

(рис. 2). Сравнительный анализ контраста микрофотографии на рис. 2 предоставляет убедительное свидетельство определяющей роли степени пересыщения на структурно-фазовый состав образцов. Так, микрофотография содержит темные пятна на сером фоне. Более темный абсорбционный ПЭМ – контраст пятен по сравнению с фоном указывает на то, что соответствующие им структурные образования являются преципитатами, включающими в свой состав большее количество тяжелых атомов, чем окружающая матрица. По результатам электронной дифракции было установлено в состав преципитатов входят атомы Ge и As. Это согласуется с результатами расчёта композиционного состава методом рентгеновского микроанализа в [2]. При длительных временах термического окисления при температуре выше граничной выделения фазы GeAs обнаружено не было, что связано с диффузионным перераспределением мышьяка в образце.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе были исследованы структурные превращения и поведение примеси в $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ сплавах после высокодозной *in-situ* имплантации ионов As^+ и последующего дестабилизирующего отжига в различных режимах. Обнаружено образование смешанного оксида $\text{SiO}_2\text{-GeO}_2$ при окислении сплава $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ в области температур 500°C – 750°C , отжиг при температурах выше 900°C приводит к сегрегации Ge. Установлена пороговая зависимость выделения фазы GeAs, определена граничная температура 915°C , при которой образование GeAs преципитатов сопровождается отжигом дефектов дислокационного типа.

Литература

1. *Nobili D. Solmi S. Parisini A. et.al. // Phys. Rev., 1994. – Vol.B 49. – N4, P. 2477-2483.*
2. *Гайдук П. И. Неравновесные процессы формирования материалов и структур твердотельной электроники: Дис... д-ра физ.-мат. наук. – Минск, 2004.*
3. *Rabie M. A. Haddara Y. M. Carette J. Kinetic model for the oxidation of silicon germanium alloys // J. Appl. Phys., 2005, Vol. 98 (7).*
4. *Nobili D. Carabelas Precipitation as the phenomenon responsible for the electrically inactive arsenic in silicon // J. Electrochem. Soc., 1983, N4, P922-928.*

ЭФФЕКТ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Т. А. Бракоренко

Одной из актуальных задач современного материаловедения является создание принципиально новых материалов, способных проявлять про-

граммируемые, существенно нелинейные деформационные свойства, вплоть до получения адаптивной (приспособительной) реакции на внешнее воздействие [1]. В частности, к таковым можно отнести материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона ν , способные расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном одноосному растяжению/сжатию соответственно, иначе называемые ауксетичные или ауксетики [2].

У большинства конструкционных материалов значения ν 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 высокой несущей способности фрикционных соединений [3], что делает их наиболее предпочтительными для использования в крепежных изделиях.

Целью работы является анализ механизмов, приводящих к отрицательным значениям ν в твердых телах, и нахождение такого материала с ауксетичными и неауксетичными включениями, который на тепловое воздействие отвечает нулевым тепловым расширением. Это сделает более широким дальнейшее использование ауксетиков в технике.

На сегодняшний день известно немало случаев проявления отрицательных значений ν в кристаллах и композиционных материалах. Учеными было выделено три структурных уровня реализации данной аномалии деформационного поведения: макро-, мезо- и микроскопический. Также известны стержневые модели материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона [4]. Несмотря на то, что коэффициент Пуассона является структурно более чувствительной характеристикой по сравнению с модулем упругости, в литературе мало внимания уделяется изучению причин, ведущих к 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- и мезоскопическом уровнях в композитных материалах и пенопластах, на молекулярный уровень.

Помимо гипотетических структур [5], ауксетичное поведение на данном уровне проявляют жидкие кристаллы и многие монокристаллы металлов. Так, среди тригональных монокристаллов такими свойствами обладают мышьяк и висмут. Среди гексагональных плотноупакованных

фаз металлов – цинк и бериллий [6]. В большинстве случаев такие эффекты проявляются в кубических кристаллах вдоль некоторых кристаллографических осей.

В заключение анализа механизмов, приводящих к отрицательным значениям ν в твердых телах, отмечу, что существуют альтернативные подходы к созданию ауксетичных фаз, основанные на моделировании упругих свойств термодинамически стабильных изотропных систем, состоящих из сферических частиц. Также был предложен механизм реализации отрицательных значений ν в фрактальных средах [7].

Таким образом, в данной работе были описаны некоторые примеры успешной реализации методов молекулярной динамики 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.

Выше было упомянуто о способности ауксетиков расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном одноосному растяжению/сжатию соответственно (рис. 1). Такое свойство делает оправданным предположение о существовании материала, состоящего из ауксетичных и неауксетичных включений, который «не реагирует» на тепловое воздействие. Формулировка проблемы в таком виде требует пояснения. Понятно, что деформации будут присутствовать как в ауксетичных, так и в неауксетичных слоях, но предполагается, что ауксетичный слой поглотит деформации неауксетичного и тепловое расширение материала в целом будет нулевым или даже отрицательным. При такой постановке возникает немало вопросов. Какова скорость поглощения деформаций? Как соотносятся скорость появления деформаций в неауксетичном слое и скорость ее поглощения в ауксетичном? Возможно ли получить отрицательный коэффициент линейного теплового расширения? На эти вопросы сейчас пытаются ответить многие группы ученых по всему миру.

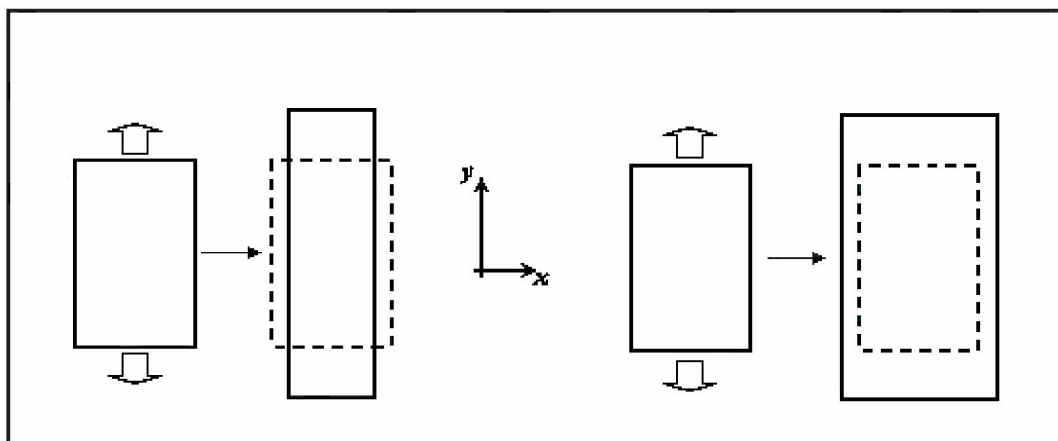


Рис. 1. Реакция неауксетичного (слева) и ауксетичного (справа) материалов на одноосное растяжение

Целью моей работы также является оптимизация геометрических параметров, таких как толщина, число слоев, вид элементарной ячейки и т.д., для того, чтобы получить материал с нулевым или близким к нулевому коэффициентом термического расширения.

В процессе решения данной задачи были сделаны следующие выводы.

Самой результативной оказалась слоистая схема укладки, т.е. чередование ауксетичного и неауксетичного слоев. Именно при таком способе укладки ауксетичных и неауксетичных слоев удалось достичь желаемых результатов. Слои в данной системе связаны без проскальзывания, трение между слоями не учитывается, т.е. слои свободно перемещаются друг относительно друга. За расчетный образец была взята система, состоящая из двух слоев, один из которых имеет положительный коэффициент Пуассона, а другой является ауксетиком. Были построены зависимости двух типов: зависимость термических перемещений:

- от коэффициента Пуассона,
- от толщины слоев системы.

Данные для расчета слоя, состоящего из обычного материала, были взяты из технических источников, т.е. коэффициенты Пуассона брались для реально существующих материалов (дерево, сталь, керамика). Данные для расчета слоя, состоящего из ауксетичного материала, брались с обратным знаком. При этом предполагается существование таких материалов и возможность их получения. Работа осложнялась отсутствием сведений в научной литературе о поведении ауксетиков в температурном поле. Тем не менее, графически удалось показать компенсацию перемещений составной пластины в результате наложения перемещений противоположного направления. Зависимость термических перемещений слоев от коэффициентов теплового расширения материалов, из которых данные слои состоят, показала, что перемещения тем меньше, чем устойчивее материал к температурному полю, т.е. при минимальном коэффициенте теплового расширения. При этом температура и толщина слоев не изменяются. Из зависимости термических перемещений слоев от их толщин, когда температура и коэффициенты теплового расширения материалов слоев постоянны, сделан вывод, что термические перемещения каждого отдельно взятого слоя не зависят от его толщины, что не противоречит принятым в ходе решения задачи предположениям. Зависимость термических перемещений слоев от коэффициента теплового расширения ауксетичного материала, из которого состоит верхний слой, когда температура, толщина слоев и коэффициент теплового расширения неауксетичного материала являются константами, демонстрирует то, что при определенных значениях коэффициента теплового расширения ауксетичного слоя возможно получение нулевых термических перемещений.

Таким образом, цель работы была успешно достигнута. Были получены условия, при которых возможно получение материала с нулевым коэффициентом теплового расширения. В процессе работы над решением данной проблемы возникли новые вопросы, поставлены новые цели, на достижение которых будет направлена наша дальнейшая деятельность.

Литература

1. *Pleskachevsky Yu.M., Shilko S.V., Stelmakh S.V.* // Journal of Wave - Material Interaction.-1999.- Vol. 14, № 1 – 2, p.49 - 58.
2. *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.
3. *Шилько С.В.* // Трение и износ. - 1995. - Т. 15, № 3. - с.429 - 437.
4. *Конёк Д.А., Войцеховски К.В., Плескачевский Ю.М., Шилько С.В.* Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона. // Механика композиционных материалов и конструкций.– 2004.– том 10, №1 – с.35-69.
5. *Lakes R. S.* // Advanced Materials.– 1993.–Vol.5.– P.293-296.
6. *Черноус Д.А., Шилько С.В., Плескачевский Ю.М.* // Механика композитных материалов и конструкций. - 1998. -№3. - с.28 - 38.
7. *Плескачевский Ю.М., Шилько С.В.* Ауксетики: модели и приложения. // Вести НАНБ.– 2003.– №4 – с.58-68.