

ТЕРМОПРУЖНІ ЕФЕКТИ У КВАЗІКРИСТАЛАХ ЗА ЛІНІЙНОГО РОЗПОДІЛУ ТЕМПЕРАТУРИ

Пастернак Ярослав Михайлович

Волинський національний університет імені Лесі Українки,
iarioslav.pasternak@vnu.edu.ua

Гоцьк Ігор Анатолійович

Волинський національний університет імені Лесі Українки, gotsyk.igor@vnu.edu.ua

Квазікристали мають низку властивих лише їм особливостей, спричинених фазонною складовою пружних деформацій. Тому дослідження особливостей квазікриссталічних тіл важливе для подальшого створення та використання інноваційних матеріалів. Теорія термопружності квазікристалів у вигляді розширеного формалізму Стро представлена в [1].

Конститутивні співвідношення термопружності квазікристалів мають вигляд:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{R}\boldsymbol{\omega}, \\ \mathbf{H} &= \mathbf{R}^T\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{K}\boldsymbol{\omega}.\end{aligned}\quad (1)$$

тут σ_{ij} – тензор фононних напружень; H_{ij} – тензор фазонних напружень; $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$ – тензор фононних деформацій; $\omega_{ij} = w_{i,j}$ – тензор фазонних деформацій; u_i та w_i – фононні та фазонні зміщення; \mathbf{C} – матриця фононних пружних сталей; \mathbf{K} – матриця фазонних пружних сталей; \mathbf{R} – матриця сталей фононно-фазонної взаємодії. Компоненти векторів $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\omega}$ складаються з компонент відповідних тензорів та розташовані згідно правила Фойгта.

З (1) фононні та фазонні деформації визначаються наступним чином:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{S}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{Q}\mathbf{H}, \\ \boldsymbol{\omega} &= \mathbf{Q}^T\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{T}\mathbf{H},\end{aligned}\quad (2)$$

де сталі податностей

$$\begin{aligned}\mathbf{S} &= [\mathbf{C} - \mathbf{R}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{R}^T]^{-1}, \\ \mathbf{T} &= [\mathbf{K} - \mathbf{R}^T\mathbf{C}^{-1}\mathbf{R}]^{-1}, \\ \mathbf{Q} &= -\mathbf{S}\mathbf{R}\mathbf{K}^{-1} = -\mathbf{C}^{-1}\mathbf{R}\mathbf{T}.\end{aligned}\quad (3)$$

Для забезпечення нерозривності деформацій повинні виконуватися умови сумісності деформацій, що для фазонної складової матимуть вигляд:

$$w_{i,jk}^\theta = w_{i,kj}^\theta \quad (4)$$

За класичними уявленнями лінійної термопружності передбачається що зміна температури викликає пропорційне напруження. Подібна поведінка властива і для фононно-фазонних деформацій:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}^\theta(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\alpha}\theta(\mathbf{x}), \\ \boldsymbol{\omega}^\theta(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\alpha}'\theta(\mathbf{x}),\end{aligned}\quad (5)$$

де $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_{11}, \alpha_{22}, \alpha_{33}, 2\alpha_{23}, 2\alpha_{31}, 2\alpha_{12}]^T$, $\boldsymbol{\alpha}' = [\alpha'_{11}, \alpha'_{22}, \alpha'_{33}, \alpha'_{23}, \alpha'_{31}, \alpha'_{12}, \alpha'_{32}, \alpha'_{13}, \alpha'_{21}]^T$, та α_{ij} і α'_{ij} – фононні та фазонні коефіцієнти теплового розширення.

У [2] проаналізовано групи симетрії квазікристалів, та зроблено висновок, що коефіцієнти фазонного теплового розширення повинні бути рівними нулю. Однак у більшості досліджень термопружності квазікристалів не накладаються такі обмеження на матеріальні сталі, натомість вважається що фазонні теплові модулі рівні нулю.

Зв'язок між тепловими модулями $\boldsymbol{\beta}$ та коефіцієнтами теплового розширення $\boldsymbol{\alpha}$ має вигляд:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\beta} &= \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{R}\boldsymbol{\alpha}', \\ \boldsymbol{\beta}' &= \mathbf{R}^T\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}'.\end{aligned}\quad (6)$$

Рівняння (7) в оберненому вигляді:

$$\begin{aligned}\alpha &= \mathbf{S}\beta + \mathbf{Q}\beta', \\ \alpha' &= \mathbf{Q}^T\beta + \mathbf{T}\beta'.\end{aligned}\quad (7)$$

Температура θ повинна задовольняти рівняння балансу тепла:

$$k_{ij}\theta_{,ij} = 0. \quad (8)$$

Умови (4) та (8) будуть задовольнятися лише за лінійного розподілу температури:

$$\theta(x) = a'_0 + a'_p x_p, \quad a'_p = a'_{nj}. \quad (9)$$

Враховуючи (9) та співвідношення теплопровідності:

$$h_i = -k_{ij}\theta_{,j} \quad (10)$$

отримаємо компоненти сталого вектора лінійного теплового потоку, що не зумовлює появи фононних та фазонних напружень у вільному 1D квазікристалі:

$$h_i = -Ck_{ij}a'_{nj} \quad (11)$$

де k_{ij} – коефіцієнти теплопровідності, C – довільна стала.

Зауважимо, що для кристалів лінійний розподіл температур (однорідний тепловий потік) не зумовлює теплових напружень, а от для квазікристалів напруження не будуть виникати тільки за певного напрямку теплового потоку.

Зокрема для 1D квазікристалів цей ефект буде спостерігатися за умови колінеарності напрямку теплового потоку з напрямом квазіперіодичного розташування атомів (молекул) матеріалу. Для 2D, так само і як для 3D квазікристалу ефект буде спостерігатися лише за накладання певних умов на властивості матеріалу. Так, для 2D квазікристалу ці умови матимуть вигляд

$$\alpha'_{1j} = \alpha'_{2j}, \quad \alpha'_{3j} = 0. \quad (12)$$

Ці результати підтверджуються комп'ютерним моделюванням термопружності в 1D гексагональному квазікристалі, матеріальні сталі якого подано у [3]. Для напрямку теплового потоку вздовж осі квазіперіодичного розташування атомів ніяких напружень не виникає, а для перпендикулярного напрямку є ненульові фазонні і фононні напруження, нормовані фазонні складові яких зображені на рис. 1.

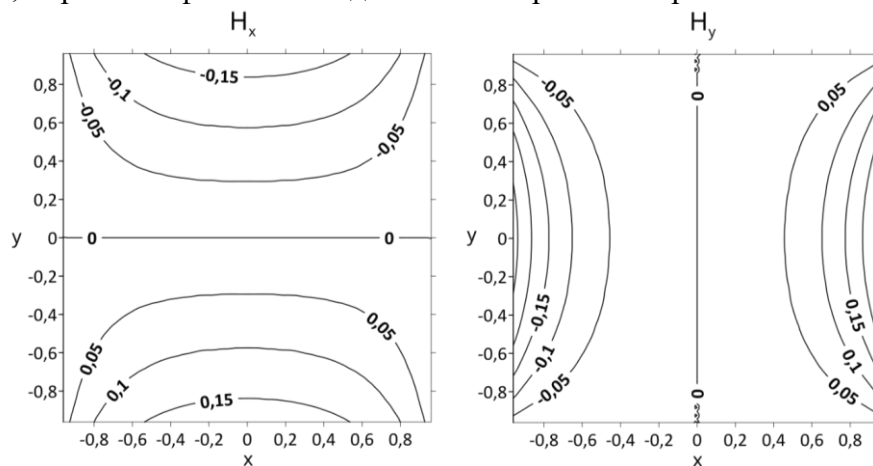


Рис.1. Фазонні напруження в 1D квазікристалі

Список літератури

1. Pasternak V., Sulym H., Pasternak I., Hotsyk I. Extended Stroh Formalism for Plane Problems of Thermoelasticity of Quasicrystals with Applications to Green's Functions and Fracture Mechanics. *Int J Eng Sci.* 2024. 203. 104–124. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2024.104124>
2. Hu C., Wang R., Ding D.H. Symmetry groups, physical property tensors, elasticity and dislocations in quasicrystals. *Reports on Progress in Physics.* 2023. 63. 1–39. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/63/1/201>
3. Fan C.Y., Yuan Y.P., Pan Y.B., Zhao M.H. Analysis of cracks in one-dimensional hexagonal quasicrystals with the heat effect. *Int J Sol Struct.* 2017. 120. 146–156. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.04.036>