

# Краевые дислокации у межфазных границ в градиентной теории упругости

© К.Н. Микаелян, М.Ю. Гуткин, Е.С. Айфантис\*

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

\*Aristotle University of Thessaloniki,

Thessaloniki 54006, Greece

Michigan Technological University,

Houghton, MI 49931, USA

E-mail: gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 25 февраля 2000 г.)

В окончательной редакции 6 марта 2000 г.)

Получено решение граничной задачи градиентной теории упругости о прямолинейной краевой дислокации, параллельной границе раздела фаз с разными упругими модулями и градиентными коэффициентами. На наноскопическом уровне рассмотрено взаимодействие дислокации и границы. Показано, что поле напряжений не имеет сингулярностей на линии дислокации и остается непрерывным на границе в отличие от классического решения, сингулярного на дислокационной линии и допускающего разрыв двух компонент напряжений на межфазной границе. Градиентное решение также устраняет классическую сингулярность силы изображения при выходе дислокации на границу. Кроме того, найдена дополнительная упругая сила изображения, обусловленная разницей градиентных коэффициентов контактирующих фаз. Оказалось, что эта сила, короткодействующая и максимальная на границе, выталкивает краевую дислокацию в материал с меньшим градиентным коэффициентом.

Работа выполнена в рамках программ INTAS (грант INTAS-93-3213-Ext) и TMR (контракт N ERBFMRX CT 960062), а также при частичной поддержке Научного совета по МНТП России "Физика твердотельных наноструктур" (грант № 97-3006).

1. В предыдущей работе [1] рассмотрено поведение прямолинейной винтовой дислокации у межфазной границы в рамках одной из версий градиентной теории упругости, предложенной ранее для анализа асимптотики упругих полей в устье трещины антиплоского сдвига и на линии винтовой дислокации [2,3]. Определяющее уравнение этой градиентной теории записывается в виде

$$(1 - c_1 \nabla^2) \boldsymbol{\sigma} = (1 - c_2 \nabla^2) [\lambda(\text{tr } \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}], \quad (1)$$

где  $\lambda$  и  $\mu$  — упругие постоянные Ламе,  $\boldsymbol{\sigma}$  и  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — тензоры упругих напряжений и деформаций,  $\mathbf{I}$  — единичный тензор,  $\nabla^2$  обозначает лапласиан, а  $c_1$  и  $c_2$  — два различных градиентных коэффициента. Эта теория является обобщением специальной теории градиентной упругости с  $c_1 \equiv 0$  и  $c_2 \equiv c$ , предложенной в работе [4] и использованной затем для устранения сингулярностей в полях перемещений и деформаций в устьях трещин [4–8] и на линиях дислокаций [9–11], а также в полях деформаций на линиях дисклинаций [11]. Решение тех же задач с помощью соотношения (1) позволило избавиться также от сингулярностей в полях упругих напряжений трещин [2], дислокаций [2,12,13] и дисклинаций [13,14].

В частности, поле напряжений прямолинейной краевой дислокации, линия которой совпадает с осью  $z$ , а вектор Бюргерса  $b_x$  направлен вдоль оси  $x$  декартовой системы координат, может быть представлено (в единицах  $\mu b_x / [2\pi(1 - \nu)]$ ) в виде [12,13]

$$\sigma_{xx} = -y(r^2 + 2x^2)/r^4 + 2y[y^2\Phi_1 + (3x^2 - y^2)\Phi_2], \quad (2)$$

$$\sigma_{yy} = -y(r^2 - 2x^2)/r^4 + 2y[x^2\Phi_1 - (3x^2 - y^2)\Phi_2], \quad (3)$$

$$\sigma_{xy} = x(r^2 - 2y^2)/r^4 - 2x[y^2\Phi_1 + (x^2 - 3y^2)\Phi_2], \quad (4)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}), \quad (5)$$

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $r^2 = x^2 + y^2$ ,  $\Phi_1 = K_1(r/\sqrt{c_1})/(\sqrt{c_1}r^3)$ ,  $\Phi_2 = [2c_1/r^2 - K_2(r/\sqrt{c_1})]/r^4$  и  $K_n(r/\sqrt{c_1})$  — модифицированная функция Бесселя второго рода (функция Макдональда)  $n$ -го порядка,  $n = 0, 1, \dots$ . Первые слагаемые в (2)–(4) представляют собой классическое решение [15], а остальные — дополнительные градиентные члены. Такое разделение полного решения на классическую и градиентную части соответствует теореме Ру и Айфантиса [5], которые показали, что решение граничной задачи градиентной теории упругости может быть записано в виде суммы классического решения такой же граничной задачи и дополнительных градиентных слагаемых, определяемых решением соответствующего уравнения Гельмгольца. Заметим, что поле напряжений (2)–(5) было получено в явном аналитическом виде в отличие от аналогичного решения нелокальной теории упругости Эрингена [16], представленного лишь в интегральном виде. При  $r \rightarrow 0$  имеем  $K_1(r/\sqrt{c_1}) \rightarrow \sqrt{c_1}/r$ ,  $K_2(r/\sqrt{c_1}) \rightarrow 2c_1/r^2 - 1/2$  и  $\sigma_{ij} \rightarrow 0$ , ( $i, j = x, y$ ). В работе [12] было показано, что напряжения (2)–(5) достигают своих наибольших значений ( $|\sigma_{xx}| \approx 0.45\mu$  и  $|\sigma_{yy}| \approx |\sigma_{xy}| \approx 0.27\mu$  при  $b_x = a = 4\sqrt{c_1}$  и  $\nu = 0.3$ ) на расстоянии  $\approx a/4$  (где  $a$  — постоянная решетки) от линии дислокации. За пределами

дислокационного ядра ( $r \geq r_0 \approx 4\sqrt{c_k}$  [10]) градиентное решение совпадает с классическим.

Тот факт, что градиентная теория упругости с определяющим соотношением (1) позволяет устранить сингулярности из полей напряжений дефектов [12–14], побудил нас рассмотреть поведение дислокаций у границ раздела. В работе [1] мы использовали (1) для решения задачи о прямолинейной винтовой дислокации у плоской границы раздела упруго-изотропных сред с разными упругими постоянными и градиентными коэффициентами. В интегральном виде были получены градиентные решения для поля напряжений дислокации и силы ее взаимодействия с межфазной границей (силы изображения). Было показано, что обе компоненты поля напряжений не имеют сингулярностей на линии дислокации и остаются непрерывными на границе в отличие от классического решения [17], сингулярного на дислокационной линии и допускающего скачок одной из компонент на межфазной границе. Вдали от границы и от дислокационной линии (на расстояниях  $\gg 10\sqrt{c_1}$ ) градиентное и классическое решения совпадали. Следствием непрерывности напряжений на границе стало устранение классической сингулярности [17] силы изображения при выходе дислокации на границу. Кроме того, была найдена дополнительная упругая сила изображения, обусловленная разницей градиентных коэффициентов контактирующих фаз. Оказалось, что эта сила, короткодействующая и максимальная на границе, выталкивает винтовую дислокацию в материал с большим градиентным коэффициентом. В общем случае, когда модули сдвига  $\mu_i$  и градиентные коэффициенты  $c_i$  (использовалось упрощенное обозначение  $c_{1i} \equiv c_i$ , где индекс  $i = 1, 2$  означал фазу 1 или 2) контактирующих фаз были различными, общая сила изображения демонстрировала различное поведение у границы в зависимости от отношений  $\mu_2/\mu_1$  и  $c_2/c_1$ , хотя ее дальнедействующая составляющая оставалась такой же, как и в классической теории упругости.

В настоящей работе рассматривается аналогичная задача для краевой дислокации. В интегральном виде приводятся градиентные решения для поля упругих напряжений дислокации и действующей на нее силы изображения. Подробно обсуждается поведение дислокации у межфазной границы.

2. Рассмотрим плоскую межфазную границу, разделяющую две упругие изотропные среды 1 ( $x > 0$ ) и 2 ( $x < 0$ ) с модулями сдвига  $\mu_i$ , коэффициентами Пуассона  $\nu_i$  и градиентными коэффициентами  $c_{1i}$  и  $c_{2i}$ , где  $i = 1, 2$  соответственно (рис. 1). Пусть линия прямолинейной краевой дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = b_x \mathbf{e}_x + b_y \mathbf{e}_y$  проходит через точку ( $x = x', y = 0$ ) параллельно оси  $z$  декартовой системы координат.

2.1. Классическое решение. В рамках классической теории упругости ( $c_{1i} = c_{2i} \equiv 0$ ) при  $x' \geq 0$  поле напряжений дислокации определяется (в единицах

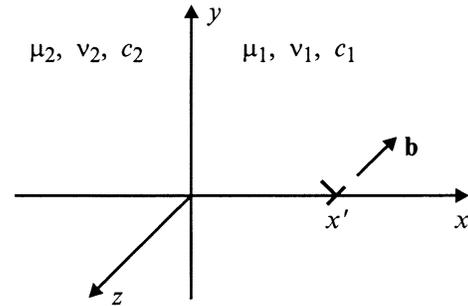


Рис. 1. Краевая дислокация у плоской межфазной границы.

$\mu_1/[\pi(k_1 + 1)]$  в среде 1 выражениями [17]

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{0(1)} = & b_x \left\{ -\frac{2y}{r_-^2} - \frac{4yx_-^2}{r_-^4} + \frac{(A+B)y}{r_+^2} \right. \\ & \left. + \frac{4Ay(x'^2 + x^2)}{r_+^4} + \frac{32Ayx'x_+^2}{r_+^6} \right\} \\ & + b_y \left\{ -\frac{2x_-}{r_-^2} + \frac{4x_-^3}{r_-^4} + \frac{(A+B)x - (3A-B)x'}{r_+^2} \right. \\ & \left. + \frac{4Ax_+(x'^2 - 6x'x - x^2)}{r_+^4} + \frac{32Axx'x_+^3}{r_+^6} \right\}, \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{0(1)} = & b_x \left\{ -\frac{2y}{r_-^2} + \frac{4yx_-^2}{r_-^4} + \frac{(3A-B)y}{r_+^2} \right. \\ & \left. + \frac{4Ay(3x'^2 + 4x'x - x^2)}{r_+^4} - \frac{32Ayx'x_+^2}{r_+^6} \right\} \\ & + b_y \left\{ \frac{6x_-}{r_-^2} - \frac{4x_-^3}{r_-^4} - \frac{(5A+B)x + (9A+B)x'}{r_+^2} \right. \\ & \left. + \frac{4Ax_+(3x'^2 + 10x'x + x^2)}{r_+^4} - \frac{32Axx'x_+^3}{r_+^6} \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{0(1)} = & b_x \left\{ -\frac{2x_-}{r_-^2} + \frac{4x_-^3}{r_-^4} + \frac{(3A-B)x - (A+B)x'}{r_+^2} \right. \\ & \left. + \frac{4Ax_+(x'^2 + 6x'x - x^2)}{r_+^4} - \frac{32Axx'x_+^3}{r_+^6} \right\} \\ & + b_y \left\{ -\frac{2y}{r_-^2} + \frac{4yx_-^2}{r_-^4} + \frac{(A+B)y}{r_+^2} \right. \\ & \left. - \frac{4Ay(x'^2 + 4x'x + x^2)}{r_+^4} + \frac{32Ayx'x_+^2}{r_+^6} \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\sigma_{zz}^{0(1)} = \nu_1 (\sigma_{xx}^{0(1)} + \sigma_{yy}^{0(1)}), \quad (9)$$

а в среде 2 выражениями

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{0(2)} = & b_x \left\{ \frac{(A+B-2)y}{r_-^2} - \frac{4yx_-[(1-B)x-(1-A)x']}{r_-^4} \right\} \\ & + b_y \left\{ \frac{(A+B-2)x + (B-3A+2)x'}{r_-^2} \right. \\ & \left. + \frac{4x_-^2[(1-B)x-(1-A)x']}{r_-^4} \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{0(2)} = & b_x \left\{ \frac{(3B-A-2)y}{r_-^2} + \frac{4yx_-[(1-B)x-(1-A)x']}{r_-^4} \right\} \\ & + b_y \left\{ \frac{(6-5B-A)x + 3(B+A-2)x'}{r_-^2} \right. \\ & \left. - \frac{4x_-^2[(1-B)x-(1-A)x']}{r_-^4} \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{0(2)} = & b_x \left\{ \frac{(3B-A-2)x + (2-A-B)x'}{r_-^2} \right. \\ & \left. + \frac{4x_-^2[(1-B)x-(1-A)x']}{r_-^4} \right\} + b_y \left\{ \frac{(A+B-2)y}{r_-^2} \right. \\ & \left. + \frac{4yx_-[(1-B)x-(1-A)x']}{r_-^4} \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\sigma_{zz}^{0(2)} = \nu_2(\sigma_{xx}^{0(2)} + \sigma_{yy}^{0(2)}), \quad (13)$$

где  $x_{\pm} = x \pm x'$ ,  $r_{\pm}^2 = x_{\pm}^2 + y^2$ ,  $A = (1-\Gamma)/(1+k_1\Gamma)$ ,  $B = (k_2-k_1\Gamma)/(k_2+\Gamma)$ ,  $\Gamma = \mu_2/\mu_1$ ,  $k_i = 3-4\nu_i$ ,  $i = 1, 2$ .

Легко убедиться, что компоненты  $\sigma_{xx}^0$  и  $\sigma_{xy}^0$  непрерывны на межфазной границе ( $x = 0$ ), тогда как компоненты  $\sigma_{yy}^0$  и  $\sigma_{zz}^0$  испытывают там скачки  $[\sigma_{kl}^0] = \sigma_{kl}^{0(1)} - \sigma_{kl}^{0(2)}$ , равные (в единицах  $\mu_1/[\pi(1-\nu_1)]$ )

$$\begin{aligned} [\sigma_{yy}^0]_{x=0} = & \frac{(A-B)b_{xy} - (3A+B)b_{yx'}}{x'^2 + y^2} \\ & + \frac{4A(b_{xy} + b_{yx'})x'^2}{(x'^2 + y^2)^2}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} [\sigma_{zz}^0]_{x=0} = & \frac{\nu_1[(A-1)b_{xy} - (3A+1)b_{yx'}] - \nu_2(B-1)(b_{xy} + b_{yx'})}{x'^2 + y^2} \\ & + \frac{4\nu_1A(b_{xy} + b_{yx'})x'^2 - 2\nu_2(A-1)b_{yx'}^3}{(x'^2 + y^2)^2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Как уже подробно обсуждалось в [1], подобные скачки в классической теории упругости вполне естественны

с макроскопической точки зрения, но они не находят объяснения при рассмотрении на наноскопическом уровне. Они просто являются следствием приближения классической модели сплошной среды, свойства которой часто не соответствуют реальности при описании наноскопических явлений.

2.2. Градиентное решение. Рассмотрим теперь ту же самую задачу в рамках градиентной теории упругости с определяющим соотношением (1). Как было предложено в работе [2] и описано также в [1,12–14], решение уравнения (1) сводится к независимому решению следующих неоднородных уравнений Гельмгольца для полей напряжений  $\sigma$  и деформаций  $\varepsilon$ :

$$(1 - c_1 \nabla^2) \sigma = \sigma^0, \quad (1 - c_2 \nabla^2) \varepsilon = \varepsilon^0, \quad (16)$$

где поля напряжений  $\sigma^0$  и деформаций  $\varepsilon^0$  представляют собой решения той же самой граничной задачи в рамках классической теории упругости. Здесь мы рассмотрим решение только первого из уравнений (16) для поля напряжений, поскольку оно представляет наибольший интерес для различных приложений.

Уравнение (16) может быть решено методом интегральных преобразований Фурье [1,10–14]. Перепишем его сначала в виде

$$(1 - c_{1i} \nabla^2) \sigma^{(i)} = \sigma^{0(i)}, \quad (17)$$

где  $\sigma^{0(i)}$  определяются равенствами (6)–(13). Далее опускаем для простоты первый индекс 1 в обозначении градиентных коэффициентов  $c_{1i}$ , так что  $c_1$  относится теперь к материалу 1, а  $c_2$  к материалу 2. Опираясь на выводы п. 2.1, а также на результаты [2,5], используем классические граничные условия

$$[\sigma_{xx}]_{x=0} = [\sigma_{xy}]_{x=0} = 0 \quad (18)$$

и шесть дополнительных граничных условий

$$\begin{aligned} [\sigma_{yy}]_{x=0} = [\sigma_{zz}]_{x=0} = \left[ \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \right]_{x=0} = \left[ \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} \right]_{x=0} \\ = \left[ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} \right]_{x=0} = \left[ \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial x} \right]_{x=0} = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Последние четыре уравнения в (19) обеспечивают плавное изменение всех компонент поля напряжений при переходе через границу аналогично [1].

Опуская громоздкие промежуточные вычисления, приведем здесь только окончательные результаты. Градиентное решение может быть записано как сумма  $\sigma_{kl}^{(i)} = \sigma_{kl}^{0(i)} + \sigma_{kl}^{\text{gr}(i)}$ , где классическое решение  $\sigma_{kl}^{0(i)}$  определяется выражениями (6)–(13), а дополнительные градиентные слагаемые  $\sigma_{kl}^{\text{gr}(i)}$  представимы (в единицах

$\mu_1/[\pi(k_1 + 1)]$ ) для среды 1 в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{gr}(1)} = & 4b_x \left\{ y^3 \Phi_1(r_-) + y(3x_-^2 - y^2) \Phi_2(r_-) \right. \\ & - \frac{2Ac_1 y}{r_+^6} \left[ 3x_+^2 - y^2 + 24x'x_+ \frac{x_+^2 - y^2}{r_+^2} \right] \\ & + \int_0^\infty \frac{s^2 \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} \left[ c_1 s \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_1} e^{-x'\lambda_1} \right. \\ & \left. \left. + \{Ac_1(\lambda_2 + s)(1 + 2x's) - c'(\lambda_2 - s)\} e^{-x's} \right] ds \right\} \\ & + 4b_y \left\{ -x_- y^2 \Phi_1(r_-) - x_-(x_-^2 - 3y^2) \Phi_2(r_-) \right. \\ & + \frac{2Ac_1}{r_+^6} \left[ x_+(x_+^2 - 3y^2) - 6x'x_+ \frac{x_+^4 - 6x_+^2 y^2 + y^4}{r_+^2} \right] \\ & + \int_0^\infty \frac{s^2 \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} [c_1(\lambda_2 - \lambda_1) e^{-x'\lambda_1} \\ & \left. - \{Ac_1(\lambda_2 + s)(1 - 2x's) + c'(\lambda_2 - s)\} e^{-x's}] ds \right\}, \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{gr}(1)} = & 4b_x \left\{ x_-^2 y \Phi_1(r_-) - y(3x_-^2 - y^2) \Phi_2(r_-) \right. \\ & + \frac{2Ac_1 y}{r_+^6} \left[ 3x_+^2 - y^2 + 24x'x_+ \frac{x_+^2 - y^2}{r_+^2} \right] \\ & - \int_0^\infty \frac{\lambda_1^2 \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} \left[ c_1 s \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_1} e^{-x'\lambda_1} \right. \\ & \left. + \{Ac_1(\lambda_2 + s)(1 + 2x's) - c''(\lambda_2 - s)\} e^{-x's} \right] ds \right\} \\ & + 4b_y \left\{ -x_-^3 \Phi_1(r_-) + x_-(x_-^2 - 3y^2) \Phi_2(r_-) \right. \\ & - \frac{2Ac_1}{r_+^6} \left[ x_+(x_+^2 - 3y^2) - 6x'x_+ \frac{x_+^4 - 6x_+^2 y^2 + y^4}{r_+^2} \right] \\ & - \int_0^\infty \frac{\lambda_1^2 \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} [c_1(\lambda_2 - \lambda_1) e^{-x'\lambda_1} \\ & - \{Ac_1(\lambda_2 + s)(1 - 2x's) \\ & \left. + (B + c's^2)(\lambda_2 - s)/\lambda_1^2\} e^{-x's}] ds \right\}, \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{\text{gr}(1)} = & 4b_x \left\{ -x_- y^2 \Phi_1(r_-) - x_-(x_-^2 - 3y^2) \Phi_2(r_-) \right. \\ & + \frac{2Ac_1}{r_+^6} \left[ x_+(x_+^2 - 3y^2) + 6x'x_+ \frac{x_+^4 - 6x_+^2 y^2 + y^4}{r_+^2} \right] \\ & + \int_0^\infty \frac{s \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} [c_1 s(\lambda_2 - \lambda_1) e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{B - Ac_1(\lambda_1^2 + \lambda_2 s)(1 + 2x's) \\ & - c's(\lambda_2 - s)\} e^{-x's}] ds \left. \right\} \\ & + 4b_y \left\{ x_-^2 y \Phi_1(r_-) - y(3x_-^2 - y^2) \Phi_2(r_-) \right. \\ & + \frac{2Ac_1 y}{r_+^6} \left[ 3x_+^2 - y^2 - 24x'x_+ \frac{x_+^2 - y^2}{r_+^2} \right] \\ & - \int_0^\infty \frac{s \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} [c_1 \lambda_1 (\lambda_2 - \lambda_1) e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{B + Ac_1(\lambda_1^2 + \lambda_2 s)(1 - 2x's) \\ & \left. - c's(\lambda_2 - s)\} e^{-x's}] ds \right\}, \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^{\text{gr}(1)} = & 4\nu_1 \left\{ (b_x y - b_y x_-) r_-^2 \Phi_1(r_-) \right. \\ & - b_x \int_0^\infty \frac{\sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} \left[ s \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_1} e^{-x'\lambda_1} \right. \\ & + \{A(\lambda_2 + s)(1 + 2x's) \\ & - [(B - 1)\nu_2/\nu_1 + 1](\lambda_2 - s)\} e^{-x's}] ds \\ & - b_y \int_0^\infty \frac{\cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} [(\lambda_2 - \lambda_1) e^{-x'\lambda_1} \\ & - \{A[s + \lambda_2(1 - 2x's)] \\ & \left. + [(B - 1)\nu_2/\nu_1 + 1](\lambda_2 - s)\} e^{-x's}] ds \left. \right\} \quad (23) \end{aligned}$$

и для среды 2 в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{gr}(2)} = & 8(B-1)c_2\{-b_{xy}(3x_-^2 - y^2) \\ & + b_{yx_-}(x_-^2 - 3y^2)\}/r_-^6 \\ & - 4b_x \int_0^\infty \frac{s^2 \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2c_1 s e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{Ac_1(\lambda_1 - s)(1 + 2x's) - c'(\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds \\ & - 4b_y \int_0^\infty \frac{s^2 \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2c_1 \lambda_1 e^{-x'\lambda_1} - \{Ac_1(\lambda_1 - s) \\ & \times (1 - 2x's) + c'(\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{gr}(2)} = & 8(B-1)c_2\{b_{xy}(3x_-^2 - y^2) \\ & - b_{yx_-}(x_-^2 - 3y^2)\}/r_-^6 \\ & + 4b_x \int_0^\infty \frac{\lambda_1^2 \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2c_1 s e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{Ac_1(\lambda_1 - s)(1 + 2x's) - c''(\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds \\ & + 4b_y \int_0^\infty \frac{\lambda_1^2 \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2c_1 \lambda_1 e^{-x'\lambda_1} \\ & - \{Ac_1(\lambda_1 - s)(1 - 2x's) \\ & + (B + c's^2)(\lambda_1 + s)/\lambda_1^2\} e^{-x's}] ds, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{\text{gr}(2)} = & 8(B-1)c_2\{b_{yx_-}(x_-^2 - 3y^2) \\ & + b_{xy}(3x_-^2 - y^2)\}/r_-^6 \\ & + 4b_x \int_0^\infty \frac{s \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [-2c_1 \lambda_1 s e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{B - Ac_1 \lambda_1 (\lambda_1 - s)(1 + 2x's) \\ & + c's(\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds \\ & + 4b_y \int_0^\infty \frac{s \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2c_1 \lambda_1^2 e^{-x'\lambda_1} \\ & - \{B + Ac_1 \lambda_1 (\lambda_1 - s)(1 - 2x's) \\ & + c's(\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds, \end{aligned} \quad (26)$$

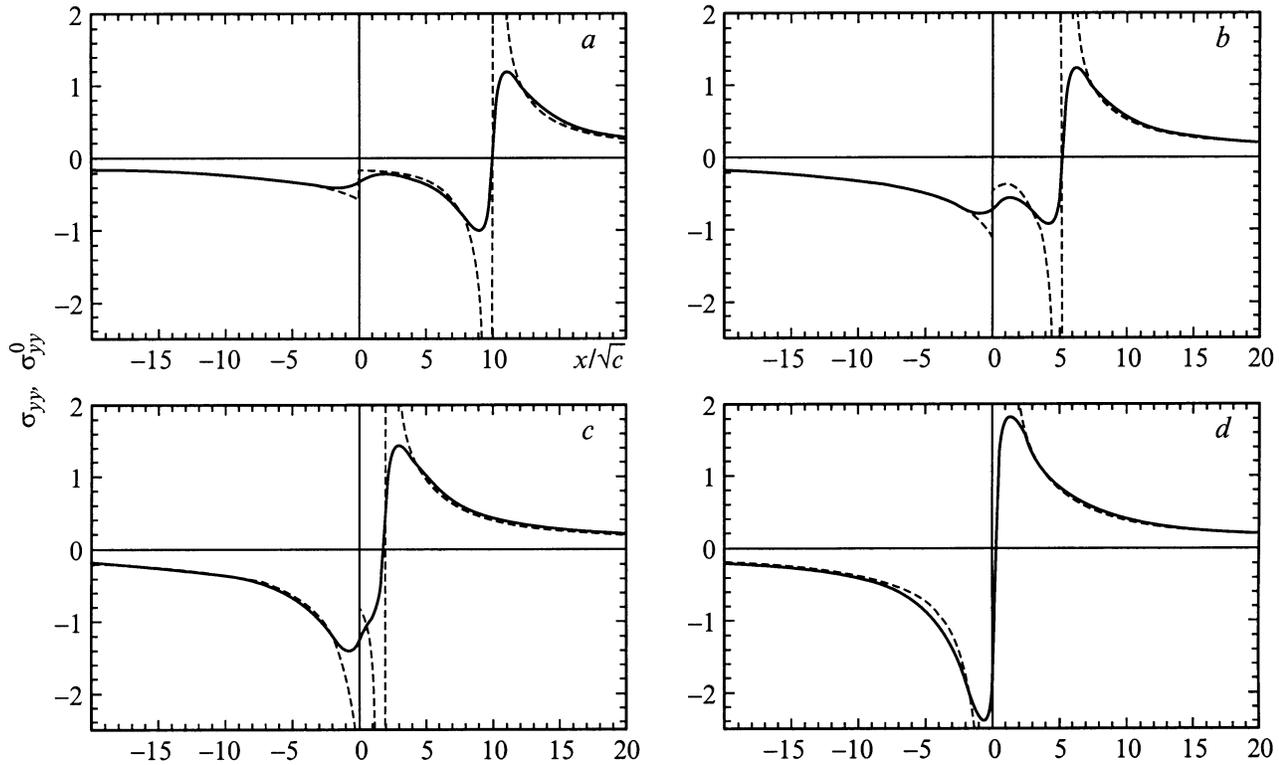
$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^{\text{gr}(2)} = & 4b_x \nu_1 \int_0^\infty \frac{\sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2s e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{A(\lambda_1 - s)(1 + 2x's) \\ & - [(B-1)\nu_2/\nu_1 + 1](\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds \\ & + 4b_y \nu_1 \int_0^\infty \frac{\cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} [2\lambda_1 e^{-x'\lambda_1} \\ & + \{A[s - \lambda_1(1 - 2x's)] \\ & - [(B-1)\nu_2/\nu_1 + 1](\lambda_1 + s)\} e^{-x's}] ds, \end{aligned} \quad (27)$$

где функции  $\Phi_j(r_-)$  определены в примечаниях к формулам (2)–(4),  $c' = c_1 + c_2(B-1)$ ,  $c'' = c_1 + c_2(B-1)\lambda_2^2/\lambda_1^2$  и  $\lambda_i = \sqrt{1/c_i + s^2}$ ,  $i = 1, 2$ .

Компоненты поля напряжений  $\sigma_{kl}^{(i)}$ , полученные в виде суперпозиции классических выражений (6)–(13) и дополнительных градиентных составляющих (20)–(27), непрерывны на межфазной границе ( $x = 0$ ). При  $\mu_1 = \mu_2 = \mu$ ,  $\nu_1 = \nu_2 = \nu$  и  $c_1 = c_2 = c$  (предельный переход к случаю однородной среды) они обращаются в выражения (2)–(5). При  $c_1 = c_2 \rightarrow 0$  (предельный переход к классической теории упругости) дополнительные градиентные составляющие (20)–(27) обращаются в нуль. Отметим, что, как и в случае винтовой дислокации [1], выражения (20)–(27) содержат специфические слагаемые, обусловленные только разницей в градиентных коэффициентах  $c_1$  и  $c_2$  (например, первые подынтегральные члены).

3. Рассмотрим по отдельности три характерных ситуации: чисто упругую границу ( $\mu_1 \neq \mu_2$ ,  $\nu_1 \neq \nu_2$ ,  $c_1 = c_2 = c$ ), чисто градиентную границу ( $\mu_1 = \mu_2$ ,  $\nu_1 = \nu_2$ ,  $c_1 \neq c_2$ ) и общую смешанную градиентно-упругую границу ( $\mu_1 \neq \mu_2$ ,  $\nu_1 \neq \nu_2$ ,  $c_1 \neq c_2$ ).

3.1. Чисто упругая граница ( $\mu_1 \neq \mu_2$ ,  $\nu_1 \neq \nu_2$ ,  $c_1 = c_2 = c$ ). В этом случае рассматриваем только эффекты, связанные с разницей в упругих постоянных контактирующих сред. Следует отметить здесь два основных преимущества градиентной теории упругости по сравнению с классической. Во-первых, отсутствие сингулярностей в поле напряжений  $\sigma_{kl}^{(i)}$  на линии дислокации. Во-вторых, отсутствие нефизических скачков напряжений  $\sigma_{yy}^{(i)}$  и  $\sigma_{zz}^{(i)}$  типа (14), (15) на межфазной границе. Все это позволяет рассматривать наноскопические короткодействующие упругие взаимодействия между дислокациями и межфазными границами, что было невозможно в классической теории упругости, приводившей к сингулярному решению (6)–(13) с разрывными на границе компонентами  $\sigma_{yy}^{0(i)}$  и  $\sigma_{zz}^{0(i)}$ . Для примера на рис. 2 показано распределение поля напряжений  $\sigma_{yy}^{(i)}(x, 0)$  дислокации с вектором Бюргера  $b_y$  вблизи межфазной границы. Видно, что классическое



**Рис. 2.** Распределение компоненты напряжений  $\sigma_{yy}(x, y = 0)$  вблизи линии краевой дислокации с вектором Бюргера  $b_y$ , расположенной на расстоянии  $x'/\sqrt{c} = 10$  (a), 5 (b), 2 (c) и 0 (d) от границы раздела ( $x = 0$ ) при  $\mu_2 = 10\mu_1$ ,  $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$  и  $c_1 = c_2 = c$ . Напряжения даны в единицах  $\mu_1 b_y / [\pi(k_1 + 1)\sqrt{c}]$ . Штриховыми линиями показаны распределения для классического решения  $\sigma_{yy}^0$ .

и градиентное решения совпадают вдали ( $r > 10\sqrt{c}$ ) от границы и от дислокационной линии, но около них (в пределах наноскопической области  $r < 10\sqrt{c}$ ) эти решения совершенно различны.

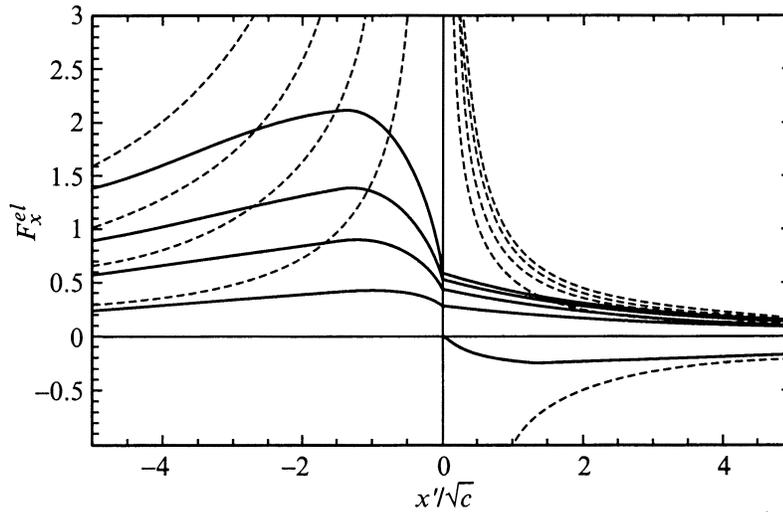
Рассмотрим теперь силу изображения  $F_x^{\text{el}}$ , действующую на единицу длины дислокации со стороны межфазной границы (рис. 1). Для дислокации с вектором Бюргера  $b_x$  градиентное решение  $F_x^{\text{el}}(x') = b_x \sigma_{xy}^{(1)}(x = x', 0)$  (в единицах  $\mu_1 b_x^2 / [\pi(k_1 + 1)]$ ) имеет вид

$$F_x^{\text{el}}(x') = -\frac{A+B}{2x'} + \frac{4Ac}{x'^3} + 2c \int_0^{+\infty} s [B(\lambda - s) - A(\lambda + s)(1 + 2x's)] e^{-x'(\lambda+s)} ds, \quad (28)$$

где  $\lambda = \sqrt{1/c + s^2}$ . Первое слагаемое в (28) — это классическое сингулярное решение [17], а остальные — дополнительные градиентные члены. Результаты численного анализа (28) представлены на рис. 3, где даны также аналогичные решения для дислокации в среде 2 ( $x' < 0$ ). Видно, что из градиентного решения исчезла классическая сингулярность, что оно оказывается непрерывным на межфазной границе и достигает наибольшей величины на расстоянии  $\approx \sqrt{c}$  от нее.

В частном случае свободной поверхности ( $\mu_2 = \nu_2 = 0$ , см. кривые в области отрицательных значений  $F_x^{\text{el}}$  на рис. 3) сила изображения обращается на границе в нуль. Эта сила возникает и увеличивается по мере проникновения в материал дислокационного ядра (радиус ядра естественно возникает в градиентной теории упругости и оценивается величиной  $\approx 4\sqrt{c}$  [9,10]), достигает максимального значения, а затем уменьшается по мере удаления дислокации от свободной поверхности в глубь материала. Эта последняя стадия (при  $x' > 5\sqrt{c}$ ) хорошо описывается классическим решением (рис. 3), которое, однако, не может описать предыдущие стадии. С помощью градиентного решения (28) можно оценить максимальное скальвующее напряжение  $\tau_{\text{max}} = |F_x^{\text{el}}|_{\text{max}}/b_x$ , которое должна преодолеть краевая дислокация, чтобы проникнуть в материал. Из кривой на рис. 3 получаем оценку  $\tau_{\text{max}} \approx \mu/2.8\pi$  (при  $\nu = 0.3$ ), т.е. величину порядка теоретической прочности на сдвиг [15].

**3.2. Чисто градиентная граница** ( $\mu_1 = \mu_2$ ,  $\nu_1 = \nu_2$ ,  $c_1 \neq c_2$ ). В этом случае рассматриваем только эффекты, связанные с разницей в градиентных коэффициентах контактирующих сред. Ограничимся рассмотрением силы изображения  $F_x^{\text{gf}}$ , действующей на дислокацию со стороны границы из-за разницы  $c_1$  и  $c_2$ . Для дислокации с вектором Бюргера  $b_x$  эта сила опре-



**Рис. 3.** Зависимость силы изображения  $F_x^{el}$  от положения  $x'/\sqrt{c}$  краевой дислокации с вектором Бюргерса  $b_x$  у "чисто упругой" границы раздела ( $x' = 0$ ) при  $c_1 = c_2 = c$ ,  $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$  и  $\mu_2/\mu_1 = 10, 7, 5, 3$  и  $0$  (сверху вниз). Значения силы даны в единицах  $\mu_1 b_x^2 / [\pi(k_1 + 1)\sqrt{c}]$ . Штриховыми линиями показаны зависимости для классического решения.

деляется (в единицах  $\mu_1 b_x^2 / [\pi(k_1 + 1)]$ ) выражением

$$F_x^{gr}(x') = 4 \int_0^{+\infty} \frac{s^2}{\lambda_1 + \lambda_2} \left\{ c_1(\lambda_2 - \lambda_1)e^{-2x'\lambda_1} + (c_2 - c_1)(\lambda_2 - s)e^{-x'(\lambda_1+s)} \right\} ds. \quad (29)$$

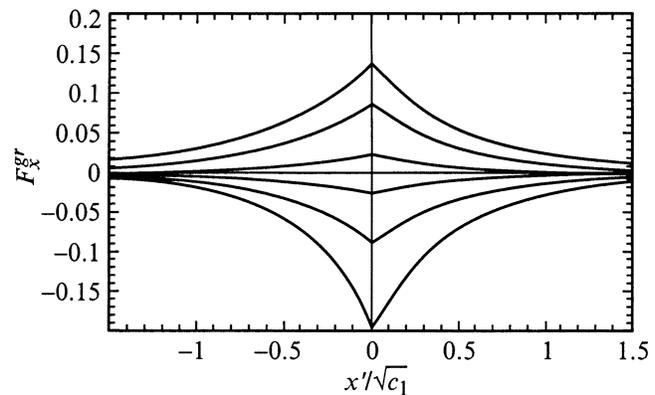
Численный анализ этого интеграла показал, что  $F_x^{gr}$  положительна при  $c_2 > c_1$  и отрицательна при  $c_2 < c_1$  (рис. 4). Это означает, что краевая дислокация отталкивается от межфазной границы в глубь того материала, у которого меньше градиентный коэффициент. Такое поведение краевой дислокации качественно отличается от поведения винтовой дислокации, которая выталкивается в материал с большим градиентным коэффициентом [1]. Причины такого различия пока не ясны. Из рис. 4 видно, что  $F_x^{gr}$  является короткодействующей силой, проявляющейся непосредственно вблизи границы. На самой границе она принимает наибольшее значение, которое сильно зависит от отношения  $c_2/c_1$ .

3.3. Смешанная градиентно-упругая граница ( $\mu_1 \neq \mu_2$ ,  $\nu_1 \neq \nu_2$ ,  $c_1 \neq c_2$ ). В этом случае сила изображения  $F_x$  принимает (в единицах  $\mu_1 b_x^2 / [\pi(k_1 + 1)]$ ) вид

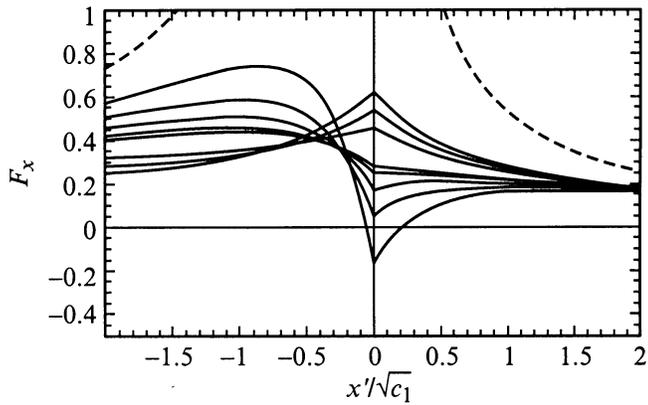
$$F_x(x') = -\frac{A+B}{2x'} + \frac{4Ac_1}{x'^3} + 4 \int_0^{+\infty} \frac{s}{\lambda_1 + \lambda_2} \times \left[ c_1 s(\lambda_2 - \lambda_1)e^{-2x'\lambda_1} + \{B - Ac_1(\lambda_1^2 + \lambda_2 s)\} \times (1 + 2x's) - c's(\lambda_2 - s) \right] e^{-x'(\lambda_1+s)} ds. \quad (30)$$

Отметим, что сила  $F_x$  не является простой суперпозицией сил  $F_x^{el}$  и  $F_x^{gr}$ , определяемых соответственно

формулами (28) и (29). Это хорошо видно на рис. 5. Сила изображения (30) является дальнодействующей не-сингулярной силой, совпадающей с классической силой изображения вдали ( $|x'| > 5\sqrt{c_1}$ ) от межфазной границы. Ее величина на границе сильно зависит от отношений  $\mu_2/\mu_1$  и  $c_2/c_1$ . Знак и качественное поведение силы  $F_x$  вблизи границы во многом определяются отношением градиентных коэффициентов  $c_2/c_1$ . Например, при  $\mu_2/\mu_1 = 3$  наблюдается три различных типа поведения  $F_x$  (рис. 5). Если  $c_2 > c_1$ , то  $F_x > 0$  для любых  $x'$  и достигает максимума на границе или вблизи от нее. Если  $c_2 = c_1$ , то  $F_x \equiv F_x^{el}$  (см. п. 3.1). Если  $c_2 < c_1$ , то  $F_x > 0$  для любых  $x'$ , кроме малой области вокруг границы. Размер этой области зависит от отношения  $c_2/c_1$ . Для  $c_2/c_1 = 0.3$  он равен примерно  $0.3\sqrt{c_1}$ , и  $F_x < 0$



**Рис. 4.** Зависимость силы изображения  $F_x^{gr}$  от положения  $x'/\sqrt{c_1}$  краевой дислокации с вектором Бюргерса  $b_x$  у "чисто градиентной" границы раздела ( $x' = 0$ ) при  $\mu_2 = \mu_1$ ,  $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$  и  $c_2/c_1 = 2, 1.5, 1.1, 0.9, 0.7$  и  $0.5$  (сверху вниз). Значения силы даны в единицах  $\mu_1 b_x^2 / [\pi(k_1 + 1)\sqrt{c_1}]$ .



**Рис. 5.** Зависимость силы изображения  $F_x$  от положения  $x'/\sqrt{c_1}$  краевой дислокации с вектором Бюргера  $b_x$  у "смешанной градиентно-упругой" границы раздела ( $x' = 0$ ) при  $\mu_2 = 3\mu_1$ ,  $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$  и  $c_2/c_1 = 5, 3, 2, 1, 0.9, 0.7, 0.5$  и  $0.3$  (сверху вниз). Значения силы даны в единицах  $\mu_1 b_x^2 / [\pi(k_1 + 1)\sqrt{c_1}]$ . Штриховыми линиями показаны зависимости для классического решения.

внутри нее, достигая минимального значения на границе. Соответственно можно выделить три характерных типа поведения дислокации у границы при  $\mu_2/\mu_1 = 3$ . Если  $c_2 \geq c_1$ , то дислокация выталкивается из материала 2 в материал 1 и не имеет равновесных положений вблизи границы. Если  $c_2 < c_1$  (например,  $c_2/c_1 = 0.3$ ), то дислокация, расположенная в материале 2, притягивается к границе и может оказаться "запертой" вблизи нее в положении устойчивого равновесия  $x' \approx -0.1\sqrt{c_1}$ . В свою очередь дислокация, расположенная в материале 1, имеет одно положение неустойчивого равновесия  $x' \approx 0.2\sqrt{c_1}$  около границы; она притягивается к нему в пределах малой области  $x' < 0.2\sqrt{c_1}$  и отталкивается от него за пределами этой области.

4. Таким образом, в рамках градиентной теории упругости с определяющим соотношением (1) получено решение граничной задачи о прямолинейной краевой дислокации, параллельной плоской границе раздела между двумя упругими изотропными средами с разными упругими постоянными и разными градиентными коэффициентами. В общем интегральном виде представлены поле упругих напряжений дислокации и сила изображения, действующая на нее со стороны межфазной границы. Показано, что все компоненты поля напряжений не имеют сингулярностей на линии дислокации и остаются непрерывными на границе в отличие от классического решения [17], сингулярного на дислокационной линии и допускающего скачок двух нормальных компонент на межфазной границе. Вдали от границы и от дислокационной линии (на расстояниях  $\gg 10\sqrt{c_1}$ ) градиентное и классическое решения совпадают. В градиентном решении также устраняется классическая сингулярность [17] силы изображения при выходе дислокации на границу. Здесь эта сила везде остается конечной и непрерыв-

ной. Кроме того, найдена дополнительная упругая сила изображения, обусловленная разницей градиентных коэффициентов контактирующих фаз. Показано, что эта сила, короткодействующая и максимальная на границе, выталкивает краевую дислокацию в материал с меньшим градиентным коэффициентом. В общем случае, когда модули сдвига  $\mu_i$  и градиентные коэффициенты  $c_i$  контактирующих фаз оказываются различными, общая сила изображения может вести себя у границы совершенно по-разному в зависимости от отношений  $\mu_2/\mu_1$  и  $c_2/c_1$ , хотя ее дальнедействующая составляющая остается такой же, как и в классической теории упругости.

## Список литературы

- [1] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, Е.С. Айфантис. ФТТ **42**, 9, 1606 (2000).
- [2] C.Q.Ru, E.C. Aifantis. Preprint MTU Report, Houghton, MI (1993), unpublished.
- [3] W.W. Milligan, S.A. Hackney, E.C. Aifantis. In: Continuum Models for Materials with Microstructure / Ed. by H. Mühlhaus. Wiley (1995). P. 379.
- [4] B.S. Altan, E.C. Aifantis. Scripta Metall. Mater. **26**, 2, 319 (1992).
- [5] C.Q. Ru, E.C. Aifantis. Acta Mechanica **101**, 1, 59 (1993).
- [6] E.C. Aifantis. J. Mech. Behaviour of Materials **5**, 3, 355 (1994).
- [7] D.J. Unger, E.C. Aifantis. Int. J. Fracture **71**, R27 (1995).
- [8] B.S. Altan, E.C. Aifantis. J. Mech. Behaviour of Materials **8**, 3, 231 (1997).
- [9] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. Scripta Mater. **35**, 11, 1353 (1996).
- [10] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. Scripta Mater. **36**, 1, 129 (1997).
- [11] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. Phys. Stat. Sol. (b) **214**, 2, 245 (1999).
- [12] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. Scripta Mater. **40**, 5, 559 (1999).
- [13] M.Yu. Gutkin, A.E. Aifantis. In: Nanostructured Films and Coating, NATO ARW Series, High Technology, Vol. 78 / Ed. by G.-M. Chow, I.A. Ovid'ko, T. Tsakalakos. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2000). P. 247.
- [14] М.Ю. Гуткин, Е.С. Айфантис. ФТТ **41**, 12, 2158 (1999).
- [15] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [16] A.C. Eringen. In: The Mechanics of Dislocations / Ed. by E.C. Aifantis, J.P. Hirth. American Society for Metals, Metals Park, OH (1985). P. 101.
- [17] T. Mura. In: Advances in Materials Research / Ed. by H. Herman. Interscience Publishers, N.Y. (1968). Vol. 3. P. 1.