

УДК 539.3

Вікторія Пастернак¹, к.т.н, доц.; Олег Ясній², д.т.н, проф.; Георгій Сулим³, д.ф.-м.н., проф.

¹Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна

²Тернопільський національний технічний університет ім. І. Пулюя, Україна

³Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, Львів, Україна

ЕНЕРГЕТИЧНІ УМОВИ КОНТАКТУ КРИСТАЛІЧНИХ ТА КВАЗІКРИСТАЛІЧНИХ ТІЛ

У роботі розглянуто задачу моделювання у парадигмі механіки суцільного середовища контактної взаємодії пружних тіл у системах квазікристал – традиційний матеріал (кристалічний, полікристалічний, аморфний) з урахуванням особливостей фононного та фазонного полів. Запропоновано модель тонкого перехідного шару між матеріалами, що дає можливість описувати контакт таких матеріалів з використанням енергетичного підходу, вважаючи, що поверхнева енергія залежить від стрибків відповідних переміщень на інтерфейсі. На основі варіаційного підходу отримано узагальнені умови контакту, які пов'язують фононні та фазонні напруження зі стрибками цих полів на межі поділу.

Ключові слова: квазікристал, крайові умови, інтерфейс, функції стрибка, міжфазний прошарок.

Vikroriia Pasternak, Oleh Yasniy, Heorhiy Sulym

ENERGY CONDITIONS FOR CONTACT OF CRYSTALLINE AND QUASICRYSTALLINE SOLIDS

Abstract. A model of a thin interfacial transition layer between the materials is proposed, which makes it possible to describe the contact of such materials using an energy-based approach, assuming that the surface energy depends on the jumps of the corresponding displacement fields at the interface.

Key words: quasicrystal, boundary conditions, interface, jump function, interphase layer.

Незважаючи на створені протягом останніх десятиліть основи теорії пружності квазікристалів, вивчення контакту квазікристалічних тіл стосуються лише поодинокі роботи. Однак навіть у них крайові умови задають лише формально, без розгляду відповідних фізичних підстав. Адже досі не з'ясовано, чи таке задання є виправданим, оскільки при описі деформування квазікристалів поряд із класичним фононним полем переміщень враховують появу додаткового специфічного фазонного поля, яке відображає не властиве жодному традиційному матеріалу перегрупування атомів квазіперіодичної структури та його вплив на фононні структури. Це стосується не тільки умов контакту матеріалів різного типу, а й формулювання натуральних фазонних крайових умов на поверхні вільного квазікристалічного тіла. Про проблему математичного опису фазонного поля та умов контакту свідчать спроби залучення до його рівнянь руху чи рівноваги факторів, що відповідають за фазонний власний вплив (phason self-action).

Важливо також зазначити, що фазонні та фонон-фазонні пружні сталі квазікристалічних матеріалів визначають не безпосередньо з експериментів суто механічного характеру (фазонні поля для них неспостережувані), а шляхом їхнього сумісного проведення разом з іншими фізичними дослідженнями, наприклад, рентгенівською дифрактометрією. Через це вивчення контактної взаємодії традиційних

матеріалів із квазікристалічними може також дати змогу створити додаткові підходи обчислення матеріальних сталих квазікристалів.

З огляду на це у даній роботі із загальних припущень континуальної за суттю теорії пружності квазікристалів розглядаються умови їхнього ідеального нерозривного контакту із кристалічними та аморфними матеріалами з урахуванням тонкого проміжного перехідного шару, наявного у таких кусково-однорідних структурах.

Густина вільної енергії деформації квазікристала дорівнює

$$\begin{aligned} W(\varepsilon_{ij}, w_{i,j}) &= \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} H_{ij} w_{i,j} = \frac{1}{2} \sigma_{ij} u_{i,j} + \frac{1}{2} H_{ij} w_{i,j} = \\ &= \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \frac{1}{2} K_{ijkl} w_{i,j} w_{k,l} + R_{ijkl} \varepsilon_{ij} w_{k,l}, \end{aligned} \quad (1)$$

де σ_{ij} – фононні напруження; H_{ij} – фазонні напруження; $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$ – компоненти фононного тензора деформацій; $w_{i,j}$ – фазонні деформації; u_i, w_i – відповідно фононні (класичні) та фазонні (в ортогональному просторі) переміщення; C_{ijkl} – компоненти тензора фононних пружних сталих; K_{ijkl} – компоненти тензора фазонних пружних сталих; R_{ijkl} – компоненти тензора фононно-фазонної взаємодії.

Розглянемо тіло, що складається із нерозривно поєднаних між собою двох тіл: з традиційного пружного (кристалічного, полікристалічного, аморфного) та з квазікристалічного матеріалу. Зайняту традиційним матеріалом область позначимо Ω_{tr} , а квазікристалічним – Ω_{qc} . На межі зчеплення матеріалів розташований перехідний шар S завтовшки $2h$.

Повна енергія тіла дорівнюватиме сумі енергій матеріалів традиційного, квазікристалічного та перехідного шару

$$\Pi = \iint_{\Omega^{tm}} W^{tm} d\Omega + \iint_{\Omega^{qc}} W^{qc} d\Omega + \int_S \Psi dS, \quad (2)$$

де через Ψ позначено зведену до серединної поверхні інтерфейсову густину енергії деформації шару S . Виходячи із принципу мінімуму потенціальної енергії $\delta\Pi = 0$ отримано умови контакту між кристалічним та квазікристалічним матеріалами за наявності тонкого перехідного шару.

Зокрема, за ідеального контакту

$$\sigma_{ij}^{tm} n_j^{tm} = -\sigma_{ij}^{qc} n_j^{qc}, \quad u_i^{tm} = u_i^{qc}. \quad (3)$$

Однак у цьому випадку для фазонного поля на межі поділу матеріалів з боку квазікристалу маємо таке співвідношення:

$$H_{ij}^{qc} n_j^{qc} = -k_{ik}^w w_k^{qc}, \quad (4)$$

де k_{ik}^w – зведена фазонна жорсткість проміжного шару. Тобто, за наявності ідеального фононного контакту між матеріалами внаслідок наявності когезійного прошарку виникають також і фазонні напруження.

Врахування такої поведінки важливе при розгляді структурно неоднорідних матеріалів із квазікристалічним наповненням, адже їхнє деформування буде пов'язане не тільки зі зміною фононної і фазонної складових енергії деформації компонент, а й зі зміною поверхневої енергії на межі контакту, що необхідно враховувати при оцінюванні тріщиновитримності інтерфейсів та ефективних характеристик таких композицій.