

Współczynnik Poissona charakteryzuje deformacje materiałów sprężystych. Wielkość ta jest zdefiniowana jako ujemny stosunek względnej zmiany rozmiaru poprzecznego materiału do względnej zmiany jego wymiaru podłużnego, jeżeli te zmiany są wynikiem działania jednorodnego naprężenia działającego w kierunku podłużnym. Łatwo przekonać się, że dla gumy, która zwęża się przy rozciąganiu, wsp. Poissona jest dodatni. Ponieważ podobny efekt obserwowano dla innych znanych materiałów izotropowych (współczynniki Poissona dla materiałów takich jak beton, szkło, aluminium, czy mosiądz wynoszą odpowiednio:  $0.2 \div 0.37$ ,  $0.29 \div 0.3$ ,  $0.33$ ,  $0.34$ ), więc sądzono, że nie istnieją w przyrodzie materiały izotropowe o ujemnym współczynniku Poissona (UWP). Opinię tę można znaleźć nawet w wydaniach znanego podręcznika teorii sprężystości (Landau i Lifshits, *Theory of Elasticity*) drukowanych (po polsku i po angielsku) jeszcze na początku lat 90-tych. Choć w roku 1985 Almgren zaprezentował w *Journal of Elasticity* model struktury mechanicznej z ujemnym wsp. Poissona, a niedługo potem opublikowano model fazy termodynamicznej tworzonej spontanicznie w układzie prostych, twardych cząsteczek (K.W. Wojciechowski, *Molecular Physics*, 1987), to wyniki te stanowiły swego rodzaju ciekawostki. Od czasu, gdy Lakes wytworzył piany z UWP (*Science*, 1987), a Evans i Caddock wytworzyli materiały mikroporowate z UWP (*J. Phys. D*, 1989), notowany jest stały wzrost zainteresowania takimi materiałami, co wynika między innymi z wielości ich potencjalnych zastosowań. Nazwa *auksetyki*, zaproponowana przez Evansa w 1991 roku, jest obecnie stosowana przez większość badaczy jako określenie dla materiałów z UWP. Warto też podkreślić, że struktury auksetyczne stanowią obecnie jedną z ważnych klas tzw. metamateriałów mechanicznych, czyli układów, których niezwykle właściwości są determinowane nie przez ich skład materiałowy, ale przez odpowiednio zaprojektowaną strukturę (J.N. Grima *et al.*, *Nature Materials*, 2016).

Celem niniejszego projektu jest zbadanie wpływu, periodycznie rozmieszczonych w sieci krystalicznej, inkluzji (o bardzo małych rozmiarach, rzędu kilku do kilkunastu rozmiarów atomów lub molekuł, przynajmniej w jednym z wymiarów) na własności sprężyste (a w szczególności na wsp. Poissona, z naciskiem na jego wartości ujemne) wybranych modeli kryształów. Takie inkluzje nazywać będziemy *nanoinkluzjami*. Planujemy zbadanie (metodami symulacji komputerowych oraz metodami analitycznymi) układów z matrycami krystalicznymi o wysokich symetriach (kubicznej i heksagonalnej), z różnymi rodzajami oddziaływań w materiale matrycy i materiale inkluzji. Przeprowadzone w naszym zespole wstępne badania prostych modeli atomowych i molekularnych z (nieskończonymi) inkluzjami w postaci nanokanałów lub nanodrutów (K.V. Tretiakov *et al.*, *Smart Materials and Structures*, 2016; J.W. Narojczyk *et al.*, *Phys. Stat. Solidi B*, 2016; P. Pięłowski *et al.* *Soft Matter*, 2017) oraz nanowarstw lub nanoszczelin (M. Bilski i K.W. Wojciechowski, *Phys. Stat. Solidi B*, 2016, P. Pięłowski *et al.*, *Phys. Stat. Solidi-RRL*, 2016) pokazały bardzo istotny wpływ - nie tylko ilościowy, ale i jakościowy - tychże inkluzji na współczynnik Poissona. W szczególności pokazano, że możliwa jest zmiana znaku wsp. Poissona i uzyskiwanie UWP w określonych kierunkach. Wspomniane badania przeprowadzono za pomocą metod analitycznych i symulacji komputerowych metodą Monte Carlo w zespołach izobaryczno-izotermicznym lub kanonicznym. Prowadzone równoległe badania *skończonych* i odseparowanych od siebie inkluzji w modelach ciągłych za pomocą symulacji metodą elementu skończonego wskazały na możliwość uzyskiwania ujemnego wsp. Poissona nie tylko w znanych przypadkach, gdy inkluzje mają niewielki w porównaniu z matrycą moduł Younga (taki przypadek można traktować jako analog modeli rotujących kwadratów), ale także gdy inkluzje mają dużo większy moduł Younga niż matryca. Ten ostatni przypadek skutkuje możliwością otrzymania auksetyków o module Younga znacznie większym niż moduł Younga matrycy.

Powody podjęcia takich badań są wielorakie. Z punktu widzenia badań podstawowych powód jest taki, że ciągle niewiele wiadomo o właściwościach sprężystych struktur będących przedmiotem projektu. Projekt dostarczy szerokiego spektrum informacji na ten temat. Innym powodem jest możliwość wytwarzania eksperymentalnego struktur będących przedmiotem projektu. Spodziewamy się, że projekt zainspiruje interesujące doświadczenia w niedalekiej przyszłości. Z punktu widzenia zastosowań ważnym powodem jest fakt, że wytwarzane obecnie materiały auksetyczne mają struktury porowate. Ich moduł Younga jest więc w sposób oczywisty znacząco mniejszy niż w przypadku materiałów litych, jakimi są układy zaplanowane do badań. Wiadomo również, że duży moduł Younga oznacza, między innymi, większą twardość materiału, co jest ważne w wielu zastosowaniach. Dlatego spodziewamy się, że uzyskane wyniki powinny być istotne dla zastosowań. Ostatnim z powodów, które tu wymienimy, będzie opracowanie nowych, efektywnych metod obliczeniowych dla właściwości sprężystych metamateriałów.