01;05

Дисклинационная петля кручения в упругом шаре

© А.Л. Колесникова, А.Е. Романов

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург
E-mail: koles@def.ipme.ru; kolesnikovanna@yandex.ru
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
Аристотелевский университет, Салоники
E-mail: aer@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 26 мая 2009 г.

Дано решение граничной задачи изотропной теории упругости для дисклинационной петли кручения, находящейся в сферическом теле. Решение построено с помощью метода виртуальных дефектов. В качестве виртуальных дефектов выбраны дисклинационные петли кручения, упругие поля которых представлены в виде разложений в ряды по полиномам Лежандра. Определены упругие поля и энергия в зависимости от положения дисклинационной петли в шаре.

PACS: 61.72.Lk, 61.46.Hk

Физико-механический отклик малых (в том числе и наноразмерных) кристаллических частиц и атомных кластеров на внешнее воздействие во многом определяется наличием в них структурных дефектов, например дислокаций и дисклинаций [1]. Упругие искажения, вносимые дефектами в кристаллическую решетку, зависят от экранировки свободной поверхностью, что для малых частиц становится определяющим фактором.

Наиболее простой физической моделью для исследования поведения дефектов в малых частицах является упругий шар, содержащий отдельный дефект. Однако даже в такой упрощенной постановке граничная задача теории упругости является по определению пространственной [2], что обусловливает трудность ее аналитического анализа. К настоящему моменту результаты получены только для весьма ограниченого набора проблем для дефектов в упругом шаре: в работе [3] дано решение осесимметричной задачи для призматической дислокационной петли, а в работах [4,5] найдены упругие поля и энергии прямолинейных клиновой дисклинации или винтовой дислокации, линии которых совпадают с диаметром шара. Указанные решения найдены методом сферических гармоник, разработанным ранее для несингулярных задач теории упругости для тел со сферическими границами [2]. В данном сообщении мы приводим новое решение, полученное оригинальным методом виртуальных дефектов, для упругих полей и энергии дисклинационной петли кручения (ДПК) в шаре.

Круговая ДПК представляет собой дефект, возникающий в результате взаимного разворота берегов кругового разреза с осью поворота нормальной плоскости разреза [6]. Такие дефекты важны как в физических приложениях, например при описании скручивания цепей в полимерах [7], так и в механических приложениях, например при прочностных расчетах для стержневых систем [8].

Впервые механические поля напряжений ДПК в бесконечной упругой среде были рассчитаны в работе [9], где дано представление через полные эллиптические интегралы. Позднее упругие поля ДПК были записаны в форме интегралов Лифшица–Ханкеля [10], ниже мы используем именно это представление. Отметим, что через интегралы Лифшица–Ханкеля могут быть выражены упругие поля круговых дислокационно-дисклинационных петель общего типа [11,12]. К настоящему времени решены задачи об упругом поведении ДПК вблизи плоских границ раздела и в пластине конечной толщины [11–15]. Упругие поля и энергия ДПК в цилиндре найдены в работе [16].

В выбранной геометрии, показанной на рис.1, a, скачок смещений на поверхности разреза $[u_\varphi]$, полные смещения u_j и механические напряжения σ_{ij} ДПК в цилиндрических координатах r, φ, z могут быть представлены в следующем виде [11,12]:

$$[u_\varphi]\big|_{z=z_0} = \omega r H\left(1 - \frac{r}{c}\right), \tag{1}$$

$$u_r = u_z = 0, \tag{2b}$$

$$u_\varphi = \frac{\omega c \,\mathrm{sgn}(z - z_0)}{2} J(2, 1; 0), \tag{2c}$$

$$\sigma_{r\varphi} = -\frac{G\omega \,\mathrm{sgn}(z - z_0)}{2} J(2, 2; 1), \tag{3a}$$

$$\sigma_{z\varphi} = -\frac{G\omega}{2} J(2, 1; 1), \tag{3b}$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{zz} = \sigma_{rz} = 0, \tag{3 c, d, e, f}$$

где ω — величина вектора Франка $\boldsymbol{\omega} = -\omega \mathbf{e}_z$ ДПК, имеющей направление линии дефекта $\mathbf{e}_\varphi$ ($\mathbf{e}_\varphi$ и $\mathbf{e}_z$ — координатные орты); c — радиус

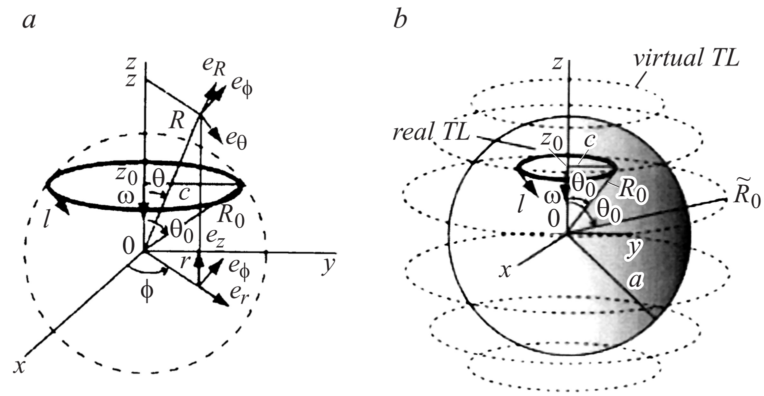

Рис. 1. Дисклинационная петля кручения ДПК (*real TL*) в упругом шаре радиусом a. Вектор Франка ДПК — $\boldsymbol{\omega} = -\omega \mathbf{e}_z$ и направление линии дефекта — $\mathbf{l} = \mathbf{e}_\varphi$. a — используемые системы кординат: цилиндрическая r, φ, z и сферическая R, θ, φ. Штриховая линия показывает сферу радиусом R_0. b — виртуальные ДПК (*virtual TL*), распределенные по сфере радиусом $\tilde{R}_0$. Координаты линии: реальной ДПК — R_0, θ_0, пробной виртуальной ДПК — $\tilde{R}_0, \tilde{\theta}_0$.

петли; $H\left(1 - \frac{r}{c}\right)$ — функция Хевисайда; G — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона; $J(m, n; p)$ — интегралы Лифшица–Ханкеля, зависящие от двух функций Бесселя $J_m(x)$ и $J_n(x)$:

$$J(m, n; p) = \int\limits_0^\infty J_m(\kappa) J_n\left(\kappa \frac{r}{c}\right) e^{-\frac{\kappa|z - z_0|}{c}} \kappa^p d\kappa, \tag{4}$$

z_0 — координата ДПК.

Для решения граничных задач теории упругости со сферической геометрией удобно получить представление полей ДПК в сферических координатах R, θ, φ (рис. 1, a). С помощью подстановок $\gamma = \kappa/c$, $r = R\sin\theta$, $z = R\cos\theta$, $c = R_0\cos\theta_0$, $z_0 = R_0\cos\theta_0$, разделения экспоненты на две, разложения в ряд одной из Бесселевых функций с экспоненциальным весом и интегрирования почленно получившегося ряда, получаем интегралы Лифшица–Ханкеля в виде рядов с полиномами Лежандра. Перевод компонент полей из цилиндрической системы координат в сферическую, замена интегралов Лифшица–Ханкеля рядами по полиномам Лежандра, и, наконец, использование рекуррентных соотношений для полиномов Лежандра приводят к следующей записи полей ДПК:

$$u_R = u_\theta = 0, \tag{5a, b}$$

$$u_\varphi = \frac{\omega R_0}{2} \times \begin{cases} (-1)\sum\limits_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)(k+2)} \left(\frac{R_0}{R}\right)^{k+1} P_k^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_k^1(\cos\theta), & R_0 < R, \\ \Big(\frac{\operatorname{sgn}(z-z_0)R\sin\theta}{R_0} + \frac{R}{R_0}\left(\cos\theta_0 + \frac{1}{4}\sin 2\theta_0 \sin\theta_0\right)\sin\theta \\ \quad + \sum\limits_{k=2}^{\infty} \frac{1}{(k-1)k(k+1)} \left(\frac{R}{R_0}\right)^{k} P_k^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_k^1(\cos\theta)\Big), & R < R_0, \end{cases} \tag{5c}$$

$$\sigma_{R\varphi} = \frac{-G\omega}{2} \times \begin{cases} (-1)\sum\limits_{k=2}^{\infty} \frac{1}{(k+1)k} \left(\frac{R_0}{R}\right)^{k+2} P_k^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_k^1(\cos\theta), & R_0 < R, \\ (-1)\sum\limits_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(k+1)(k+2)} \left(\frac{R}{R_0}\right)^{k} P_{k+1}^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_{k+1}^1(\cos\theta), & R < R_0, \end{cases} \tag{6a}$$

$$\sigma_{\theta\varphi} = \frac{-G\omega}{2} \times \begin{cases} \sum\limits_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)(k+2)} \left(\frac{R_0}{R}\right)^{k+2} P_k^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_k^2(\cos\theta), & R_0 < R, \\ (-1)\sum\limits_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)(k+2)} \left(\frac{R}{R_0}\right)^{k} P_{k+1}^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_{k+1}^2(\cos\theta), & R < R_0, \end{cases} \tag{6b}$$

$$\sigma_{RR} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{R\theta} = 0, \tag{6 c, d, e, f}$$

где $P_n^1(t)$ и $P_n^2(t)$ — присоединенные полиномы Лежандра, которые связаны с полиномами Лежандра $P_n(t)$ следующими соотношениями: $P_n^m(t) = (-1)^m(1-t^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dt^m} P_n(t)$, $m = 1,\ 2,\ 3\ldots$ [17].

Представление смещений ДПК через ряды с полиномами Лежандра (5c) естественным образом выявляет скачок смещений (1). За скачок оказывается ответствен первый член ряда (5c) при $R < R_0$. Таким образом, разложение смещений (2c) в ряд по полиномам Лежандра позволяет выделить упругие смещения из полных. Найденные поля ДПК (5) и (6) в виде рядов с полиномами Лежандра дают возможность находить решения осесимметричных граничных задач в присутствии сферических поверхностей раздела.

Для решения граничной задачи об упругих полях ДПК в шаре применим метод виртуальных дефектов, где в качестве виртуальных дефектов также используются ДПК. Подробно метод описан в [11,12,16,18], а его применение к задачам о петлях в цилиндре дано в [16,19]. В рамках метода искомое поле реального дефекта вблизи свободной поверхности или интейфейса ищется в виде суммы поля дефекта в бесконечной среде и добавочного поля, которое позволяет удовлетворять заданным граничным условиям. Добавочное поле создается непрерывными распределениями виртуальных дефектов, а в случае осесимметричных задач — распределениями виртуальных дислокационных и дисклинационных петель. Число распределений соответствует числу заданных граничных условий. Граничные условия, записанные с помощью полей реального дефекта и полей виртуальных дефектов, представляют в виде интегральных уравнений. Для случаев плоских [12,16,18], цилиндрических [16,19] и клиновидных [20] границ интеральные уравнения с помощью соответствющих интегральных преобразований сводятся к алгебраическим относительно образов неизвестных функций распределений. Дальнейшее определение искомых полей, удовлетворяющих граничным условиям, не представляет труда.

В нашем случае на свободной поверхности шара на компоненты тензора напряжений накладываются следующие условия:

$$\sigma_{Rj}\Big|_{R=a} = 0, \quad i, j = R, \theta, \varphi, \tag{7}$$

где a — радиус шара. Следуя методу виртуальных дефектов, запишем поле напряжений ДПК в шаре ${}^{s}\sigma_{ij}$ в следующем виде:

$${}^{s}\sigma_{ij} = \sigma_{ij} + \int\limits_{0}^{\pi} f(\tilde{\theta}_0)\sigma_{ij}^{V}\tilde{R}_0 \sin\tilde{\theta}_0 d\tilde{\theta}_0, \tag{8}$$

где $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(R, \theta, R_0, \theta_0)$ — напряжения реальной ДПК в бесконечной среде (6); $\sigma_{ij}^{V} = \sigma_{ij}^{V}(R, \theta, \tilde{R}_0, \tilde{\theta}_0)$ — напряжения пробной виртуальной ДПК в распределении, определяемые формулами (6); $\tilde{R}_0, \tilde{\theta}_0$ — сферические координаты пробной виртуальной ДПК (рис. 1, b).

Граничные условия (7) на свободной поверхности сфероида с учетом (8) запишутся в виде:

$$\sigma_{R\varphi}\Big|_{R=a} + \int\limits_0^\pi f(\tilde{\theta}_0)\sigma^V_{R\varphi}\Big|_{R=a} \tilde{R}_0 \sin\tilde{\theta}_0 d\tilde{\theta}_0 = 0. \tag{9}$$

Принимая во внимание представления напряжений ДПК в виде рядов по полиномам Лежандра, можно переписать (9):

$$\frac{G\omega}{2}\sum_{k=2}^{\infty}\frac{1}{(k+1)k}\left(\frac{R_0}{a}\right)^{k+2} P_k^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0 P_k^1(\cos\theta)$$
$$+ \frac{G\omega}{2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(k+1)(k+2)}\left(\frac{a}{\tilde{R}_0}\right)^{k} A_{k+1}P_{k+1}^1(\cos\theta) = 0, \tag{10}$$

где $A_{k+1} = \int\limits_0^\pi f(\tilde{\theta}_0)\tilde{R}_0 \sin^3\tilde{\theta}_0 P_{k+1}^2(\cos\tilde{\theta}_0)d\tilde{\theta}_0$. Из уравнения (10) находим интегралы A_n приравниванием коэффициентов при одинаковых полиномах Лежандра:

$$A_n = -\left(\frac{\tilde{R}_0}{a}\right)^{n-1}\left(\frac{R_0}{a}\right)^{n+2} P_n^2(\cos\theta_0)\sin^2\theta_0, \quad n = 2, 3, 4, \ldots \tag{11}$$

Подставляя найденные A_n в (8), получаем искомое поле напряжений ДПК в шаре:

$${}^s\sigma_{R\varphi} = -\frac{G\omega}{2}[\mathrm{sgn}(z - z_0)J(2,2;1)\sin\theta + J(2,1;1)\cos\theta]$$
$$-\frac{G\omega\sin^2\theta_0}{2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(k+1)(k+2)}\left(\frac{R_0}{a}\right)^{k+3}\left(\frac{R}{a}\right)^{k} P_{k+1}^2(\cos\theta_0)P_{k+1}^1(\cos\theta), \tag{12a}$$

$${}^s\sigma_{\theta\varphi} = -\frac{G\omega}{2}[\mathrm{sgn}(z - z_0)J(2,2;1)\cos\theta - J(2,1;1)\sin\theta]$$
$$-\frac{G\omega\sin^2\theta_0}{2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k(k+1)(k+2)}\left(\frac{R_0}{a}\right)^{k+3}\left(\frac{R}{a}\right)^{k} P_{k+1}^2(\cos\theta_0)P_{k+1}^2(\cos\theta). \tag{12b}$$

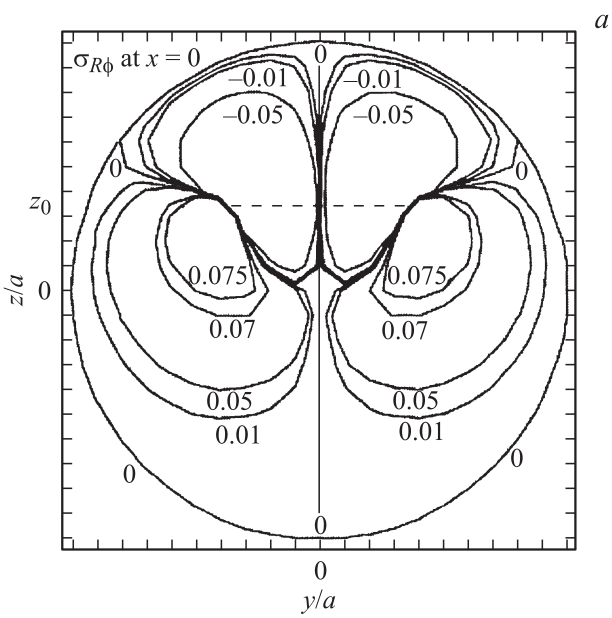

Рис. 2. Упругие характеристики дисклинационной петли кручения в шаре. a — напряжения ${}^s\sigma_{R\varphi}$ в плоскости $Z0Y$, $x = 0$, пунктирной линией обозначено место расположения петли. Напряжения выражены в единицах $G\omega/2$, G — модуль сдвига, ω — мощность петли (величина вектора Франка); все линейные величины выражены в единицах радиуса шара a; b — энергия петли в зависимости от ее радиуса c при $a = 100b$ и координате петли $z_0 = a\cos\frac{\pi}{4} \approx 70.7b$; c — энергия петли радиуса $c = 40b$ в зависимости от ее осевого положения в шаре z_0. На рис. b и c: *1* — энергия петли в бесконечной среде, *2* — энергия петли в шаре. Радиус ядра петли $r_c = b$, энергия выражена в единицах $G\omega^2 b^3$, b — характерная величина вектора Бюргерса дислокации в данном материале.

Напряжения ${}^s\sigma_{ij}$ удовлетворяют граничным условиям (7) и уравнениям равновесия, которые для ДПК, обладающей только двумя ненулевыми и осесимметричными компонентами напряжений, вырождаются в одно уравнение: $\frac{\partial\sigma_{R\varphi}}{\partial R} + \frac{\sigma_{\theta\varphi}}{R\partial\theta} + \frac{3\sigma_{R\varphi}+2\sigma_{\theta\varphi}\operatorname{ctg}\theta}{R} = 0$.

На рис. 2, a показаны распределения напряжений ДПК в шаре. Отметим тот факт, что для однозначного определения полей смещений

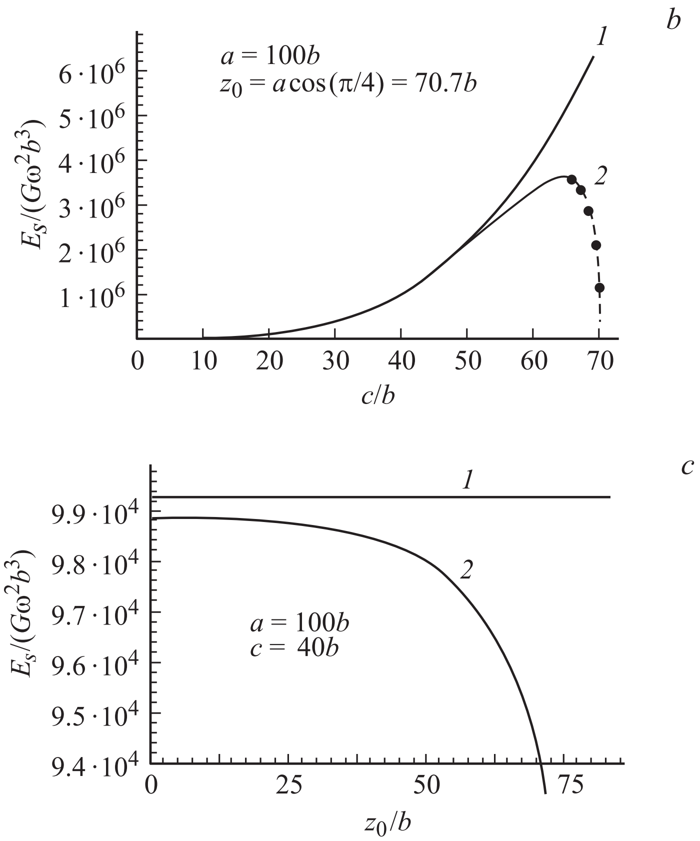

Рис. 2 (*продолжение*).

реального детекта в сфере или цилиндре с помощью метода виртуальных дефектов необходимо учитывать следующее: 1) поля смещений петель содержат скачок, который обусловлен способом введения петли в упругое пространство; 2) необходимо вычесть из полей смещений от распределений виртуальных петель их скачки либо использовать виртуальные петли, которые не содержат скачков смещений в области решения граничной задачи.

Знание полей напряжений позволяет определить упругую энергию ДПК в шаре по формуле:

$$E_s = -\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\int_0^{c-r_0}[u_\varphi]^s\sigma_{z\varphi}\big|_{z=z_0} r\,dr\,d\varphi$$

$$= \frac{G\omega^2 R_0^3\sin^3\theta_0}{2}\left(\ln\frac{8R_0\sin\theta_0}{r_c}-\frac{8}{3}\right)+\frac{G\omega^2\pi R_0^3\sin^2\theta_0}{2}$$

$$\times\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(\cos\theta_0)^{k+3}}{k(k+1)}\left(\frac{R_0}{a}\right)^{2k+3}P_{k+1}^2(\cos\theta_0)\int_0^{\theta_0}\frac{(\sin\theta)^2}{(\cos\theta)^{k+4}}P_k^1(\cos\theta)d\theta, \tag{13}$$

где член вне ряда — это энергия ДПК в бесконечной среде, r_c — радиус ядра ДПК. На рис. 2, b, c представлены зависимости энергии ДПК в шаре от радиуса петли и от осевого положения ДПК при фиксированном значении радиуса петли c.

Из энергетических зависимостей видно, что петля имеет критический радиус, при котором ее энергия максимальна. Этот радиус достаточно близок к радиусу шара. При размере петли, большем критического, она имеет тенденцию к расширению и выходу на поверхность (рис. 2, b). Из графика на рис. 2, c видно, что вдоль оси z на ДПК действует сила притяжения к поверхности шара.

Таким образом, в настоящей работе впервые получено решение граничной задачи теории упругости для дисклинационной петли кручения в шаре. Решение построено с помощью представления полей (смещений и напряжений) дисклинационной петли в виде сферических гармоник, т. е. в виде рядов по присоединенным полиномам Лежандра.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и программы Еврокомиссии Мари Кюри.

Список литературы

[1] *Gryaznov V.G., Trusov L.I.* // Prog. Mat. Sci. 1993. V. 37. P. 289.
[2] *Лурье А.И.* Теория упругости. М.: Наука, 1970.
[3] *Willis J.R., Bullough B., Stoneham A.M.* // Phil. Mag. A. 1983. V. 48. P. 95.

[4] *Polonsky I.A., Romanov A.E., Gryaznov V.G., Kaprelov A.M.* // Czech. J. Phys. 1991. V. 41. P. 1249.
[5] *Polonsky I.A., Romanov A.E., Gryaznov V.G., Kaprelov A.M.* // Phil. Mag. A. 1991. V. 64. P. 281.
[6] *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986.
[7] *Li J.C.M., Gilman J.J.* // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. P. 4248.
[8] *Sackfield A., Barber J.R., Hills D.A., Truman C.E.* // Europ. J. Mech. 2002. V. 21. P. 73.
[9] *Owen D.R.J., Mura T.* // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 2818.
[10] *Kuo H.H., Mura T.* // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. P. 1454.
[11] *Колесникова А.Л., Романов А.Е.* Круговые дислокационно-дисклинационные петли и их применение к решению граничных задач теории дефектов. Л.: ФТИ, препринт № 1019, 1986.
[12] *Колесникова А.Л., Романов А.Е.* // ФТТ. 2003. Т. 45. В. 9. С. 1626.
[13] *Chou T.W.* // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. P. 4092.
[14] *Kuo H.H., Mura T.* // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. P. 3936.
[15] *Kuo H.H., Mura T., Dundurs J.* // Int. J. Eng. Sci. 1973. V. 11. P. 193.
[16] *Kolesnikova A.L., Romanov A.E.* // J. Appl. Mech. 2004. V. 71. N 3. P. 409.
[17] *Бейтмен Г., Эрдейн А.* // Высшие трансцендентные функции. Ч. I. М.: Наука, 1973.
[18] *Колесникова А.Л., Романов А.Е.* // Письма в ЖТФ. 1987. Т. 13. В. 11. С. 656.
[19] *Колесникова А.Л., Романов А.Е.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. В. 20. С. 73.
[20] *Hecker M., Romanov A.E.* // Mater. Sci. Eng. A. 1993. V. 164. N 1–2. P. 411.