

## ОБЗОРЫ

УДК 541.64:539.3

© 1992 г. Ал. Ал. Берлин, Л. Ротенбург, Р. Басэрст

## ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ И НЕПОЛИМЕРНЫХ ТЕЛ

На основе результатов компьютерного моделирования статического механического поведения тела, состоящего из 1000 упругих жестких частиц, обсуждаются некоторые проблемы механики неупорядоченных (аморфных) тел: переход стекло — жидкость, пластические деформации в твердом состоянии, отрицательный коэффициент Пуассона, особенности случайной наиболее плотной упаковки частиц различной формы. Показано, что число прямых физических контактов частиц друг с другом, распределение их в пространстве и спад в процессе сдвиговой деформации определяют существование двух состояний — твердого стеклообразного и жидкого и условие перехода между ними, а также основные механические свойства твердого тела: пластичность, деформационное размягчение, локализацию деформации в форме полос сдвига. Предложен и обоснован критерий перехода стекло — жидкость и показано, что критическое число контактов и плотность упаковки в точке перехода зависят от симметрии частиц и типа контактных сил. Обсуждается применимость геометрических представлений для разработки теории конденсированного состояния в предположении, что любой потенциал взаимодействия между частицами может быть разделен на две составляющие — жесткое отталкивание и мягкое притяжение, отвечающие за различные физические свойства реального вещества: переход газ — жидкость, наличие критических точек, переход жидкость — стекло, механическое поведение стекол и кристаллов. Рассмотрены особенности строения изотропных тел, характеризующиеся отрицательным коэффициентом Пуассона. Показано, что тела должны представлять собой систему узлов (или частиц), связанных друг с другом потенциалом или конструкцией, имеющими большую сдвиговую и изгибную жесткость по сравнению с нормальной. Предложено объяснение структуры жестких полимерных и металлических пен с отрицательным коэффициентом Пуассона, основанное на анализе упругого поведения тонких прослоек материала пены после потери устойчивости. Наиболее плотная случайная упаковка частиц определяется как геометрическими, так и механическими свойствами и соответствует точке перехода системы в твердое состояние.

Все тела состоят из частиц, взаимодействующих друг с другом за счет сил различной природы, описывающих потенциалами взаимодействия разного типа. При больших плотностях в конденсированном состоянии чрезвычайно важными становятся весьма жесткие силы отталкивания частиц друг от друга, которые в конце концов определяют некоторые важные свойства конденсированных тел, например кристаллическую структуру с ее дефектами и пр.

Чтобы проанализировать роль этих сил в поведении неупорядоченных стеклообразных или жидких тел, удобно воспользоваться моделями гранулированных тел (рис. 1, a), состоящих из ансамбля частиц, линейно-упруго

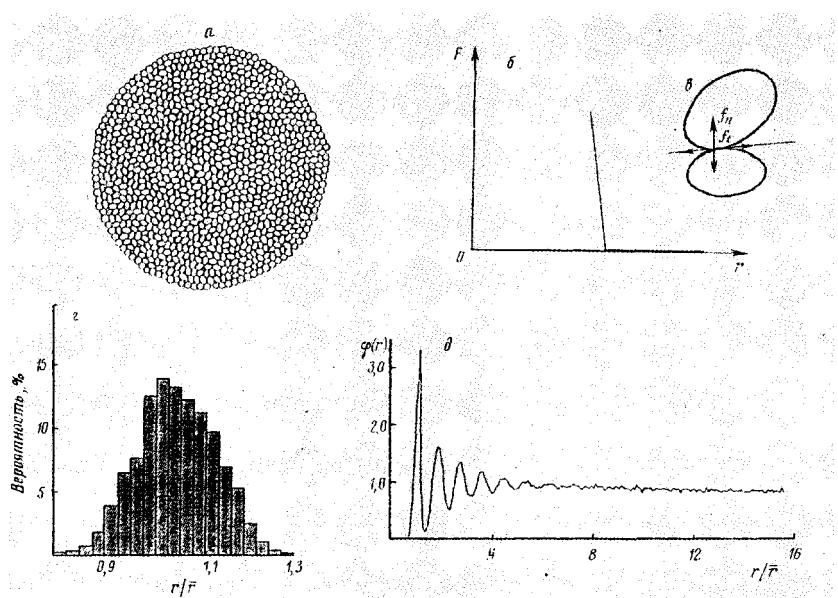


Рис. 1. Пример анализируемой гранулированной системы (а); зависимость действующих в контакте сил от расстояния между центрами частиц (б); схема нормальных  $f_n$  и тангенциальных  $f_t$  сил в контакте (в); функция распределения частиц по размерам (г) и нормированная радиальная функция распределения плотности (д)

взаимодействующих друг с другом только при непосредственном контакте. Зависимость силы отталкивания от расстояния приведена на рис. 1, б. Такое существенное упрощение взаимодействия позволяет выявить ряд общих закономерностей поведения неупорядоченных конденсированных тел. Кроме того, такой анализ представляет самостоятельный интерес для механики гранулированных систем — песка, грунта, сыпучих веществ, высоконаполненных композитов с твердыми дисперсными наполнителями и т. п.

К настоящему моменту разработаны некоторые аналитические и компьютерные приемы [1—12] для расчета механического поведения гранулированных тел, положенные в основу данной работы. При компьютерном моделировании решались уравнения движения для ансамбля ~ 1000 дискообразных или эллиптических твердых частиц на плоскости ( $2D$ ) или в объеме ( $3D$ ), взаимодействующих друг с другом в точках непосредственного контакта по закону линейной упругости в нормальном и тангенциальном направлениях в плоскости контакта (рис. 1, в). Заметим, что используемый потенциал (рис. 1, б) на самом деле в значительной степени нелинейный, поскольку при отрыве частиц друг от друга ( $r > r_1 + r_2$ , где  $r_1$  и  $r_2$  — радиусы частиц) взаимодействие прекращается в точке и сила становится равной нулю. Частицы на границе ансамбля смешались по закону, характерному для деформации сплошного твердого континуума. На каждом шагу достигалось состояние статического равновесия всех частиц благодаря введению в уравнения движения небольшого слагаемого вязкого затухания. Значение коэффициента в последнем выбиралось таким образом, чтобы оно не влияло на конечное состояние. При решении задачи находилось положение и смещение каждой частицы, число контактов частиц друг с другом и силы, действующие в каждом контакте, а также определялись средние и локальные напряжения и деформации. Использовалось сравнительное узкое  $0,8 < r/\bar{r} < 1,3$ , где  $\bar{r}$  — средний радиус) распределение по размерам

частиц (рис. 1, г), что позволило исключить кристаллизацию при формировании исходной системы, путем «сжатия» разреженного «газа» частиц. Неупорядоченность исходного состояния видна из радиальной функции распределения плотности (рис. 1, д). Средняя плотность изученных тел весьма велика (0,8—0,9).

### ЖИДКОЕ (СЫПУЧЕЕ) И ТВЕРДОЕ (СТЕКЛООБРАЗНОЕ) СОСТОЯНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ГРАНУЛИРОВАННЫХ ТЕЛ

При сравнении жидких и твердых аморфных тел обычно говорят о различии в релаксационных характеристиках: малые времена релаксации в жидком и очень большие в твердом состояниях. При этом предполагается, что стеклование (переход жидкость — стекло) является релаксационным переходом и зависит от постоянной времени измерительного метода или устройства. Попробуем подойти к этой проблеме с других позиций — статической механики. Тогда под жидкостью следует понимать состояние вещества, при котором тело способно сохранять объем и легко изменять форму тела, а под твердым стеклом — состояние вещества, при котором тело стремится сохранить как объем, так и форму при приложении внешних нагрузок. С точки зрения механики нам кажется наиболее логичным определить переход стекло — жидкость как обращение в нуль отношения  $\sigma_y/K$ , где  $\sigma_y$  — макроскопический предел текучести,  $K$  — объемный модуль материала. Мы пользуемся пределом текучести, а не модулем сдвига, поскольку речь идет о необратимом в условиях деформирования изменении формы. Такое определение означает, в частности, что сшитый каучук выше  $T_c$  находится в жидком состоянии, хотя и имеет небольшое, но конечное значение модуля сдвига.

Результаты компьютерного моделирования одноосного сжатия гранулированных тел показали, что они также могут находиться в двух разных состояниях: твердом (рис. 2, а, кривая 1) и жидким (сыпучем) (кривая 2). В данном случае переход от твердого к жидкому состоянию достигается изменением симметрии сил, действующих в местах контакта частиц для одного и того же ансамбля частиц: жидкое состояние — только нормальные к поверхности контакта силы; твердое — нормальные и тангенциальные. Для твердого гранулированного тела, как и для большинства молекулярных тел, наблюдается предел текучести на диаграмме сдвиговое напряжение — сдвиговая деформация (рис. 2, а, кривая 1), что указывает на наличие пластичности, на природе которой мы остановимся в следующем разделе.

Многочисленные компьютерные эксперименты показали, что переход стекло — жидкость наблюдается при различных условиях в зависимости от формы частиц (диски или эллипсы), от природы сил в контакте (только нормальные или нормальные и тангенциальные вместе), от размерности пространства и т. д. В частности, в 2D пространстве для дисков с нормальными силами переход наблюдался при плотности  $\rho \approx 0,8$ ; для эллипсов — при  $\rho \approx 0,9$ . Эта очень большая разница свидетельствует о том, что плотность (или свободный объем) не могут быть единственным параметром для однозначной характеристики этих состояний.

Кроме того, следует отметить, что рассматриваемая здесь система и наблюдаемый в ней переход стекло — жидкость не имеют никакого отношения к релаксационным процессам и жидкое состояние, если проводить аналогию с молекулярными телами, может существовать даже при абсолютном нуле при отсутствии каких-либо движений частиц (в классическом приближении). Поэтому необходимо сформулировать условия указанного перехода, используя представления статической механики. Важной идеей, позволившей решить данную задачу, стало представление о том, что со-

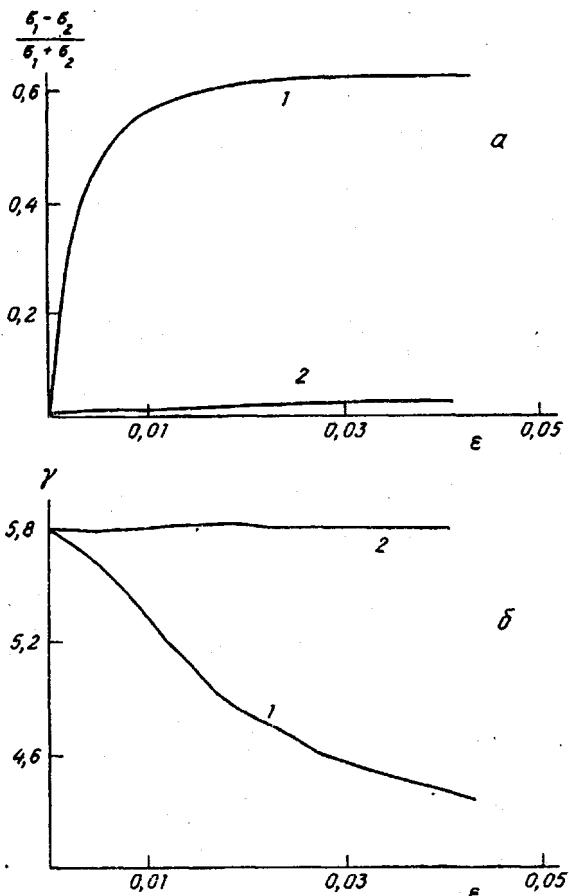


Рис. 2. Зависимость приведенного сдвигового напряжения  $(\sigma_1 - \sigma_2)/(\sigma_1 + \sigma_2)$  (а) и среднего числа контактов  $\gamma$  от сдвиговой деформации  $\epsilon$  (б) при одноосном сжатии твердого стеклообразного (1) и жидкого (2) образца из эллиптических частиц с эксцентриситетом  $e = 0,2$ . Отношение тангенциальной к нормальной жесткости  $\lambda = 1$  (1) и 0 (2)

стояние системы определяется числом контактов частиц друг с другом. Отметим принципиальное отличие числа контактов каждой частицы с ее соседями от общепринятой характеристики твердых тел — координационного числа, т. е. числа ближайших соседей. Не со всеми частицами в первой координационной сфере имеется непосредственный контакт и, следовательно, взаимодействие. Это отличие существенно усиливается при деформации тела, как это будет видно в следующем разделе.

Пусть тело состоит из  $N$  частиц, взаимодействующих только при непосредственном контакте,  $\gamma$  — среднее число контактов в расчете на одну частицу. При соприкосновении абсолютно твердых тел неизвестными, которые необходимо определить, являются силы в контактах, а уравнения для их определения — уравнения равновесия для проекций сил и моментов сил.

При равенстве числа неизвестных и уравнений, что, по нашему предположению, соответствует критическому значению числа контактов  $\gamma^*$ , система находится в статически определимом состоянии и можно найти все неизвестные.

В табл. 1 представлены различные варианты систем на плоскости ( $2D$ ) и в пространстве ( $3D$ ).

Таблица 1

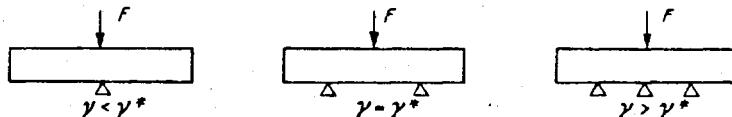
Данные для определения критического числа контактов  $\gamma^*$ 

Размерность пространства	Форма частиц	Действующие силы	Число неизвестных сил	Число уравнений равновесия	Примечание	$\gamma^*$
2D	Диск	Нормальные	$\gamma N/2$	$2N$	Проекции сил на два направления	4
2D	»	Нормальные и тангенциальные	$\gamma N$	$3N$	Проекции сил на два направления и момент сил	3
2D	Эллипс	Нормальные	$\gamma N/2$	$3N$	То же	6
2D	»	Нормальные и тангенциальные	$\gamma N$	$3N$	»	3
3D	Сфера	Нормальные	$\gamma N/2$	$3N$	Проекции сил на три направления	6
3D	»	Нормальные и тангенциальные	$3\gamma N/2$	$6N$	Проекции сил и моментов сил на три направления	4
3D	Эллипсоид	Нормальные	$\gamma N/2$	$6N$	То же	12
3D	»	Нормальные и тангенциальные	$3\gamma N/2$	$6N$	»	4

Примечание. Эллипсоид с тремя различными осями или тело произвольной формы.

При  $\gamma < \gamma^*$  неизвестных меньше, чем уравнений и система находится в неустойчивом или нестабильном состоянии и легко подстраивается под изменение границы, т. е. форма тела изменяется практически без внешних сил.

При  $\gamma > \gamma^*$  система находится в статически неопределенном, но в очень устойчивом состоянии, причем система имеет возможность, напротив, подстраивать силы в контактах под изменение внешних условий (приложение нагрузки к внешнему контуру тела) без существенного изменения положения частиц, т. е. почти без изменения формы тела. Эти три ситуации приведены ниже.



Ряд компьютерных экспериментов подтвердил, что именно при  $\gamma = \gamma^*$  наблюдается переход от твердого ( $\gamma > \gamma^*$ ) к жидкому ( $\gamma < \gamma^*$ ) состоянию. Подтверждением могут служить результаты, представленные на рис. 3, где показана связь внешнего давления с числом контактов при сжатии двух разных систем — плоского (2D) ансамбля гладких (только нормальные силы

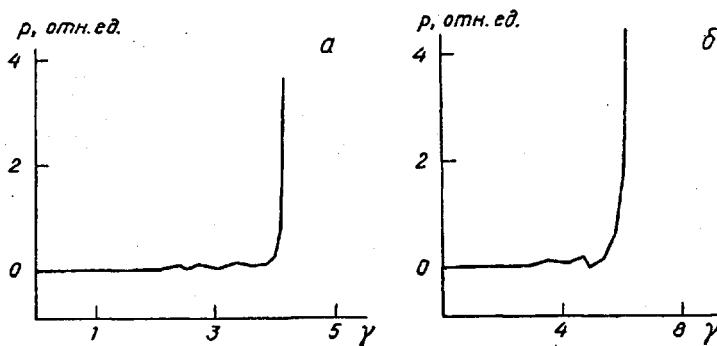


Рис. 3. Связь внешнего давления  $p$  и числа контактов  $\gamma$  для системы гладких ( $\lambda = 0$ ) дисков (2D) (а) и системы гладких сфер (3D) (б)

в контактах) дисков (а) и пространственной (3D) системы гладких сфер (б). Как видно, затвердевание системы, т. е. резкое увеличение давления, наблюдается при  $\gamma = 4$  для дисков и при  $\gamma = 6$  для сфер. Это и есть точка перехода жидкость — стекло, что находится в прекрасном согласии с данными табл. 1.

Другим подтверждением справедливости предложенного критерия перехода являются результаты, приведенные на рис. 2. Анализируемая система состоит из эллиптических частиц, для которых в соответствии с табл. 1 критические значения числа контактов  $\gamma_1^* = 6$  для гладких эллипсов и  $\gamma_2^* = 3$  для шероховатых эллипсов (в контактах действуют как нормальные, так и тангенциальные силы). Число контактов в исходной системе  $\gamma_0 = 5,8$ . Соответственно система из гладких эллипсов ( $\gamma_0 < \gamma_1^*$ ) ведет себя как жидкость, а система из шероховатых эллипсов ( $\gamma_0 > \gamma_2^*$ ) — как твердое тело.

Критерий перехода жидкость — стекло, который мы сформулировали с позиций механики как условие статически определимой задачи, можно переформулировать с точки зрения термодинамики как равенство числа поступательных и вращательных степеней свободы (число уравнений равновесия, табл. 1), с одной стороны, и числа ограничительных условий, в качестве которых в данном случае выступают силы в контактах (число неизвестных сил), с другой. Главным обстоятельством здесь является то, что только непосредственный контакт ограничивает движение частицы. Это в свою очередь обязано форме потенциала взаимодействия — резкий переход от очень большой жесткости к нулевой в точке отрыва частиц друг от друга.

Отметим, два важных, на наш взгляд, обстоятельства, касающихся описываемого нами перехода жидкость — стекло.

1. Плотность системы в точке перехода не является каким-то характерным абсолютным параметром, а зависит от формы частиц и природы контактных сил. Так, мы уже упоминали, что плотность системы гладких дисков на плоскости в точке перехода  $\approx 0,8$ , а гладких эллипсов  $\approx 0,9$ . Могут быть приведены и другие примеры, демонстрирующие неадекватность простых представлений свободного объема или критической концентрации пор.

2. Как было видно из представленных результатов, изменение симметрии формы частиц (от дисков к эллипсам) или изменение симметрии действующих в контакте сил (от нормальных к произвольно направленным) существенно и скачкообразно изменяет характеристики системы (плотность, число контактов и пр.) в точке перехода. Это позволяет проводить аналогию рассматриваемого нерелаксационного перехода жидкость — стекло с термодинамическим фазовым переходом второго рода.

Рассмотрим теперь состояние полимерного вещества. Для этого соединим

Таблица 2

## Критические числа контактов для полимерных систем

Размерность пространства	Жидкость цепи	Критическое число контактов на цепь $\gamma_n^*$	Критическое число контактов на звено $\gamma_1^*$
2D	Гибкая	$2n + 2$	4
2D	Жесткая	6	$2 + 4/n$
2D	Жесткая с гибкими связями	$6 - 4\alpha + 2\alpha n$	$2(1 + \alpha) + 4(1 - \alpha)/n$
3D	Гибкая	$4n + 2$	6
3D	Полужесткая	$2n + 6$	$4 + 4/n$
3D	Жесткая	12 (10)	$2 + 10/n$
3D	Жесткая с гибкими связями	$2 + 10(1 - \alpha) + 4\alpha n$	$2 + 4\alpha + 10(1 - \alpha)/n$
3D	Жесткая с развязками ограниченной гибкости	$2 + 10(1 - \alpha\beta) + 4\alpha\beta n$	$2 + 4\alpha\beta + 10(1 - \alpha\beta)/n$

Примечание.  $n$  — число звеньев в цепи;  $0 \leq \alpha \leq 1$  — доля гибких (полугибких) связей;  $0 \leq \beta \leq 1$  — степень гибкости связки.

частицы тела, представленного на рис. 1, *a*, в  $n$ -меры с помощью жестких связей. Предположим, что частицы — сферические (или диски) и силы в контактах только нормальные (центральные). Связи, соединяющие частицы в макромеры, накладывают дополнительные ограничения на движение частиц, уменьшая число степеней свободы. Приведем пример расчета условий перехода жидкость — стекло для  $n$ -мера на плоскости (2D). Число степеней свободы  $m$  такой макрочастицы с жесткими связями и нефиксированными углами между ними (свободносочлененная цепь) равно:  $m = 2n - (n - 1) = n + 1$ , где  $2n$  — число степеней свободы до соединения в цепь, а  $(n - 1)$  — число связей. Приравнивая число степеней свободы в цепи  $m$  числу ограничений, равному в данном случае числу контактов  $\gamma_n^*/2$ , получаем условие перехода:  $\gamma_n^* = 2n + 2$ ; здесь  $\gamma_n^*$  — число контактов в расчете на весь  $n$ -мер. Число контактов в расчете на одно звено цепи  $\gamma_1^*$  связано с числом контактов на  $n$ -мер соотношением

$$\gamma_n^* = 2(\gamma_1^* - 1) + (n - 2)(\gamma_1^* - 2) = n(\gamma_1^* - 2) + 2$$

Тогда имеем для условия перехода  $\gamma_1^* = 4$  независимо от длины цепи  $n$ . Таким образом, оказалось, что при соединении частиц в свободносочлененную цепь условие перехода не меняется. Дело в том, что два контакта, превратившиеся при формировании  $n$ -мера в жесткие связи, точно также ограничивают подвижность, как и образовавшиеся две связи.

Ситуация меняется, если зафиксировать угол между связями в  $n$ -мере. Например, для жесткого  $n$ -мера на плоскости (2D) имеем:  $m = 2n - (n - 1) - (n - 2) = 3$ , и условия перехода принимают вид  $\gamma_n^* = 6$  и  $\gamma_1^* = 2 + 4/n$ . Последнее выражение означает, что полимерные молекулы с жесткими углами склеиваются при значительно меньших величинах  $\gamma_1^*$  и значит при меньших плотностях. Нами был рассмотрен ряд вариантов цепей различной жесткости на плоскости (2D) и в пространстве (3D); результаты анализа приведены в табл. 2.

В трехмерном пространстве (3D) кроме валентного угла мы рассматривали угол внутреннего вращения, и «полужесткой» цепью мы назвали  $n$ -мер,

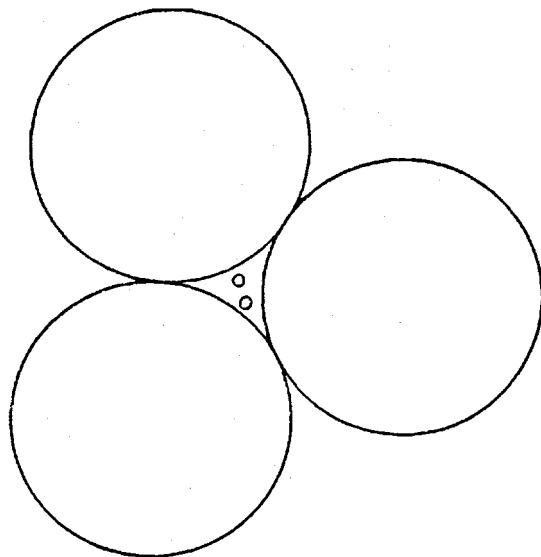


Рис. 4. Схема двухкомпонентной системы дисков

котором валентный угол фиксирован, а угол внутреннего вращения свободен. Кроме того, изучили вариант жесткой цепи с гибкими или ограниченно жесткими развязками.

Таким образом, условия перехода жидкость — стекло в полимере зависят как от межмолекулярных взаимодействий, так и от внутримолекулярной жесткости цепи, что, конечно же, хорошо известно и согласуется также с рассматриваемой моделью.

Если говорить о влиянии температуры в молекулярной динамической системе на ее состояние (жидкость или стекло) в рамках предлагаемого подхода, то оно двояко. С одной стороны, при увеличении температуры уменьшается плотность и, следовательно, среднее число контактов. С другой стороны, от температуры зависит свобода внутренних вращений, что также значительно сказывается на условии перехода и состоянии системы. По-видимому, влияние продолжительности скорости испытания может быть понято аналогичным образом в рамках обсуждаемой модели. Впрочем, здесь еще очень много надо сделать для настоящего понимания проблемы стеклования в полимерных системах.

В заключении этого раздела остановимся на простых, но многокомпонентных гранулированных системах. До сих пор речь шла о системах со сравнительно узким распределением частиц по размерам и, что особенно важно, с узким распределением частиц по числу контактов в исходном (до начала деформации) состоянии. Однако можно себе представить и двухкомпонентные и более сложные гранулированные системы. В таких системах, очевидно, теряет смысл анализ среднего значения числа контактов  $\bar{y}$ , но следует рассматривать поведение двух (или более) подсистем<sup>1</sup> раздельно. В качестве примера приведем смесь большого количества крупных сферических частиц (или дисков), имеющих собственное значение  $y > y^*$ , и небольшого количества мелких ( $r_2/r_1 < 0,1$ ) сферических частиц (дисков), находящихся в полостях между большими и имеющих свое значение  $y < y^*$  (рис. 4). Такая система характеризуется широкой, в данном случае бимодальной функцией распределения по числу контактов. Ее следует считать «двухфазной» (этот термин в данном случае не следует понимать в принятом смысле, подразумевающем существование двух отдельных фаз с границей раздела), причем большие частицы находятся в твердом стеклообразном,

а мелкие — в жидким состояниях. При изменении внешних условий (гидростатического давления) для такой системы будет наблюдаться два различных перехода жидкость — стекло для двух подсистем. Описанный эффект также относится к геометрическим и обязан существованию жесткого потенциала.

Поведение такого рода систем, количественное формулирование критерия возможности разделения на подсистемы, анализ взаимного влияния на характеристики подсистем, в том числе положения переходов жидкость — стекло, анализ возможности взаимного растворения, образования смешанных однокомпонентных систем представляют, на наш взгляд, большой интерес и требуют дальнейших исследований. Укажем лишь на интересную аналогию, существующую в молекулярных системах. Для полимеров характерно наличие большого количества, так называемых релаксационных переходов ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и т. п.). Самый высокотемпературный ( $\alpha$ -переход) относят обычно к стеклованию полимера, другие — к поведению отдельных молекулярных групп (боковых и т. д.). Сформулированные выше идеи могут помочь в разработке теории этих переходов.

### ПРИРОДА ПЛАСТИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ

Способность к пластическим деформациям является одной из наиболее характерных и важнейших свойств практически всех твердых тел, как кристаллических, так и аморфных. Именно пластические деформации определяют многие прочностные характеристики материала: стойкость к распространению трещин (вязкость разрушения), ударную и усталостную прочность и другие.

До сих пор был известен лишь один микроскопический механизм, ответственный за пластические деформации в кристаллических телах, — размножение и движение дислокаций. Схожесть макроскопических проявлений пластической деформации кристаллических и аморфных тел привела к попытке распространения дислокационных моделей и на аморфные тела [13, 14], что, естественно, вызывает принципиальные возражения.

С помощью метода компьютерного моделирования нами идентифицирован иной механизм пластической деформации твердых неупорядоченных гранулированных систем. Суть механизма, как будет видно ниже, состоит в изменении среднего числа контактов  $\gamma$  (числа контактов, но не числа соседних частиц!) по ходу деформации при наличии сдвиговой компоненты, а также изменении пространственного распределения частиц с различным (меньшим  $\gamma$ ) числом контактов. Дальнейшие исследования помогут выяснить возможность распространения сформулированных представлений на механизм пластической деформации других неупорядоченных тел.

Рассмотрим подробнее процесс деформации тела из гранулированного материала при  $\gamma > \gamma^*$ , т. е. в твердом стеклообразном состоянии. При приложении одноосной сжимающей, сдвиговой или более сложной нагрузки вначале при малых деформациях наблюдается упругость, а затем при дальнейшем деформировании переход в пластическое состояние. Сдвиговая компонента среднего напряжения в зависимости от сдвиговой деформации (или диаграмма  $\sigma - \epsilon$ ) имеет характерный для большинства твердых тел вид «запределяющейся» кривой или кривой с максимумом (рис. 5, а). До того, как обсуждать причину «размягчения» материала, т. е. уменьшения мгновенного модуля, обеспечивающую в конце концов переход к пластическому состоянию, остановимся на характерном для большинства материалов макроскопическом проявлении пластичности — неоднородной деформации в виде полос сдвига. Как было показано ранее [15], появление полос сдвига является следствием наличия максимума на диаграмме

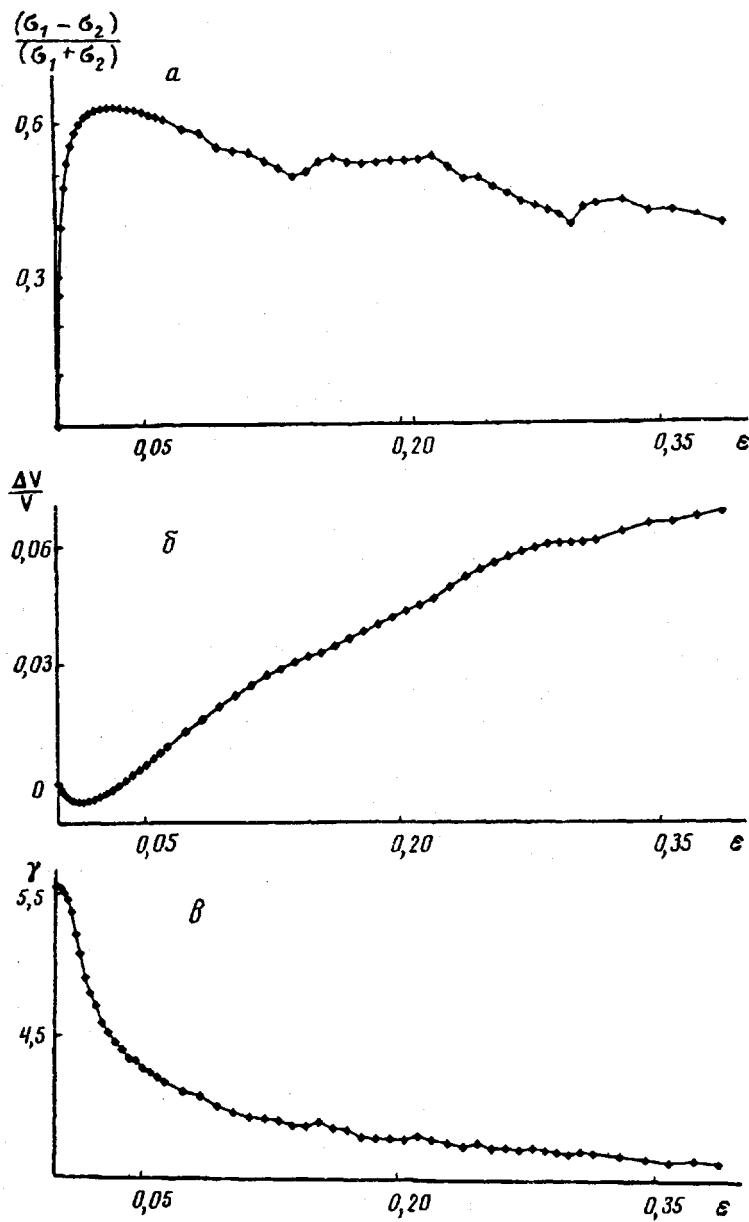


Рис. 5. Зависимость приведенного сдвигового напряжения  $(\sigma_1 - \sigma_2)/(\sigma_1 + \sigma_2)$  (а), объема образца  $\Delta V/V$  (б) и среднего числа контактов  $\gamma$  (в) от сдвиговой деформации  $\varepsilon$  при одноосном сжатии системы эллиптических частиц,  $e = 0,2$ ;  $\lambda = 1$

$\sigma - \varepsilon$ . Вблизи максимума однородная деформация образца (при однородных граничных условиях, например при одноосном сжатии) становится неустойчивой и локализуется в виде полос сдвига в направлении приблизительно вдоль максимальных касательных напряжений.

Таким образом, независимо от микроскопического механизма пластичности (еще один вариант локализации деформации наблюдается при потере устойчивости в сотовых конструкциях [32]) должна иметь место неоднородная деформация в виде полос сдвига и для анализируемых здесь гранулированных тел. Действительно, появление и развитие неоднородной

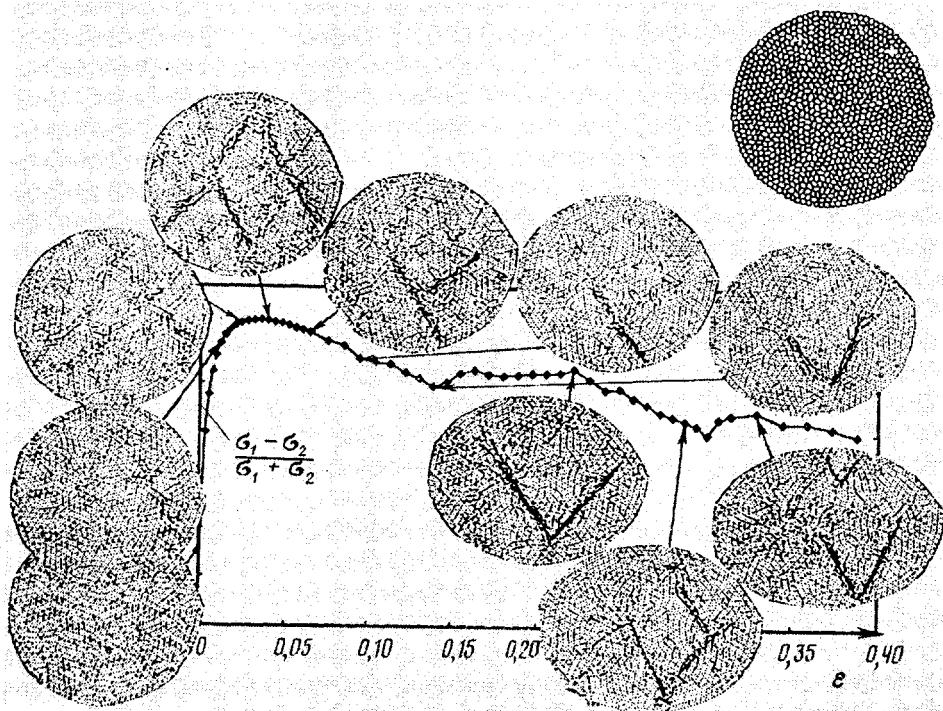


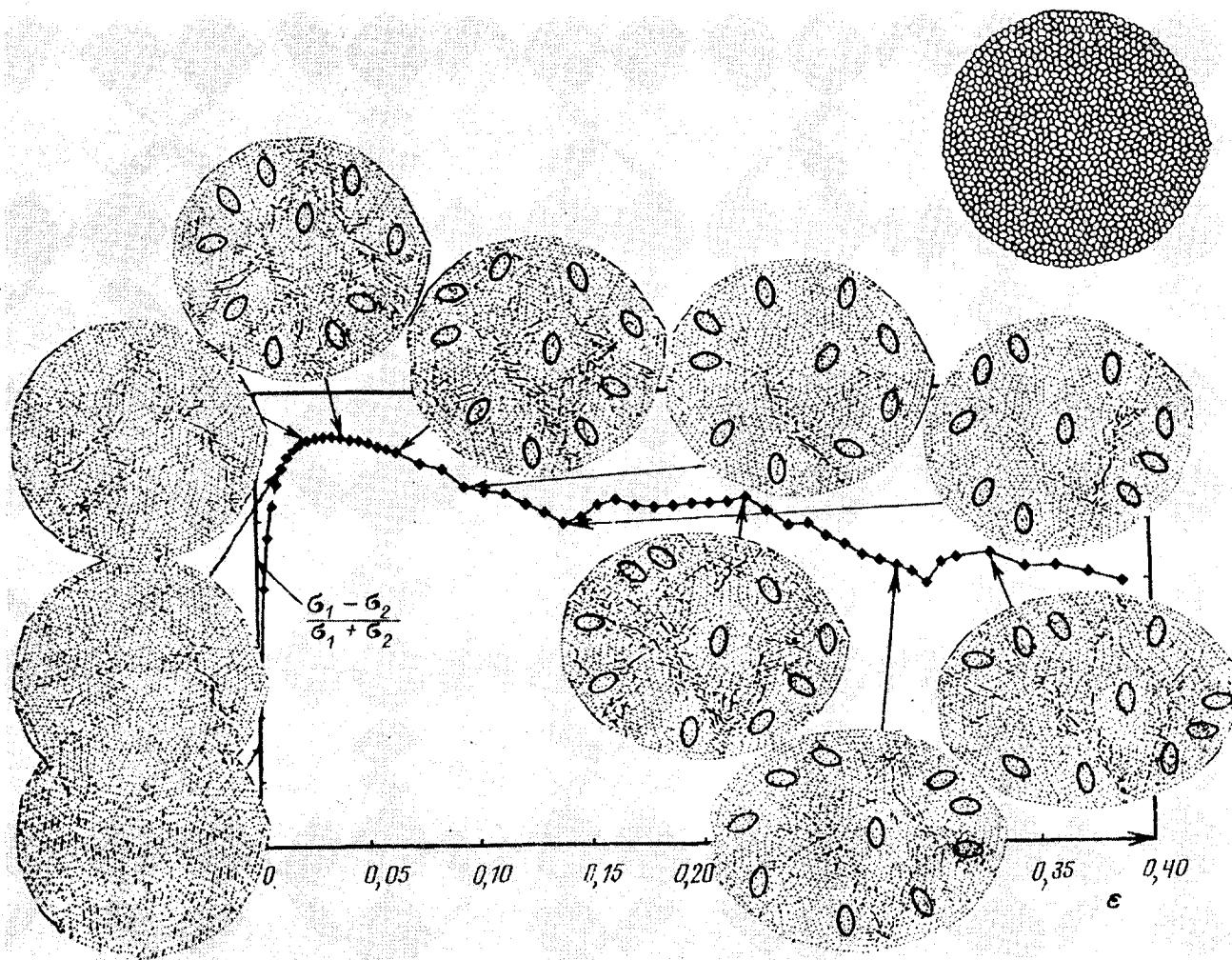
Рис. 6. Распределение локальных мгновенных деформаций в образце на различных стадиях одноосного сжатия. Направление и длина каждой черточки соответствует направлению и величине смещения двух соседних частиц друг относительно друга на одном шаге деформации. Стрелками показаны места на диаграмме сжатия, соответствующие изображенной картине распределения деформаций. Условия эксперимента приведены в подписи к рис. 5

деформации в форме полос сдвига наблюдается в области пластического деформирования (рис. 6). После того, как полоса сдвига пересекает весь образец или полосы встречаются друг с другом, деформация внутри этих полос прекращается и возникают новые полосы сдвига в других местах образца (рис. 6). Такая картина определяется особенностю конкретного способа приложения внешней нагрузки — на границе тела задаются смещения частиц в предположении однородности деформации всего тела.

В результате такой неоднородной деформации образец приобретает доменную структуру (рис. 7), и общая пластическая деформация образца осуществляется в основном путем скольжения доменов друг относительно друга по полосам сдвига между ними. Кроме того, при встрече полос сдвига друг с другом образуются вихри деформации (рис. 8), напоминающие турбулентные вихри в потоках жидкости. Наличие таких вихрей, которые, очевидно, при больших сдвиговых деформациях будут играть значительную роль, может объяснить большую интенсивность процессов перемешивания твердого вещества и смещения двух твердых веществ, необходимых для образования сплавов, твердых растворов или протекания химических реакций при высоких давлениях в сочетании со сдвиговыми деформациями [16, 17].

Важно отметить, что по ходу пластической деформации вплоть до  $\epsilon = 40\%$  (максимальный уровень, достигнутый в наших экспериментах) не наблюдается ни одного случая смены соседей ни у одной частицы. Тем более этого нет в начале пластической деформации при  $\epsilon = 1-3\%$ . Во всей изученной области деформаций имеется лишь сравнительно небольшое смещение положений частиц друг относительно друга, т. е. некоторое

Рис. 7. Распределение локальных мгновенных деформаций в образце на разных стадиях сжатия. Обведены слабо деформирующиеся области (домены). Условия те же, что на рис. 5



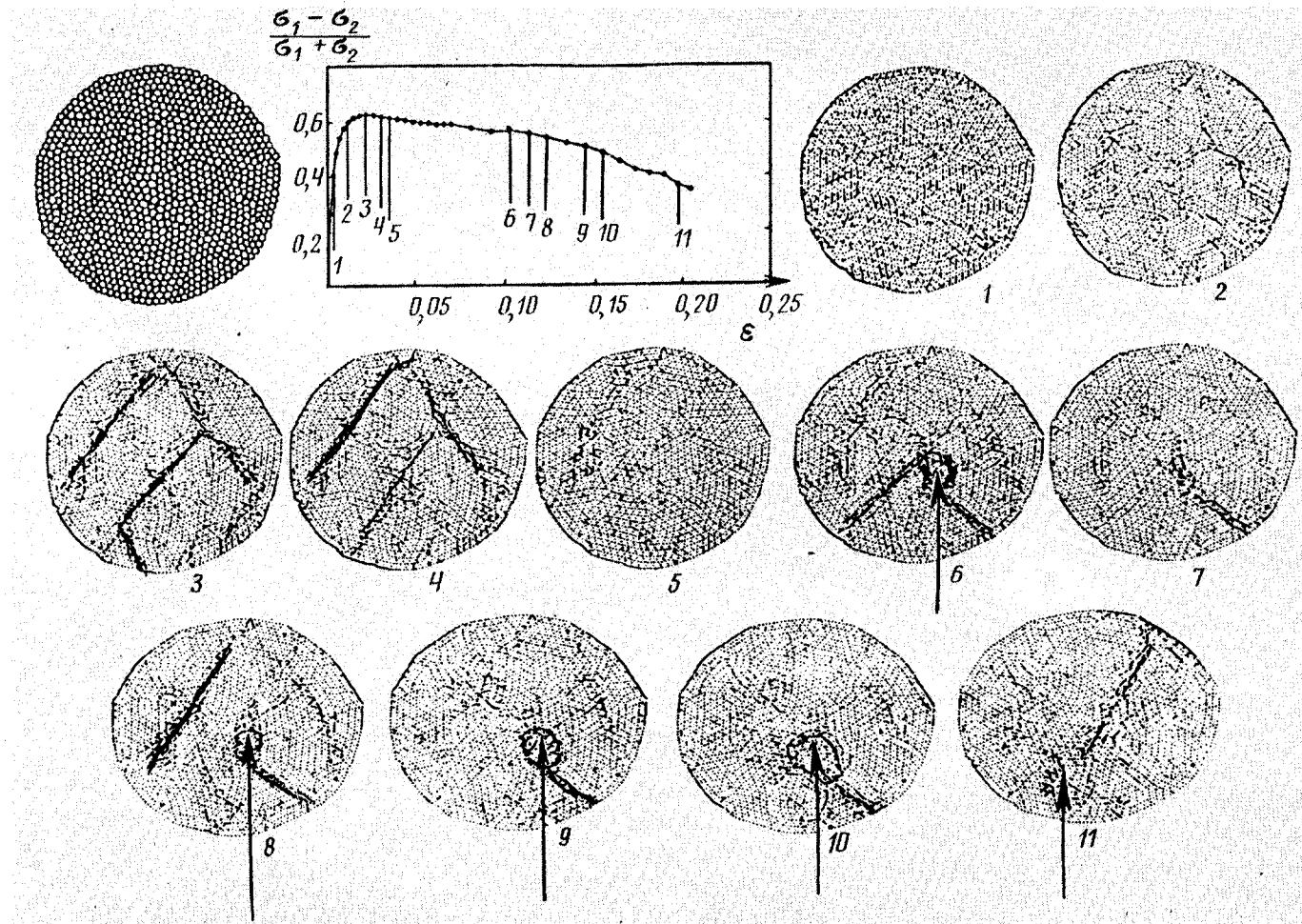


Рис. 8. Распределение локальных деформаций на различных стадиях движения полос сдвига. Стрелками обозначены области вихрей. Дискообразные частицы ( $e = 0$ ),  $\lambda = 1$

изменение формы первой координационной сферы, поэтому о механизме перескоков частиц из одного положения равновесия в другое, через некий барьер (теории типа Эйринга, свободного объема и т. д.) не может быть и речи. Очень важно также, что число соседей в первой координационной сфере у каждой частицы также не меняется во всей области пластической деформации. Возникает вопрос, в чем же причина «размягчения» материала?

Оказалось, что причина «размягчения» твердого гранулированного тела состоит в изменении числа контактов частиц друг с другом, как и причина рассмотренного выше перехода жидкость — стекло. По мере приложения сжимающей или сдвиговой нагрузки к такой системе (твердый стеклообразный образец с  $\gamma > \gamma^*$ ) происходит значительное уменьшение числа контактов (рис. 5, а). При одноосном сжатии объем системы сначала несколько уменьшается, а затем растет (рис. 5, б). Среднее число контактов стремится к значению  $\gamma^*$ . Заметим, что при деформации в жидком состоянии ( $\gamma < \gamma^*$ ) число контактов не изменяется в процессе деформации (рис. 2, б, кривая 2).

Важно, что начало пластической деформации в твердом состоянии, положение максимума на диаграмме  $\sigma - \epsilon$  и образование полос сдвига наблюдается тогда, когда число контактов еще значительно превышает величину  $\gamma^*$ . Существенным оказывается пространственное распределение частиц с малым числом контактов ( $\gamma \leq \gamma^*$ ). В начальной упругой стадии процесса деформации образование частиц с  $\gamma \leq \gamma^*$  происходит случайно и равномерно по объему образца. Затем эти частицы начинают группироваться, формируя линейные структуры в направлении, близком к направлению максимальной сдвиговой нагрузки (рис. 9, б). Именно вдоль этих структур и локализуются максимальные сдвиговые деформации (рис. 9, а). Это явление можно назвать наведенной искусственной переколяцией. Характерно, что оставшиеся неразорванными контакты внутри полосы сдвига направлены главным образом поперек оси полосы сдвига (рис. 9, в) так, что силы в контактах не препятствуют сдвигу одной части образца относительно другой вдоль этой полосы.

Таким образом, как переход жидкость — стекло, так и пластическая деформация в твердом неупорядоченном (стекло) состоянии определяются геометрическими и механическими причинами — числом контактов между частицами и существованием критического значения числа контактов  $\gamma^*$ . Очевидно, что в описанных системах для существования этих явлений важно наличие очень жесткого потенциала отталкивания.

Здесь же, по-видимому, следует указать, что при наличии достаточно широкого распределения частиц по числу контактов под точкой перехода жидкость — стекло следует понимать не равенство среднего числа контактов критическому ( $\gamma = \gamma^*$ ), а равенство переколяционному пределу по частицам с числом контактов более критического ( $\gamma \geq \gamma^*$ ).

В литературе [18—24] давно обсуждается вопрос о возможной применимости геометрических представлений для разработки теории жидкости. Действительно, любой потенциал взаимодействия в молекулярных системах можно разделить на две части — левая «жесткая» ветвь отталкивания и правая «мягкая» ветвь притяжения. Наличие правой ветви объясняет такие явления, как переход газ — жидкость, существование жидкого состояния, критических точек и пр. Наличие «жесткой» ветви, на наш взгляд, поможет объяснить переход жидкость — стекло, механическое поведение стекол и т. д., так же как именно эта часть потенциала во многом определяет структуру, дефекты и механические свойства кристаллов.

Наиболее сложный вопрос при создании геометрической теории стекол и жидкостей в рамках такого подхода — определение понятия жесткий

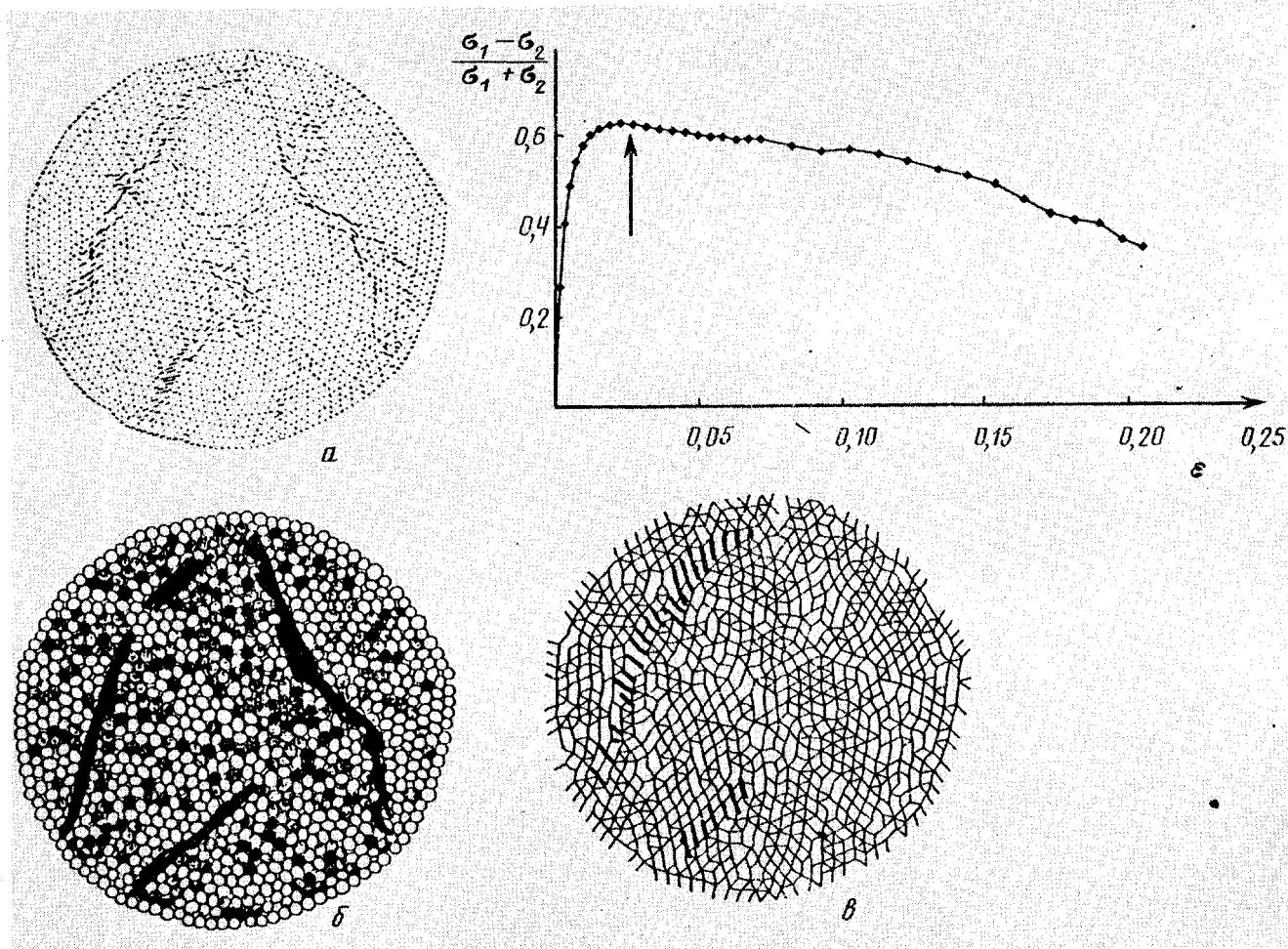


Рис. 9. Пространственные распределения локальных деформаций (а), частиц (темного цвета) с числом контактов  $\gamma < \gamma^* = 3$  (б) и направления всех контактов частиц в образце (в). На диаграмме сжатия стрелкой отмечено место, соответствующее распределениям а, б и в. Эллиптические частицы с  $e = 0,1$ ;  $\lambda = 1$

непосредственный контакт частиц, число таких контактов данной частицы и зависимость их от внешних условий: температуры, давления и т. п. Здесь очень важно, что построение полигонов и их анализ [23] должны быть основаны на понятии «прямой контакт», а не просто «соседняя частица».

### ОТРИЦАТЕЛЬНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ПУАССОНА

Анализ механики гранулированных систем оказался весьма интересным и для рассмотрения проблемы отрицательного коэффициента Пуассона  $\nu$  изотропных материалов и позволил найти возможные классы структур с  $\nu < 0$ .

Хорошо известно [25], что ограничения на коэффициент Пуассона, которые накладывают общие законы термодинамики изотропных тел, имеют вид  $-1 < \nu < 0,5$ . Это вытекает, например, из очевидного требования положительности модулей сдвига  $G$  и объемного сжатия  $K$  и следующего соотношения теории упругости:

$$K/G = 2(1 + \nu)/3(1 - 2\nu)$$

Это следствие механической устойчивости тела, положительности упругой энергии под действием любой внешней нагрузки.

Однако окружающая нас природа не давала нам примеров изотропных материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона. Верхним пределом  $\nu \approx 0,5$  обладает резина, а известным нижним для изотропных материалов  $\nu \approx 0$  – натуральная пробка. Так что фактические пределы для коэффициента Пуассона считались  $0 < \nu < 0,5$ . Для анизотропных кристаллов [26–29] и композитов [30] известны случаи отрицательных коэффициентов Пуассона. Различные варианты конструкций, состоящих из жестких ограничительных элементов и упругих пружин, представлены в работе [31]. В работах [32, 33] приведен пример анизотропного микропористого полимера (ПТФЭ), демонстрирующего в определенном диапазоне удлинений при одноосном растяжении большие отрицательные значения коэффициента Пуассона ( $\nu \approx -12$ ) и дана структурная интерпретация этого явления, основанная на идее вращения анизотропных элементов (пор) при участии жестких стрингеров, в качестве которых выступают полимерные фибрилы. Варианты сотовых конструкций с отрицательным коэффициентом Пуассона приведены в работе [34]. И в этом случае эффект  $\nu < 0$  обеспечивается фактически наличием жестких стрингеров. В работе [35] показано, что коэффициент Пуассона плоской правильной сотовой конструкции из упругих стержней в зависимости от соотношения жесткости стержня и угла между соседними стержнями может принимать значение  $-1/3 < \nu < 1$ . Возможны и другие варианты анизотропных конструкций с  $\nu < 0$ . Например, конструкция, представленная на рис. 10, может, иметь любой отрицательный коэффициент Пуассона в одном из направлений в зависимости от величины угла  $\theta$ .

Недавно [36, 37] появилось сообщение о синтезе специальным способом полимерного пеноматериала с коэффициентом Пуассона  $\nu = -0,7$ . Однако объяснение этого явления, данное в работах [36, 37] и основанное на той же идее жестких стрингеров и вогнутой сотовой структуры [34] («re-entrant» structure, рис. 11), нам кажется не единственным и не лучшим. Ниже мы рассмотрим другие возможные структурные интерпретации материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона.

Заметим, что тела из материала с  $\nu = 0,5$  (например, резина) сохраняют в процессе деформации свой объем, изменения форму. Тела из гипотетического материала с коэффициентом Пуассона  $\nu = -1$  должны сохранять форму, существенно изменяя объем при деформации. Такие материалы могли бы

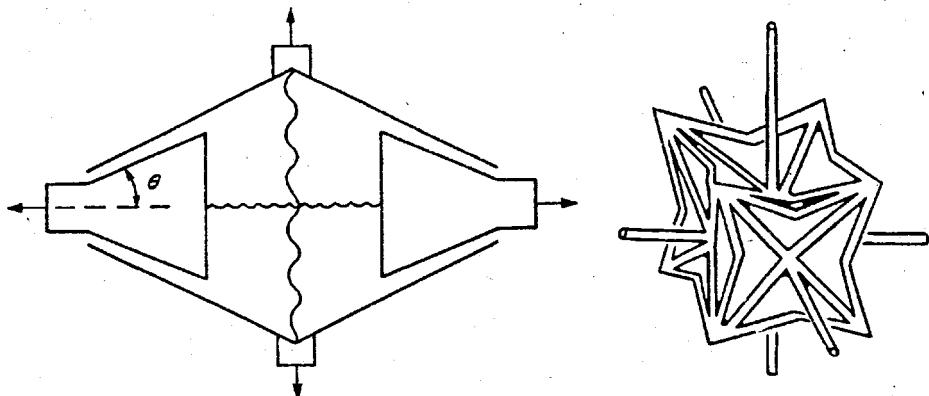


Рис. 10. Пример конструкции с произвольным коэффициентом Пуассона в одном из направлений

Рис. 11. Идеализированный элемент структуры пеноматериала с  $\nu < 0$ , предложенный в работах [36, 37]

представить большой практический интерес. Например, они могли бы быть прекрасными герметиками, иметь существенно большее, чем обычные материалы, сопротивление внедрению в них других тел и распространению трещин (высокую вязкость разрушения) и т. д.

Впервые о возможности существования тел с отрицательным коэффициентом Пуассона было сообщено в работе [4], где был также дан анализ необходимых для этого условий. Было рассмотрено механическое поведение случайно упакованных сфер (или дисков в двумерном пространстве), взаимодействующих друг с другом в месте контакта за счет сил двух типов: нормальных к плоскости контакта (центральных) и тангенциальных (трение) (рис. 12). Предполагалось, что нормальные  $f_n$  и тангенциальные  $f_t$  силы пропорциональны соответствующим смещениям ( $\delta_n, \delta_t$ ) от положения равновесия  $f_n = k_n \delta_n$  и  $f_t = k_t \delta_t$ , где  $k_n$  и  $k_t$  – нормальная и тангенциальная жесткости. Это линейное приближение. Было показано, что для такого тела коэффициент Пуассона зависит от отношения тангенциальной и нормальной жесткостей,  $\lambda = k_t/k_n$  и равен

$$\nu = (1 - \lambda)/(4 + \lambda) \quad (1)$$

для трехмерного и

$$\nu = (1 - \lambda)/(3 + \lambda) \quad (2)$$

для двумерного тела.

Затем этот результат был подтвержден методом компьютерного моделирования для двумерного случая [8]. При  $\lambda = 0$   $\nu = 0,25$ , что совпадает с результатом, полученным еще самим Пуассоном для ансамбля частиц с центральными силами. С ростом  $\lambda$  коэффициент Пуассона уменьшается, при  $\lambda = 1$   $\nu = 0$ , а при  $\lambda \rightarrow \infty$   $\nu$  стремится к  $-1$ . Этот результат может быть легко понят, если рассмотреть изменение треугольника, соединяющего центры соседних взаимодействующих частиц (рис. 12), в процессе деформации всего тела. Большое значение  $\lambda$ , т. е. высокая тангенциальная жесткость по сравнению с нормальной, соответствует тому, что при любой деформации должны сохраняться углы рассматриваемого треугольника. Сохранение углов треугольника при деформации означает, что изменение всех сторон пропорциональны (условие подобия), а это в свою очередь соответствует тому, что  $\nu = -1$  для такого тела. Приведенное рассуждение можно распространить на все тело только в том случае, если все оно состоит сплошь из связанных треугольников. Действительно, результаты компьютерного моделирования

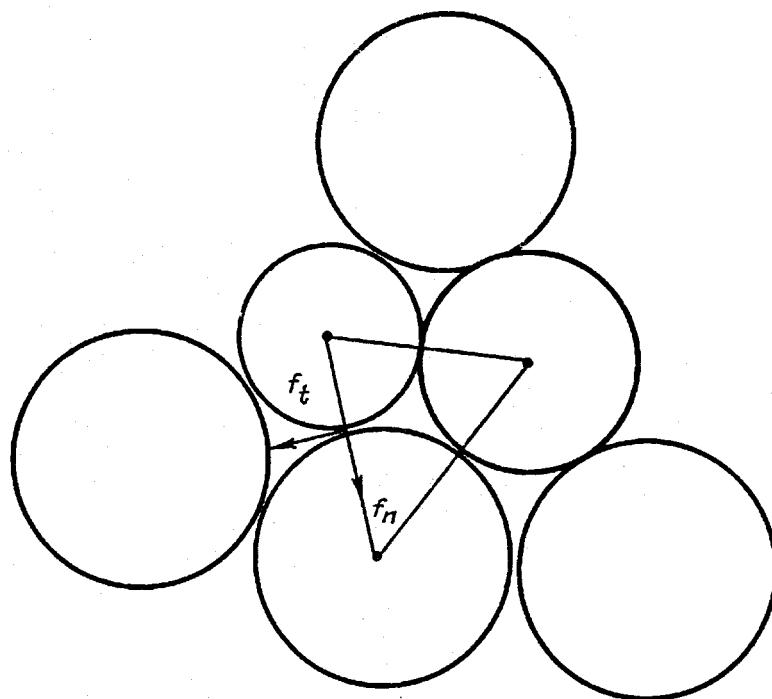


Рис. 12. Схема тела, состоящего из взаимодействующих частиц.

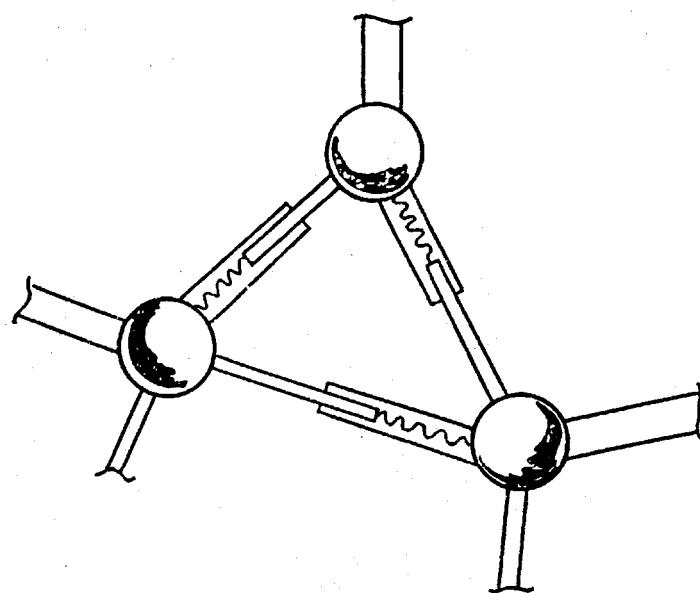


Рис. 13. Элемент конструкции с  $\nu = -1$

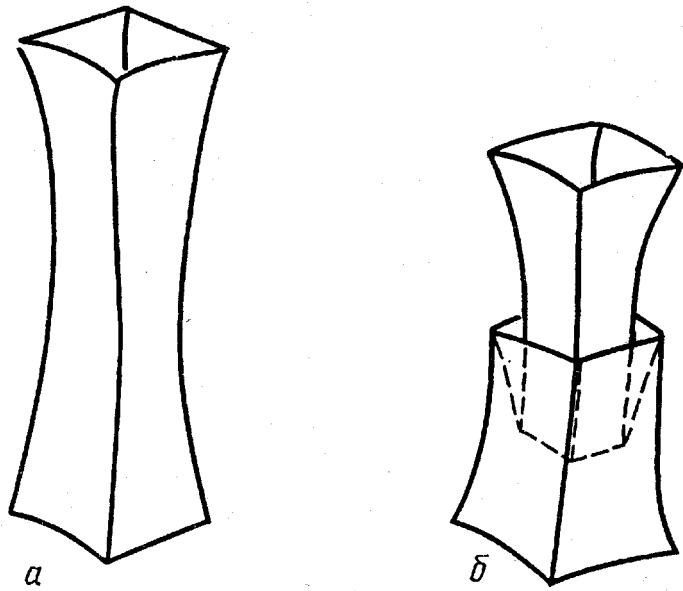


Рис. 14. Схема элемента структуры пеноматериала до (а) и после трехосного сжатия (б)

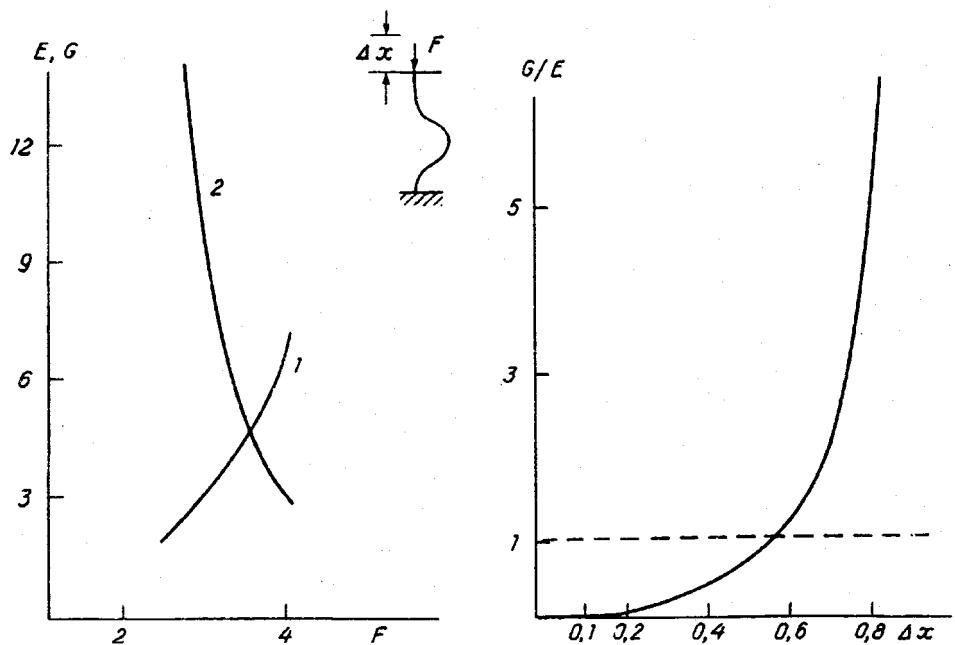


Рис. 15. Зависимость отношения тангенциальной (1) к нормальной (2) жесткости балки, изогнутой в результате потери устойчивости

[38, 39] совпадают с формулой (2) при координационном числе шесть для плоской задачи.

Полученный результат позволяет понять, почему в окружающем нас мире отсутствуют (или очень редки) тела с  $\nu < 0$ . Дело в том, что все известные потенциалы взаимодействия атомных и молекулярных частиц друг с другом или центральные, или значительно жестче в нормальном нежели в тангенциальном направлении. Например, жесткость химических связей больше жесткости валентных углов и т. д. ( $\lambda < 1$ ).

Решение задачи [40] для деформации двух упругих сферических тел с абсолютной адгезией показывает, что отношение тангенциальной и нормальной жесткостей зависит от коэффициента Пуассона материала, из которого сделаны сферы, и может стать больше единицы ( $\lambda > 1$ ) лишь в том случае, если коэффициент Пуассона этого материала сам отрицательный ( $\nu < 0$ ).

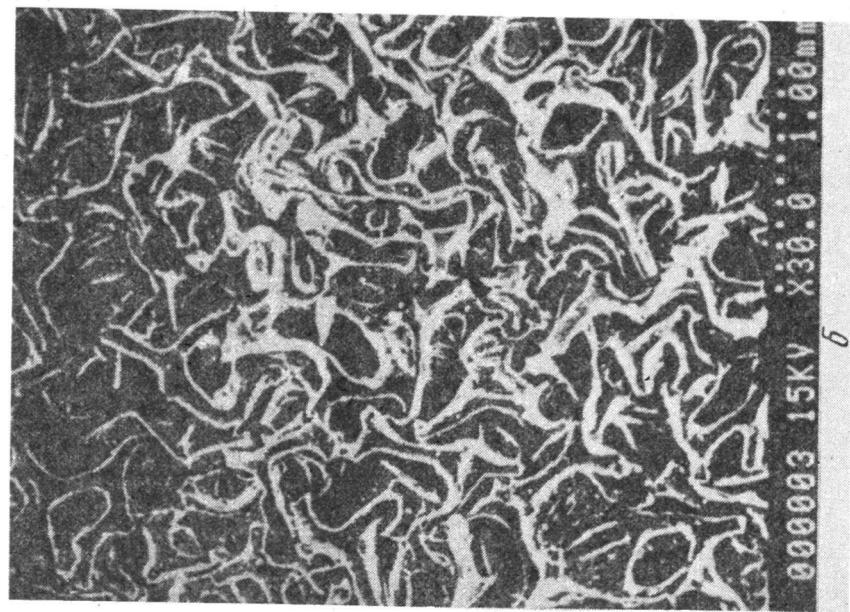
Таким образом, для создания изотропного тела с  $\nu < 0$  необходимо иметь либо потенциал взаимодействия между соседними частицами, либо такой элемент конструкции, соединяющий случайно расположенные узлы, которые бы обеспечили слабую нормальную жесткость по сравнению с тангенциальной (сдвиг или изгиб). Примером такого тела может быть конструкция из жестких узлов с жесткими углами, соединенными друг с другом элементами типа телескопической антенны (рис. 13).

Рассмотрим подробнее метод получения пенополиматериала с  $\nu < 0$ . Авторы работ [36, 37] в качестве исходного материала использовали жесткий пенополиэфир. Характеристики исходного пенопласта: плотность  $\approx 0,33$  г/см, модуль Юнга  $\approx 70$  кПа,  $\nu \approx 0,4$ ,  $T_g \approx 170^\circ$ . Значение коэффициента Пуассона положительно и соответствует обычным синтетическим пенопластам. Образец такой пены подвергался сжатию (изменение объема в 2–4 раза), затем нагреву до температуры, близкой к температуре размягчения ( $T_g$ ) и охлаждению до комнатной температуры с целью фиксации созданной при сжатии структуры. Полученный после такой обработки полимерный пеноматериал имел коэффициент Пуассона  $\nu = -0,7$ . Аналогичный результат получили авторы для металлической пены (пористая медь) путем ее пластической деформации (трехосное сжатие) при комнатной температуре, а также для трехмерно сплошной силиконовой резины, подвергнутой всестороннему сжатию на определенной стадии отверждения.

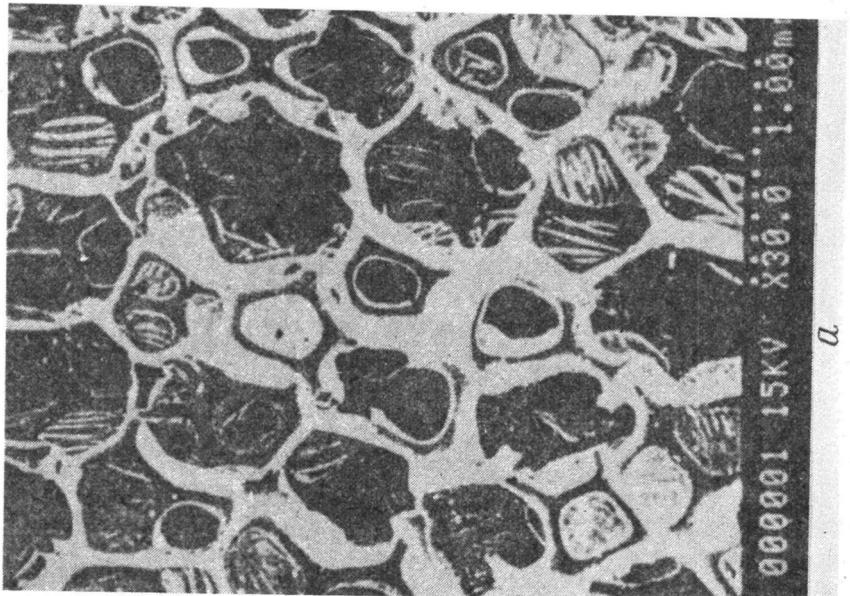
Трансформация структуры в процессе описанной выше обработки может быть представлена, на наш взгляд, следующим образом (рис. 14). Элемент структуры пены, показанный на рис. 14, *а*, при сжатии теряет устойчивость в наиболее узком месте и одна часть проваливается в другую, как это показано на рис. 14, *б*, образуя элемент типа телескопической антенны. Такой элемент обладает большой жесткостью на изгиб и малой на осевое сжатие — растяжение и обеспечивает тем самым необходимое условие для получения материала с  $\nu < 0$ .

Существует, однако, еще более простая интерпретация структуры такого пеноматериала, основанная на той же идеи о роли соотношения тангенциальной и нормальной жесткостей элемента сеточной структуры материала в формировании отрицательного коэффициента Пуассона: Рассмотрим упругие свойства тонкой балки<sup>1</sup>, изогнутой в результате потери устойчивости под действием осевого сжатия (рис. 15). В зависимости от изогнутости (прогиба  $\Delta x$ ) балки меняется соотношение тангенциальной  $G$  и нормальной  $E$  жесткостей, причем тангенциальная увеличивается по мере роста прогиба, а нормальная уменьшается и при некотором значении прогиба  $G = E$ , а при больших  $G > E$ , что соответствует необходимому условию появления отрицательного коэффициента Пуассона, согласно работе [11]. Действи-

<sup>1</sup> Численный расчет проведен В. Г. Ошмяном.

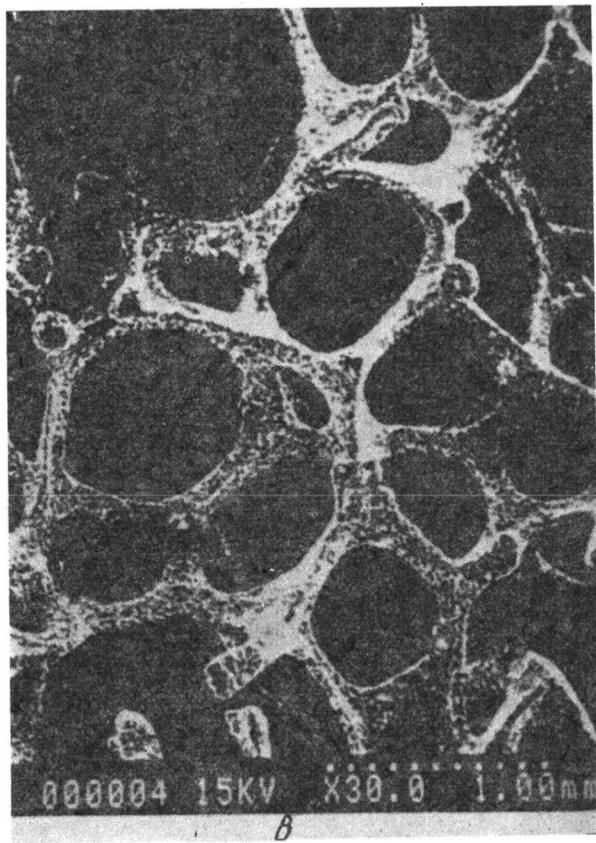


б



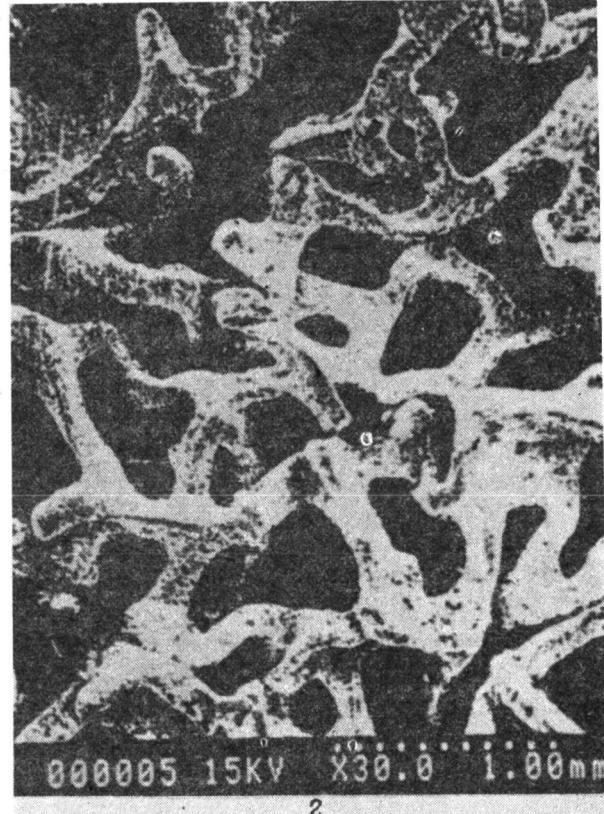
а

Рис. 16 а, б



а

000004 15KV X30.0 1.00mm



б

000005 15KV X30.0 1.00mm

Рис. 16. Структуры полиэфирного пенопласта (а, б) и пористой меди (в, г) до (а, в) и после (б, г) трехосного сжатия [37]

тельно, как видно из рисунков работ [36, 37], полимерные перегородки в пенопласте и металлические в пенометалле после трехосного сжатия потеряли устойчивость и изогнулись (рис. 16). Для выявления количественного согласия модели с экспериментом необходимы дальнейшие подробные исследования.

Таким образом, в настоящее время показана возможность существования изотропных материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона, определены условия и предложены варианты структур, обеспечивающих такое свойство материала.

### СЛУЧАЙНАЯ УПАКОВКА ЧАСТИЦ РАЗЛИЧНОЙ ФОРМЫ

Приведенные выше результаты позволяют вернуться к проблеме так называемой наиболее плотной случайной упаковки [41—45]. Несмотря на большое количество теоретических и модельных исследований в этой области, как нам кажется, не достигнута полная ясность даже в определении этого понятия.

Существует сложившееся интуитивное мнение, что понятие это чисто геометрическое. Однако большинство количественных результатов, полученных методами компьютерного или физического моделирования, например по случайной упаковке сфер, основано на экспериментах, включающих и механические явления и представления: жесткие шары и уравнения движения их под действием внешних сил (давление стенки) и упругих взаимодействий друг с другом.

Методы случайного набрасывания непересекающихся дисков (*2D*) или шаров (*3D*), т. е. чисто геометрические подходы, без последующего механического уплотнения дают обычно значительно более рыхлые упаковки и представляют собой случайные, но не «наиболее плотные» упаковки.

Принято считать [44], что плотность «случайной наиболее плотной» упаковки гладких сфер (*3D*) составляет  $\sim 0,64$ , а гладких дисков (*2D*)  $\sim 0,8$ . Однако геометрический статистический анализ, проведенный Л. Ротенбургом [46, 47], показал, что критическим значением числа контактов и плотности, после которой случайная система дисков на плоскости становится геометрически неустойчивой и происходит ее «кристаллизация», равны  $\gamma \cong 5,5$  и  $\rho \cong 0,87$ — $0,89$ . Это значение плотности и числа контактов (о данной величине будет сказано ниже) значительно выше того, что получается из других («механических») экспериментов, в которых наиболее плотная система получается методом сжатия рыхлого «газа» частиц, когда кристаллизация системы предотвращается каким-либо способом (распределение частиц по размерам, высокая вязкость, специальная неправильной формы ограничивающая поверхность образца и т. п.).

Определенную путаницу, которую, впрочем, можно использовать и для прояснения проблемы, внесли наши недавние результаты, полученные для упаковки гладких эллипсов (*2D*) [48, 49]. Оказалось, что гладкие эллипсы даже со сравнительно небольшим эксцентриситетом ( $e = 0,1$ — $0,2$ ) упаковываются в «механическом» эксперименте значительно лучше гладких дисков ( $\gamma \cong 5,3$ — $5,8$ ;  $\rho \cong 0,89$ — $0,90$ ), несмотря на то, что ориентация эллипсов в указанных экспериментах совершенно случайная.

Природа этого, как нам кажется, была понята и состоит в том, что плотность упаковки в «механических» экспериментах ограничивается сверху (максимальная плотность) точкой перехода жидкость (газ) — стекло, т. е. точкой механического стеклования, после чего дальнейшее уплотнение системы требует чрезвычайно большого, а для абсолютно жестких частиц — бесконечно большого внешнего давления (рис. 3) — система запирается.

Условия для критического значения числа контактов, а это и есть определяющий параметр в гранулированных системах, в соответствии с

Таблица 3

## Параметры наиболее плотной случайной упаковки

Норма частиц	Размерность пространства	$\gamma_m^*$	$\rho_m^*$	$\gamma_g^*$	$\rho_g^*$
		механическая упаковка	геометрическая упаковка		
Гладкие диски	$2D$	4	$\approx 0,80$	$\approx 5,5$	$\approx 0,89$
Гладкие эллипсы	$2D$	6	$\approx 0,90$	?	?
Гладкие сферы	$3D$	6	$\approx 0,64$	?	?

изложенными ранее соображениями, для этого перехода различны для гладких дисков и гладких эллипсов (табл. 1), так как различны условия статического равновесия: в отличие от эллипсов гладкие диски не могут вращаться под действием нормальных контактных сил, что и ограничивает возможность их упаковки.

Таким образом, следует ввести два понятия случайной наиболее плотной упаковки: первое — механическое и второе — геометрическое, которые характеризуются параметрами  $\gamma_m^*$ ,  $\rho_m^*$  и  $\gamma_g^*$ ,  $\rho_g^*$  соответственно (табл. 3).

В качестве механической случайной наиболее плотной упаковки следует понимать точку механического стеклования. Определяющим параметром в этом случае является число контактов. Критические значения числа контактов для частиц различной формы на плоскости и в пространстве приведены в табл. 1.

С геометрическим понятием случайной наиболее плотной упаковки дело обстоит, очевидно, более сложно и необходимы дальнейшие исследования этой проблемы.

По-видимому, соотношение между этими двумя понятиями зависит от формы частиц и природы контактных сил. Так,  $\gamma_g^* > \gamma_m^*$  и  $\rho_g^* > \rho_m^*$  для системы гладких дисков, но  $\gamma_g^* \approx \gamma_m^*$  (или даже  $\gamma_g^* < \gamma_m^*$ ) для гладких эллипсов на плоскости. Можно предполагать, что и для упаковки гладких иголок (эллипс с  $e \rightarrow 1$ ) на плоскости  $\gamma_g^* < \gamma_m^*$ . Все эти вопросы, однако, требуют дальнейшего анализа.

Интересная ситуация наблюдается для упаковки гладких эллипсов с большим эксцентриситетом (иголок) на плоскости. В этом случае принципиально невозможно добиться точки стеклования ( $\gamma^* = 6$ ) для  $e \rightarrow 1$  (тонкие иголки) при случайной ориентации иголок, поскольку в каждом контакте должен участвовать хотя бы один конец иголки, которых всего  $2N$ , где  $N$  — число частиц, в то время как число контактов в точке стеклования должно быть равно  $\gamma^* N/2 = 3N$ . Это означает, что необходимы еще и контакты боковыми поверхностями иголок для достижения  $\gamma^* = 6$ . Другими словами, ориентация частиц в таком состоянии будет не случайна, иголки становятся параллельными друг другу, образуется упорядоченное состояние (мезофаза). Более того, правильный кристалл из иголок одинакового размера имеет меньшее число контактов  $\gamma^* = 4$ , чем частично случайное (по расположению центров тяжести) состояние с  $\gamma^* = 6$  (рис. 17). Следовательно, второе состояние, мезофаза, механически более устойчивое, нежели первое, т. е. полностью упорядоченный кристалл.

Другие варианты упаковок иголок на плоскости представляют собой чрезвычайно неустойчивые состояния с вырожденными контактами концов друг с другом (рис. 18, а, б). Тогда, например, контакт четырех частиц (рис. 18, в) на самом деле представляет собой вырождение пяти контактов в расчете на четыре конца частиц. Однако и в этом случае контактов не

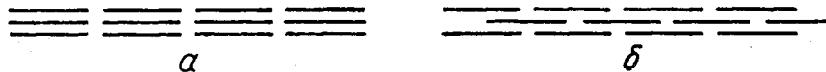


Рис. 17. «Кристаллическая» (а) и «мезофазная» (б) упаковки иголок на плоскости

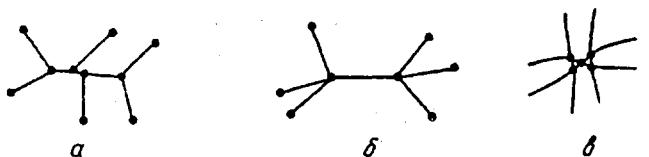


Рис. 18. Структуры упаковок игольчатых частиц с вырожденными контактами.  
Пояснения в тексте

хватает для достижения точки перехода жидкость — стекло ( $\frac{5}{4}$ )  $2N = 2,5N$ , вместо необходимых  $3N$  контактов. На этом пути нет выхода.

Возникает вопрос: при каких эксцентризитетах эллипса становится иголкой и кристаллизация системы наступает с неизбежностью?

Уже для гладких треугольников или уголков ситуация меняется. Для таких систем и для случайной ориентации частицы хватает углов или концов у каждой частицы, чтобы в принципе контактов типа ребро — угол хватило для достижения точки стеклования ( $3N$ ). В данном случае, наверное, многое зависит от конкретной геометрии — значений величин углов и сторон. Здесь еще необходимо участие каждого угла и сторон в контактах. Для четырехугольников этого уже не нужно и легче достигается точка перехода.

Также весьма сложна проблема упаковки полимерных молекул с различной внутрицепной гибкостью, в особенности, когда гибкость переменна и зависит от внешних условий — давления и температуры. В таком случае очень важен процесс замораживания внутрицепной подвижности одновременно с изменением числа контактов макромолекул друг с другом при изменении внешних условий.

Компьютерный анализ механики гранулированных систем позволил сформулировать следующие идеи, которые могут представлять интерес для теории конденсированного состояния различных тел:

1. Состояние конденсированного неупорядоченного тела (стекло, жидкость) и его деформационное поведение определяется контактами соседних частиц друг с другом, их числом и распределением в пространстве.

2. Любой потенциал взаимодействия между частицами может быть разделен на две составляющие — «жесткое» отталкивание и «мягкое» притяжение, отвечающие за различные свойства реального вещества.

3. Тела с отрицательным коэффициентом Пуассона должны представлять собой систему узлов (или частиц), связанных друг с другом потенциалом или конструкцией, имеющей большую сдвиговую и изгибную жесткость по сравнению с нормальной (центральной) жесткостью.

4. Наиболее плотная случайная упаковка частиц определяется как геометрическими, так и механическими свойствами и соответствует точке перехода системы в твердое состояние.

Существует, однако, еще много трудностей для того, чтобы использовать эти идеи для создания совершенной теории конденсированного состояния.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cundall P. A., Strack O. D. L//Geotechnique. 1979. V. 29. № 1. P. 47.
2. Cundall P. A., Drescher A., Strack O. D. L//IUTAM Conf. on Deformation and Failure of Granular Materials. Delft, 1982. P. 355.
3. Cundall P. A., Jenkins J. T., Ishibashi I./*Powders and Grains*, Int. Conf. on Micromechanics of Granular Media, Clermont-Ferrand, 1989.
4. Rothenburg L. Ph. D. Thesis «Micromechanics of Idealized Granular Systems». Ottawa: Carlton University, 1980.
5. Bathurst R. J. Ph. D. Thesis «A Study of Stress and Anisotropy in Idealized Granular Assemblies». Canada: Queens University at Kingston, 1985.
6. Thornton C., Barnes D. J./*Acta Mechanica*. 1986. V. 64. P. 45.
7. Rothenburg L., Bathurst R. J//Geotechnique. 1989. V. 39. № 4. P. 601.
8. Bathurst R. J., Rothenburg L//J. Appl. Mech. ASME. 1988. V. 55. P. 17.
9. Bathurst R. J., Rothenburg L//Int. J. Eng. Sci. 1988. V. 26. № 4. P. 373.
10. Bathurst R. J., Rothenburg L//Mechanics of Materials. 1990. V. 9. P. 65.
11. Rothenburg L., Bathurst R. J., Dusseault M./*Powders and Grains*. ISBN. 1989. p. 355.
12. Rothenburg L., Bathurst R. J., Dusseault M./*Powders and Grains*. Int. Conf. on Micromechanics of Granular Media. Clermont-Ferrand, 1989. P. 9.
13. Gilman J. J./J. Appl. Phys. 1975. V. 46. P. 1625.
14. Li J. M./*Metallic Glasses*/Ed. by Gilman J. J. Ohio, 1978. P. 173.
15. Гринева Н. С., Карпенко Ю. П., Берлин Ал. Ал., Маневич Л. И./Докл. АН СССР. 1982. Т. 266. № 2. С. 384.
16. Жорин В. А., Макарова И. Ф., Ген М. Я., Ениколопян Н. С./Докл. АН СССР. 1981. Т. 261. № 2. С. 405.
17. Жорин В. А., Индолева Е. Л., Зеленецкий А. Н., Ениколопян Н. С./Докл. АН СССР. 1986. Т. 287. № 2. С. 373.
18. Bernal J. D./Proc. Roy. Soc. London. A. 1964. 280. P. 299.
19. Smith F. W./Disc. Faraday Soc. 1967. V. 43. P. 231.
20. Larson K. B. Ph. D. Thesis. M. I. T., 1964.
21. Finney J. L. Ph. D. Thesis. University of London, 1968.
22. Finney J. L//Proc. Roy. Soc. London. A. 1970. V. 319. P. 479.
23. Finney J. L//J. phys. 1975. V. 36. P. 320.
24. Collins R./Phase Transitions and Critical Phenomena. V. 2. L., 1972. P. 271.
25. Ландau Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М., 1965. С. 204.
26. Love A. E. H. A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity. 4-ed N. Y., 1944.
27. Li Y./Phys. Stat. Sol. 1976. V. 38. P. 171.
28. Garber A. M./Aero. Eng. 1963. V. 22. P. 126.
29. Саэмюэл И. Л., Епшинин А. И., Крикко А. И., Самойлов А. И., Одинцов И. Н., Андреев А. П./Докл. АН СССР. 1988. Т. 302. № 6. С. 1372.
30. Herakovich C. T./J. Comp. Mat. 1984. V. 18. P. 447.
31. Evans K. E./J. Phys. Appl. Phys. 1989. V. 22. P. 1870.
32. Caddock B. D., Evans K. E./J. Phys., Appl. Phys. 1989. V. 22. P. 1877.
33. Evans K. E., Caddock B. D./J. Phys., Appl. Phys. 1989. V. 22. P. 1883.
34. Gibson L. S., Ashby M. F., Schaefer G. S., Roberson C. I./Proc. Roy. Soc. London A. 1982. V. 382. P. 25.
35. Bergman D. J./Phys. Rev. B. 1986. № 3. P. 2013.
36. Lakes R./Science. 1987. V. 235. P. 1038.
37. Fris E. A., Lakes R. S., Park J. B//J. Mat. Sci. 1988. V. 23. P. 4406.
38. Bathurst R. J., Rothenburg L//J. Appl. Mech. ASME. 1988. V. 55. P. 17.
39. Bathurst R. J., Rothenburg L//Int. J. Eng. Sci. 1988. V. 26. № 4. P. 373.
40. Mindlin R. D./J. Appl. Mech. ASME. 1949. V. 16. № 3. P. 259.
41. Cumberland D. J., Crawford R. J./Handbook of Powder Technology. V. 6. Amsterdam, 1987.
42. Dullien F. A. L//Handbook of Powder Science and Technology/Ed. by Fayed M. E., Otten L. N. Y., 1984. P. 99.
43. Shinohara K//Handbook of Powder Science and Technology/Ed. by Fayed M. E., Otten L. N. Y., 1984. P. 129.
44. Berryman J. G./Phys. Rev. A. 1983. V. 27. P. 1053.
45. Sutherland D. N./J. Colloid Interface Sci. 1977. V. 60. P. 96.
46. Rothenburg L., Selvadurai A. P. S. Colloques internationaux du CNRS № 319. Comportement plastique des solides anisotropes. 1981. P. 29.
47. Rothenburg L., Selvadurai A. P. S. Proceedings of the International Symposium on the Mechanical Behavior of Structured Media. Ottawa, 1981. Part B. P. 469.
48. Берлин Ал. Ал., Ротенбург Л., Басэрст Р./Хим. физика. 1991. Т. 10. № 9. С. 1284.

49. Rothenburg L., Bathurst R. J., Berlin Al. Al//7th Intern. Conf. on Surface and Colloid Sci. Compiegne, France, 1991. V. A1. P. 30.

Институт химической физики  
им. Н. Н. Семенова  
Российской Академии наук,  
Москва

Университет Ватерлоо, Канада  
Королевский военный колледж  
Кингстон, Канада

Al. Al. Berlin, L. Rothenburg, R. Basarst

FEATURES OF DEFORMATION OF DISORDERED  
POLYMER AND NONPOLYMER  
SOLIDS

S u m m a r y

Some problems of mechanics of disordered (amorphous) solids: the glass — liquid transition, plastic deformation in the solid state, the negative Poisson coefficient, features of random densest packing of particles of various shape — are discussed basing on results of computer simulation of stochastic mechanical behavior of a solid consisting of 1000 elastic rigid particles. The number of direct physical contacts between particles, their distribution in space and decay in the course of shear strain are shown to result in existence of two states — solid glassy and liquid ones, the condition of the transition between them and the main mechanical properties of a solid: plasticity, strain softening, localization of the strain as shear bands. The criterion of the glass — liquid transition is proposed and based, and the dependence of the critical number of contacts and of the packing density in the transition point on the symmetry of particles and the type of contact forces is shown. The possibility to apply the geometrical conceptions to the theory of the condensed state is discussed with the assumption, that any potential of interaction between particles can be separated into two components — rigid repulsion and soft attraction being responsible for various physical properties: gas — liquid and liquid — glass transitions, presence of critical points, mechanical behavior of glasses and crystals. Features of the structure of isotropic solids characterized by the negative Poisson coefficient are discussed. Such solids are shown to be a system of lattice sites (or particles) related with the potential or construction having the high shear and flexural rigidity comparing with normal one. The structure of rigid polymer and metallic foams having the negative Poisson coefficient is explained basing on the analysis of elastic behavior of thin layers of the foam material after the loss of stability. The densest random packing of particles depends both on geometrical and mechanical properties and corresponds to the point of the transition of the system into the solid state.