ИЗВЕСТИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МЕХАНИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА 2021,
№ 1, с. 44–49

УДК 539.3

КРУГОВЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ: УДЕЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ И ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ

© 2021 г. С. В. Кузнецов[a,b,c,*]

[a] *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия*
[b] *Московский государственный технический университет им. Баумана, Москва, Россия*
[c] *Московский государственный строительный университет, Москва, Россия*
**e-mail: kuzn-sergey@yandex.ru*

Поступила в редакцию 05.04.2019 г.
После доработки 15.08.2019 г.
Принята к публикации 21.09.2020 г.

Построен псевдодифференциальный оператор, описывающий поле напряжений в анизотропной среде, вызванное дислокацией с переменным вектором Бюргерса.

В предположении $\mathbf{b} \in H_{1/2}(\Pi, R^3)$ впервые получены аналитические выражения для энергии круговых дислокаций с переменным вектором Бюргерса, находящихся в упругой среде с анизотропией общего вида. Обнаружено, что в изотропной среде энергия образования краевой дислокации и дислокации скольжения определяется только равномерной нормой вектора Бюргерса.

Ключевые слова: дислокация, вектор Бюргерса, анизотропия, энергия

DOI: 10.31857/S0572329921010074

1. Введение. Энергия образования изолированной дислокации позволяет судить о многих свойствах кристаллов, с точки зрения механики разрушения наиболее важные из которых связанны с пластичностью и трещиностойкостью. Последнее обусловлено тем, что по современным представлениям краевая дислокация является предшественником трещины. В анизотропных кристаллах энергия дислокации среди прочих параметров может зависеть от ориентации дислокации (ориентации плоскости, в которой расположена дислокация) и ориентации вектора Бюргерса, характеризующего тип дислокации. Так в случае, если вектор Бюргерса лежит в плоскости дислокации говорят о дислокации скольжения, связанной с пластической работой материала, при векторе Бюргерса перпендикулярном плоскости дислокации речь идет о краевой дислокации. Естественно, что минимальные значения энергии отвечают наиболее вероятным расположениям дислокаций и, тем самым, определяют направления линий скольжения в кристаллах и направления, по которым должны развиваться будущие трещины. Кроме того, это позволяет оценить соотношение между пластическими и хрупкими свойствами кристалла.

Наиболее простой и в то же время естественный способ теоретического исследования энергии образования дислокации состоит в описании упругого поля перемещений, индуцированного дислокацией, в виде потенциала двойного слоя

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \mathbf{b}(\mathbf{y}') \cdot \mathbf{T}(\nu, \partial_y)\mathbf{E}(\mathbf{x} - \mathbf{y}')dy' \tag{1.1}$$

где $\mathbf{u}$ – поле перемещений, Ω – (плоская) область, занятая дислокацией, $\mathbf{b}$ – вектор Бюргерса, $\mathbf{T}$ – оператор поверхностных напряжений на плоскости $\Pi \supset \Omega$ с вектором единичной нормали $\boldsymbol{\nu}$, $\mathbf{E}$ – фундаментальное решение уравнений равновесия. Затем по (1.1) вычисляются напряжения на плоскости Π, после чего оказывается возможным определить и энергию дислокации, как работу поверхностных напряжений на соответствующем скачке смещений, создаваемым вектором Бюргерса:

$$W = 1/2\int_{\Omega} \mathbf{t} \cdot \mathbf{b} dx' \tag{1.2}$$

где $\mathbf{t}$ – поверхностные напряжения на плоскости Π.

Этот подход применялся в исследованиях [1–3], где определялась энергия образования дислокации, размещенной в изотропной среде, и в [4], где найдена энергия дислокации, находящейся в плоскости изотропии трансверсально изотропной среды. В [5] аналогичный подход в сочетании с интегральным преобразованием Фурье позволил обойти трудности, связанные с отсутствием аналитических формул для фундаментальных решений при произвольной анизотропии.

Замечание 1.1. В [1–5] при описании дислокаций предполагалось, что вектор Бюргерса постоянен в Ω, – это в сочетании с теоремой Пича–Колера [6], позволяло ограничиться изучением энергии, произведенной дислокационной петлей (контуром, ограничивающим область Ω). В этом случае энергия образования дислокации оказывается бесконечной, и для получения конечных значений энергии приходиться выделять некоторую тороидальную окрестность петли. Метод выделения тороидальных окрестностей для получения конечных значений энергии дислокационных петель применялся в [7]. Надо отметить принципиальное различие между задачами теории трещин и дислокаций: если в теории трещин, в силу предположений о характере поля скачков смещений на берегах трещины, поле напряжений интегрируемо, то в теории дислокаций положение более сложное: для дислокаций с постоянным вектором Бюргерса поле напряжений имеет неинтегрируемую особенность в окрестности дислокационной границы, это вносит отмеченные выше затруднения в подсчете энергии краевой дислокации. Конечные значения энергии дислокаций могут быть получены и в предположении, что вектор Бюргерса непостоянен в Ω. Строго говоря, для конечных значений энергии требуется, чтобы $\mathbf{b} \in H_{1/2}(\Pi, R^3)$, при $\operatorname{supp} \mathbf{B} \subset \Omega$, где supp обозначает носитель распределения (функции), а $H_{1/2}$ – функциональное пространство Хермандера, определенное как множество распределений, преобразование Фурье которых интегрируемо в квадрате с весом $k(\xi') = (1 + |\xi'|^2)^{1/2}$.

В настоящей работе методом, основанном на анализе символов, построен псевдодифференциальный оператор, описывающий поле напряжений в анизотропной среде, вызванное дислокацией с переменным вектором Бюргерса.

В предположении $\mathbf{b} \in H_{1/2}(\Pi, R^3)$ получены аналитические формулы для энергии круговой дислокации в среде с анизотропией общего вида. Кроме того, приведена аналитическая формула, дающая значения энергии круговой дислокации, находящейся в изотропной среде.

2. Основные соотношения. Рассматривается однородная анизотропная упругая среда, уравнения равновесия которой записываются в виде

$$\mathbf{A}(\partial_{\mathbf{x}})\mathbf{u} = -\mathrm{div}_{\mathrm{x}}\mathbf{C} \cdot\cdot \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u} = \mathbf{0} \tag{2.1}$$

где $\mathbf{u}$ – вектор перемещений, $\mathbf{A}$ – матричный дифференциальный оператор уравнений равновесия, $\mathbf{C}$ – четырехвалентный тензор упругости. Предполагается, что тензор $\mathbf{C}$ строго эллиптичен

$$\mathbf{s} \cdot\cdot \mathbf{C} \cdot\cdot \mathbf{s} > \mathbf{0}, \quad \mathbf{s} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b}, \quad \mathbf{a}, \mathbf{b} \in R^3, \quad \mathbf{a}, \mathbf{b} \neq \mathbf{0} \tag{2.2}$$

Предполагается также, что исследуемая среда гиперупругая, в силу чего тензор **C** симметричен, как оператор, действующий в шестимерном пространстве симметричных тензоров второго ранга: $C^{ijmn} = C^{mnij}$.

Применяя интегральное преобразование Фурье

$$f^{\wedge}(\xi) = \int_{R^3} f(\mathbf{x}) \exp(-2\pi i \mathbf{x} \cdot \xi) dx, \quad f \in L^2(R^3)$$

к уравнению (2.1), получим символ оператора **A**

$$\mathbf{A}^{\wedge}(\xi) = (2\pi)^2 \xi \cdot \mathbf{C} \cdot \xi \tag{2.3}$$

причем условие (2.2) обеспечивает эллиптичность символа $\mathbf{A}^{\wedge}$. По символу (2.3) легко вычисляется преобразованное по Фурье фундаментальное решение

$$\mathbf{E}^{\wedge}(\xi) = \mathbf{A}^{\wedge -1}(\xi) \tag{2.4}$$

Замечание 2.1. В общем случае анизотропии обратить по Фурье выражение (2.4) удается только численно. Однако, как показано ниже, при построении основного п.д.о., необходимого для вычисления энергии, оказывается возможным ограничиться символом $\mathbf{E}^{\wedge}(\xi)$.

Напряжения на плоскости, несущей дислокацию, определяются по (1.1) с помощью следующего п.д.о:

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}') = -\lim_{\mathbf{x} \to \mathbf{x}'} \mathbf{T}(\nu, \partial_{\mathbf{x}}) \int_{\Omega} \mathbf{b}(\mathbf{y}') \cdot \mathbf{T}(\nu, \partial_y) \mathbf{E}(\mathbf{x} - \mathbf{y}') dy' \; \mathbf{x}' \in \Pi \tag{2.5}$$

Предел в правой части (2.5) вычисляется по некасательным направлениям к П. При этом в области Ω непосредственный переход к пределу под знаком интеграла оказывается невозможным из-за слишком большой особенности ядра

$$\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = -\mathbf{T}(\nu_y, \partial_y) \mathbf{E}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{T}^t(\nu_x, \partial_x) \tag{2.6}$$

Можно показать [7], что ядро **G** имеет неинтегрируемую особенность r^{-3} при $r \to 0$.

Интегральное преобразование Фурье, примененное к (2.6) дает соответствующую амплитуду в виде

$$\mathbf{G}^{\wedge}(\xi) = (2\pi)^2 \nu_y \cdot \mathbf{C} \cdot \cdot \xi \otimes \mathbf{E}^{\wedge}(\xi) \otimes \xi \cdot \cdot \mathbf{C} \cdot \nu_x \tag{2.7}$$

где для главного символа оператора поверхностных напряжений использовано представление $\mathbf{T}^{\wedge}(\nu, \xi) = 2\pi i \nu \cdot \mathbf{C} \cdot \xi$.

Замечание 2.2. Непосредственно из (2.7) следует, что амплитуда $\mathbf{G}^{\wedge}$ положительно однородна по ξ степени 0.

3. Сужение $\mathbf{G}^{\wedge}$ на плоскость П. В терминах обратного интегрального преобразования Фурье сужение $\mathbf{G}^{\wedge}$ на плоскость П, соответствующее формуле (2.5), может быть записано в виде

$$\mathbf{G}^{\sim}(\xi') = \lim_{x'' \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{G}^{\wedge}(\xi) \exp(2\pi i x'' \xi'') d\xi'', \quad \xi' = \mathrm{Pr}_{\Pi}\, \xi, \quad \xi'' = \mathrm{Pr}_{\nu}\, \xi \tag{3.1}$$

где знак "~" обозначает преобразование Фурье по переменным лежащим в плоскости П, а x'' – проекция вектора **x** на направление $\boldsymbol{\nu}$. Надо признать, что пользоваться формулой (3.1) также неудобно, как и (2.5), поскольку для вычисления предела в правой части (3.1) необходимо многократно при различных значениях x'' вычислять несобственный интеграл (3.1).

Для перехода к пределу непосредственно под интегралом, введем в рассмотрение постоянный тензор

$$\lim_{\xi''\to 0} \mathbf{G}^\wedge(\xi) = \nu_y \cdot \mathbf{C} \cdot \nu_x \tag{3.2}$$

Выделяя из амплитуды (2.7) постоянный тензор (3.2), получим асимптотическую оценку

$$(\mathbf{G}^\wedge(\xi) - \boldsymbol{\nu}_y \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\nu}_x) = O(|\xi''|^{-1}), \quad |\xi''| \to \infty \tag{3.3}$$

Оценка (3.3) показывает, что после выделения постоянного тензора (3.2) несобственный интеграл в (3.1) при $x'' = 0$ все еще расходится. Однако, анализ выражения в левой части (3.3) показывает, что компоненты, для которых эта оценка достигается нечетны по ξ''. Это позволяет получить следующую регулярную формулу для вычисления несобственного интеграла (3.1) при $x'' = 0$:

$$\mathbf{G}^\sim(\xi') = \int_{-\infty}^{\infty} \{1/2[\mathbf{G}^\wedge(\xi) + \mathbf{G}^\wedge(-\xi)] - \nu_y \cdot \mathbf{C} \cdot \nu_x\} d\xi'' \tag{3.4}$$

Замечания 3.1. а) Методами [7, 8] можно показать, что амплитуда $\mathbf{G}^\sim$ положительно однородна по ξ' степени 1 и при $\nu_y = \nu_x$ дает символ, строго эллиптичный при любых $\xi' \neq 0$.

б) Из предыдущего замечания следует, что вычисление $\mathbf{G}^\sim$ по формуле (3.4) можно проводить лишь для значений ξ', лежащих на окружности единичного радиуса, поскольку

$$\mathbf{G}^\sim(\xi') = |\xi'| \mathbf{G}_0^\sim(\varphi), \quad \varphi = \arcsin(\xi_2/|\xi'|) \tag{3.5}$$

Надо отметить, что зависимость символа $\mathbf{G}_0^\sim$ только от окружной координаты аналогична зависимости положительно однородного символа фундаментального решения уравнений статики $\mathbf{E}^\wedge(\xi)$, представимого в виде $|\xi|^{-2}\mathbf{E}_0^\sim(\varphi,\theta)$, только от двух сферических координат φ, θ. Это позволяет свести определение символа $\mathbf{E}^\wedge(\xi)$ к определению значений $\mathbf{E}_0^\sim(\varphi,\theta)$ на сфере единичного радиуса [7].

4. Формула для энергии. Используя (3.4), преобразованные по Фурье напряжения на плоскости П представим в виде

$$\mathbf{t}^\sim(\xi') = \mathbf{b}^\sim(\xi') \cdot \mathbf{G}^\sim(\xi') \tag{4.1}$$

Теперь, применяя равенство Парсеваля к выражению для энергии (1.2) и используя (4.1), найдем

$$W = 1/2 \int_{\Pi} \mathbf{b}^\sim(\xi') \cdot \overline{\mathbf{G}^\sim(\xi') \cdot \mathbf{b}^\sim(\xi')} d\xi' \tag{4.2}$$

В силу (3.5) выражение (4.2) принимает конечные значения, если $\mathbf{b} \in H_{1/2}(\Pi, R^3)$.

Замечания 4.1. а) Для любой измеримой области $\Omega \subset \Pi$ характеристическая функция $\chi_\Omega \notin H_{1/2}(\Pi)$. Этот факт немедленно вытекает из рассмотрения выражения преобразованной по Фурье характеристической функции какой-либо простой области, погруженной в заданную, для которой преобразование Фурье удается вычислить явно.

Например, для окружности единичного радиуса имеем [9]: $\hat{\chi}_\Omega(\xi') = |\xi'|^{-1} J_1(2\pi|\xi'|)$, что приводит к асимптотической оценке

$$|\hat{\chi}_\Omega(\xi')| = O(|\xi'|^{-3/2}), \quad |\xi'| \to \infty \tag{4.3}$$

Из (4.3) в свою очередь следует, что норма такой функции не ограничена в $H_{1/2}$. Но для дислокаций с постоянным вектором Бюргерса имеем $\mathbf{b}(\mathbf{x}') = \mathbf{b}\chi_\Omega(\mathbf{x}')$, $\mathbf{x}' \in \Pi$.

Таким образом при любой анизотропии упругой среды, в том случае если вектор Бюргерса постоянен в (плоской) области, занятой дислокацией, ее энергия, определяемая по (4.2) при учете (3.5), оказывается неограниченной.

б) Рассмотрим круговые дислокации с переменным вектором Бюргерса:

$$\mathbf{b}(\mathbf{x}') = \begin{cases} \mathbf{b}_0(1 - |\mathbf{x}'|^2)^\delta, & |\mathbf{x}'| \le 1, \quad 0 < \delta \\ 0, & |\mathbf{x}'| > 1 \end{cases} \tag{4.4}$$

где $\mathbf{b}_0$ – постоянный вектор. Преобразование Фурье представления (4.4) дает [8]:

$$\mathbf{b}^{\sim}(\xi') = \mathbf{b}_0\pi^{-\delta}\Gamma(\delta + 1)|\xi'|^{-\delta-1} J_{\delta+1}(2\pi|\xi'|) \tag{4.5}$$

Имея ввиду асимптотические оценки бесселевых функций

$$J_\alpha = O(r^\alpha), \quad r \to 0, \quad J_\alpha = O(r^{-1/2}), \quad r \to \infty, \quad \underset{\alpha \ge 0}{\forall \alpha}$$

При из (4.2), (4.5) по аналогии с п. а) немедленно получаем

При любой анизотропии упругой среды, энергия круговых дислокаций с вектором Бюргерса, определенным формулой (4.4), конечна.

Подстановка выражения (4.5) в формулу для энергии (4.2) при учете (3.5) дает

$$W = 1/2\pi^{-2\delta}\Gamma^2(\delta + 1)\int_0^\infty r^{-2\delta-1}J^2_{\delta+1}(2\pi r)dr\int_0^{2\pi} \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{G}_0^{\sim}(\varphi) \cdot \mathbf{b}_0 d\varphi \tag{4.6}$$

В формуле (4.6) упругие свойства среды и тип дислокации входят лишь в последний интеграл, так что при оценке влияния анизотропии упругих свойств на энергию образования круговой дислокации (4.4) оказывается возможным ограничиться анализом значений интеграла на единичной окружности.

5. Дислокация в изотропной среде. Рассматривается изотропная однородная упругая среда, тензор упругости которой имеет вид

$$C^{ijkl} = \lambda\delta^{ij}\delta^{kl} + \mu(\delta^{ik}\delta^{jl} + \delta^{il}\delta^{jk}) \tag{5.1}$$

где λ, μ – константы Ламе, δ_{ij} – символ Кронекера. Для этой среды непосредственное использование выражений (2.3), (2.4) дает

$$\mathbf{E}^\wedge(\xi) = (2\pi)^{-2}[\mu(\lambda + 2\mu)]^{-1}[(\lambda + 2\mu)|\xi|^{-2}\mathbf{I} - (\lambda + \mu)|\xi|^{-4}\xi \otimes \xi] \tag{5.2}$$

где $\mathbf{I}$ – единичная диагональная матрица. Подставляя выражения (5.1), (5.2) в формулу (2.7) для главного символа $\mathbf{G}^\wedge$ (при $\nu_x = \nu_y$), получим

$$\begin{aligned}\mathbf{G}^\wedge(\xi) = \frac{1}{\lambda + 2\mu}\bigg[&(\lambda + \mu)^2\boldsymbol{\nu} \otimes \boldsymbol{\nu} + \frac{\mu(\lambda + \mu)}{|\xi|^2}(\xi \cdot \boldsymbol{\nu})(\xi \otimes \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu} \otimes \xi) + \\ &+ \frac{\mu(\lambda + 2\mu)}{|\xi|^2}\xi \otimes \xi - \frac{\mu(\lambda + \mu)}{|\xi|^4}(\xi \cdot \boldsymbol{\nu})^2\xi \otimes \xi\bigg]\end{aligned} \tag{5.3}$$

Далее, используя для символа (5.3) регуляризацию (3.4), будем иметь

$$\mathbf{G}^{\sim}(\xi') = \frac{\mu|\xi'|}{2(\lambda+2\mu)}\left[(\lambda+2\mu)\mathbf{I} + \lambda\left(\frac{\xi'\otimes\xi'}{|\xi'|^2} + \mathbf{v}\otimes\mathbf{v}\right)\right] \tag{5.4}$$

Выражение (5.4) с точностью до множителя $|\xi'|$ совпадает с символом оператора теории трещин для изотропной среды [7, 10].

Имея ввиду замечание 4.1.б), из (5.4) получим формулу для интеграла по единичной окружности в формуле (4.6):

$$\int_0^{2\pi} \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{G}_0^{\sim}(\varphi) \cdot \mathbf{b}_0 \, d\varphi = 2\pi\frac{\mu(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}|\mathbf{b}_0|^2 \tag{5.5}$$

Выражение (5.5) показывает, что в изотропной среде энергия рассматриваемой круговой дислокации не зависит от ее типа. Таким образом, в изотропной среде появление краевых дислокаций и дислокаций скольжения с точки зрения энергии равновероятно.

6. Заключение. Построен псевдодифференциальный оператор, описывающий поле напряжений в анизотропной среде, вызванное дислокацией с произвольным вектором Бюргерса.

В предположении $\mathbf{b} \in H_{1/2}(\Pi, R^3)$ получены аналитические формулы для энергии круговой дислокации с переменным вектором Бюргерса, находящейся в анизотропной среде с анизотропией общего вида.

Получены аналитические выражения, дающие значения энергии круговой дислокации, находящейся в изотропной среде. Показано, что в изотропной среде энергия рассматриваемой круговой дислокации с переменным вектором Бюргерса $\mathbf{b} \in H_{1/2}(\Pi, R^3)$ не зависит от типа дислокации.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 19-19-00616.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mechanics of Generalized Continua (editor *Kroner E.*). Proceedings of the IUTAM-Symposium. Springer; 2014. ISBN-13:978-3662302590.
2. Collected Works of J. D. Eshelby: The Mechanics of Defects and Inhomogeneities. Springer; 2006 edition. ISBN-10:140204416X.
3. *Nabarro F.R.N.* The mathematical theory of stationary dislocations // Adv. Phys. 1952. V. 1. № 3. P. 269–394.
4. *Chou Y.T., Eshelby J.D.* The energy and line tension of a dislocation in a hexagonal crystal // J. Mech. Phys. Solids. 1962. V. 10. № 1. P. 27–34.
5. *Kuznetsov S.V.* On the operator of the theory of cracks // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. Série II, Mécanique, Physique, Chimie, Astronomie. 1996. V. 323. Iss. 7. P. 427–432.
6. *Peach M.O., Koehler J.S.* The forces exerted in dislocations and the stress field produced by them // Phys. Rev. Ser. 2. 1950. V. 80. P. 436–439.
7. *Kuznetsov S.V.* Fundamental and singular solutions of Lamé equations for media with arbitrary elastic anisotropy // Quart. Appl. Math. 2005. V. 63. P. 455–467.
8. *Ilyashenko A.V., Kuznetsov S.V.* 3D Green's function for equations of harmonic vibrations // Arch. Appl. Mech. 2017. V.87. P. 159–165. https://doi.org/10.1007/s00419-016-1184-y
9. *Stein E.* Real Analysis: Measure Theory, Integration, and Hilbert Spaces. Princeton University Press, 2005. ISBN-13:978-0691113869.
10. *Willis J.R.* A penny-shaped crack on an interface // Quart. J. Mech. Appl. Math. 1972. V. 25. № 3. P. 367–385.