

# УПРУГОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ С ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЕТЛЕЙ В МЕТОДЕ ФУНКЦИЙ ГРИНА

*П.Н. Остапчук, О.Г. Троценко*

*Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,  
Харьков, Украина*

*E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua*

В изотропном приближении упругой среды даются выражения энергии упругого взаимодействия между точечным дефектом и круговой краевой дислокацией, посчитанные двумя различными способами. Первый – это решение уравнений равновесия; второй – использование тензорной функции Грина. Показано, что оба метода дают хорошее качественное и количественное согласие. Приводятся аргументы о предпочтительности метода функций Грина при переходе к описанию реальных кристаллов, в частности гексагональной сингонии.

PACS: 62.20.Dc; 62.20.Fe

## ВВЕДЕНИЕ

Предположение об упругом взаимодействии между дислокациями и точечными дефектами (ТД) кристалла оказалось очень полезным во многих задачах теории радиационного материаловедения. Именно оно, по современным представлениям, является причиной явления радиационного распухания облучаемых металлов и сплавов [1, 2], а также основной движущей силой микроструктурной эволюции материала под облучением, проявляющимся, в частности, в зарождении и росте дислокационных петель, ведущих, в конечном счете, к радиационному упрочнению конструкционных материалов ядерных реакторов [3]. Согласно Эшелби [4], это взаимодействие определяется моделью ТД, как источника внутренних напряжений, и полем упругих напряжений, создаваемых петлей в месте расположения ТД. Как правило, точечный дефект рассматривается в приближении центра дилатации. Упругое поле дислокации можно определять двойко. Во-первых, можно искать неоднозначные решения уравнений равновесия в терминах смещений [5]. Во-вторых, использовать тензорную функцию Грина (ТФГ)  $G_{ik}$  уравнений равновесия данной упругой среды, т. е. функцию, определяющую смещение  $u_i$ , созданное в неограниченной среде, сосредоточенной в начале координат единичной силой, которая направлена вдоль оси  $x_k$  [6, 7]. В изотропном приближении ТФГ хорошо известна. В случае упругоанизотропной среды регулярный метод ее построения был предложен И.М. Лифшицем и Л.Н. Розенцвейгом в работе [8]. Было показано, что задача, в принципе, сводится к вычитам и подразумевает нахождение корней (полюсов) некоторого алгебраического уравнения шестой степени. Расположение полюсов в нужной полуплоскости комплексной переменной определяется конкретными значениями упругих модулей кристалла. Практически для всех ГПУ-металлов (Zr, Mg, Co, Ti и т. д.) искомые полюса чисто мнимые, а для Zn, Cd и Be – комплексные. В работе [9] компоненты ТФГ гексагональной среды

получены в общем виде, справедливым как для мнимых, так и для комплексных полюсов. А вот обобщение на анизотропный случай решений уравнений равновесия представляется затруднительным. В этом сообщении рассматривается краевая дислокационная петля, линия которой имеет форму окружности. Двумя способами вычисляется энергия взаимодействия петли с ТД в модели центра дилатации в изотропном приближении. Численно показывается, что результаты в обоих случаях совпадают. Обсуждается возможность их обобщения на гексагональную анизотропию.

## 1. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ РАВНОВЕСИЯ

Рассмотрим в бесконечной упругоизотропной среде краевую дислокацию Вольтера, линия которой имеет форму окружности, а вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости дислокации. В цилиндрических координатах  $(r, \varphi, z)$  дислокационная линия лежит в плоскости  $z = 0$ , окружность с центром в начале координат имеет радиус  $R$ , а вектор Бюргерса имеет только  $z$ -компоненту  $(0, 0, b)$ . Такая петля формируется следующим образом. В плоскости  $z = 0$  удаляется круглая (радиуса  $R$ ) часть материала среды толщиной  $b$ , а «берега» образовавшейся полости склеиваются, перемещаясь на величину  $b/2$  и  $-b/2$  в  $z$ -направлении. В результате среда остается непрерывной за исключением сингулярной дислокационной линии. Поскольку задача аксиально-симметрична, угловая зависимость отсутствует, и напряженное состояние однозначно определяется четырьмя компонентами тензора напряжений:  $\sigma_{rr}$ ,  $\sigma_{\varphi\varphi}$ ,  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{rz}$ . Кроме того, решение можно искать только для верхней полуплоскости ( $z \geq 0$ ) с граничными условиями в плоскости  $z = 0$ :

$$u_z(r, 0) = -\frac{1}{2}b, \quad 0 \leq r < R;$$
$$u_z(r, 0) = 0, \quad r > R;$$

$$\sigma_{rz}(r, 0) = 0. \quad (1)$$

Условие на сдвиговые напряжения  $\sigma_{rz}$  обеспечивает требуемую симметрию и непрерывный переход в нижнюю полуплоскость. Оказывается, что уравнения равновесия тождественно удовлетворяются подстановкой:

$$u_r = -\frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r \partial z};$$

$$u_z = 2 \frac{1-\nu}{1-2\nu} \nabla^2 \Phi - \frac{1}{1-2\nu} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2}, \quad (2)$$

где  $\Phi(r, z)$  – произвольная функция, а  $\nu$  – коэффициент Пуассона (напомним, что упругая среда предполагается изотропной). Аналогичная подстановка в уравнения неразрывности деформаций дает бигармоническое уравнение для  $\Phi(r, z)$ :

$$\nabla^2 \nabla^2 \Phi = 0, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (3)$$

Техника решения таких уравнений в цилиндрической симметрии применительно к теории упругости детально разработана в [10]. Поэтому здесь, сугубо для понимания логики вычислений, приведем лишь ее основные моменты. Уравнение (3) с помощью преобразования Ханкеля  $G(\xi, z) = \int_0^\infty r \Phi(r, z) J_0(\xi, r) dr$  сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению четвертого порядка:

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} - \xi^2 \right)^2 G(\xi, z) = 0,$$

решение которого имеет вид:

$G(\xi, z) = (A + Bz)e^{\xi z} + (C + Dz)e^{-\xi z}$ , где  $A, B, C$  и  $D$  определяются из граничных условий задачи. Поскольку все компоненты смещений и напряжений должны исчезать при  $z \rightarrow \infty$ , то  $A = B = 0$ , соответственно  $G(\xi, z) = (C + Dz)e^{-\xi z}$ . Для сдвиговых напряжений в терминах функции  $G(\xi, z)$  имеем

$$\sigma_{rz}(r, z) = 2\mu \frac{1-\nu}{1-2\nu} \int_0^\infty \xi^2 \left[ \frac{\nu}{1-\nu} \frac{d^2 G}{dz^2} + \xi^2 G \right] J_1(\xi, r) d\xi, \quad (4)$$

где  $J_0, J_1$  – функции Бесселя первого рода;  $\mu$  – модуль сдвига. После подстановки  $G(\xi, z)$  в (4) второе граничное условие в (1) дает связь  $C(\xi) = 2\nu \frac{D(\xi)}{\xi}$  соответственно  $G(\xi, z) =$

$$= \frac{D(\xi)}{\xi} (2\nu + \xi z) e^{-\xi z}. \text{ Далее, для } z\text{-компо-}$$

ненты смещений в терминах функции  $G(\xi, z)$  имеем

$$u_z = \int_0^\infty \xi \left[ \frac{d^2 G}{dz^2} - 2 \frac{1-\nu}{1-2\nu} \xi^2 G \right] J_0(\xi, r) d\xi. \quad (5)$$

После подстановки  $G(\xi, z)$  в (5) первое граничное условие в (1) дает  $D(\xi) = \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{bR}{4\xi^2} J_1(\xi R)$  и соответственно

$$G(\xi, z) = \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{bR}{4\xi^3} J_1(\xi, R) (2\nu + \xi z) e^{-\xi z}. \quad (6)$$

Поскольку все компоненты смещений и напряжений с помощью инверсионной теоремы Ханкеля выражаются через  $G(\xi, z)$  и ее производные по переменной  $\xi$ , то фактически задача решена. Чтобы не загромождать текст формулами, окончательные выражения приводить не будем. Их можно найти в [5]. Нас интересует только шпур поля напряжений, поскольку именно он фигурирует в выражении для энергии упругого взаимодействия ТД с этим полем:

$$E_{\text{int}}(\vec{r}) = -\frac{1}{3} \Delta V S p \sigma_{ik}(\vec{r}) = \Delta V \bar{P}(\vec{r}), \quad (7)$$

где  $\Delta V$  – дилатационный объем ТД;  $\bar{P}(\vec{r})$  – среднее давление, создаваемое полем в месте нахождения ТД. Результат в безразмерных переменных ( $\rho = r/R; \zeta = z/R$ ) следующий:

$$S p \sigma_{ik} = \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\mu b}{2\pi R} F\left(\frac{r}{R}, \frac{z}{R}\right);$$

$$F \equiv \frac{2}{\sqrt{(1+\rho)^2 + \zeta^2}} \left[ \frac{1^2 - \rho^2 - \zeta^2}{(1-\rho)^2 + \zeta^2} E(m) + K(m) \right]. \quad (8)$$

Здесь  $E(m), K(m)$  – полные эллиптические интегралы первого и второго рода,

$$m \equiv \frac{4\rho}{(1+\rho)^2 + \zeta^2}. \text{ Рассмотрим предельный}$$

случай больших по сравнению с размером петли расстояний. В качестве малого параметра естественно выбрать  $\varepsilon = 1/\rho \ll 1$ . Тогда, в

$$\text{частности, } m = 4 \frac{a\varepsilon}{1 + 2a\varepsilon + a\varepsilon^2}, \text{ где } a \equiv \frac{\rho^2}{\rho^2 + \zeta^2}.$$

Используя разложения в ряд эллиптических интегралов

$$E(m) \approx \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 \frac{m}{1} - \left(\frac{1.3}{2.4}\right)^2 \frac{m^2}{3} - \dots \right];$$

$$K(m) \approx \frac{\pi}{2} \left[ 1 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 m + \left(\frac{1.3}{2.4}\right)^2 m^2 + \dots \right], \quad (9)$$

получаем стандартное выражение такое же, как для инфинитезимальной петли с учетом  $\delta S = \pi R^2$ :

$$E_{\text{int}}(\vec{r}) \approx \Delta V \frac{\mu b}{6\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\pi R^2}{(r^2 + z^2)^{3/2}} \left( 1 - 3 \frac{z^2}{r^2 + z^2} \right). \quad (10)$$

В плоскости  $z = 0$  энергия взаимодействия спадает как  $1/r^3$ .

## 2. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА

С этим методом связана известная формула для смещений, обусловленных дислокацией любой формы для любого анизотропного материала:

$$u_i(\vec{r}) = C_{jklm} b_m \int_{S_D} n_l G_{ij,k}(\vec{r} - \vec{r}') d^2 r';$$

$$G_{ij,k} \equiv \frac{\partial}{\partial x_k} G_{ij}, \quad (11)$$

где  $C_{jklm}$  – тензор модулей упругости среды, моделирующей кристалл;  $b_m$  – компонента вектора Бюргерса дислокации;  $n_l$  – компонента вектора нормали к произвольной поверхности  $S_D$ , опирающейся на дислокационную линию  $D$ ;  $G_{ij}$  – тензорная функция Грина;  $\vec{r}$  – точка наблюдения; интегрирование проводится по поверхности  $S_D$ . В изотропном приближении

$$C_{jklm} = \lambda \delta_{jk} \delta_{lm} + \mu (\delta_{jl} \delta_{km} + \delta_{jm} \delta_{kl}); \quad (12)$$

$$G_{ij} = \frac{1}{8\pi\mu} \frac{1}{2(1-\nu)} \left[ (3-4\nu)\delta_{ij} + n_i n_j \right] \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|};$$

$$n_i = \frac{x_i - x'_i}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

В нашем случае  $S_D$  – это плоскость петли, соответственно  $n_l = n_3 = 1$ ; петля краевая с вектором Бюргерса вдоль оси «z», т. е.  $b_m = b_3 \equiv b$ , поэтому  $u_i(\vec{r}) = b C_{jk33} \int_{S_D} G_{ij,k}(\vec{r} - \vec{r}') d^2 r'$ .

Соответствующий тензор деформации принимает вид:

$$u_{in}(\vec{r}) = b C_{jk33} \frac{1}{2} \int_{S_D} (G_{ij,kn}(\vec{r} - \vec{r}') + G_{nj,ki}(\vec{r} - \vec{r}')) d^2 r'. \quad (13)$$

Нас по-прежнему интересует только величина  $Sp\sigma_{ij} = (3\lambda + 2\mu) Spu_{ij}$ , поэтому последовательность вычислений следующая: вычисляем вторую производную  $G_{ij,kn}$ , заменяем индекс «n» на «i» и по нему суммируем. В результате

$$Spu_{in} = -\frac{b}{8\pi\mu} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \sum_{j,k} C_{jk33} \int_{S_D} (\delta_{kj} - 3n_k n_j) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} d^2 r'. \quad (14)$$

Теперь подставляем в (14) явное выражение для  $C_{jk33}$  из (12) и снова суммируем по повторяющимся индексам. Получаем

$$Sp\sigma_{in} = -\frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\mu b}{2\pi} \iint_{x^2+y^2 \leq R^2} \left( 1 - \frac{3z^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \right) \frac{dx' dy'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}. \quad (15)$$

Заметим, что в интеграле (15)  $z' = 0$ , поскольку петля лежит в плоскости «xy». Далее, чтобы сравнить (15) с (8), перейдем к безразмерным цилиндрическим координатам ( $\rho = r/R$ ;  $\zeta = z/R$ ). Имеем

$$Sp\sigma_{in} = \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\mu b}{2\pi R} H\left(\frac{r}{R}, \frac{z}{R}\right);$$

$$H \equiv -\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 \left( 1 - \frac{3z^2}{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|^2} \right) \frac{\rho' d\rho'}{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|^3}, \quad (16)$$

где  $|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|^2 = \rho^2 + \zeta^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi' - \varphi) + \rho'^2$ .

По поводу (16) сделаем два замечания. Во-первых, и это важно, результат интегрирования не зависит от угла  $\varphi$ . Это становится очевидным, если сделать замену  $\psi = \varphi' - \varphi$ . Тогда пределы интегрирования для  $\psi$  сместятся на  $\varphi$   $[-\varphi; 2\pi - \varphi]$ , оставаясь в пределах периода  $2\pi$ . А интеграл от периодической функции на периоде не зависит от точки отсчета. Поэтому в (16) угол  $\varphi$  можно просто опустить. Так и должно быть в силу аксиальной симметрии задачи. И во-вторых, в элементарных функциях интеграл в (16) не берется, хотя один раз проинтегрировать по  $\rho'$  проблем не представляет. Доказать, что повторный интеграл сводится к эллиптическим функциям – проблематично. Поэтому сравнивать результаты (8) и (16) будем графически. При этом в (8) для простоты вместо функций  $E$  и  $K$  будем использовать их разложения в ряд (9) до слагаемых порядка  $m^8$ .

На рис. 1, 2 показаны кривые зависимости функций  $F$  и  $H$  согласно формулам (8) и (16) соответственно от относительного расстояния  $\rho$  для двух плоскостей  $z = 0,5R$  и  $z = 0,1R$ . Видно, что качественно они совпадают. Небольшое количественное отличие, скорее всего, связано с использованием рядов (9) для аппроксимации эллиптических функций. Дело в том, что зависимость  $m(\rho)$  при  $z = const$  имеет максимум, значение которого близко к единице при малых  $z$ . Поэтому количество членов ряда в области максимума, по-видимому, не достаточно. С увеличением  $z$  значение максимума уменьшается, и количественное согласие улучшается. Отметим несколько моментов. Как видно из рисунков, взаимодействие меняет знак по мере удаления от центра петли, т. е. в любой плоскости для ТД любого типа всегда есть область притяжения и отталкивания. В случае с нашей петлей (она вакансионная) область отрицательных  $F$  и  $H$  – это область притяжения вакансий ( $\Delta V < 0$ ).

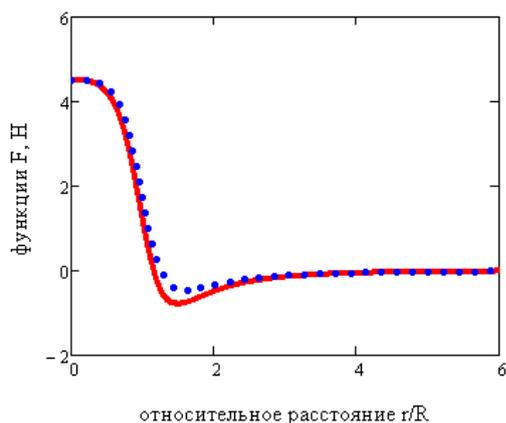


Рис. 1. Функции  $F$  и  $H$  согласно (8) и (16) в зависимости от относительного расстояния  $\rho = r/R$  на плоскости  $z = 0,5R$

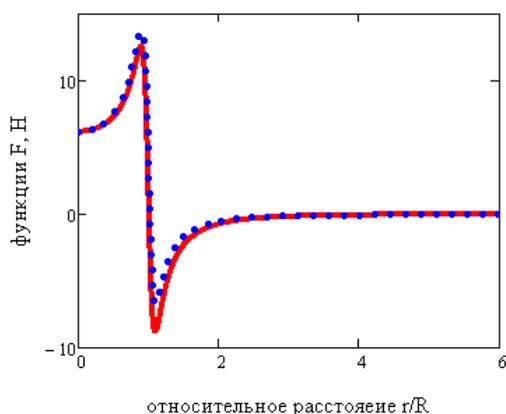


Рис. 2. Функции  $F$  и  $H$  согласно (8) и (16) в зависимости от относительного расстояния  $\rho = r/R$  на плоскости  $z = 0,1R$

Отметим быстрое спадание взаимодействия на больших ( $r > 2R$ ) расстояниях. Интересно поведение минимума. При больших  $z$  ( $z > 1$ ) он широкий, «мелкий» и смещен в область больших  $r$ . По мере приближения к плоскости петли (см. рис. 1, 2) он сужается, углубляется и смещается к точке  $r = R$ , т.е. к ядру дислокации. Таким образом, в ближайшей окрестности нашей петли с внешней ее части имеет место область сильного притяжения для вакансий (что-то типа области захвата). Соответственно из внутренней части вакансии выталкиваются, но тоже по-разному, в зависимости от удаленности от плоскости петли.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Итак, основная цель данного сообщения – показать, что использование формулы (11), содержащей функцию Грина, в простейшем случае изотропной упругой среды дает тот же результат, что и решение уравнений равновесия. Конечно, физический смысл задач, связанных с изотропным приближением, условен, поскольку реальные дислокации по своей сути присущи кристаллам, т.е. анизотропным средам, однако иллюстративный интерес они все же представляют. В плане перехода

к анизотропии, в частности к гексагональной сингонии (имеется в виду, прежде всего, цирконий), именно метод функций Грина представляется нам предпочтительнее, и вот почему. Предположим, что петля, как это часто бывает в реальности, имеет форму эллипса. Даже в изотропном приближении решение уравнений равновесия становится проблематичным. Появляется угловая зависимость, сами уравнения равновесия резко усложняются. Далеко не факт, что можно найти подстановку, приводящую к уравнению в частных производных типа (3), не говоря уже о его решении, ведь метод преобразований Ханкеля разработан только для аксиально-симметричных задач. В методе функций Грина интеграл по площади круга (15) заменяется интегралом по площади эллипса и все. Теперь по поводу гексагональной сингонии. Хотя в базисной плоскости, скажем циркония, имеет место изотропия и угловая зависимость отсутствует, усложнение тензора упругих модулей

$$C_{iklm} = a\delta_{ik}\delta_{lm} + b(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}) + \gamma\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{l3}\delta_{m3} + \chi(\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{lm} + \delta_{ik}\delta_{l3}\delta_{m3}) + \rho(\delta_{im}\delta_{k3}\delta_{l3} + \delta_{il}\delta_{k3}\delta_{m3} + \delta_{kl}\delta_{i3}\delta_{m3} + \delta_{km}\delta_{i3}\delta_{l3}) \quad (17)$$

приводит к тем же аргументам относительно уравнений равновесия. Ведь решать их все равно надо в терминах смещений (иначе решение не будет содержать вектора Бюргерса), а закон Гука уже сложнее:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= aS\rho u_{ik} + 2bu_{11} + \chi u_{33}; & \sigma_{12} &= 2bu_{12}; \\ \sigma_{22} &= aS\rho u_{ik} + 2bu_{22} + \chi u_{33}; & \sigma_{\beta 3} &= 2bu_{\beta 3}; \\ \sigma_{33} &= (a + \chi)S\rho u_{ik} + (2b + \gamma + \chi + 4\rho)u_{33}. \end{aligned}$$

В методе функций Грина формула (11) остается прежней. Усложняется вид тензора Грина, но он, в отличие от подстановки (2), известен [9]. Поэтому принципиальных трудностей для решения аналогичной задачи, но уже для циркония, нет. Но это тема будущего сообщения.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. *Радиационные дефекты и распухание металлов*. Киев: «Наукова думка», 1988, 296 с.
2. В.Н. Воеводин, И.М. Неклюдов. *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов*. Киев: «Наукова думка», 2006, 376 с.
3. V.I. Dubinko, S.A. Kotrechko, and V.F. Klepikov // *Radiat. Eff. Defects Solids*. 2009, v. 164, p. 647.
4. Дж. Эшелби. *Континуальная теория дислокаций*. М.: «Наука», 1963, 215 с.
5. F. Kroupa // *Czech. J. Phys. B*. 1960, v. 10, p. 284.
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. М.: «Наука», 1987, 246 с.
7. Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. М.: «Атомиздат», 1972, 600 с.
8. И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг // *ЖЭТФ*. 1947, т. 17, с. 783.

9. П.Н. Остапчук, О.Г. Троценко // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2014, №4(92), с. 49-54.

10. Ian. N. Sneddon. *Fourier Transforms*. Mc Graw Hill. New York, 1951.

*Статья поступила в редакцию 12.08.2015 г.*

## **ПРУЖНА ВЗАЄМОДІЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ З ДИСЛОКАЦІЙНОЮ ПЕТЛЕЮ У МЕТОДІ ФУНКЦІЙ ГРІНА**

*П.М. Остапчук, О.Г. Троценко*

У ізотропному наближенні пружного середовища даються вираження енергії пружної взаємодії між точковим дефектом та круговою крайовою дислокацією, що пораховані двома різними способами. Перший – це рішення рівнянь рівноваги. Другий – використання тензорної функції Гріна. Показано, що обидва методи дають хорошу якісну і кількісну згоду. Наводяться аргументи щодо переваги методу функцій Гріна при переході до опису реальних кристалів, зокрема гексагональної сингонії.

## **ELASTIC INTERACTION OF POINT DEFECTS WITH DISLOCATION LOOP IN THE GREEN'S FUNCTION METHOD**

*P.N. Ostapchuk, O.G. Trotsenko*

Using an elastic medium isotropic approximation, expressions of elastic interaction energy between the point defect and the circular edge dislocation, considering two different ways, are obtained. The first is the solution of the equilibrium equations. The second is the result of using of Green's tensor function. It is shown that both methods give a good qualitative and quantitative agreement. Arguments about the preferred method of Green's functions in the transition to the description of real crystals, particularly the hexagonal system, are proposed.