07,10

Упругое взаимодействие точечных дефектов с краевой дислокационной петлей в формализме функций Грина

© П.Н. Остапчук, О.Г. Троценко

Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина

E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 1 февраля 2016 г.
В окончательной редакции 22 февраля 2016 г.)

Получены универсальные выражения для компонент тензорной функции Грина упругоанизотропной гексагональной среды. В отличие от классических выражений (метод Лифшица–Розенцвейга) они не содержат неопределенности типа 0/0 при переходе к изотропному приближению и справедливы для любого гексагонального кристалла. В качестве примера их использования рассчитаны поля смещений и деформаций, создаваемые краевой дислокационной петлей, лежащей в базисной плоскости такого кристалла.

1. Введение

Предположение об упругом взаимодействии между дислокациями и точечными дефектами (ТД) кристалла (вакансиями, собственными междоузельными атомами, атомами инертных газов и примесей) оказалось очень полезным во многих задачах теории радиационного материаловедения. Например, именно оно, по современным представлениям, является причиной явления радиационного распухания облучаемых металлов и сплавов [1], а также основной движущей силой микроструктурной эволюции материала под облучением, проявляющейся, в частности, в зарождении и росте дислокационных петель, ведущих в конечном счете к радиационному упрочнению конструкционных материалов ядерных реакторов [2]. Согласно Эшелби [3], энергия взаимодействия между двумя системами внутренних напряжений $S(\mathbf{u}^S, u_{ij}^S, \sigma_{ij}^S)$ и $T(\mathbf{u}^T, u_{ij}^T, \sigma_{ij}^T)$ в упругой среде, ограниченной поверхностью Σ_0, может быть представлена в виде интеграла по поверхности Σ, разделяющей эти системы

$$E_{\text{int}}(S, T) = \int\limits_{\Sigma} (\sigma_{ij}^S u_i^T - \sigma_{ij}^T u_i^S) dS_j, \tag{1}$$

где n_j в соотношении $dS_j = n_j dS$ — внешняя нормаль к поверхности Σ. При этом источники системы S целиком лежат внутри поверхности Σ, источники другой, T — вне ее. Если можно найти фиктивное распределение объемных сил f_i^S внутри Σ, которое создает такое же напряжение на поверхности Σ и вне ее, как и действительный источник внутреннего напряжения, находящийся внутри Σ, то формулу (1) можно свести к объемному интегралу [3]

$$E_{\text{int}}(S, T) = -\int f_i^S u_i^T dV, \tag{2}$$

который берется по области, расположенной внутри Σ. Пусть система S обусловлена точечным дефектом. В теории упругости ТД описывается объемным распределением дипольных сил без момента, т. е. выражением вида

$$f_i^S(\mathbf{r}) = -A_{ij} \nabla_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad A_{ij} = A_{ji}. \tag{3}$$

Тогда для энергии взаимодействия ТД с полем T имеем

$$E_{\text{int}}(S, T) = -A_{ij} u_{ij}^T, \tag{4}$$

а в случае центра дилатации $A_{ij} = K\Delta V \delta_{ij}$, и дислокации ($T = D$), выражение (4) принимает стандартный вид

$$E_{\text{int}}(\mathbf{r}) = -K\Delta V \, \mathrm{Sp} u_{ij}^D, \tag{5}$$

где K — модуль всестороннего сжатия среды; ΔV — изменение объема среды, вызванное наличием в ней одного ТД; величина $\mathrm{Sp} u_{ij}^D$ вычисляется в точке нахождения ТД. Отсюда задача теории — это расчет упругого поля дислокации u_{ij}^D. Его можно проводить двояким образом. Во-первых, искать неоднозначные решения уравнений равновесия в терминах смещений. Во-вторых, использовать тензорную функцию Грина G_{ik} (ТФГ) уравнений равновесия данной упругой среды, т. е. функцию, определяющую i-ю компоненту смещения u_i, созданного в неограниченной среде, сосредоточенной в начале координат единичной силой, которая направлена вдоль оси x_k [4–7]. Знание ТФГ дает возможность вычислить смещения, а значит и деформации, создаваемые дислокацией любой формы в любой анизотропной упругой среде, согласно классической формуле

$$u_i^D(\mathbf{r}) = C_{jklm} b_m^D \int\limits_{S_D} n_l^D \frac{\partial G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_k} dS'. \tag{6}$$

Обозначения в (6) следующие: C_{jklm} — тензор упругих модулей среды, моделирующей кристалл; b_m^D — m-я компонента вектора Бюргерса дислокации; n_l^D — l-я компонента вектора нормали к произвольной поверхности S_D, опирающейся на дислокационную линию; $\mathbf{r}$ — координата точки наблюдения; $\mathbf{r}'$ — координата точки поверхности S^D; G_{ij} — искомая ТФГ или просто тензор Грина среды.

Основная цель работы — вычисление по формулам (5), (6) энергии упругого взаимодействия ТД с краевой дислокационной петлей, расположенной в базисной плоскости кристалла гексагональной сингонии (в частности, циркония). Промежуточная — на примере краевой прямолинейной дислокации и краевой петли показать, как формализм функций Грина „работает“ в изотропном приближении. И хотя результаты в последнем случае хорошо известны, получены они путем решения уравнений равновесия. Поэтому с точки зрения методологии представляется логичным показать, что дает применение ТФГ.

2. Упругое поле прямолинейной краевой дислокации в методе ТФГ

Рассмотрим прямоугольную краевую петлю, лежащую в плоскости zy и имеющую размеры по оси y от 0 до L, по оси z от $-L$ до L. Вектор Бюргерса петли направлен вдоль положительного направления оси x $\mathbf{b}(b,0,0)$, а нормаль к плоскости петли — вдоль отрицательного направления оси x; S_D — плоскость петли. Тогда в изотропном приближении

$$C_{jklm} = \mu\left[\frac{2\nu}{1-2\nu}\,\delta_{jk}\delta_{lm} + \delta_{jl}\delta_{km} + \delta_{jm}\delta_{kl}\right],$$

$$G_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}\,\frac{1}{2(1-\nu)}[(3-4\nu)\delta_{ij} + n_i n_j]\frac{1}{r} \tag{7}$$

для компоненты смещений $u_x(\mathbf{r})$ имеем:

$$u_x(\mathbf{r}) = \frac{b}{8\pi(1-\nu)}\,x\int_0^L dy'\int_{-L}^{L} dz'\left((1-2\nu)\,\frac{1}{r^3} + 3\,\frac{x^2}{r^5}\right)$$

$$\equiv \frac{b}{4\pi(1-\nu)}[(1-2\nu)I_1 + I_2], \tag{8}$$

где $r=\sqrt{x^2+(y-y')^2+(z-z')^2}$; индекс $\beta = y;\ z$; ν — коэффициент Пуассона, μ — модуль сдвига. Интегралы по z' в (8) табличные, но достаточно громоздкие. Их численный анализ показывает, что с увеличением параметра L, т.е. в пределе прямолинейной дислокации, во-первых, как и должно быть, исчезает зависимость от переменной z, а во-вторых,

$$I_1 \to x\int_0^L dy'\frac{1}{[x^2+(y-y')^2]} \to \operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{L}{x}\right),$$

$$I_2 \to 2x^3\int_0^L dy'\frac{1}{\left[x^2+(y-y')^2\right]^2}$$

$$\to \left[\operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{L}{x}\right) + \frac{xy}{x^2+y^2}\right].$$

В результате в пределе $L \to \infty$

$$u_x(\mathbf{r}) \to \frac{b}{2\pi}\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{1}{2(1-\nu)}\,\frac{xy}{x^2+y^2}\right] + \frac{b}{4}. \tag{9}$$

А поскольку смещение определяется с точностью до константы, пренебрегая последней, получаем искомое стандартное выражение [4,5]. Аналогичные вычисления для компоненты смещений $u_y(\mathbf{r})$ дают следующий результат

$$u_y(\mathbf{r}) \to -\frac{b}{2\pi}\left[\frac{(1-2\nu)}{4(1-\nu)}\,\ln(x^2+y^2) + \frac{1}{4(1-\nu)}\,\frac{2x^2}{x^2+y^2}\right]$$

$$+\frac{b}{8\pi}\,\frac{(1-2\nu)}{(1-\nu)}\,\ln L. \tag{10}$$

Формально при $L\to\infty$ мы имеем расходимость, однако она не физична, Это просто большая константа, которую следует отбросить по той же причине, что и выше. Остальная часть (10) имеет стандартный вид [4,5]. Окончательно из (5), (9) и (10) имеем

$$\mathrm{Sp}u_{ij}^D = -\frac{b}{2\pi}\,\frac{1-2\nu}{(1-\nu)}\,\frac{y}{x^2+y^2},$$

$$E_{\text{int}} = \frac{\mu b(1+\nu)\Delta V}{3\pi(1-\nu)}\,\frac{y}{x^2+y^2}. \tag{11}$$

Конечно, нового результата здесь нет, однако способ получения уже известного не стандартен.

3. Упругое поле краевой дислокационной петли в методе ТФГ

Рассмотрим в бесконечной упругоизотропной среде краевую дислокацию Вольтерра, линия которой имеет форму окружности, а вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости дислокации. В цилиндрических координатах (ρ,φ,z) дислокационная петля лежит в плоскости $z=0$, имеет форму окружности с радиусом R и центром в начале координат, а ее вектор Бюргерса имеет только z-компоненту $(0,0,b)$. Поскольку задача аксиально симметрична, угловая зависимость отсутствует, и напряженное состояние однозначно определяется четырьмя компонентами тензора напряжений: σ_{rr}, $\sigma_{\varphi\varphi}$, σ_{zz}, σ_{rz}. Аналитическое решение уравнений равновесия методом преобразований Ханкеля было получено в работе [8], и в безразмерных переменных $\rho = r/R$; $\xi = z/R$ искомое выражение для суммы диагональных элементов тензора деформации имеет вид

$$\mathrm{Sp}u_{ij} = \frac{b}{4\pi R}\,\frac{1-2\nu}{1-\nu}\,F(\rho,\xi),$$

$$F \equiv \frac{2}{\sqrt{(1+\rho)^2+\xi^2}}\left[\frac{1-\rho^2-\xi^2}{(1-\rho)^2+\xi^2}\,E(m) + K(m)\right], \tag{12}$$

где $E(m)$, $K(m)$ — полные эллиптические интегралы первого и второго рода; $m \equiv \frac{4\rho}{(1+\rho)^2+\xi^2}$. Аналогичное

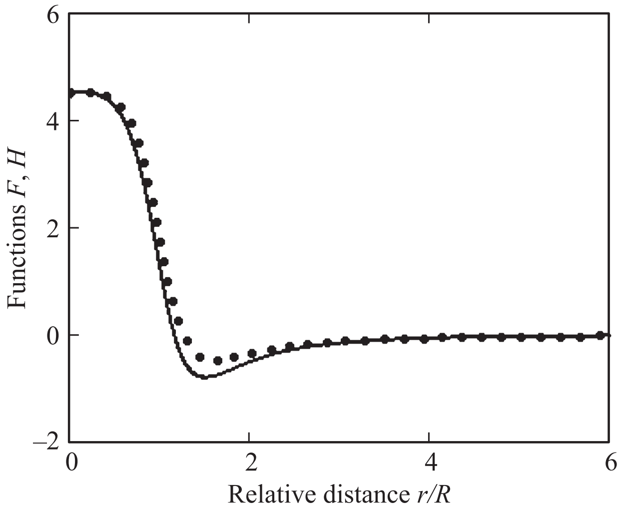

Рис. 1. Функции F и H, согласно (12) и (13), в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.5R$. Сплошная линия — функция F, пунктирная линия — функция H.

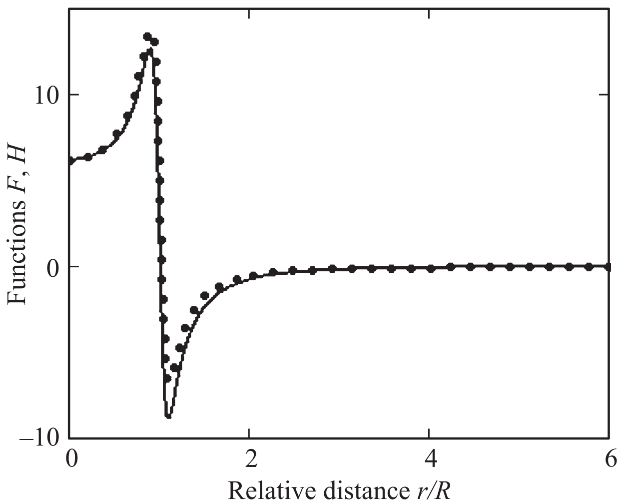

Рис. 2. Функции F и H согласно (12) и (13) в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.1R$. Сплошная линия — функция F, пунктирная линия — функция H.

выражение в методе функций Грина следующее:

$$\mathrm{Sp}u_{ij} = \frac{b}{4\pi R}\,\frac{1-2\nu}{1-\nu}\,H(\rho,\xi),$$

$$H \equiv -\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 \left(1 - \frac{3\xi^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}\right)\frac{\rho' d\rho'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}, \qquad (13)$$

где $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 = \rho^2 + \xi^2 - 2\rho\rho'\cos(\varphi-\varphi') + \rho'^2$. Показать аналитически, что (13) сводится к эллиптическим функциям (12) не удалось, хотя один раз проинтегрировать, например, по ρ' проблем не представляет. Поэтому сравнивать (12) и (13) пришлось численно. Результаты такого сравнения представлены на рис. 1, 2. На них приведены кривые зависимости функций F и H согласно формулам (12) и (13) соответственно от относительного расстояния ρ для двух плоскостей $z = 0.5R$ и $z = 0.1R$. Видно, что качественно они совпадают. Небольшие количественные отличия, возможно, связаны с использованием рядов для аппроксимации эллиптических функций. Так, для простоты численных вычислений и с учетом неравенства $m \le 1$, для $E(m)$ и $K(m)$ использовались их разложения в ряд до слагаемых порядка m^8

$$E(m) \approx \frac{\pi}{2}\left[1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 \frac{m}{1} - \left(\frac{1\cdot 3}{2\cdot 4}\right)^2 \frac{m^2}{3} - \cdots\right],$$

$$K(m) \approx \frac{\pi}{2}\left[1 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 m + \left(\frac{1\cdot 3}{2\cdot 4}\right)^2 m^2 + \cdots\right].$$

Как и должно быть в случае аксиальной симметрии задачи, результат интегрирования (13) не зависит от угла φ, поэтому в расчетах его положили равным нулю. Как видно из рисунков, взаимодействие меняет знак по мере удаления от центра петли, т. е. в любой плоскости $z = \mathrm{const}$ для ТД любого типа всегда есть область притяжения и отталкивания. Однако характер взаимодействия меняется по мере приближения ТД к плоскости петли. Так, на рис. 1 ($z = 0.5R$) взаимодействие — это плавно меняющаяся функция расстояния до оси петли с широким и „мелким“ минимумом, в то время как на рис. 2 ($z = 0.1R$) имеет место скачок в области $r \approx R$, т. е. в области ядра дислокации.

И последнее замечание. Круговая форма петли была выбрана лишь для сравнения с имеющимися аналитическими результатами. Но это может быть и эллипс. Отличие только в том, что интегрирование в (13) будет по площади эллипса и все. А вот можно ли решить уравнения равновесия для него, это еще вопрос.

4. Упругое поле краевой дислокационной петли, лежащей в базисной плоскости ГПУ-металла

Далее рассматривается та же самая краевая петля, лежащая в базисной плоскости (в данном случае $z' \equiv x'_3 = 0$) ГПУ-металла, характеризующегося в декартовой системе координат тензором упругих модулей вида

$$C_{jklm} = a\delta_{jk}\delta_{lm} + b(\delta_{jl}\delta_{km} + \delta_{jm}\delta_{kl}) + \gamma\delta_{j3}\delta_{k3}\delta_{l3}\delta_{m3} + \chi(\delta_{j3}\delta_{k3}\delta_{lm} + \delta_{jk}\delta_{l3}\delta_{m3}) + \rho(\delta_{jm}\delta_{k3}\delta_{l3} + \delta_{jl}\delta_{k3}\delta_{m3} + \delta_{kl}\delta_{j3}\delta_{m3} + \delta_{km}\delta_{j3}\delta_{l3}), \qquad (14)$$

$$a = C_{12}, \quad b = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \quad \chi = C_{13} - C_{12},$$

$$\rho = C_{55} - \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \quad \gamma = C_{11} + C_{33} - 4C_{44} - 2C_{13},$$

где C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, $C_{44} = C_{55}$ — минимальное число отличных от нуля упругих модулей; а ось x_3 совпадает с направлением гексагональной оси кристалла. Примером объекта такого рода могут служить так называемые c-петли $\mathbf{b} = 1/2[0001]$, наблюдавшиеся в цирконии при электронном облучении при $T = 715\,\mathrm{K}$. Что касается функции Грина, то регулярный метод ее построения для любой упругоанизотропной среды был предложен Лифшицем и Розенцвейгом в работе [9]. Было показано, что задача, в принципе, сводится к вычетам и подразумевает нахождение корней (полюсов) некоторого алгебраического уравнения шестой степени. Для большинства ГПУ-металлов (Zr, Mg, Co, Ti, Hf, Y, Sc, Tl, Tc, Ru, Re, Os) искомые полюса чисто мнимые, а для Zn, Cd и Be — комплексные. Для мнимых полюсов ТФГ получена в [9], для комплексных — в [10]. Однако в обеих работах результат содержит один и тот же недостаток — неопределенность типа $0/0$ при переходе к изотропии. В данной работе предлагается универсальное выражение для тензорной функции Грина, справедливое для любого кристалла гексагональной сингонии и, в отличие от классиков [9], не содержащее указанной неопределенности. Поскольку оно достаточно громоздкое и содержит много дополнительных обозначений, представляется целесообразным кратко изложить идею и основные моменты его получения.

Смещение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, возникающее в среде, под действием приложенной в начале координат точечной силы $\mathbf{f}$, удовлетворяет системе уравнений

$$C_{jklm}\frac{\partial^2 u_l(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r}) f_j, \quad u_i(\infty) \to 0, \tag{15}$$

Тензорная функция Грина определяется соотношением

$$u_l(\mathbf{r}) = \int d^3r' G_{ln}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') f_n \delta(\mathbf{r}') = G_{ln}(\mathbf{r}) f_n, \tag{16}$$

т. е. является решением системы

$$C_{jklm}\frac{\partial^2 G_{ln}(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r})\delta_{jn}, \quad G_{ln}(\infty) \to 0. \tag{17}$$

Поэтому, найдя компоненту смещения $u_l(\mathbf{r})$ и заменив в ней f_j на δ_{jn}, мы получим соответствующую компоненту $G_{ln}(\mathbf{r})$ ТФГ (латинские индексы принимают значения $1, 2, 3$). Это идея.

Решение (15) находится с помощью преобразования Фурье, с использованием известного разложения δ-функции Дирака

$$u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\boldsymbol{\xi}) \exp(i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}) d^3\xi,$$

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \exp(i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}) d^3\xi. \tag{18}$$

Подстановка (18) в (15) дает для амплитуд Фурье $V_l(\boldsymbol{\xi})$ систему алгебраических уравнений, формальное решение которой имеет вид

$$V_l(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\Delta_{lj}(\mathbf{e})}{\xi^2 \Delta(\mathbf{e})}\frac{f_j}{(2\pi)^3}, \tag{19}$$

где $\mathbf{e} = \boldsymbol{\xi}/\xi$ — единичный вектор в пространстве векторов $\boldsymbol{\xi}$; $\Delta(\boldsymbol{\xi})$ — определитель системы; $\Delta_{lj}(\boldsymbol{\xi})$ — его алгебраические дополнения. В силу действительности выражения (19), интеграл (18) можно представить следующим образом:

$$u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\boldsymbol{\xi}) \cos(\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}) d^3\xi$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{\Delta_{lj}(\mathbf{e}) f_j}{\Delta(\mathbf{e})}\left(\int_0^\infty \cos\{r\xi(\mathbf{n}\mathbf{e})\} d\xi\right) d\Omega(\mathbf{e}), \tag{20}$$

где второе интегрирование проводится по полному телесному углу в пространстве $\boldsymbol{\xi}$, а $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ — единичный вектор в пространстве $\mathbf{r}$. Техника вычисления интеграла (20) подробно изложена в оригинальной статье Лифшица–Розенцвейга, поэтому сразу приведем результат

$$u_l(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{r}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_{lj}(z)}{\Delta(z)}\frac{f_j}{(2\pi)^3} dz. \tag{21}$$

В общем случае $\Delta(z)$, $\Delta_{lj}(z)$ — полиномы шестой и четвертой степени комплексной переменной z соответственно, коэффициенты которых выражаются через полярные углы θ и φ вектора $\mathbf{n}$ в кристаллографической системе осей и упругие модули кристалла. Интеграл в (21) берется с помощью вычетов подынтегральной функции относительно полюсов, расположенных в верхней полуплоскости комплексной переменной z. Поэтому формально задача сводится к нахождению корней уравнения шестой степени $\Delta(z) = 0$. Для ГПУ-кристаллов искомые полюса являются корнями квадратного и биквадратного уравнений вида

$$\frac{1}{2}A(\theta)z^4 + B(\theta)z^2 + k = 0, \quad P(\theta)z^2 + b = 0,$$

$$A(\theta) = 2(k + l\sin^2\theta - m\sin^4\theta), \quad B(\theta) = (l\sin^2\theta + 2k),$$

$$P(\theta) = b + \rho\sin^2\theta, \tag{22}$$

а константы k, m, l даются выражениями

$$k = (a+2b)(b+\rho), \quad m = (a+b-\rho)\gamma - (\chi+2\rho)^2,$$

$$l = (a+2b)\gamma + (2b-\chi)(\chi+2\rho). \tag{23}$$

Коэффициенты уравнений (22) вещественны, поэтому их корни являются попарно сопряженными, и вклад в интеграл (21) дают только три из них $z_{1,2,3}$. Наиболее просто результат выглядит для компонент ТФГ $G_{3k}(\mathbf{r})$

$$G_{3k}(\mathbf{r}) = \frac{2i}{(z_1+z_2)A(n_3^2)}\left\{\frac{a+b+\chi+\rho}{4\pi}(\delta_{1k}n_1 + \delta_{2k}n_2)\frac{n_3}{r}\right.$$

$$\left. + \left((b+\rho) + (a+b-\rho)n_3^2 - \frac{(a+2b)}{z_1 z_2}\right)\frac{\delta_{3k}}{4\pi r}\right\}$$

$$\equiv \Phi(n_3^2)\frac{n_3 n_\beta \delta_{\beta k}}{4\pi r} + F(n_3^2)\frac{\delta_{3k}}{4\pi r}, \tag{24}$$

(здесь $n_1 = \sin\theta\cos\varphi$; $n_2 = \sin\theta\sin\varphi$; $n_3 = \cos\theta$ — компоненты единичного вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$; $z_{1,2}$ — корни биквадратного уравнения, лежащие в верхней полуплоскости комплексной переменной z). Аналогичный результат для компонент $G_{\alpha k}(\mathbf{r})$ $(\alpha = 1, 2)$ сложнее

$$G_{\alpha k}(\mathbf{r}) = \left[\frac{2i}{(z_1+z_2)}\frac{R(n_3^2)}{bA(n_3^2)} - \frac{bn_3^2}{\sqrt{bP(n_3^2)(b+\rho)(1-n_3^2)}}\right]\frac{\delta_{\alpha k}}{4\pi r}$$

$$-\left[\frac{2i}{(z_1+z_2)}\frac{S(n_3^2)}{(1-n_3^2)bA(n_3^2)} - \frac{P(n_3^2)+bn_3^2}{\sqrt{bP(n_3^2)(b+\rho)\left(1-n_3^2\right)^2}}\right]$$

$$\times\frac{(\delta_{1k}n_1+\delta_{2k}n_2)n_\alpha}{4\pi r} + \frac{2i}{(z_1+z_2)}\frac{a+b+\chi+\rho}{A(n_3^2)}\frac{n_\alpha n_3}{4\pi r}\delta_{3k}$$

$$\equiv N(n_3^2)\frac{\delta_{\alpha k}}{4\pi r} - M(n_3^2)\frac{n_\alpha n_\beta \delta_{\beta k}}{4\pi r} + \Phi(n_3^2)\frac{n_\alpha n_3 \delta_{3k}}{4\pi r}, \tag{25}$$

а функции $R(n_3^2)$ и $S(n_3^2)$ даются следующими выражениями

$$R = \frac{(a+b)(b+\rho)}{z_1z_2} - \frac{A(n_3^2)P(n_3^2)}{2(b+\rho)(1-n_3^2)}\left(z_1z_2 - \frac{b}{P}\right);$$

$$z_1z_2 = -\sqrt{\frac{2k}{A(n_3^2)}}; \tag{26}$$

$$S = (a+b)(b+\rho)\left[\frac{1}{z_1z_2} + n_3^2\right] - \frac{A(n_3^2)P(n_3^2)}{2(b+\rho)(1-n_3^2)}$$

$$\times\left[\left(z_1z_2 - \frac{b}{P}\right) + \left(z_1^2z_2^2 + \frac{b}{P}\left[z_1z_2 - \frac{2B}{A}\right]\right)n_3^2\right].$$

Удобство такой формы записи ТФГ заключается в предельной простоте перехода к изотропии. Положим $\gamma = \chi = \rho = 0$. Тогда $m = l = 0$, $A = B = 2k$, $P = b$, $k = b(a+2b)$, биквадратное уравнение (22) становится тривиальным: $\left[z^2+1\right]^2 = 0$, откуда следует, что $z_1 = z_2 = i$. В результате из (24), (25) имеем выражения

$$G_{3k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}$$
$$\times\left[(\delta_{1k}n_1+\delta_{2k}n_2)n_3 + \left(\frac{a+3b}{a+b} + n_3^2\right)\delta_{3k}\right]\frac{1}{r}, \tag{27}$$

$$G_{\alpha k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}$$
$$\times\left[\frac{a+3b}{a+b}\delta_{\alpha k} + (\delta_{1k}n_1+\delta_{2k}n_2)n_\alpha + n_\alpha n_3\delta_{3k}\right]\frac{1}{r}, \tag{28}$$

которые легко сворачиваются в одно

$$G_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}\left[\frac{a+3b}{a+b}\delta_{ik} + n_in_k\right]\frac{1}{r}, \tag{29}$$

соответствующее изотропной упругой среде ($a \to \lambda$; $b \to \mu$, где λ и μ — коэффициенты Ламэ). Отметим, что подобные попытки универсальной записи ТФГ гексагональных сред предпринимались и ранее [11], однако, как указано в статье [12] ТФГ в выражении Пан–Чоу не верна для компонент смещений, вызванных силой, параллельной плоскости изотропии.

В работах [13,14] приведены экспериментальные и расчетные значения упругих модулей практически всех ГПУ металлов. Анализ этих данных (в пересчете на Mbar) показывает, что для всех них имеют место неравенства $k = C_{11}C_{44} > 0$, $A(\theta) > 0$, $B(\theta) > 0$, $P(\theta) > 0$ для любого значения угла θ. Поэтому, нужный корень квадратного уравнения z_3 очевиден: $z_3 = i\sqrt{b/P}$ и формула (25) написана уже с учетом его явного вида. А в (24) он вообще вклада не дает. Зависимость от угла θ у коэффициентов $A(\theta)$, $B(\theta)$, $P(\theta)$, входит посредством $\sin^2\theta = 1 - n_3^2$, поэтому в (24), (25) в качестве аргумента фигурирует n_3^2. Что касается корней биквадратного уравнения $z_{1,2}$, то их явные выражения зависят от знака дискриминанта $D = B^2 - 2Ak$ или от соотношений между упругими модулями конкретного материала. Комбинация же $z_1z_2 = -(2k/A)^{1/2}$ универсальна, а знак минус следует из перехода к изотропии $z_1z_2 \to -1$. Таким образом, единственное место, где нужны явные выражения z_1z_2, это отношение $2i/(z_1+z_2)$. При $D > 0$, искомые полюса чисто мнимые и компактно могут быть записаны в виде

$$z_{1,2} = i\sqrt{p_{1,2}(n_3^2)/A(n_3^2)},$$

$$p_{1,2} = B \pm \sqrt{B^2 - 2Ak} = 2k + (l \pm \sqrt{l^2 + 4km})(1 - n_3^2). \tag{30}$$

Эта ситуация реализуется у Zr, Mg, Co, Ti, Hf, Y, Sc, Tl, Tc, Ru, Re, Os; для них $l, m > 0$, так что $p_{1,2}(n_3 > 0)$ для любого значения θ. Для Zn, Cd и Be дискриминант отрицательный $D < 0$, а искомые полюса имеют вид

$$z_{1,2}(n_3^2) = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2k}{A(n_3^2)}} - \frac{B(n_3^2)}{A(n_3^2)}\right)^{1/2}$$
$$+\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2k}{A(n_3^2)}} + \frac{B(n_3^2)}{A(n_3^2)}\right)^{1/2}. \tag{31}$$

Отметим, что в обоих случаях комбинация $2i/(z_1+z_2)$ вещественна, а сами $z_{1,2}$ являются функциями только n_3^2.

Теперь вернемся к нашей краевой дислокационной петле $\mathbf{b} = (0, 0, b^D)$, $\mathbf{n}^D = (0, 0, 1)$. Формула для смещений (6) принимает вид

$$u_i^D(\mathbf{r}) = b^D\int\limits_{S_D} d^2r'\left[C_{13}G_{i\alpha,\alpha}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + C_{33}G_{i3,3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right],$$

$$a + \chi = C_{13}, \quad a + 2b + \gamma + 2\chi + 4\rho = C_{33} \tag{32}$$

(по индексу $\alpha = 1, 2$ подразумевается суммирование). Подставляя в (32) компоненты G_{ik} из (24), (25), для компонент смещений $u_i(\mathbf{r})$ получаем

$$u_3^D(\mathbf{r}) = -\frac{b^D}{4\pi}\int\limits_{S_D} d^2r'\,\frac{\tau_3}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}\,\Psi(\tau_3^2),$$

$$u_\beta^D(\mathbf{r}) = \frac{b^D}{4\pi}\int\limits_{S_D} d^2r'\,\frac{\tau_\beta}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}\,Y(\tau_3^2),$$

$$\Psi(\tau_3^2) = C_{13}\left[\left(1-3\tau_3^2\right)\Phi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2\left(1-\tau_3^2\right)\frac{d\Phi}{d\tau_3^2}\right] + C_{33}\left[F\left(\tau_3^2\right) - 2\left(1-\tau_3^2\right)\frac{dF}{d\tau_3^2}\right],$$

$$Y(\tau_3^2) = C_{13}\left[-N\left(\tau_3^2\right) - 2\tau_3^2\,\frac{dN}{d\tau_3^2} - 3\tau_3^2 M\left(\tau_3^2\right) + 2\tau_3^2\left(1-\tau_3^2\right)\frac{dM}{d\tau_3^2}\right] + C_{33}\left[\left(1-3\tau_3^2\right)\Phi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2\left(1-\tau_3^2\right)\frac{d\Phi}{d\tau_3^2}\right], \quad (33)$$

где функции Φ и F определяются выражениями из формулы (24) для G_{3k}

$$\Phi\left(\tau_3^2\right) \equiv \frac{2i}{z_1+z_2}\,\frac{a+b+\chi+\rho}{A\left(\tau_3^2\right)},$$

$$F\left(\tau_3^2\right) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)A\left(\tau_3^2\right)} \times \left((b+\rho) + (a+b-\rho)\tau_3^2 - \frac{a+2b}{z_1 z_2}\right), \quad (34)$$

а функции N и M — выражениями в первой и второй квадратных скобках формулы (25) для $G_{\alpha k}$ соответственно

$$N\left(\tau_3^2\right) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)}\,\frac{R\left(\tau_3^2\right)}{bA\left(\tau_3^2\right)} - \frac{b\tau_3^2}{\sqrt{bP\left(\tau_3^2\right)}(b+\rho)(1-\tau_3^2)},$$

$$M\left(\tau_3^2\right) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)}\,\frac{S\left(\tau_3^2\right)}{\left(1-\tau_3^2\right)bA(\tau_3^2)} - \frac{P\left(\tau_3^2\right) + b\tau_3^2}{\sqrt{bP\left(\tau_3^2\right)}(b+\rho)(1-\tau_3^2)^2}. \quad (35)$$

Здесь τ_k — компоненты единичного вектора $\boldsymbol{\tau} = (\mathbf{r}-\mathbf{r}')/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, чтобы не путать с аналогичными компонентами вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$; $z_{1,2}\left(\tau_3^2\right)$ — полюса из (30), (31). Также учтено очевидное равенство $\sum_k \tau_k^2 = 1$ и простое правило дифференцирования $\frac{\partial f(\tau_3^2)}{\partial x_k} = 2\,\frac{\tau_3}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,[\delta_{3k} - \tau_3\tau_k]\,\frac{df}{d\tau_3^2}$. Обратим внимание, что переменная x_3' в компоненте τ_3 отсутствует, поскольку петля лежит в плоскости $x_3' = 0$.

Зная поле смещений, легко найти поле деформаций u_{ij}^D. Так,

$$u_{33}^D(\mathbf{r}) = -\frac{b^D}{4\pi} \times \int\limits_{S_D} \frac{d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\left[\left(1-3\tau_3^2\right)\Psi\left(\tau_3^2\right) + 2\tau_3^2(1-\tau_3^2)\,\frac{d\Psi}{d\tau_3^2}\right],$$

$$u_{\beta\gamma}^D(\mathbf{r}) = \frac{b^D}{4\pi}\int\limits_{S_D}\frac{d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} \times \left[(\delta_{\beta\gamma} - 3\tau_\beta\tau_\gamma)Y\left(\tau_3^2\right) - 2\tau_3^2\tau_\beta\tau_\gamma\,\frac{dY}{d\tau_3^2}\right], \quad \beta,\gamma = 1, 2. \quad (36)$$

И тогда

$$\mathrm{Sp}u_{ij}^D = -\frac{b^D}{4\pi}\int\limits_{S_D}\frac{d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\left[\left(1-3\tau_3^2\right)\left\{\Psi\left(\tau_3^2\right) + Y\left(\tau_3^2\right)\right\} + 2\tau_3^2\left(1-\tau_3^2\right)\frac{d}{d\tau_3^2}\left\{\Psi\left(\tau_3^2\right) + Y\left(\tau_3^2\right)\right\}\right]. \quad (37)$$

Переход к изотропному приближению тривиален

$$\left\{\Psi\left(\tau_3^2\right) + Y\left(\tau_3^2\right)\right\} \to \frac{2b}{a+2b},$$

$$\mathrm{Sp}u_{ij}^D \to -\frac{b^D}{4\pi}\,\frac{2b}{a+2b}\int\limits_{S_D}\frac{d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\left(1-3\tau_3^2\right). \quad (38)$$

Подставляя (37) в (5), получаем искомую энергию упругого взаимодействия данной краевой петли с центром дилатации (ТД), расположенным в точке наблюдения $\mathbf{r}$. При этом модуль всестороннего сжатия K в (5) надо заменить усредненным $K^{\mathrm{hex}} = \lambda^{\mathrm{hex}} + \frac{2}{3}\mu^{\mathrm{hex}}$, который конструируется из модулей гексагонального кристалла. Следуя, например, Фогту [5] $\lambda = \frac{1}{15}\left(2C_{iijj} - C_{ijij}\right)$, $\mu = \frac{1}{30}\left(3C_{ijij} - C_{iijj}\right)$, имеем

$$E_{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) = -K^{\mathrm{hex}}\Delta V\,\mathrm{Sp}u_{ij}^D(\mathbf{r}),$$

$$\lambda^{\mathrm{hex}} = a + \frac{1}{15}(\gamma + 10\chi), \quad \mu^{\mathrm{hex}} = b + \frac{1}{15}(\gamma + 10\rho). \quad (39)$$

Таким образом, аналитика сводится к дифференцированию функций Ψ и Y (33) по переменной τ_3^2 с последующим интегрированием по площади петли. Но, учитывая громоздкость $\Phi\left(\tau_3^2\right)$, $F\left(\tau_3^2\right)$, $N\left(\tau_3^2\right)$ и $M\left(\tau_3^2\right)$, выписывать результат для произвольной точки $\mathbf{r}$ даже в интегральном виде не будем.

Представляется логичным численно сравнить полученный результат (37) с изотропным приближением (12) и (38) для круговой петли. Для этого снова перейдем к безразмерным цилиндрическим координатам $\rho = r/R$; $\xi = z/R$ и введем следующие обозначения:

$I_{th}(\rho,\xi) = \frac{2\mu^{\mathrm{hex}}}{\lambda^{\mathrm{hex}} + 2\mu^{\mathrm{hex}}}\,F(\rho,\xi)$ — теоретический результат работы [8] (см. (12)),

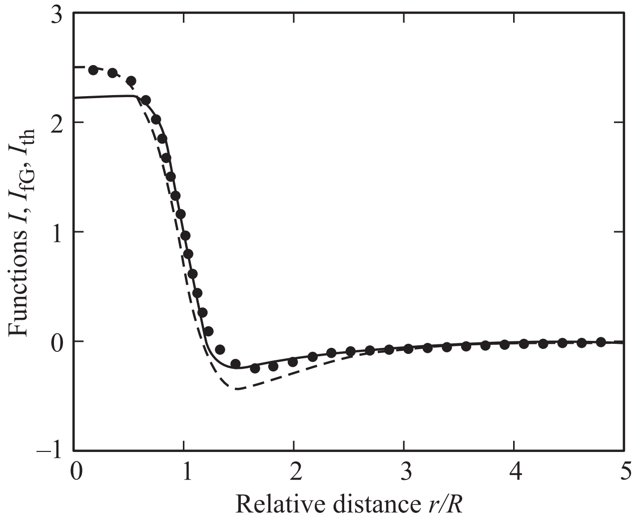

Рис. 3. Функции I (сплошная линия согласно (12)), I_{fG} (пунктирная линия, согласно (13)) и $I_{\rm th}$ (штриховая линия, согласно (37)) в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.5R$.

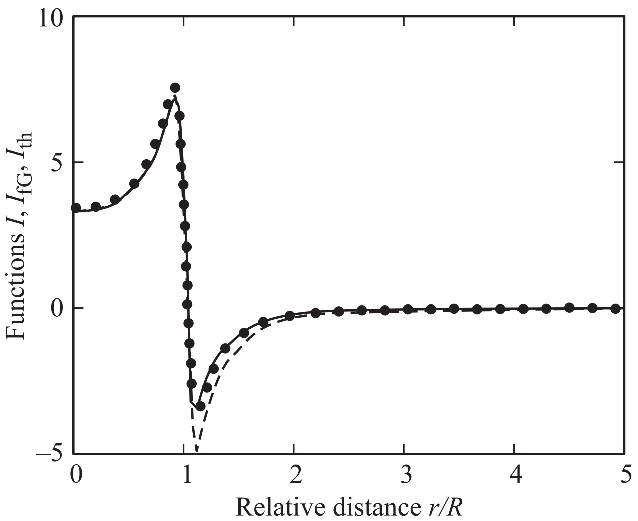

Рис. 4. Функции I (сплошная линия согласно (12)), I_{fG} (пунктирная линия, согласно (13)) и $I_{\rm th}$ (штриховая линия согласно (37)) в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.1R$.

$I_{fG}(\rho, \xi) = \frac{2\mu^{\rm hex}}{\lambda^{\rm hex} + 2\mu^{\rm hex}} H(\rho, \xi)$ — аналогичный результат в методе функций Грина (13),

$I(\rho, \xi) = -\int\limits_0^1 \rho' d\rho' \int\limits_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} Q(\rho, \xi, \rho', \varphi, \varphi')$ — полученный выше результат (37), где буквой Q обозначена подынтегральная функция переменной τ_3^2 в (37); $\tau_3^2 = \xi^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2$, а $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 = \rho^2 + \xi^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + \rho'^2$. При этом $\mathrm{Spu}_{ij}^D = \frac{b^D}{4\pi R} I(\rho, \xi)$, и не зависит от угла φ (в силу изотропии в базисной плоскости). Численные оценки были проведены применительно к цирконию. Экспериментальные значения его упругих модулей, согласно [14], следующие (Mbar): $C_{11} = 1.554$; $C_{12} = 0.672$; $C_{13} = 0.646$; $C_{33} = 1.725$; $C_{55} = C_{44} = 0.363$. Результаты сравнения представлены на рис. 3, 4. На них приведены кривые зависимости функций I, I_{fG}, $I_{\rm th}$ от относительного расстояния ρ для двух плоскостей $z = 0.5R$ и $z = 0.1R$. Видно, что вклад анизотропии вдоль c-оси циркония в искомую энергию взаимодействия несущественный (по крайней мере для Zr) и что аналитическая формула (12) вполне приемлема для дальнейших применений.

5. Результаты и их обсуждение

Целью работы был расчет энергии упругого взаимодействия центра дилатации с краевой дислокационной петлей, расположенной в базисной плоскости кристалла гексагональной сингонии с использованием тензорной функции Грина упругой среды, моделирующей кристалл (формулы (5), (6)). Для этого формула (6) сначала была „протестирована“ на примере краевой прямолинейной дислокации и краевой петли в изотропной среде. Для них упругое поле рассчитывалось путем решения уравнений равновесия, и результаты в аналитическом виде были хорошо известны. В работе показано, что использование ТФГ дает те же результаты, только в интегральном виде. Так, известные аналитические выражения для поля прямолинейной дислокации получаются из прямоугольной петли в пределе ее бесконечно большого размера, а для круговой петли численное сравнение двойного интеграла (13) дает хорошее согласие с аналитикой (12) (см. рис. 1, 2).

В случае гексагональных кристаллов предложены универсальные выражения для компонент ТФГ, не содержащие неопределенности типа $0/0$ при переходе к изотропному приближению (24), (25), и справедливые для любого гексагонального кристалла. Может возникнуть вопрос об их расходимости в пределе $n_3^2 \to 1$. Этот момент не обсуждался в оригинальной работе Лифшица–Розенцвейга. На самом деле никакой расходимости нет. Для определенности рассмотрим кристаллы, у которых полюса $z_{1,2}$ чисто мнимые (30) (это, например, Zr). Нетрудно показать, что

$$N(n_3^2 \to 1) \to -\frac{(a+b)(b+\rho)}{2kb} + \frac{1}{b},$$

$$M(n_3^2 \to 1) \to -\frac{(a+b)(b+\rho)}{2kb}\left(1 + \frac{l}{2k}\right) + \frac{1}{4(b+\rho)}\left(\frac{m}{k} - \frac{\rho^2}{b^2} + \frac{l}{k}\frac{\rho}{b}\right),$$

т. е. с компонентами $G_{\alpha k}(\mathbf{r})$ все в порядке. Аналогичная картина и с компонентами смещений и деформаций, которые содержат первые и вторые производные от $N(n_3^2)$ и $M(n_3^2)$. Так, например,

$$\frac{dN}{dn_3^2}(n_3^2 \to 1) \to -\frac{(a+b)(b+\rho)}{8bk}\frac{l}{k} + \frac{1}{8(b+\rho)}\left[\frac{m}{k} + 3\frac{\rho^2}{b^2} + \frac{\rho}{b}\left(4 + \frac{l}{k}\right)\right],$$

$$\frac{d^2N}{d(n_3^2)^2}(n_3^2 \to 1) \to -\frac{(a+b)(b+\rho)}{8bk}\left(\frac{l^2}{k^2} + \frac{m}{k}\right) + \frac{1}{8(b+\rho)}\left[\frac{ml}{k^2} + 6\frac{\rho^2}{b^2} + 5\frac{\rho^3}{b^3} + \frac{\rho}{b}\left(\frac{l^2}{k^2} + \frac{m}{k}\right)\right].$$

Искомый предел для производных от $M(n_3^2)$ еще более громоздкий, но конечный. Выписывать его мы не будем.

На основе (24), (25) рассчитаны поля смещений (35) и деформаций (36), создаваемые краевой дислокационной петлей, лежащей в базисной плоскости кристалла, а также энергия ее упругого взаимодействия с центром дилатации (38). Например, для инфинитезимальной петли из (35) имеем

$$u_3^D(\mathbf{r}) = -\frac{b^D \delta S_D}{4\pi|\mathbf{r}|^2} n_3 \Psi(n_3^2),$$

$$u_\beta^D(\mathbf{r}) = \frac{b^D \delta S_D}{4\pi|\mathbf{r}|^2} n_\beta Y\left(n_3^2\right), \quad n_i = r_i/|\mathbf{r}|.$$

Аналогично из (36) находим поле деформаций, а используя закон Гука

$$\sigma_{33} = (a+\chi)\mathrm{Sp}u_{ik} + (2b + \gamma + \chi + 4\rho)u_{33},$$

$$\sigma_{\beta\gamma} = (a\mathrm{Sp}u_{ik} + \chi u_{33})\delta_{\beta\gamma} + 2bu_{\beta\gamma}, \quad \sigma_{\beta 3} = 2(b+\rho)u_{\beta 3},$$

находим поле напряжений, создаваемое такой дислокационной петлей. При этом для базисной плоскости ($n_3 = 0$) мы автоматически получаем результаты работы [15]. Здесь следует заметить, что задача об упругом взаимодействии инфинитезимальных объектов позднее решалась Yoo в работе [16], однако там ТФГ использовалась в форме Кренера [17]. А поскольку сравнения результатов Yoo с [15] сделано не было, трудно судить, какая из форм ТФГ более предпочтительна.

Применительно к цирконию численно показано (рис. 3, 4), что учет анизотропии практически не влияет на энергию упругого взаимодействия базисной c-петли с ТД в модели центра дилатации. Поэтому для расчета диффузионных потоков ТД и ее фактора предпочтения можно использовать изотропное приближение и аналитические выражения из работы [8] (формулы (12)).

Таким же образом можно рассмотреть поле напряжений, создаваемое a-петлей в цирконии ($\mathbf{b} = 1/3\langle 11\bar{2}0\rangle$), залегающей в плоскости $\{11\bar{2}0\}$. Это — доминирующая форма дислокационных петель при нейтронном облучении. Это совершенные петли, как вакансионные, так и междоузельные по своей природе. Действительно, выбрав ось x_1 декартовой системы координат по направлению вектора Бюргерса, получим

$$C_{ik11} = \alpha\delta_{jk} + 2b\delta_{j1}\delta_{k1} + \chi\delta_{j3}\delta_{k3},$$

$$u_i^D(\mathbf{r}) = b^D \int\limits_{S_D} d^2r'[(a+2b)G_{i1,1} + aG_{i2,2} + (a+\chi)G_{i3,3}].$$

Дальнейшие вычисления полностью аналогичны проделанным выше, но это уже другая задача.

Список литературы

[1] В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. Радиационные дефекты и распухание металлов. Наук. думка, Киев (1988). 296 с.
[2] V.I. Dubinko, S.A. Kotrechko, V.F. Klepikov. Radiat. Eff. Defects Solids. **164**, 647 (2009).
[3] Дж. Эшелби. Континуальная теория дислокаций. Наука, М. (1963). 215 с.
[4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 246 с.
[5] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
[6] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Мир, М. (1985). 352 с.
[7] T. Mura. Micromechanics of Defects in Solids. Martinus Nijhof Publishers, Dordrecht. 2nd ed. (1987). 588 c.
[8] F. Kroupa. Czech. J. Phys. B **10**, 284 (1960).
[9] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ **17**, 783 (1947).
[10] П.Н. Остапчук. ФТТ **55**, 95 (2013).
[11] Y.C. Pan, T.W. Chou. J. Appl. Mech. **43**, 608 (1976).
[12] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Р.С. Телятник. ФТТ **58**, *5*, 941 (2016).
[13] М.А. Баранов, Е.А. Дубов, И.В. Дятлова, Е.В. Черных. ФТТ **46**, 212 (2004).
[14] L. Fast, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson. Phys. Rev. B **51**, 17 431 (1995).
[15] L. Leychek. Czech. J. Phys. B **19**, 799 (1969).
[16] M.H. Yoo. Phys. Status Solidi B **61**, 411 (1974).
[17] E. Kröner. Zeitschrift Phyzik **136**, 402 (1953).