

УДК 539.2

## НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭФФЕКТЫ В УПРУГИХ ПОЛЯХ ДИСКЛИНАЦИИ

В. И. Владимиров, И. А. Полонский, А. Е. Романов

В рамках теории упругости II порядка решена задача об изолированной клиновидной дисклинации. Оценены границы применимости линейной теории упругости при описании дисклинаций. Рассмотрены упругие эффекты II порядка, основным из которых является изменение объема тела с дисклинациями. Обсуждается влияние ядра дисклинации на величину средней дилатации тела. Для простейших физических моделей ядра даются численные оценки, находящиеся в качественном согласии с результатами атомного расчета на ЭВМ. Это позволяет приближенно рассчитать изменение плотности тела при переходе в аморфное состояние.

Дисклинационные представления играют важную роль в описании структуры и свойств твердых тел [1]. С их помощью исследуются ротационные моды пластичности, фрагментация, строение границ зерен кристаллов. В аморфных телах дисклинации являются неотъемлемым и определяющим элементом структуры. Однако для описания упругих характеристик дисклинаций до последнего времени использовалась линейная теория упругости. Исключением являются работы [2, 3], в которых было получено обобщение на нелинейный случай теоремы Вейнгартена и найдены выражения для упругих полей клиновидной дисклинации. Однако эти выражения получены в предположении, что материал подчиняется гипотетическому полулинейному закону состояния. Это приводит к невозможности их физического приложения.

В настоящей работе исследуется применимость теории упругости II порядка для описания дисклинаций в реальных материалах, затронут вопрос о ядре дисклинации, изучается эффект дилатации тела с дисклинацией с учетом влияния ядра. Для конкретных физических объектов построены простейшие модели ядра и даны численные оценки дилатации.

Рассмотрим клиновидную дисклинацию мощностью  $\omega$ , расположенную на оси бесконечно длинного цилиндра из изотропного идеально упругого материала. Как это необходимо в нелинейной теории упругости, будем различать координаты точек тела в начальном и деформированном состояниях:  $r, \vartheta, z$  и  $R, \Theta, Z$  соответственно (цилиндрические координаты). В силу осевой симметрии ясно, что для любой точки тела они будут связаны соотношениями

$$r = f(R), \quad \vartheta = \left(1 - \frac{\omega}{2\pi}\right)\theta, \quad z = KZ, \quad (1)$$

где  $K$  характеризует изменение длины цилиндра.

Для решения задачи применим теорию упругости II порядка [4, 5], т. е. будем считать компоненты тензора градиента смещений малыми, и во всех соотношениях удерживать лишь члены до II порядка малости включительно. Для этого должно быть малым воздействие, вызвавшее деформацию тела. Примем за малый параметр величину  $\delta = \omega/2\pi$ . В теории упругости II порядка роль общего закона играет закон Мурнагана [4]. Он может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} \hat{T} = & [\lambda j_1 + (\nu_1 - 2\nu_2 - \lambda) j_1^2 + (\nu_3 - 2\nu_2) j_2] \hat{G} + \\ & + [2\mu + (2\nu_2 - \nu_3 - 2\lambda - 2\mu) j_1] \hat{\varepsilon} + (\nu_3 - 4\mu) \hat{\varepsilon}^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь все тензоры определены в координатах конечного состояния.  $\hat{T}$  — тензор напряжений Коши;  $\hat{G}$  — метрический тензор, его компоненты образуют единичную матрицу в системе осей  $e_R, e_\theta, e_z$ , в которой в дальнейшем будут проводиться вычисления;  $\hat{\varepsilon}$  — тензор конечной деформации Альманзи—Гамеля. Если  $\tilde{\nabla}$  — набла-оператор координат конечного состояния,  $\mathbf{u}$  — вектор смещения, то

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\tilde{\nabla} \mathbf{u} + \tilde{\nabla} \mathbf{u}^T - \tilde{\nabla} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}^T), \quad (3)$$

$j_1, j_2, j_3$  — главные инварианты  $\hat{\varepsilon}$ ;  $\lambda, \mu$  — константы Ламе;  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  — модули упругости II порядка.

Другая форма записи закона Мурнагана

$$A = \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) j_1^2 - 2\mu j_2 + \frac{1}{3} \nu_1 j_1^3 - 2\nu_2 j_1 j_2 + \nu_3 j_3, \quad (4)$$

где  $A$  — удельная потенциальная энергия деформации, взятая, как всегда, на единицу начального объема. В соответствии со сказанным выше, (2) и (4) верны с точностью до II и III порядка соответственно.

Из (1), (3) нетрудно получить (для  $K=1$ )

$$\tilde{\varepsilon}_{RR} = \frac{1}{2} (1 - f'(R)^2), \quad \tilde{\varepsilon}_{\theta\theta} = \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( \frac{f(R)}{R} \right)^2 (1 - \delta)^2 \right]. \quad (5)$$

Остальные компоненты равны нулю, что обуславливает диагональность матрицы тензора  $\hat{T}$  в данной системе осей. Поэтому с учетом симметрии задачи из уравнений равновесия  $\tilde{\nabla} \cdot \hat{T} = 0$  останется одно

$$\frac{dT_{RR}}{dR} + \frac{1}{R} (T_{RR} - T_{\theta\theta}) = 0. \quad (6)$$

Граничные условия для него — отсутствие внешних сил на боковой поверхности и непрерывность смещений на оси цилиндра

$$T_{RR}(R_1) = 0, \quad f(R \rightarrow 0) \rightarrow 0. \quad (7)$$

Подставляя (5) в (2), затем (2) в (6) и (7), можно получить обыкновенное нелинейное дифференциальное уравнение, которое следует решать методом итераций до II приближения. Полагая

$$f(R) = R - \delta f_1(R) - \delta^2 f_2(R) - \dots,$$

получим последовательно для  $f_1$  и  $f_2$

$$f_1'' + \frac{1}{R} f_1' - \frac{1}{R^2} f_1 = \frac{2\alpha}{R}, \quad f_2'' + \frac{1}{R} f_2' - \frac{1}{R^2} f_2 = \frac{1}{R} \left( C_1 \ln \frac{R}{R_1} + C_2 \right),$$

где  $\alpha = \mu/(\lambda + 2\mu)$ ;  $C_1, C_2$  — комбинации модулей, которые не будем выписывать в силу их громоздкости;  $R_1$  — радиус цилиндра.

Первое уравнение дает известное решение линейной теории упругости [1], с помощью которого выводится второе уравнение. Проинтегрировав его, получим для  $f(R)$

$$r = f(R) = R \left[ 1 - \delta \left( \alpha \ln \frac{R}{R_1} - \frac{1}{2} \right) - \delta^2 \left( \alpha_1 \ln^2 \frac{R}{R_1} + \alpha_2 \ln \frac{R}{R_1} + \alpha_3 \right) \right], \quad (8)$$

где

$$\alpha_1 = \frac{\alpha^3}{2\mu} (9\lambda + 12\mu - 4\nu_1 + 4\nu_2) + \frac{\alpha^2}{\mu} (\nu_2 - 3\mu - \lambda),$$

$$\alpha_2 = \frac{\alpha^3}{2\mu} (4\lambda + 11\mu - 2\nu_2) + \frac{\alpha^2}{\mu} (\nu_2 - 3\mu),$$

$$\alpha_3 = -\frac{1}{2(\lambda + \mu)} \left[ \alpha^2 \left( \frac{3}{2} \mu + \nu_1 - \nu_2 \right) - \alpha \left( \frac{3}{2} \mu + \nu_2 \right) + \frac{1}{4} (\lambda + \mu + 2\nu_2) \right].$$

Теперь из (2), (4), (5) находим все интересующие нас характеристики упругих полей. Например,

$$T_{RR} = \left[ 2\alpha(\lambda + \mu) \ln \frac{R}{R_1} \right] \delta + \left[ C_3 \ln^2 \frac{R}{R_1} + C_4 \ln \frac{R}{R_1} + C_5 \right] \delta^2,$$

$$T_{\theta\theta} = \left[ 2\alpha(\lambda + \mu) \left( 1 + \ln \frac{R}{R_1} \right) \right] \delta + \left[ C_6 \ln^2 \frac{R}{R_1} + C_7 \ln \frac{R}{R_1} + C_8 \right] \delta^2, \quad (9)$$

где  $C_{3,4,5,6,7,8}$  — комбинации модулей. Распределение напряжений в теле показано на рисунке в сравнении с известным из линейной теории.

Погонная энергия деформации тела

$$w = \iint_s Ads = \iint_S A \frac{ds}{dS} dS = 2\pi \int_0^{R_1} (1 - j_1) RA(R) dR,$$

так как

$$ds/dS = (1 - 2j_1 + 4j_2 - 8j_3)^{1/2} \approx 1 - j_1 \quad [4].$$

Здесь  $s$ ,  $S$  — сечение тела в начальном и конечном состоянии соответственно.

Из (8), (5), (4) получим

$$w = \frac{\pi\mu\delta^2 R_1^2}{4(1-\nu)} + \pi\mu\delta^3 C_w R_1^2, \quad (10)$$

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона,

$$C_w = \frac{\lambda\mu}{2(\lambda + 2\mu)^2} + \frac{\lambda + \mu}{\mu} (\alpha_2 - \alpha_1) + \frac{3\nu_2 - \nu_1}{3\mu} \alpha^3.$$

Первый член в (10) — значение энергии дисклинации в линейной теории упругости [1].

Особенно важным представляется вопрос о средней дилатации тела с дисклинацией, так как линейная теория дает для нее нулевое значение. В рассмотренной задаче средняя дилатация

$$\bar{D}_a \approx \frac{S-s}{S} = 1 - \left( \frac{r_1}{R_1} \right)^2 \left( 1 - \frac{\omega}{2\pi} \right),$$

и из (8)

$$\bar{D}_a = (3/4 + 2\alpha_3) \delta^2. \quad (11)$$

Отметим еще один эффект II порядка. В задачах о плоской деформации обычно рассматриваются два случая [4]: а) отсутствует смещение по оси  $Z$ , б) отсутствует продольная сила

$$\iint_s T_{zz} dS = 0.$$

Рассмотренная выше задача относится к случаю «а», так как в (1) положили  $K=1$ . Элементарный анализ линейного решения [1] задачи о клиновой дисклинации показывает, что для него выполнены оба условия. Поэтому случаи «а» и «б» никак не различают. В нелинейной теории упругости это, вообще говоря, не так (ниже это будет подтверждено примером).

Обсудим вопрос о средней дилатации тела с дисклинацией и влиянии на нее ядра дефекта в постановке задачи «б».

Для среднего значения тензора напряжений известно соотношение [4]

$$\iiint_V \hat{T} dV = \iint_{\partial V} \mathbf{FR} dS,$$

где  $\partial V$  — поверхность тела  $V$ ;  $\mathbf{F}$  — действующие на ней силы;  $\mathbf{R}$  — радиус-вектор конечного состояния. Отсюда можно аналогично выводу в [4] получить

$$\bar{D}_6 = \frac{1}{(3\lambda + 2\mu)V} \iint_{\partial V} \mathbf{F} \cdot \mathbf{R} dS - \frac{1}{(3\lambda + 2\mu)V} \iiint_V \varphi(\hat{\varepsilon}) dV, \quad (12)$$

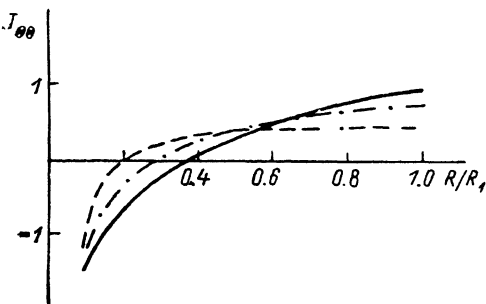
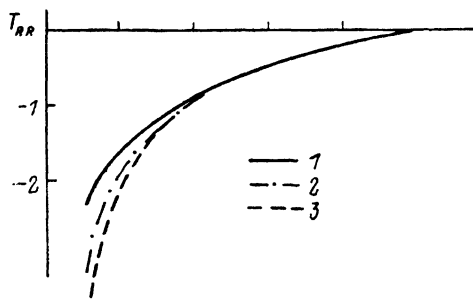
где

$$\varphi(\hat{\varepsilon}) = \left(-\frac{7}{2}\lambda - \mu + 3\nu_1 - 7\nu_2 + \frac{1}{2}\nu_3\right) (\text{Sp } \hat{\varepsilon})^2 + \left(-3\lambda - 6\mu + 3\nu_2 - \frac{1}{2}\nu_3\right) \text{Sp } \hat{\varepsilon}^2.$$

Здесь  $\hat{\varepsilon}$  — линейный тензор деформации. Второй член играет роль поправки II порядка. При  $\mathbf{F}=0$  имеем формулу Тушина—Ривлина [4] для средней дилатации ненагруженного тела с линейными дефектами. Видно, что для ее применения достаточно знания линейного тензора деформации и модулей II порядка. В нашем случае получим

$$\bar{D}_6 = -\frac{\delta^2}{3\lambda + 2\mu} \left[ \left(-\frac{7}{2}\lambda - \mu + 3\nu_1 - 7\nu_2 + \frac{1}{2}\nu_3\right) \alpha^2 + \left(-3\lambda - 6\mu + 3\nu_2 - \frac{1}{2}\nu_3\right) \left(\alpha^2 - \alpha + \frac{1}{2}\right) \right]. \quad (13)$$

Например, взяв модули меди (в единицах  $10^5$  МПа):  $\lambda=1.07$ ,  $\mu=0.477$ ,  $\nu_1=-1.416$ ,  $\nu_2=-1.238$ ,  $\nu_3=-10.196$  (рассчитаны по приведенным в [4] дан-



ных), получим  $\bar{D}_6=0.43 \delta^2$ , в то время как расчет по (11) дает  $\bar{D}_a \approx 0.78 \delta^2$ .

На данном этапе ядром дисклинации будем считать зону радиуса  $R_0$ , где напряжения достигли такого значения  $T_0 = \mu \varepsilon_0$ , что произошла их пластическая релаксация. Эта модель пригодна, например, для описания оборванных дислокационных стенок. Ясно, что в этом случае напряжения не превосходят рас-

Распределение радиальной  $T_{RR}$  и тангенциальной  $T_{\theta\theta}$  компонент тензора напряжений в цилиндре с клиновой дисклинацией.

1 — в линейной теории упругости; 2, 3 — в теории упругости 2-го порядка для дисклинаций мощности  $36^\circ$  и  $72^\circ$  соответственно. Напряжения даны в единицах  $\mu\omega/2\pi(1-\nu)$ . Для построения результатов нелинейной теории использованы модули упругости армо-железа [\*]:  $\lambda=1.1 \times 10^{11}$  Па,  $\mu=0.82 \cdot 10^{11}$  Па ( $\nu=0.29$ ),  $\nu_1=7.86 \times 10^{11}$  Па,  $\nu_2=-3.28 \cdot 10^{11}$  Па,  $\nu_3=-1.36 \cdot 10^{11}$  Па.

считываемых в линейной теории упругости. Поэтому оценим  $R_0$  сверху из соотношения

$$\mu \varepsilon_0 \leq \frac{\mu}{1-\nu} \left| \delta \ln \frac{R_0}{R_1} \right|,$$

откуда

$$R_0 \leq R_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0}{|\delta|}\right). \quad (14)$$

(Конечно, считаем  $\delta < \varepsilon_0$ , иначе ядро займет весь объем тела). Если тело мысленно разбить на ядро и внешнюю часть ( $V_0$  и  $V_1$ ), то

$$\begin{aligned} \bar{D}_6 &= \frac{\Delta V_1 + \Delta V_0}{V_1 + V_0} = \frac{1}{(3\lambda + 2\mu)V} \left[ \iiint_{V_1} \varphi(\hat{\varepsilon}) dV + \iiint_{V_0} \varphi(\hat{\varepsilon}) dV + \right. \\ &+ \left. \iint_{\partial V_1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{R} dS - \iint_{\partial V_0} \mathbf{F} \cdot \mathbf{R} dS \right] = \frac{1}{(3\lambda + 2\mu)V} \left[ \iiint_{V_1} \varphi(\hat{\varepsilon}) dV + \right. \\ &+ \left. \iint_{V_0} \varphi(\hat{\varepsilon}) dV \right] = \bar{D}_1 + \bar{D}_2, \end{aligned}$$

$\left( \iint_{\partial V_1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{R} dS = - \iint_{\partial V_0} \mathbf{F} \cdot \mathbf{R} dS \right)$  ввиду отсутствия внешних сил). Второй член можно оценить величиной  $|\delta \ln (R_0/R_1)| (R_0/R_1)^2$ , считая, что во всем ядре напряжения уровня  $T_0$ . При  $R_0 \ll R_1$  оценку первого члена дает выражение (13), тогда

$$\left| \frac{\bar{D}_2}{\bar{D}_1} \right| \approx \left| \frac{1}{\delta} \ln \frac{R_0}{R_1} \right| \left( \frac{R_0}{R_1} \right)^2 = \frac{\varepsilon_0}{\delta^2} \exp \left( - \frac{2\varepsilon_0}{|\delta|} \right).$$

Для малых  $\delta$  эта величина весьма мала, т. е. ядро не оказывает заметного влияния на среднюю дилатацию.

Рассмотрим следующую модель. Ядро отрицательной дисклинации будем считать полостью радиуса  $R_0$  с эффективной поверхностной энергией  $\gamma = \mu a/k_0$ , где  $k_0 \sim 4 \div 10$ . (Аналогично для положительной дисклинации можно принять модель ядра в виде жесткого цилиндра). Эта модель основывается на давних машинного эксперимента [6], в котором изучались полные дисклинации в малых кристаллитах ( $R_1 \leq 10a$ , где  $a$  — постоянная решетки). Хотя теория упругости II порядка неприменима для точного количественного анализа упругих полей таких дисклинаций, можно ожидать, что она даст качественно верные результаты, в том числе для величины средней дилатации тела. Выясним, так ли это.

Если  $R_0 \ll R_1$ , то применяя (12), (13), получим

$$\bar{D}_6 \approx - \frac{\delta^2}{(3\lambda + 2\mu)} \left[ \left( -\frac{7}{2} \lambda - \mu + 3\nu_1 - 7\nu_2 + \frac{1}{2} \nu_3 \right) \alpha^2 + \right. \\ \left. + \left( -3\lambda - 6\mu + 3\nu_2 - \frac{\nu_3}{2} \right) \left( \alpha^2 - \alpha + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{4\gamma R_0}{(3\lambda + 2\mu) R_1^2} + \frac{R_0^2 - r_0^2}{R_1^2},$$

где  $r_0$  характеризует тот объем, который занимали в исходном состоянии атомы, образующие ядро. Видно, что для не слишком малых кристаллитов основной вклад дает первый член (например, для меди при  $\omega = \pi/3$  ( $\delta = 1/6$ ),  $\gamma \sim \mu a/8$ ,  $R_1 \approx 10a$ ,  $R_0 \approx 1.3a$  получим  $\bar{D}_6 \approx 0.012 - 0.002 + 0.007 \approx 0.01 \div 0.02$ ). Поэтому при  $R_1 \gg 10a$  дилатация может быть оценена по формуле (13). Когда кристаллит мал, доминируют члены, связанные с ядром, определение которых требует атомного расчета. Полученный результат находится в качественном согласии с [6], где для  $\pi/3$ -дисклинации в медном кристаллите радиуса  $R_1 \geq 8a$   $\bar{D}_6 \approx 0.015 \div 0.02$ .

## Обсуждение результатов

1. Сравнение полученных распределений компонент тензора напряжений в теле с известными из линейной теории (см. рисунок) показывает, что отличия не слишком велики вне ядра для дисклинаций мощности приблизительно до  $\pi/6$ . Так, для  $\omega = 36^\circ$ , армо-железа отличия порядка 30%. Это и дает оценку границам применимости линейной теории упругости при описании дисклинаций. Для  $\omega = 10^\circ$  (типичное значение для фрагментированных структур, возникающих при больших пластических деформациях) отличия порядка 2%.

2. Как видно из (9), на оси цилиндра имеется сингулярность упругих полей, как и в линейной теории, причем ряд по степеням  $\delta$ , очевидно, расходится в достаточно близкой к оси области. Это говорит о невозможности описания ядра дефекта итерационными схемами нелинейной теории упругости. Для реальных дисклинаций это связано с тем, что поведение материала в ядре существенно неупругое. Поэтому для описания ядра следует конкретизировать его физическую структуру и исходя из нее задать свойства ядра либо использовать феноменологическое описание на основе экспериментальных данных. Однако в ряде случаев влияние ядра несущественно, например для значения средней дилатации, энергии деформации тела с достаточно малыми дисклинациями. Например, взяв в (15)  $\delta = 0.01$ ,  $\varepsilon_0 = 0.05$ , видим, что вклад ядра в дилатацию составляет  $\approx 0.02 \ll 1$ . Более того, для достаточно малых  $\omega$  можно в рамках континуального подхода вообще игнорировать существование ядра. В самом

деле, из (14) видно, что при  $\omega \sim (3-5)^2$  радиус ядра сравним с величиной вектора Бюргерса  $|b|$  (для типичных значений  $R_1 \sim 10^3-10^4$  (b),  $\varepsilon_0 \sim 0.1$ ).

3. Как видно из (10), теория упругости II порядка дает в выражении для энергии деформации тела поправку, пропорциональную  $\delta^3$ . Значит, в нелинейной теории существует различие между энергиями дисклинаций и противоположными векторами Франка. Для модулей упругости меди  $\delta=0.1$  это различие составит  $\sim 14\%$  от значения энергии дисклинации в линейной теории.

4. Средняя дилатация тела в отличие от линейной теории не равна нулю. Этот типичный эффект II порядка является, видимо, основным объектом приложения теории упругости II порядка в задачах эластостатики, связанных с дисклинациями. Из (11), (13) видно, что в рамках теории II порядка дилатация не зависит от знака  $\omega$ ; характерное значение ее (для  $\omega=10^3$ ) — порядка 0.01 — зависит от модулей упругости материала.

5. Теория упругости II порядка дает качественно верный результат для средней дилатации тела с полной дисклинацией, если моделировать строение ядра на основании данных машинного эксперимента. Этот результат, согласно современным представлениям о структуре аморфных тел [1], можно рассматривать как грубую оценку отличия плотности аморфного и кристаллического состояний тела.

6. Еще одним эффектом II порядка является изменение длины ненагруженного цилиндра с дисклинацией. Это приводит к особенностям постановки плоских задач теории II порядка для тел с дисклинациями по сравнению с аналогичными линейными задачами.

## Выводы

1. Для достаточно малых мощностей ( $|\omega| \leq \pi/6$ ) напряжения и энергия дисклинации могут описываться линейной теорией упругости, так как отличия линейного решения от решения теории упругости II порядка невелики ( $< 30\%$ ).

2. Основным нелинейным упругим эффектом является средняя дилатация тел с дисклинациями. Ее расчет позволяет оценить изменение плотности при переходе в аморфное состояние. В рамках теории II порядка дилатация не зависит от знака дисклинации. Для  $|\omega|=10^3$   $\bar{D} \sim 0.1\%$ .

## Литература

- [1] Владимиров В. И., Романов А. Е. Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
- [2] Зубов Л. М. Изв. АН СССР. МТТ, 1986, № 1, с. 69—73.
- [3] Зубов Л. М. ДАН СССР, 1986, т. 287, № 3, с. 579—582.
- [4] Лурье А. И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
- [5] Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.
- [6] Михайлин А. И., Романов А. Е. В сб.: Структура и свойства аморфных сплавов. Устинов, 1985, в. VII, с. 25—33.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе  
АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
2 июня 1987 г.