{44}$. $\nu_3 > 0.5$ при $C_{44} < \frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}{6C_{11}}$. $\nu_4$ мог бы принимать значения, превосходящие 0.5 лишь при отрицательных $C_{44}$.

Далее рассмотрим модель, в рамках которой коэффициенты Пуассона (2)-(4) могут принимать значения, выходящие за пределы интервала $-1 \le \nu \le 0,5$.

**3. Дискретная модель кристалла из сферических частиц.** Пусть недеформируемые сферические частицы (зерна), обладающие массой $M$, образуют простую кубическую решетку с периодом $a$. В исходном состоянии сферы диаметром $d$ сосредоточены в узлах этой решетки (рис. 1). Каждая частица имеет шесть степеней свободы: центр масс частицы с номером $N=N(i, j, k)$ может смещаться вдоль осей $x$, $y$ и $z$ (трансляционные степени свободы $u_{i,j,k}$, $v_{i,j,k}$ и $w_{i,j,k}$), а сама частица способна поворачиваться вокруг каждой из этих осей (ротационные степени свободы $\theta_{i,j,k}$, $\psi_{i,j,k}$ и $\varphi_{i,j,k}$) (рис. 2). В таком случае кинетическая энергия частицы $N$ задается следующей формулой:

$$T = \frac{M}{2}\left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2\right) + \frac{J}{2}(\varphi_t^2 + \theta_t^2 + \psi_t^2), \qquad (9)$$

где $J = \frac{2}{5}M\left(\frac{d}{2}\right)^2 = \frac{1}{10}Md^2$ - момент инерции частицы относительно каждой оси, проходящей через ее центр масс. Здесь и далее в формулах, если не указано иное, нижние буквенные символы обозначают производные по соответствующим переменным.

Считается, что частица $N=N(i, j, k)$ взаимодействует лишь с ближайшими соседями, удаленными от нее на расстояние $a$ (6 частиц 1-й координационной сферы: $(i\pm1, j, k)$, $(i, j\pm1, k)$, $(i, j, k\pm1)$), на расстояние $a\sqrt{2}$ (12 частиц 2-й координационной сферы:

(*i*, *j*±1, *k*±1), (*i*±1, *j*, *k*±1), (*i*±1, *j*±1, *k*)) и на расстояние $a\sqrt{3}$ (8 частиц 3-й сферы: (*i*±1, *j*±1, *k*±1)) (см. рис. 1). Между частицами расположена безмассовая упругая среда, через которую передаются силовые и моментные воздействия, моделируемые линейными упругими пружинами пяти типов: центральными с жесткостью $K_0$, соединяющими центры масс соседних частиц, нецентральными с жесткостью $K_1$, диагональными $K_2$ (рис. 3), а также пружинами с жесткостями $K_3$ и $K_4$, соединяющими центральную частицу с зернами, соответственно, второй и третьей координационных сфер. На рисунке 3 синим и зеленым цветом обозначены пружины с жесткостью $K_1$, коричневым – пружины $K_2$.

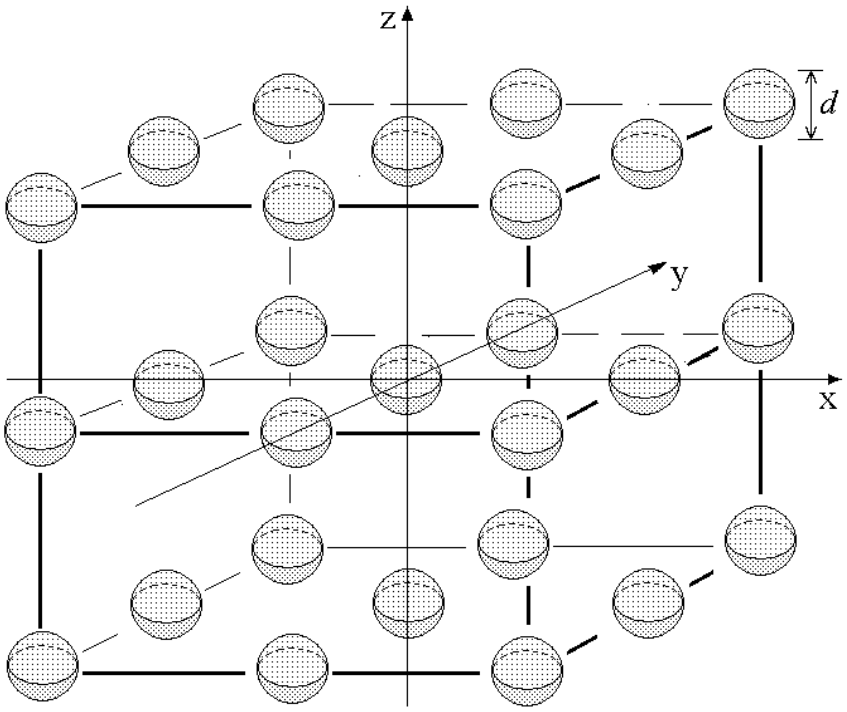



**Рис.1.** Простая кубическая решетка из сферических частиц.

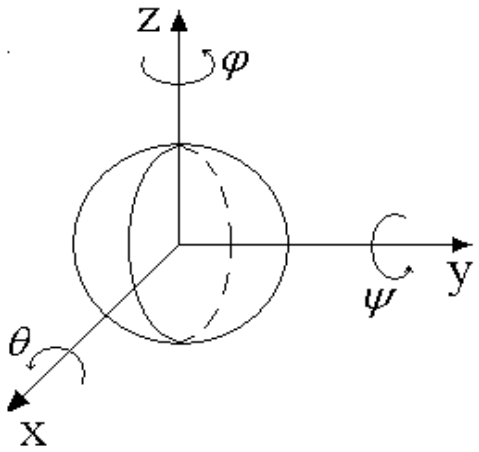



**Рис. 2.** Ротационные степени свободы частицы.

Для удобства дальнейших вычислений предполагается, что в каждую сферу диаметром $d$ вписан куб со стороной $b = d/\sqrt{3}$. Точки соединения с частицами пружин вида $K_1$ и $K_2$ лежат в вершинах куба (на рис. 3 $A_2B'_1$, $B_2A'_1$, $E_2C'_1$, $C_2E'_1$ – пружины с жесткостью $K_1$, $A_2C'_1$, $E_2B'_1$, $B_2E'_1$, $C_2A'_1$ – пружины вида $K_2$), а пружины с жесткостями $K_3$ и $K_4$ прикреплены к серединам ближайших друг к другу ребер кубов, геометрические центры которых в исходном состоянии расположены на расстояниях $a\sqrt{2}$ и $a\sqrt{3}$.

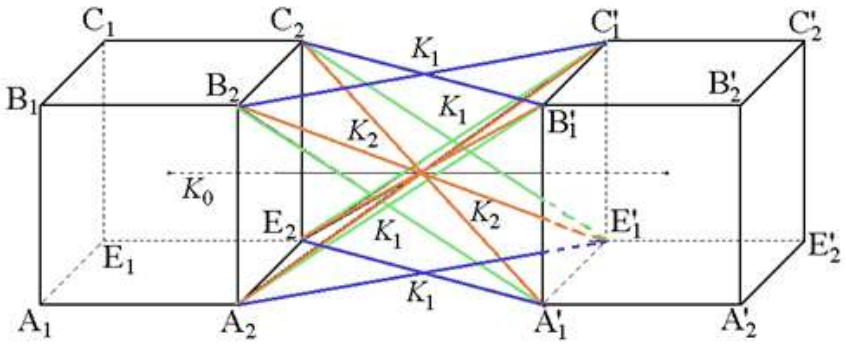



**Рис. 3.** Схема силовых взаимодействий между ближайшими соседями по решетке (частицами первой координационной сферы). Синим и зеленым обозначены пружины с жесткостью $K_1$, коричневым – пружины $K_2$.

Пружины с жесткостями $K_0$, $K_1$, $K_2$ и $K_3$ описывают взаимодействия частиц внутри одного слоя. Так, центральные $K_0$ и нецентральные $K_1$ пружины характеризуют взаимодействия при растяжении-сжатии материала. Через пружины $K_1$ передаются также моменты при поворотах частиц. Пружины с жесткостью $K_1$ и $K_2$ характеризуют силовые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале.

Предполагается, что смещения зерен малы по сравнению с размерами элементарной ячейки рассматриваемой решетки. Взаимодействие частиц при отклонениях от положения равновесия определяется относительными удлинениями пружин. Потенциальная энергия, обусловленная взаимодействием частицы $N$ с 26 ближайшими соседями по решетке, описывается формулой

$$U_N = \frac{1}{2}\left(\sum_{n=1}^{6}\frac{K_0}{2}D_{0n}^2 + \sum_{n=1}^{48}\frac{K_1}{2}D_{1n}^2 + \sum_{n=1}^{24}\frac{K_2}{2}D_{2n}^2 + \sum_{n=1}^{12}\frac{K_3}{2}D_{3n}^2 + \sum_{n=1}^{8}\frac{K_4}{2}D_{4n}^2\right), \quad (10)$$

где $D_{ln}$ ($l$=0, 1, 2, 3, 4) – удлинения пронумерованных в произвольном порядке пружин пяти типов, соединяющих частицу с ее соседями. Эти удлинения определяются изменениями расстояний между точками соединения соответствующих пружин (см. рис. 3). Далее от полученной дискретной модели перейдем в континуальное приближение. Для этого выразим удлинения пружин через смещения и углы поворотов частиц и разложим последние в выражении для потенциальной энергии в ряд Тейлора до квадратичных членов включительно.

**4. Длинноволновая континуальная модель кристаллической среды.** В случае длинноволновых возмущений, когда $\lambda >> a$ функция Лагранжа $L$ рассматриваемой среды из сферических частиц с точностью до квадратичных слагаемых примет вид:

$$L = \frac{M}{2}\left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2\right) + \frac{J}{2}(\varphi_t^2 + \theta_t^2 + \psi_t^2) -$$
$$-\frac{M}{2}[c_1^2(u_x^2 + v_y^2 + w_z^2) + c_2^2(v_x^2 + v_z^2 + u_y^2 + u_z^2 + w_x^2 + w_y^2) +$$
$$+s^2(v_y w_z + v_z w_y + u_x w_z + u_z w_x + u_x v_y + u_y v_x) + \beta_1^2(\varphi^2 + \theta^2 + \psi^2) + \quad (11)$$
$$\beta_2^2(v_x\varphi - w_x\psi + w_y\theta - u_y\varphi + u_z\psi - v_z\theta) +$$
$$+b^2c_3^2(\varphi_z^2 + \theta_x^2 + \psi_y^2) + b^2c_4^2(\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \theta_y^2 + \theta_z^2 + \psi_x^2 + \psi_z^2)].$$

Здесь введены обозначения: $c_i$ $(i = 1 \div 4)$ — скорости распространения соответственно продольной, поперечной и ротационных волн, $s$ — коэффициент связи между продольными и сдвиговыми деформациями, $\beta_1$ и $\beta_2$ — параметры связи микроповоротов с поперечной и продольной волнами.

Из функции Лагранжа (11) с помощью вариационного принципа Гамильтона-Остроградского получена система дифференциальных уравнений, описывающая распространение акустических и ротационных волн в кубической решетке из сферических частиц:

$$u_{tt} - c_1^2 u_{xx} - c_2^2\left(u_{yy} + u_{zz}\right) - s^2\left(v_{xy} + w_{xz}\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(\varphi_y - \psi_z\right) = 0,$$
$$v_{tt} - c_1^2 v_{yy} - c_2^2\left(v_{xx} + v_{zz}\right) - s^2\left(u_{xy} + w_{yz}\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(\theta_z - \varphi_x\right) = 0,$$
$$w_{tt} - c_1^2 w_{zz} - c_2^2\left(w_{xx} + w_{yy}\right) - s^2(u_{xz} + v_{yz}) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(\psi_x - \theta_y\right) = 0, \quad (12)$$
$$d^2\left(\frac{1}{10}\theta_{tt} - \frac{1}{3}c_3^2\theta_{xx} - \frac{1}{3}c_4^2\left(\theta_{yy} + \theta_{zz}\right)\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(w_y - v_z\right) + \beta_1^2\theta = 0,$$
$$d^2\left(\frac{1}{10}\psi_{tt} - \frac{1}{3}c_3^2\psi_{yy} - \frac{1}{3}c_4^2\left(\psi_{xx} + \psi_{zz}\right)\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(u_z - w_x\right) + \beta_1^2\psi = 0,$$
$$d^2\left(\frac{1}{10}\varphi_{tt} - \frac{1}{3}c_3^2\varphi_{zz} - \frac{1}{3}c_4^2\left(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}\right)\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(v_x - u_y\right) + \beta_1^2\varphi = 0.$$

Коэффициенты уравнений системы (12), являющиеся, по сути, макропараметрами среды, выражаются через силовые постоянные $K_0$, $K_1$, $K_2$, $K_3$, $K_4$, период решетки $a$ и размер частицы $b = d/\sqrt{3}$ следующим образом:

$$c_1^2 = \frac{1}{a\rho}\left(K_0 + \frac{8(a-b)^2}{(a-b)^2 + b^2}K_1 + \frac{4(a-b)^2}{(a-b)^2 + 2b^2}K_2 + \frac{K_3}{\sqrt{2}} + \frac{2K_4}{3}\right),$$
$$c_2^2 = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{4b^2}{(a-b)^2 + b^2}K_1 + \frac{4b^2}{(a-b)^2 + 2b^2}K_2 + \frac{K_3}{2\sqrt{2}} + \frac{2K_4}{3}\right),$$

$$s^2 = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{K_3}{\sqrt{2}} + \frac{4K_4}{3}\right),$$

$$\beta_1^2 = \frac{8b^2}{a\rho}\left(\frac{K_1}{(a-b)^2+b^2} + \frac{K_2}{(a-b)^2+2b^2}\right), \quad (13)$$

$$\beta_2^2 = \frac{8b^2}{a\rho}\left(\frac{K_2}{(a-b)^2+2b^2}\right), \quad c_3^2 = \frac{2b^2}{a\rho}\left(\frac{K_1}{(a-b)^2+b^2}\right),$$

$$c_4^2 = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{K_1(a^2+(a-b)^2)}{(a-b)^2+b^2} + \frac{K_2 a^2}{(a-b)^2+2b^2}\right).$$

Здесь $\rho = M / a^3$ – плотность рассматриваемой среды. Из (13) следует

$$\beta_1^2 + s^2 = 2c_2^2, \quad \beta_2^2 + 4c_3^2 = \beta_1^2. \quad (14)$$

Таким образом, в данной анизотропной среде имеется лишь 5 независимых макроконстант, причем при переходе к изотропной среде (в этом случае $c_1^2 = c_2^2 + s^2$) останется лишь 4 константы. Данная среда становится изотропной при выполнении следующего соотношения:

$$K_0 = \frac{4b^2 - 8(a-b)^2}{(a-b)^2+b^2}K_1 + \frac{4a(2b-a)}{(a-b)^2+2b^2}K_2 - \frac{K_3}{4\sqrt{2}} + \frac{4}{3}K_4. \quad (15)$$

Пружины пяти типов были введены в модель по следующим причинам. Благодаря наличию центральных пружин с жесткостью $K_0$, достигается превосходство скорости продольных волн над скоростями остальных волн. В отсутствии пружин $K_1$ $\beta_1 = \beta_2$ и $c_3 = 0$, в то время как в среде Коссера, представляющей собой континуум твердых недеформируемых тел-частиц [23], этот коэффициент является ненулевым. Если же $K_2$=0, то $\beta_2 = 0$ и, как следствие, исчезает связь между трансляционными и ротационными степенями свободы частиц в линейном приближении, присутствующая в континууме Коссера. Дублирующими друг друга кажутся, на первый взгляд, пружины $K_3$ и $K_4$. Но, как следует из соотношения (15), пружины этих двух типов в количественном отношении по-разному влияют на параметры $c_1$, $c_2$ и $s$. Кроме того, равенство (15) показывает их разное качественное влияние на выполнение условия изотропии среды, поскольку $K_3$ и $K_4$ входят в (14) с противоположными знаками.

**5. Градиентная модель.** Для сопоставления полученной модели (12) с уравнениями Ламе классической теории упругости (5) рассмотрим случай, когда повороты частиц среды связаны с продольными и поперечными деформациями. Иными словами, рассмотрим приближение, когда $d \to 0$ и, следовательно, в уравнениях (12) слагаемые со вторыми производными существенно меньше остальных. В этом случае

$$\theta(x,y,z,t) \approx \frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\left(v_z - w_y\right) = -\frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\,\mathrm{rot}_x\,\mathbf{U},$$

$$\psi(x,y,z,t) \approx \frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}(w_x - u_z) = -\frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\,\mathrm{rot}_y\,\mathbf{U}, \tag{16}$$

$$\varphi(x,y,z,t) \approx \frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}(u_y - v_x) = -\frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\,\mathrm{rot}_z\,\mathbf{U}.$$

В результате учета соотношений (16) в функции Лагранжа (11) происходит “замораживание” ротационных степеней свободы, и формула (11) принимает следующий вид:

$$L = \frac{M}{2}\left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2\right) + \frac{J}{8}\frac{\beta_2^4}{\beta_1^4}\left(\left(v_{xt} - u_{yt}\right)^2 + \left(u_{zt} - w_{xt}\right)^2 + \left(w_{yt} - v_{zt}\right)^2\right) -$$

$$-\frac{M}{2}\left[c_1^2(u_x^2 + v_y^2 + w_z^2) + c_2^2(v_x^2 + v_z^2 + u_y^2 + u_z^2 + w_x^2 + w_y^2) + \right.$$

$$+s^2(v_y w_z + v_z w_y + u_x w_z + u_z w_x + u_x v_y + u_y v_x) - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\left(\left(v_x - u_y\right)^2 + \left(w_y - v_z\right)^2 + \left(u_z - w_x\right)^2\right) + \tag{17}$$

$$+\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^4}b^2c_3^2\left(\left(v_{xz} - u_{yz}\right)^2 + \left(w_{yx} - v_{xz}\right)^2 + \left(u_{yz} - w_{xy}\right)^2\right) +$$

$$\left. +\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^4}b^2c_4^2(\left(v_{xx} - u_{xy}\right)^2 + \left(v_{xy} - u_{yy}\right)^2 + \left(w_{yy} - v_{yz}\right)^2 + \left(w_{yz} - v_{zz}\right)^2 + \left(u_{xz} - w_{xx}\right)^2 + \left(u_{zz} - w_{xz}\right)^2)\right].$$

Следует отметить, что часть функции Лагранжа (17), соответствующая потенциальной энергии, положительна даже несмотря на наличие отрицательной составляющей – слагаемого $-\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\left(\left(v_x - u_y\right)^2 + \left(w_y - v_z\right)^2 + \left(u_z - w_x\right)^2\right)$, поскольку это слагаемое компенсируется положительным слагаемым $c_2^2(v_x^2 + v_z^2 + u_y^2 + u_z^2 + w_x^2 + w_y^2)$. При разложении квадратов в слагаемом $-\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\left(\left(v_x - u_y\right)^2 + \left(w_y - v_z\right)^2 + \left(u_z - w_x\right)^2\right)$ удвоенные произведения положительны. Остаются квадраты различных деформаций с коэффициентом $c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}$, пропорциональным упругой постоянной $C_{44}$>0: $C_{44} = \rho\left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)$. Более того, этот коэффициент в явном виде выражается через параметры микроструктуры с помощью соотношений (13):

$$c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2} = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{4(K'_1 + K'_2)^2 - 2(K'_2)^2}{K'_1 + K'_2} + \frac{K_3}{2\sqrt{2}} + \frac{2K_4}{3}\right), \tag{18}$$

где $K'_1 = \frac{b^2}{r_1^2}K_1$ и $K'_2 = \frac{b^2}{r_2^2}K_2$. Очевидно, что выражение (18) положительно при любых положительных жесткостях пружин.

Функции Лагранжа (17) соответствуют следующие уравнения динамики:

$$u_{tt} - c_1^2 u_{xx} - \left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(u_{yy} + u_{zz}\right) - \left(s^2 + \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(v_{xy} + w_{xz}\right) =$$
$$= \frac{\beta_2^4}{2\beta_1^4}\left\{\frac{d^2}{20}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(u_y - v_x\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(u_z - w_x\right)\right) - b^2 c_4^2 \Delta\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(u_y - v_x\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(u_z - w_x\right)\right) + \right.$$
$$\left. + b^2\left(c_4^2 - c_3^2\right)\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}\left(2u_{yz} - v_{xz} - w_{xy}\right)\right\},$$

$$v_{tt} - c_1^2 v_{yy} - \left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(v_{xx} + v_{zz}\right) - \left(s^2 + \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(u_{xy} + w_{yz}\right) = \qquad (19)$$
$$= \frac{\beta_2^4}{2\beta_1^4}\left\{\frac{d^2}{20}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(v_x - u_y\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_z - w_y\right)\right) - b^2 c_4^2 \Delta\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(v_x - u_y\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_z - w_y\right)\right) + \right.$$
$$\left. + b^2\left(c_4^2 - c_3^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial z}\left(2v_{xz} - u_{yz} - w_{xy}\right)\right\},$$

$$w_{tt} - c_1^2 w_{zz} - \left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(w_{xx} + w_{yy}\right) - \left(s^2 + \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(u_{xz} + v_{yz}\right) =$$
$$= \frac{\beta_2^4}{2\beta_1^4}\left\{\frac{d^2}{20}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(w_x - u_z\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(w_y - v_z\right)\right) - b^2 c_4^2 \Delta\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(w_x - u_z\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(w_y - v_z\right)\right) + \right.$$
$$\left. + b^2\left(c_4^2 - c_3^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}\left(2w_{xy} - v_{xz} - u_{yz}\right)\right\},$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

Такие уравнения принято называть уравнениями градиентной теории упругости, поскольку они содержат слагаемые высокого порядка (в данном случае - четвертого) [25]. Уравнения (19) показывают, что в данном низкочастотном приближении вызванные микровращениями возмущения не распространяются, однако микроповороты оказывают влияние на распространение продольных и поперечных волн: квадрат скорости поперечной волны $c_2^2$ уменьшается на величину $\beta_2^4 / 4\beta_1^2$, а параметр связи между продольными и поперечными деформациями $s^2$ увеличивается на эту же величину.

Далее с помощью уравнений (19) попытаемся выяснить, при каких значениях параметров микроструктуры коэффициент Пуассона $\nu_2$ принимает значения, большие 0.5, $\nu_4$ достигает значений, меньше -1, а коэффициент $\nu_3$ обладает обоими этими свойствами.

**6. Влияние микроструктуры среды на ее коэффициенты Пуассона.** В уравнениях (19) пренебрежем производными четвертого порядка и сравним левые части этих уравнений с уравнениями (5) классической теории упругости для сред с кубической симметрией. Благодаря такому сравнению, выразим упругие постоянные второго порядка через коэффициенты (13) уравнений (12):

$$C_{11}=\rho c_1^2,\ C_{44}=\rho\left(c_2^2-\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right),\ C_{12}=\rho\left(s^2-c_2^2+\frac{\beta_2^4}{2\beta_1^2}\right). \tag{20}$$

Далее подставим в формулы (2)-(4) выражения (20) и (13). В результате получим зависимости коэффициентов Пуассона $\nu_2$, $\nu_3$ и $\nu_4$ от параметров микроструктуры среды, к каковым относятся геометрические характеристики среды (период решетки $a$ и диаметр сферической частицы $d$) и параметры силовых и моментных взаимодействий $K_i$ ($i$=0, 1, 2, 3, 4). Анализ данной модели показывает, что при фиксированных значениях параметров $K_{i0}=K_i/K_0$ ($i$=1, 2, 3, 4) коэффициенты Пуассона $\nu_2$, $\nu_3$ и $\nu_4$ монотонно убывают с ростом относительного размера частиц $d/a$ [24]. Следовательно, самые большие значения коэффициенты Пуассона достигают при $d/a\to 0$, а самые маленькие (отрицательные) – при $d/a\to 1$.

Если $d/a=0$, то

$$c_1^2=\frac{1}{a\rho}\left(K_0+8K_1+4K_2+\frac{K_3}{\sqrt{2}}+\frac{2K_4}{3}\right),$$

$$c_2^2=\frac{1}{a\rho}\left(\frac{K_3}{2\sqrt{2}}+\frac{2K_4}{3}\right)=\frac{s^2}{2},$$

$$\beta_1^2=\beta_2^2=c_3^2=0, \tag{21}$$

$$c_4^2=\frac{1}{a\rho}\left(2K_1+K_2\right).$$

Из (21) следует, что $\nu_2>0.5$ при

$$\frac{K_{40}}{3}\left(8K_{40}+\frac{7K_{30}}{\sqrt{2}}\right)>\left(1+8K_{10}+4K_{20}\right)\left(1+8K_{10}+4K_{20}+\frac{7K_{30}}{2\sqrt{2}}+\frac{10K_{40}}{3}\right). \tag{22}$$

Очевидно, что неравенство (22) может выполняться лишь при малых значениях параметров $K_{10}$ и $K_{20}$. Так, если $K_{10}=K_{20}=0$, то неравенство (22) примет вид:

$$K_{30}>\frac{2\sqrt{2}(3-8K_{40}^2+10K_{40})}{7(2K_{40}-3)2\sqrt{2}}. \tag{23}$$

Очевидно, что при любом положительном $K_{40}$ правая часть неравенства (23) будет отрицательной. Значит, в случае, когда $d$=0 и $K_{10}=K_{20}=0$, $\nu_2>0.5$ при любых положительных значениях $K_{30}$ и $K_{40}$. Если же взять хоть и малые, но ненулевые значения

параметров $K_{10}$ и $K_{20}$, то $\nu_2$ будет превышать 0.5 уже не при всех значениях $K_{40}$, что подтверждается численными исследованиями, представленными на рисунке 4.

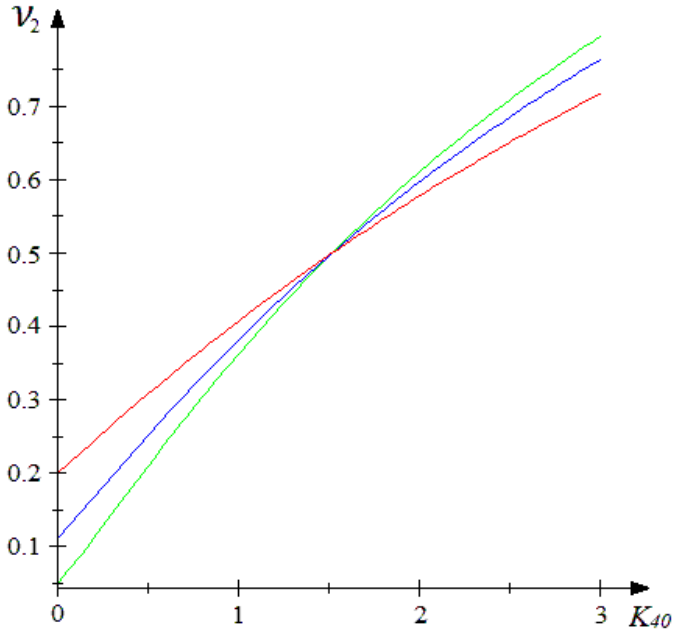



**Рис. 4.** Зависимость коэффициента Пуассона $\nu_2$ от силового параметра $K_{40}$ при $d/a$=0.01, $K_{10}$=$K_{20}$ =0.001,
где зеленая кривая соответствует $K_{30}$=0.5, синяя – $K_{30}$=1, красная – $K_{30}$=2.

Аналогично (при $d/a=0$), $\nu_3>0.5$ при $C_{11}^2>2C_{44}^2+5C_{11}C_{44}$ или, в терминах силовых и моментных параметров взаимодействий между частицами, при

$$\left(1+8K_{10}+4K_{20}\right)^2>\left(1+8K_{10}+4K_{20}\right)\left(\frac{K_{30}}{2\sqrt{2}}+2K_{40}\right)+K_{30}^2+\frac{8}{3}K_{40}^2+\frac{5}{\sqrt{2}}K_{30}K_{40}\,. \quad (24)$$

Анализ неравенства (24) показывает, что по сравнению с $\nu_2$ коэффициент Пуассона $\nu_3$ ведет себя по-другому - он увеличивается с ростом $K_{10}$ и $K_{20}$, причем, как следует из рисунка 5, наибольшие значения $\nu_3$ принимает при малых значениях $K_{30}$ и $K_{40}$.

Далее выясним, могут ли коэффициенты Пуассона (3) и (4) принимать очень большие по модулю отрицательные значения. Так, $\nu_4<-0.5$ при $C_{44}>2C_{11}+4C_{12}$. Но такое соотношение при всех положительных константах упругости второго порядка практически недостижимое.

В свою очередь, $\nu_3<-0.5$ при

$$2C_{11}C_{44}>3\left(C_{11}-C_{12}\right)\left(C_{11}+2C_{12}\right). \quad (25)$$

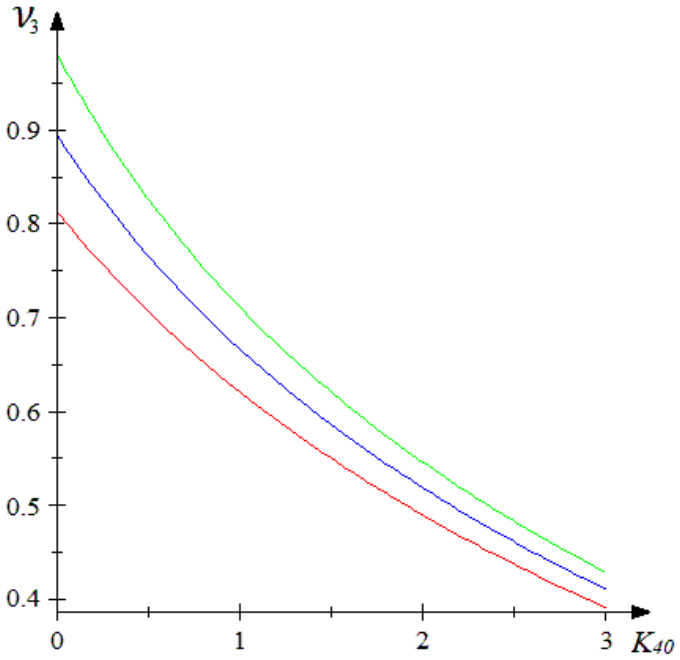



**Рис. 5.** Зависимость коэффициента Пуассона $\nu_3$ от силового параметра $K_{40}$ при $d/a$=0.01, $K_{10}$=$K_{20}$ =0.5,
где зеленая кривая соответствует $K_{30}$=0.1, синяя – $K_{30}$=0.6, красная – $K_{30}$=1.2.

Неравенство (25) вполне может выполняться для некоторых кубических кристаллов. Подставив в (3) выражения (20) и (13), получим зависимости коэффициента Пуассона $\nu_3$ от параметров микроструктуры. Нас интересует случай, когда $d/a \to 1$. На рисунке 6 представлены зависимости $\nu_3$ от параметра межчастичных взаимодействий $K_{40}$ при $d/a$=0.99. Из данного рисунка видно, что наименьшие значения $\nu_3$ принимает при малых значениях $K_{30}$ и $K_{40}$. Возникает вопрос: существуют ли значения параметров микроструктуры, при которых $\nu_3$ может стать меньше -1? Анализ показал, что ответ на этот вопрос утвердительный: $\nu_3 < -1$, например, если $K_{30}$=0.1, $K_{40}$<0.2, а все остальные параметры такие же, как при построении рисунка 6.

С другой стороны, неравенство $\nu_3 < -1$ может выполняться лишь при $(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}) < 0$. Однако оба множителя здесь положительны: первый – согласно условию (7), второй – из-за выполнения (6). Почему же при некоторых значениях параметров микроструктуры коэффициента Пуассона $\nu_3$ принимает значения, меньшие -1? Дело в том, что в случае, когда $d/a \to 1$, параметры $K_{30}$ и $K_{40}$ малы, а параметры $K_{10}$ и $K_{20}$ большие (больше 0.4), не только становится отрицательной упругая постоянная $C_{12}$, но и нарушается условие (6).

Таким образом, рассмотренная в данной работе модель допускает как положительные, так и отрицательные аномальные значения коэффициентов Пуассона вдоль основных кристаллографических осей.

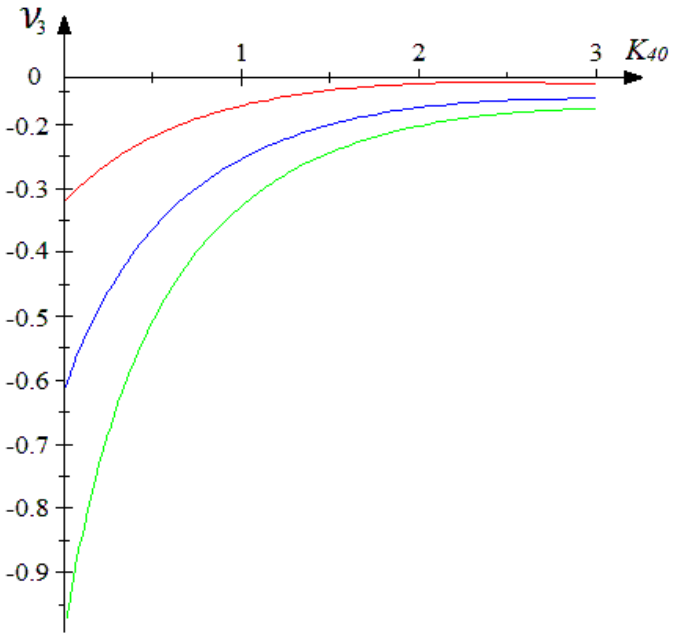



**Рис. 6.** Зависимость коэффициента Пуассона $\nu_3$ от силового параметра $K_{40}$ при $d/a$=0.99, $K_{10}$=0.4, $K_{20}$ =0.5, где зеленая кривая соответствует $K_{30}$=0.25, синяя – $K_{30}$=0.7, красная – $K_{30}$=1.5.

**7. Заключение.** В рамках построенной трехмерной модели анизотропной кристаллической среды с простой кубической решетки из сферических частиц получены аналитические зависимости коэффициентов уравнений динамики такой среды от параметров ее микроструктуры.

Рассмотрено низкочастотное приближение шестимодовой модели кристаллической среды, соответствующее уравнениям градиентной теории упругости. В этом приближении можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц, но память о них остается в виде корректировки скоростей поперечных и изгибных волн по сравнению с исходной моделью.

Сопоставление уравнений градиентной теории упругости с уравнениями Ламе классической теории упругости для сред с кубической симметрией дало возможность установить связь между упругими постоянными второго порядка и параметрами микроструктуры рассматриваемой среды. В результате, были найдены соотношения между коэффициентами Пуассона вдоль основных кристаллографических направлений анизотропной среды и параметрами ее микроструктуры.

Показано, что нулевой размер частиц среды ($d$=0) и наличие лишь центральных сил взаимодействия между частицами первой координационной сферы ( $K_{10} = K_{20} = 0$ ) являются достаточными условиями для того, чтобы коэффициент Пуассона $\nu_{<110,\ 001>} = \nu_2$ был больше 0.5. Коэффициент Пуассона $\nu_{<110,\ 1\bar{1}0>} = \nu_3$ становится больше 0.5 при $d$=0, больших значениях $K_{10}$ и $K_{20}$ и малых значениях $K_{30}$ и $K_{40}$. Кроме того, $\nu_3$ может принять и аномально малые значения (меньшие -1) при больших значениях относительных размеров частиц ( $d/a \to 1$ ) и малых значениях $K_{30}$ и $K_{40}$, однако в этом случае становится отрицательной константа упругости $C_{12}$, в то время как $-1 < \nu_3 < -0.5$ при $C_{12}$>0.

## Список литературы

1. Конек Д.А., Войцеховский К.В., Плескачевский Ю.М., Шилько С.В. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона: обзор // Механика композиционных материалов и конструкций. — 2004. — Т. 10, № 1. — С. 35—69.
2. Беломестных В.Н., Теслева Е.П. Коэффициент Пуассона и параметр Грюнайзена твердых тел // Известия Томского политехнического университета. – 2003. – Т. 306. – № 5. – С. 8-12.
3. Иванов Г.П., Лебедев Т.А. О физическом смысле коэффициента Пуассона // Труды Ленингр. политехн. ин-та им. М.И. Калинина. – 1964. – № 236. – С. 38-46.
4. Evans K.E. Auxetic polymers: a new range of materials // Endeavour. — 1991. — Vol. 15, iss. 4. — P. 170—174.
5. Evans K.E., Alderson A. Auxetic materials: functional materials and structures from lateral thinking // Adv. Mater. 2000. – V. 12. – P. 617–628.
6. Underhill R.S. Defense applications of auxetic materials // Defense Syst. Inf. Anal. Center J. 2014. – V. 1. – P. 7–13.
7. Liu Q. Literature review materials with negative Poisson’s ratios and potential applications to aerospace and defense // Aust. Gov. Dep. Def. 2006.
8. Choi J.B. Lakes R.S. Fracture toughness of re-entrant foam materials with a negative Poisson’s ratio: experiment and analysis // Int. J. Fract. 1996. – V. 80. – P. 73–83.
9. Donoghue J.P., Alderson, K.L., Evans, K.E. The fracture toughness of composite laminates with a negative Poisson’s ratio // Phys. Status Solidi B. 2009. – V. 246. – P. 2011–2017.
10. Alderson K.L., Webber R.S., Mohammed U.F., Murphy E., Evans K.E. An experimental study of ultrasonic attenuation in microporous polyethylene // Appl. Acoust. 1997. – V. 50. – P. 23–33.
11. Howell B., Prendergast P., Hansen L. Examination of acoustic behavior of negative Poisson’s ratio materials // Appl. Acoust. 1994. – V. 43. – P. 141–148.
12. Епишин А.И., Лисовенко Д.С. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов// Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – № 10. С. 74–82.
13. Волков М.А. Экстремальные значения коэффициента Пуассона триклинных и моноклинных кристаллов // Письма о материалах. – 2014. – Т.4. – №3. – С.167-170. https://doi.org/10.22226/2410-3535-2014-3-167-170
14. Муслов С.А., Лисовенко Д.С. Коэффициент Пуассона дентина как анизотропной среды с гексагональной симметрией // Междунар. науч.-исслед. журн. – 2018. – № 7 (73). – С. 18–24.
15. Lethbridge Z.A.D., Walton R.I., Marmier A., Smith C.W., Evans K.E. Elastic anisotropy and extreme Poisson’s ratios in single crystals // Acta Mater. 2010. – V. 58. – P. 6444–6451.
16. 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. — P. 264—271.
17. Беломестных В.Н., Соболева Е.Г. Коэффициенты Пуассона щелочно-галоидных кристаллов. Ч. I: Галогениды лития // Известия Томского политехнического университета. — 2012. — Т. 320, № 2. — С. 137—139.
18. Ерофеев В.И., Павлов И.С. Параметрическая идентификация кристаллов, имеющих кубическую решетку, с отрицательными коэффициентами Пуассона // Прикладная механика и техническая физика. — 2015, № 6. — С. 94-101.

19. Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Ауксетики среди материалов с кубической анизотропией // Известия РАН: Механика твердого тела. - 2020. - № 4. - С. 7-24.
20. Second and Higher Order Elastic Constants // In: Nelson, D.F. (ed.). V. 29a of Landolt-Bornstein—Group III Condensed Matter. Springer. 1992.
21. Branka A.C., Heyes D.M., Wojciechowski K.W. Auxeticity of cubic materials // Phys. Status Solidi B. – 2009. – V. 246. – P. 2063–2071.
22. Беломестных В.Н., Соболева Э.Г. Нетрадиционный подход к определению анизотропных коэффициентов Пуассона кубических кристаллов. // Письма о материалах. — 2012. — Т.2, №1. — С.13-16.
23. Новацкий В. Теория упругости. — М.: Мир, 1975. — 872 с.
24. Pavlov I.S., Dmitriev S.V., Vasiliev A.A., Muravieva A.V. Models and Auxetic Characteristics of a Simple Cubic Lattice of Spherical Particles // Continuum Mechanics and Thermodynamics. —2022. —V. 34. — P. 1669–1685. https://doi.org/10.1007/s00161-022-01157-w
25. Ванин Г.А. Градиентная теория упругости // Известия РАН. Механика твердого тела. — 1999. — № 1. — С. 46—53.

*Дата поступления: 29 ноября 2023 г.*