

**Ташук Р.Ю. Деформація анізотропних кристалів з різко нелінійними механічними властивостями в умовах обмеженої релаксації напружень. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 - Фізика та астрономія. – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2023.

Дисертація присвячена дослідженню в рамках теорії пружності для анізотропних кристалів основних ауксетичних характеристик моно-, полікристалів і 2D-кристалічних наношарів методами фізичної акустики і обробки експериментальних результатів за допомогою ІТ технологій. Для побудови характеристичних поверхонь модулів Юнга (ХПМЮ)  $E_i(x,y,z)$ , кутових розподілів коефіцієнтів Пуассона (КРКП)  $\mu(\varphi,\theta,\psi)$ , вказівних поверхонь ауксетичності (ВПА)  $S(x,y,z)$  та визначення естремальних значень коефіцієнтів Пуассона (ЕЗКП)  $\mu_{min}$ ,  $\mu_{max}$  і ступеню ауксетичності  $S_a$  створений пакет комп'ютерних програм для монокристалів довільної сингонії. Проаналізовані закономірності та механізми формування основних ауксетичних характеристик в таких матеріалах, з врахуванням типу хімічного зв'язку.

**Перший розділ** дисертації присвячений огляду літератури. Коротко висвітлені основні положення теорії пружності для анізотропних кристалів усіх кристалічних категорій та її трансформацію для 2D-шарів наношарів, які зазнають періодичної термомеханічної дії в умовах обмеженої релаксації напружень, зумовленої анізотропією термічних властивостей та термічно- і кристалографічно-обмеженою рухливістю дефектів кристалічної структури. Описані методи вимірювання швидкостей поширення акустичних хвиль та визначення пружних констант кристалів усіх категорій. Приділено увагу виявленню особливостей поведінки дефектів кристалічної будови та їх комплексів, утворення і рух яких відіграє вирішальну роль у релаксації механічних напружень, що виникають при деформації матеріалу, в звичайних і ауксетичних напрямках у кристалах з «аксіальним», «неаксіальним» чи «змішаним» типами ауксетичності.

**У другому розділі** вивчався вплив деформації та анізотропії пружних констант на основні ауксетичні характеристики стабільних і метастабільних поліморфних модифікацій діоксиду кремнію (альфа та бета кварцу, альфа та бета кристобаліту, коеситу і стишовіту, відповідно). Для них побудовані  $E_i(x,y,z)$ , кутові розподіли  $\mu(\varphi, \theta, \psi)$  та вказівні поверхні ауксетичності. Виявлено однозначну кореляцію між анізотропією ХПМЮ і ауксетичністю монокристалів. Показано, що і кварц, і кристобаліт стають абсолютними ауксетиками із ступенем ауксетичності  $S_a = 1$  лише при наближенні до точок поліморфних перетворень між  $\alpha$ - і  $\beta$ - фазами при  $T_{\phi 1} = 846$  К для кварцу, та при  $T_{\phi 2} = 1050$  К для переходу між  $\alpha$ - і  $\beta$ - модифікаціями кристобаліту. При цьому естремальні значення коефіцієнтів Пуассона  $\mu_{min}$  і  $\mu_{max}$  приймають від'ємні значення. Досліджено швидкості поширення акустичних хвиль у кристалах кремнезему у широкому інтервалі температур і показано, що у монокристалах кристобаліту має місце аномальне розм'якшування модулів пружності  $C_{11} \rightarrow C_{44}$  та аномальні ефекти рівності повздовжніх  $v_l$  і поперечних  $v_{l1}$  і  $v_{l2}$  фазових швидкостей

ультразвуку:  $v_l = v_{l1} = v_{l2}$ , які пов'язані з появою від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона.

В рамках теорії дислокацій проаналізовані особливості поведінки лінійних дефектів та їх об'єднань з точковими дефектами (вакансіями та міжвузловими атомами) в ауксетичних і звичайних (неауксетичних) напрямках у кристалах кремнезему, для яких характерною є «часткова» чи «змішана» ауксетичність.

**У третьому розділі** із аналізу закономірностей і механізмів формування характеристичних поверхонь  $E_i(x, y, z)$ , кутових розподілів  $\mu(\varphi, \Theta, \psi)$  та вказівних поверхонь ауксетичності монокристалів кубічної, гексагональної, тетрагональної і ромбічної сингоній виявлені кристали, які можуть досягти граничних від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона, передбачених класичною теорією пружності для ізотропних середовищ. Показано, що саме масив від'ємних значень коефіцієнтів Пуассона формує зображення вказівних поверхонь ауксетичності. Встановлено, що з пониженням симетрії кристалів зростає кількість кристалографічних напрямків, в яких кристали поступово перетворюються з «часткових» на «змішані» або навіть «абсолютні» ауксетики. Виявлено, що більшість монокристалів вищої і середньої категорії ледве досягають мінімальних граничних значень коефіцієнтів Пуассона. Тому для отримання ауксетичних матеріалів з високими ударно-енергетичними та сейсмічно стійкими характеристиками запропоновано використовувати речовини, що належать до низької кристалографічної категорії, зокрема моноклінної. Побудовані об'ємні зображення поверхонь модулів Юнга, кутових розподілів коефіцієнтів Пуассона та вказівних поверхонь ауксетичності для ряду моноклінних кристалів, таких як лабрадорит, дигідрофосфат цезію, ніобат лантану, антрацену, нафталену, бібензилу та ін., які дозволяють визначити розподіл за напрямками екстремальних значень коефіцієнтів Пуассона  $\mu_{min}$ ,  $\mu_{max}$  і ступінь ауксетичності  $S_a$  в цих кристалах. Показано, що екстремальні значення коефіцієнтів Пуассона  $\mu_{min}$  і  $\mu_{max}$  для органічних молекулярних кристалів з молекулярно-ковалентним типом зв'язку змінюються у суттєво вужчих інтервалах, ніж для неорганічних моноклінних кристалів з іонним та іонно-ковалентним типами зв'язку. Так інтервал зміни  $\mu_{min}$  в молекулярних кристалах практично в 3 рази, а  $\mu_{max}$  майже у 8 разів менший, ніж у неорганічних кристалах, відповідно.

**У четвертому розділі** із застосуванням лінійної теорії пружності анізотропних кристалів та використанням експериментальних значень модулів пружності  $C_{ij}$  і податливостей  $S_{ij}$ , наведених в таблицях Ландольт-Берштейна, вперше побудовані характеристичні поверхні модулів Юнга, кутові розподіли коефіцієнтів Пуассона  $\mu(\varphi, \Theta, \psi)$  та вказівні поверхні ауксетичності монокристалів інтерметалічних сполук  $Ag-Au$ ,  $Cu-Ni$ ,  $Cu-Au$ ,  $Cu-Zn$  і  $Cu-Mn$ . Встановлено надзвичайно високу чутливість складової екстремальних значень модулів Юнга у напрямку  $\langle 110 \rangle$   $E_{\langle 110 \rangle}$  до аномальних деформацій при фазових перетвореннях типу «порядок-непорядок», які протікають як при впорядкуванні атомів, так і при впорядкуванні спінів при магнітних перетвореннях. Виявлено аномалії концентраційних залежностей ауксетичних параметрів  $\mu_{min}(X)$ ,  $\mu_{max}(X)$  та ступеня ауксетичності  $S_a(X)$  поблизу точок фазового перетворення типу

«впорядкування-розпорядкування» першого і другого роду. Досліджені особливості зміни кінематичних властивостей дислокацій і дислокаційних атмосфер із зміною концентрації точкових дефектів у звичайних і ауксетичних напрямках у кристалах *Cu-Mn*. Виявлено існування нано-каналів підвищеної пластичності поблизу екстраплощин крайових дислокацій, що залягають в ауксетичних напрямках у кристалах цих інтерметалідів.

У п'ятому розділі роботи досліджено зміну характеру деформації нано-шарів індію в залежності від температури і кристалографічних напрямів у шарі при жорсткому низькотемпературному термомеханічному циклуванні в інтервалі 2 - 300 К. Показано, що посилення анізотропії термопружних деформацій у цьому металі при переході від об'ємних ізотропних полікристалічних до квазіанізотропних 2D-наноконтактів призводить до появи в деяких кристалографічних напрямках при напруженнях порядку межі міцності  $\sigma_B$  «від'ємних» дилатацій в інтервалі 15–(80)100 К. Проаналізовано механізми утворення в шарах індію механічних напружень такого рівня, які накопичуються в умовах обмеженого простору і обмеженої рухливості дислокацій при криогенних температурах. В рамках дислокаційної моделі оцінено висоту бар'єрів Пайєрлса для перегинів на дислокаціях в індії та коефіцієнти їх прозорості. Виявлено високу ймовірність їх подолання шляхом проникнення (тунелювання) перегинів-солітонів через бар'єри у тих кристалографічних напрямках, для яких коефіцієнти Пуассона  $\mu \sim 0,5$  і які можуть слугувати каналами релаксації руйнівних напружень, що накопичились у шарі.

**Ключові слова:** ауксетизм, деформації, кристали, структура, вказівні поверхні, анізотропія, пружні константи, наношари, механічні напруги, дислокації, вакансії, міжвузольні атоми, бар'єри Пайєрлса, акустичні фонони, комп'ютерне моделювання.