

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

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

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]

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

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

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

Тогда для энергии взаимодействия ТД с полем T имеем

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

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

$$E_{\text{int}}(\mathbf{r}) = -K \Delta V \text{Spr}_{ij}^D, \quad (5)$$

где K — модуль всестороннего сжатия среды; ΔV — изменение объема среды, вызванное наличием в ней одного ТД; величина Spr_{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

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

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

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

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

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

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

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

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,

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

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

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

В результате в пределе $L \rightarrow \infty$

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

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

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

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

Формально при $L \rightarrow \infty$ 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

$$\text{Spu}_{ij}^D = -\frac{b}{2\pi} \frac{1-2\nu}{(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2},$$

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

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

$$\text{Spu}_{ij} = \frac{b}{4\pi R} \frac{1-2\nu}{1-\nu} F(\rho, \xi),$$

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

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

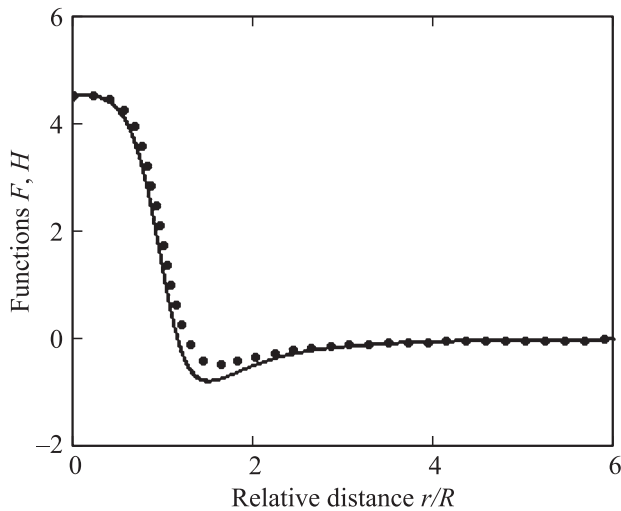


Рис. 1. Функции F и H , согласно (12) и (13), в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.5R$. Сплошная линия — функция F , пунктирная линия — функция H .

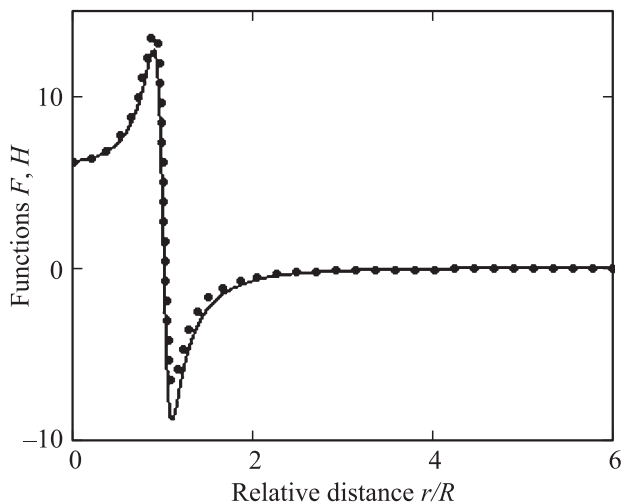


Рис. 2. Функции F и H согласно (12) и (13) в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.1R$. Сплошная линия — функция F , пунктирная линия — функция H .

выражение в методе функций Грина следующее:

$$\text{Spu}_{ij} = \frac{b}{4\pi R} \frac{1-2\nu}{1-\nu} H(\rho, \xi),$$

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

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 $m \leq 1$, для $E(m)$ и $K(m)$ использовались их разложения в ряд до слагаемых порядка m^8

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

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

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 $z = \text{const}$ 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

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

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

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

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 $T = 715$ К. 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 вычтам 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

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

Тензорная функция Грина определяется соотношением

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

т. е. является решением системы

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

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

$$u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\xi) \exp(i\mathbf{r}\xi) d^3 \xi, \\ \delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\mathbf{r}\xi) d^3 \xi. \quad (18)$$

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

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

где $\mathbf{e} = \xi/\xi$ — единичный вектор в пространстве векторов ξ ; $\Delta(\xi)$ — определитель системы; $\Delta_{lj}(\xi)$ — его

алгебраические дополнения. В силу действительности выражения (19), интеграл (18) можно представить следующим образом:

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

где второе интегрирование проводится по полному телесному углу в пространстве ξ , 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

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

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

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

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

$$P(\theta) = b + \rho \sin^2 \theta, \quad (22)$$

а константы k , m , l даются выражениями

$$k = (a + 2b)(b + \rho), \quad m = (a + b - \rho)\gamma - (\chi + 2\rho)^2, \\ l = (a + 2b)\gamma + (2b - \chi)(\chi + 2\rho). \quad (23)$$

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 $G_{3k}(\mathbf{r})$

$$G_{3k}(\mathbf{r}) = \frac{2i}{(z_1 + z_2)A(n_3^2)} \left\{ \frac{a + b + \chi + \rho}{4\pi} (\delta_{1k} n_1 + \delta_{2k} n_2) \frac{n_3}{r} \right. \\ \left. + \left((b + \rho) + (a + b - \rho)n_3^2 - \frac{(a + 2b)}{z_1 z_2} \right) \frac{\delta_{3k}}{4\pi r} \right\} \\ \equiv \Phi(n_3^2) \frac{n_3 n_\beta \delta_{\beta k}}{4\pi r} + F(n_3^2) \frac{\delta_{3k}}{4\pi r}, \quad (24)$$

(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

$$G_{\alpha k}(\mathbf{r}) = \left[\frac{2i}{(z_1 + z_2)} \frac{R(n_3^2)}{bA(n_3^2)} - \frac{bn_3^2}{\sqrt{bP(n_3^2)(b+\rho)(1-n_3^2)}} \right] \frac{\delta_{\alpha k}}{4\pi r} - \left[\frac{2i}{(z_1 + z_2)} \frac{S(n_3^2)}{(1-n_3^2)bA(n_3^2)} - \frac{P(n_3^2) + bn_3^2}{\sqrt{bP(n_3^2)(b+\rho)(1-n_3^2)^2}} \right] \times \frac{(\delta_{1k}n_1 + \delta_{2k}n_2)n_\alpha}{4\pi r} + \frac{2i}{(z_1 + z_2)} \frac{a+b+\chi+\rho}{A(n_3^2)} \frac{n_\alpha n_3}{4\pi r} \delta_{3k} \equiv N(n_3^2) \frac{\delta_{\alpha k}}{4\pi r} - M(n_3^2) \frac{n_\alpha n_\beta \delta_{\beta k}}{4\pi r} + \Phi(n_3^2) \frac{n_\alpha n_3 \delta_{3k}}{4\pi r}, \quad (25)$$

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

$$R = \frac{(a+b)(b+\rho)}{z_1 z_2} - \frac{A(n_3^2)P(n_3^2)}{2(b+\rho)(1-n_3^2)} \left(z_1 z_2 - \frac{b}{P} \right); \quad z_1 z_2 = -\sqrt{\frac{2k}{A(n_3^2)}}; \quad (26)$$

$$S = (a+b)(b+\rho) \left[\frac{1}{z_1 z_2} + n_3^2 \right] - \frac{A(n_3^2)P(n_3^2)}{2(b+\rho)(1-n_3^2)} \times \left[\left(z_1 z_2 - \frac{b}{P} \right) + \left(z_1^2 z_2^2 + \frac{b}{P} \left[z_1 z_2 - \frac{2B}{A} \right] \right) n_3^2 \right].$$

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: $[z^2 + 1]^2 = 0$, откуда следует, что $z_1 = z_2 = i$. В результате из (24), (25) имеем выражения

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

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

которые легко сворачиваются в одно

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

соответствующее изотропной упругой среде ($a \rightarrow \lambda$; $b \rightarrow \mu$, 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 $z_1 z_2 = -(2k/A)^{1/2}$ универсальна, а знак минус следует из перехода к изотропии $z_1 z_2 \rightarrow -1$. Таким образом, единственное место, где нужны явные выражения $z_1 z_2$, это отношение $2i/(z_1 + z_2)$. При $D > 0$, искомые полюса чисто мнимые и компактно могут быть записаны в виде

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

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

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

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

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

$$u_i^D(\mathbf{r}) = b^D \int_{S_D} d^2 r' [C_{13} G_{i\alpha, \alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + C_{33} G_{i3, 3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad a + \chi = C_{13}, \quad a + 2b + \gamma + 2\chi + 4\rho = C_{33} \quad (32)$$

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

компонент смещений $u_i(\mathbf{r})$ получаем

$$\begin{aligned} u_3^D(\mathbf{r}) &= -\frac{b^D}{4\pi} \int_{S_D} d^2r' \frac{\tau_3}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \Psi(\tau_3^2), \\ u_\beta^D(\mathbf{r}) &= \frac{b^D}{4\pi} \int_{S_D} d^2r' \frac{\tau_\beta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} Y(\tau_3^2), \\ \Psi(\tau_3^2) &= C_{13} \left[(1 - 3\tau_3^2) \Phi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2 (1 - \tau_3^2) \frac{d\Phi}{d\tau_3^2} \right] \\ &\quad + C_{33} \left[F(\tau_3^2) - 2(1 - \tau_3^2) \frac{dF}{d\tau_3^2} \right], \\ Y(\tau_3^2) &= C_{13} \left[-N(\tau_3^2) - 2\tau_3^2 \frac{dN}{d\tau_3^2} - 3\tau_3^2 M(\tau_3^2) \right. \\ &\quad \left. + 2\tau_3^2 (1 - \tau_3^2) \frac{dM}{d\tau_3^2} \right] \\ &\quad + C_{33} \left[(1 - 3\tau_3^2) \Phi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2 (1 - \tau_3^2) \frac{d\Phi}{d\tau_3^2} \right], \quad (33) \end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} N(\tau_3^2) &\equiv \frac{2i}{(z_1 + z_2)} \frac{R(\tau_3^2)}{bA(\tau_3^2)} - \frac{b\tau_3^2}{\sqrt{bP(\tau_3^2)}(b + \rho)(1 - \tau_3^2)}, \\ M(\tau_3^2) &\equiv \frac{2i}{(z_1 + z_2)} \frac{S(\tau_3^2)}{(1 - \tau_3^2)bA(\tau_3^2)} \\ &\quad - \frac{P(\tau_3^2) + b\tau_3^2}{\sqrt{bP(\tau_3^2)}(b + \rho)(1 - \tau_3^2)^2}. \quad (35) \end{aligned}$$

Здесь τ_k — компоненты единичного вектора $\boldsymbol{\tau} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, чтобы не путать с аналогичными компонентами вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$; $z_{1,2}(\tau_3^2)$ — полюса из (30), (31). Также учтено очевидное равенство $\sum_k \tau_k^2 = 1$ и простое правило дифференцирования $\frac{\partial f(\tau_3^2)}{\partial x_k} = 2 \frac{\tau_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [\delta_{3k} - \tau_3 \tau_k] \frac{df}{d\tau_3^2}$. 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,

$$\begin{aligned} u_{33}^D(\mathbf{r}) &= -\frac{b^D}{4\pi} \\ &\quad \times \int_{S_D} \frac{d^2r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \left[(1 - 3\tau_3^2) \Psi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2 (1 - \tau_3^2) \frac{d\Psi}{d\tau_3^2} \right], \\ u_{\beta\gamma}^D(\mathbf{r}) &= \frac{b^D}{4\pi} \int_{S_D} \frac{d^2r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &\quad \times \left[(\delta_{\beta\gamma} - 3\tau_\beta \tau_\gamma) Y(\tau_3^2) - 2\tau_3^2 \tau_\beta \tau_\gamma \frac{dY}{d\tau_3^2} \right], \quad \beta, \gamma = 1, 2. \end{aligned} \quad (36)$$

И тогда

$$\begin{aligned} \text{Spru}_{ij}^D &= -\frac{b^D}{4\pi} \int_{S_D} \frac{d^2r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \left[(1 - 3\tau_3^2) \left\{ \Psi(\tau_3^2) + Y(\tau_3^2) \right\} \right. \\ &\quad \left. + 2\tau_3^2 (1 - \tau_3^2) \frac{d}{d\tau_3^2} \left\{ \Psi(\tau_3^2) + Y(\tau_3^2) \right\} \right]. \quad (37) \end{aligned}$$

Переход к изотропному приближению тривиален

$$\begin{aligned} \left\{ \Psi(\tau_3^2) + Y(\tau_3^2) \right\} &\rightarrow \frac{2b}{a + 2b}, \\ \text{Spru}_{ij}^D &\rightarrow -\frac{b^D}{4\pi} \frac{2b}{a + 2b} \int_{S_D} \frac{d^2r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} (1 - 3\tau_3^2). \quad (38) \end{aligned}$$

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 $K^{\text{hex}} = \lambda^{\text{hex}} + \frac{2}{3}\mu^{\text{hex}}$, который конструируется из модулей гексагонального кристалла. Следуя, например, Фогту [5] $\lambda = \frac{1}{15}(2C_{iijj} - C_{ijij})$, $\mu = \frac{1}{30}(3C_{ijij} - C_{iijj})$, имеем

$$E_{\text{int}}(\mathbf{r}) = -K^{\text{hex}} \Delta V \text{Spru}_{ij}^D(\mathbf{r}),$$

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

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 $\Phi(\tau_3^2)$, $F(\tau_3^2)$, $N(\tau_3^2)$ и $M(\tau_3^2)$, 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:

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

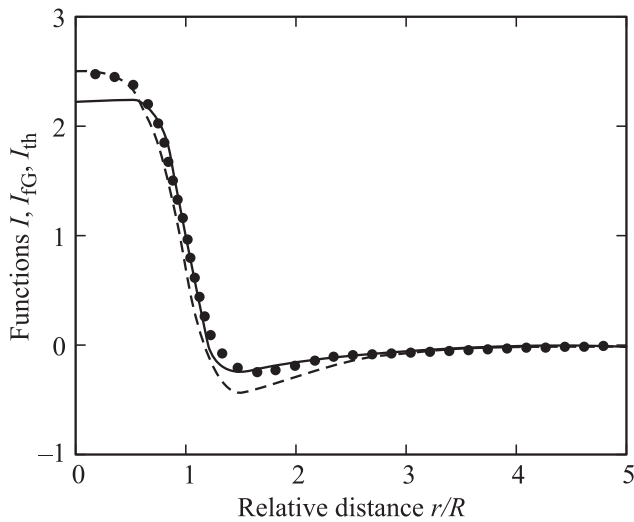


Рис. 3. Функции I (сплошная линия согласно (12)), I_{fG} (пунктирная линия, согласно (13)) и I_{th} (штриховая линия, согласно (37)) в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.5R$.

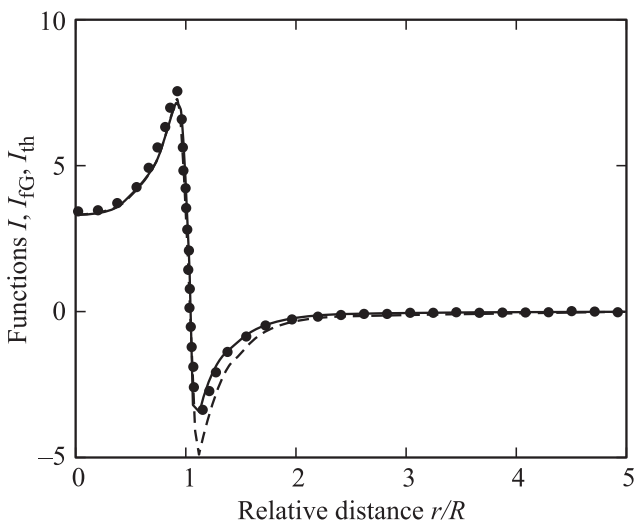


Рис. 4. Функции I (сплошная линия согласно (12)), I_{fG} (пунктирная линия, согласно (13)) и I_{th} (штриховая линия согласно (37)) в зависимости от относительного расстояния $\rho = r/R$ на плоскости $z = 0.1R$.

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

$I(\rho, \xi) = - \int_0^1 \rho' d\rho' \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} Q(\rho, \xi, \rho', \varphi, \varphi')$ — 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 $\text{Spr}_{ij}^D = \frac{b^D}{4\pi R} I(\rho, \xi)$, и не зависит от угла φ (в силу изотропии в базисной плоско-

сти). Численные оценки были проведены применительно к цирконю. Экспериментальные значения его упругих модулей, согласно [14], следующие (Мбар): $C_{11} = 1.554$; $C_{12} = 0.672$; $C_{13} = 0.646$; $C_{33} = 1.725$; $C_{55} = C_{44} = 0.363$. Результаты сравнения представлены на рис. 3, 4. На них приведены кривые зависимости функций I , I_{fG} , I_{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 $n_3^2 \rightarrow 1$. 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

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

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

т.е. с компонентами $G_{ak}(\mathbf{r})$ все в порядке. Аналогичная картина и с компонентами смещений и деформаций, ко-

торые содержат первые и вторые производные от $N(n_3^2)$ и $M(n_3^2)$. Так, например,

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dn_3^2}(n_3^2 \rightarrow 1) &\rightarrow -\frac{(a+b)(b+\rho)}{8bk} \frac{l}{k} \\ &+ \frac{1}{8(b+\rho)} \left[\frac{m}{k} + 3\frac{\rho^2}{b^2} + \frac{\rho}{b} \left(4 + \frac{l}{k} \right) \right], \\ \frac{d^2N}{d(n_3^2)^2}(n_3^2 \rightarrow 1) &\rightarrow -\frac{(a+b)(b+\rho)}{8bk} \left(\frac{l^2}{k^2} + \frac{m}{k} \right) \\ &+ \frac{1}{8(b+\rho)} \left[\frac{ml}{k^2} + 6\frac{\rho^2}{b^2} + 5\frac{\rho^3}{b^3} + \frac{\rho}{b} \left(\frac{l^2}{k^2} + \frac{m}{k} \right) \right]. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} u_3^D(\mathbf{r}) &= -\frac{b^D \delta S_D}{4\pi |\mathbf{r}|^2} n_3 \Psi(n_3^2), \\ u_\beta^D(\mathbf{r}) &= \frac{b^D \delta S_D}{4\pi |\mathbf{r}|^2} n_\beta Y(n_3^2), \quad n_i = r_i/|\mathbf{r}|. \end{aligned}$$

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

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

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

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 Уоо в работе [16], однако там ТФГ использовалась в форме Кренера [17]. А поскольку сравнения результатов Уоо 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 s -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

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

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

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 набухание 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 Nijhoff Publishers, Dordrecht. 2nd ed. (1987). 588 с.
- [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 Physik **136**, 402 (1953).