

Поведение винтовых дислокаций у межфазных границ в градиентной теории упругости

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

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

* Aristotle University of Thessaloniki,
Thessaloniki 54006, Greece

Michigan Technological University,
Houghton, MI 49931, USA

E-mail: Gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 16 февраля 2000 г.)

В рамках одной из версий градиентной теории упругости получено решение граничной задачи о прямолинейной винтовой дислокации, параллельной границе раздела фаз с разными упругими модулями и градиентными коэффициентами. В интегральном виде представлены поле напряжений дислокации и сила ее взаимодействия с границей (сила изображения). Описаны особенности короткодействующего взаимодействия дислокации и границы, изучение которого невозможно в классической линейной теории упругости. Показано, что обе компоненты поля напряжений не имеют сингулярностей на линии дислокации и остаются непрерывными на границе в отличие от классического решения, сингулярного на дислокационной линии и допускающего разрыв одной из компонент на межфазной границе. Результатом этого стало устранение классической сингулярности силы изображения при выходе дислокации на границу. Кроме того, найдена дополнительная упругая сила изображения, обусловленная разницей градиентных коэффициентов контактирующих фаз. Оказалось, что эта сила, короткодействующая и максимальная на границе, выталкивает винтовую дислокацию в материал с большим градиентным коэффициентом. В то же время новые градиентные решения для поля напряжений и силы изображения совпадают с классическими на расстояниях, превышающих несколько межатомных, от дислокационной линии и межфазной границы.

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

1. Одной из основных проблем теории дефектов в неоднородных материалах является описание упругого взаимодействия дислокаций с границами раздела. Модели такого взаимодействия находят широкое применение в физике прочности и пластичности поли- и нанокристаллов, композитов и тонкопленочных твердотельных структур [1–4]. Традиционное описание поведения дислокаций у границ раздела основано на решении граничных задач классической линейной теории упругости. Соответствующие решения хорошо описывают упругие поля дислокаций вдали (на расстоянии нескольких атомных размеров) от границ или дислокационных линий. Таким образом, они пригодны для случаев, когда основную роль играет дальнедействующее взаимодействие дислокаций и границ. Однако в ситуациях, когда важным становится учет короткодействующих взаимодействий, классические решения не работают. Это касается, в первую очередь, сингулярности упругих полей дислокации на ее линии и сингулярности силы взаимодействия дислокации с границей (силы изображения) при выходе дислокации на границу. Кроме того, некоторые компоненты поля упругих напряжений дислокации испытывают разрывы на границах раздела. При классическом макроскопическом описании это не вызывает возражений, однако представляется физически необоснованным при нано- или микроскопическом рас-

смотрении. Чтобы избежать отмеченных трудностей при теоретическом описании поведения дислокаций у границ раздела, далее авторы используют градиентную теорию упругости для постановки и решения граничной задачи о прямолинейной винтовой дислокации, параллельной межфазной границе.

Настоящая работа является естественным продолжением наших систематических исследований [5–10] по описанию дефектов (дислокаций [5–10] и дисклинаций [8–10]) в рамках градиентной теории упругости. Основными результатами такого описания стали устранение сингулярностей в полях перемещений [5–8,10], деформаций [5–10], напряжений [7,9,10] и в энергиях [7,8,10] на линиях дефектов. Используя в [5,6,8] простую градиентную модификацию линейной теории упругости, предложенную в [11] и опробованную в задачах о трещинах [11–15], мы получили новые несингулярные решения для полей перемещений и деформаций от дислокаций, для энергий дислокаций, а также для полей деформаций от дисклинаций. Однако в рамках той градиентной теории решения для упругих напряжений оставались прежними, сингулярными, как и в классической теории упругости. Чтобы получить новые несингулярные решения, в [7,9,10] была использована более общая градиентная теория, предложенная в работах [16,17].

Определяющее соотношение этой теории имеет вид

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

где λ и μ — упругие постоянные Ламе, $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\epsilon}$ — тензоры упругих напряжений и деформаций, \mathbf{I} — единичный тензор, ∇^2 обозначает лапласиан, а c_1 и c_2 — два различных градиентных коэффициента. Следуя довольно простой схеме решения уравнения (1), предложенной в [16] по аналогии с приведенной ранее в работе [12], мы получили решения для прямолинейных дислокаций [7,10] и дисклинаций [9,10] в бесконечной изотропной упругой среде. Эти новые решения дают уже несингулярные выражения как для деформаций, так и для напряжений.

Например, поле напряжений прямолинейной винтовой дислокации, линия которой совпадает с осью z декартовой системы координат, получается в виде [7,10]

$$\begin{aligned} \sigma_{xz} &= \frac{\mu b_z}{2\pi} \left[-\frac{y}{r^2} + \frac{y}{\sqrt{c_1} r} K_1 \left(\frac{r}{\sqrt{c_1}} \right) \right], \\ \sigma_{yz} &= \frac{\mu b_z}{2\pi} \left[\frac{x}{r^2} - \frac{x}{\sqrt{c_1} r} K_1 \left(\frac{r}{\sqrt{c_1}} \right) \right], \end{aligned} \quad (2)$$

где b_z — вектор Бюргера дислокации, $r^2 = x^2 + y^2$, $K_n(r/\sqrt{c_1})$ — модифицированная функция Бесселя второго рода (функция Макдональда) n -го порядка, $n = 0, 1, \dots$. Первые слагаемые в квадратных скобках представляют собой классическое решение [18], а вторые — дополнительные градиентные члены. Такая структура решения, характерная и для других упругих полей и дефектов в [7,9,10], полностью согласуется с теоремой Ру и Айфантиса [12], утверждающей, что решение граничной задачи теории градиентной упругости может быть записано в виде суммы классического решения такой же граничной задачи и дополнительных градиентных слагаемых, определяемых решением соответствующего уравнения Гельмгольца. Интересно, что поле напряжений (2) в точности совпадает с решением, полученным Эрингеном [19–21] в рамках его версии нелокальной теории упругости. При $r \rightarrow 0$ имеем $K_1(r/\sqrt{c_1}) \rightarrow \sqrt{c_1}/r$ и $\sigma_{iz} \rightarrow 0$, ($i = x, y$). Такой же результат был получен в [16] из асимптотического решения для винтовой дислокации, а также для вершины трещины антиплоского сдвига. В работе [7] было показано, что упругие напряжения (2) достигают наибольшей величины $\approx \mu/4$ на расстоянии $\approx \sqrt{c_1}$ (которое можно оценить как $\approx a/4$ [11], где a — постоянная решетки) от линии дислокации.

Все перечисленные результаты были получены для дефектов в бесконечной изотропной упругой среде, характеризующейся упругими постоянными Ламе λ и μ и градиентными коэффициентами c_1 и c_2 (или только одним градиентным коэффициентом c в специальной градиентной теории упругости [11]). В настоящей работе рассмотрена винтовая дислокация, параллельная плоской межфазной границе, разделяющей упругие изотропные среды с разными постоянными Ламе и градиентными коэффициентами. В интегральном виде получены поле

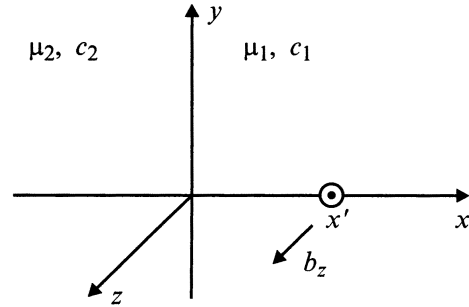


Рис. 1. Винтовая дислокация у плоской межфазной границы.

напряжений дислокации и сила ее взаимодействия с границей (сила изображения), а также описаны особенности короткодействующего взаимодействия дислокации и границы на наноскопическом уровне.

2. Рассмотрим плоскую межфазную границу, разделяющую две упругие изотропные среды 1 ($x > 0$) и 2 ($x < 0$) с модулями сдвига μ_i и градиентными коэффициентами c_{1i} и c_{2i} , где $i = 1, 2$ соответственно (рис. 1). Пусть линия прямолинейной винтовой дислокации с вектором Бюргера b_z проходит через точку ($x = x', y = 0$) параллельно оси z декартовой системы координат.

2.1. Классическое решение. В рамках классической теории упругости ($c_{1i} = c_{2i} \equiv 0$) при $x' \geq 0$ поле напряжений дислокации определяется (в единицах $\mu_1 b_z / (2\pi)$) в среде 1 выражениями [22]

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^{0(1)} &= -\frac{y}{r_-^2} + \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \frac{y}{r_+^2}, \\ \sigma_{yz}^{0(1)} &= \frac{x - x'}{r_-^2} + \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \frac{x + x'}{r_+^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

а в среде 2 выражениями

$$\sigma_{xz}^{0(2)} = -\frac{2\Gamma}{\Gamma + 1} \frac{y}{r_-^2}, \quad \sigma_{yz}^{0(2)} = \frac{2\Gamma}{\Gamma + 1} \frac{x - x'}{r_1^2}, \quad (4)$$

где $r_{\pm}^2 = (x \pm x')^2 + y^2$ и $\Gamma = \mu_2 / \mu_1$.

Легко убедиться, что компонента σ_{xz}^0 непрерывна на межфазной границе ($x = 0$), тогда как компонента σ_{yz}^0 испытывает там скачок

$$\begin{aligned} [\sigma_{yz}^0]_{x=0} &= \sigma_{yz}^{0(1)}(x=0) - \sigma_{yz}^{0(2)}(x=0) \\ &= \frac{\mu_1 b_z}{\pi} \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \frac{x'}{x'^2 + y^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Такой скачок в классической упругости вполне объясним с макроскопической точки зрения, поскольку эта yz -компонента не вносит никакого вклада в x -компоненту упругой силы, которая должна быть уравновешена на границе. С другой стороны, если рассматривать напряженное состояние у идеально сопряженной границы с точки зрения наноскопии, природа такого скачка становится непонятной. Действительно, атомные слои по обе

стороны границы упруго взаимодействуют не только с атомами их собственной среды, но и с атомами другой среды. Следовательно, нужно допустить существование некой переходной зоны толщиной в несколько атомных слоев, в пределах которой упругие взаимодействия между атомами плавно меняются от сильного в более жестком материале до слабого в менее жестком. Из такого допущения сразу следует, что скачок напряжений (5) является просто следствием приближения классической модели сплошной среды, свойства которой часто не соответствуют реальности при описании наноскопических явлений.

Для иллюстрации сказанного отметим, что величина скачка напряжений (5) стремится к бесконечности в плоскости xz , когда дислокация подходит вплотную к границе. Таким образом, представляется очевидным, что скачок напряжений на границе раздела должен быть по возможности устранен при решении данной задачи в рамках любой обобщенной теории упругости, нацеленной на описание явлений на наноуровне.

2.2. Градиентное решение. Рассмотрим теперь ту же самую задачу в рамках градиентной теории упругости с определяющим соотношением (1). Как было предложено в работе [16] и описано также в [7,9,10], решение уравнения (1) сводится к независимому решению следующих неоднородных уравнений Гельмгольца для полей напряжений σ и деформаций ϵ :

$$(1 - c_1 \nabla^2) \sigma = \sigma^0, \quad (1 - c_2 \nabla^2) \epsilon = \epsilon^0, \quad (6)$$

где поля напряжений σ^0 и деформаций ϵ^0 представляют собой решения той же самой граничной задачи в рамках классической теории упругости. Здесь мы рассмотрим решение только первого из уравнений (6) для поля напряжений, поскольку оно представляет наибольший интерес для различных приложений.

Первое из уравнений (6) может быть решено методом интегральных преобразований Фурье [6–10]. Перепишем его сначала в виде

$$(1 - c_{1i} \nabla^2) \sigma^{(i)} = \sigma^{0(i)}, \quad (7)$$

где $\sigma^{0(i)}$ определяются равенствами (3) и (4). Далее для простоты опускаем первый индекс "1" в обозначении градиентных коэффициентов c_{1i} , так что c_1 относится теперь к материалу 1, а c_2 к материалу 2. Опираясь на выводы п. 2.1, а также на результаты [12,16], используем классическое граничное условие

$$[\sigma_{xz}]_{x=0} = \sigma_{xz}^{(1)}(x=0) - \sigma_{xz}^{(2)}(x=0) = 0 \quad (8)$$

и три дополнительных граничных условия

$$[\sigma_{yz}]_{x=0} = \sigma_{yz}^{(1)}(x=0) - \sigma_{yz}^{(2)}(x=0) = 0,$$

$$\left[\frac{\partial \sigma_{jz}}{\partial x} \right]_{x=0} = \frac{\partial \sigma_{jz}^{(1)}}{\partial x} \Big|_{x=0} - \frac{\partial \sigma_{jz}^{(2)}}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad j = x, y. \quad (9)$$

Первое из уравнений (9) устраняет скачок yz -компоненты поля напряжений на межфазной границе, а второе обеспечивает плавное изменение обеих компонент при переходе через границу.

Опуская громоздкие промежуточные вычисления, приведем только окончательные результаты. Градиентное решение может быть представлено (в единицах $\mu_1 b_z / 2\pi$) для среды 1 в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^{(1)} &= \sigma_{xz}^{0(1)} + \frac{y}{\sqrt{c_1} r_-} K_1 \left(\frac{r_-}{\sqrt{c_1}} \right) + \int_0^{+\infty} \frac{s \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} \\ &\times \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} e^{-x'\lambda_1} + 2 \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} e^{-x's} \right) ds, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yz}^{(1)} &= \sigma_{yz}^{0(1)} - \frac{x - x'}{\sqrt{c_1} r_-} K_1 \left(\frac{r_-}{\sqrt{c_1}} \right) - \int_0^{+\infty} \frac{\lambda_1 \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-x\lambda_1} \\ &\times \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} e^{-x'\lambda_1} + 2 \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} e^{-x's} \right) ds, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\lambda_i = \sqrt{1/c_i + s^2}$, $i = 1, 2$, а для среды 2 в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^{(2)} &= \sigma_{xz}^{0(2)} \\ &+ 2 \int_0^{+\infty} \frac{s \sin(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} \left(e^{-x'\lambda_1} + \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} e^{-x's} \right) ds, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yz}^{(2)} &= \sigma_{yz}^{0(2)} \\ &+ 2 \int_0^{+\infty} \frac{\lambda_2 \cos(sy)}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{x\lambda_2} \left(e^{-x'\lambda_1} + \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} e^{-x's} \right) ds. \end{aligned} \quad (13)$$

Обсудим кратко структуру градиентного решения (10)–(13). Во-первых, все компоненты поля напряжений содержат классическое решение (3)–(4) и дополнительные градиентные слагаемые в соответствии с теоремой Ру и Айфантиса [12,16] (см. п. 1). Во-вторых, они содержат градиентное решение (2), полученное в [7] для случая бесконечной однородной среды ($\Gamma = 1$, $c_1 = c_2 = c$), которое представлено в явном аналитическом виде в (10)–(11) и интегральном виде в (12)–(13). При $\Gamma = 1$ и $c_1 = c_2 = c$ выражения (10)–(13) обращаются в (2). В-третьих, компоненты поля напряжений (10)–(13) содержат специфические градиентные слагаемые, обусловленные только разницей в градиентных коэффициентах c_1 и c_2 . Эти слагаемые представляются в интегральном виде последними членами в (10)–(13) при $\Gamma = 1$.

3. Структура градиентного решения (10)–(13) позволяет рассмотреть по отдельности три характерные ситуации: "чисто упругую" границу ($\Gamma \neq 1$, $c_1 = c_2 = c$), "чисто градиентную" границу ($\Gamma = 1$, $c_1 \neq c_2$) и общую "смешанную градиентно-упругую" границу ($\Gamma \neq 1$, $c_1 \neq c_2$).

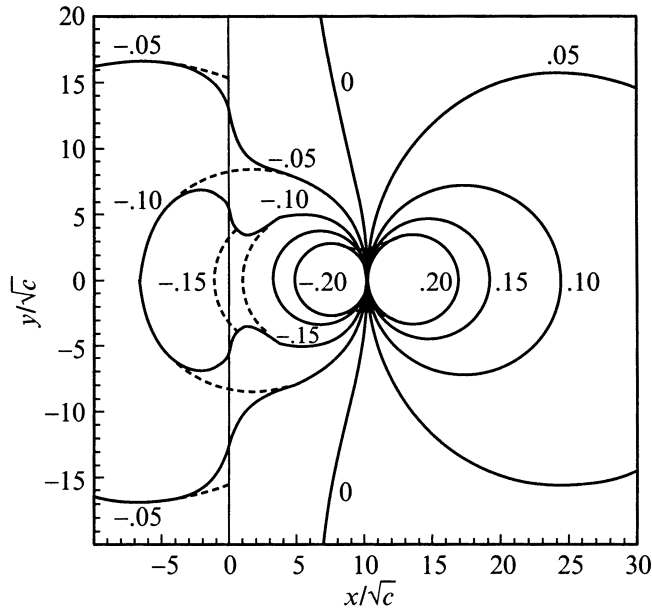


Рис. 2. Карта поля напряжений σ_{yz} винтовой дислокации, расположенной в точке $(10, 0)$ у плоской границы раздела ($x = 0$) при $\mu_2 = 2\mu_1$ и $c_1 = c_2 = c$. Напряжения даны в единицах $\mu_1 b_z / (2\pi\sqrt{c})$. Пунктиром показаны изолинии для классического решения σ_{yz}^0 .

3.1. Чисто упругая граница ($\Gamma \neq 1$, $c_1 = c_2 = c$). В этом случае градиентное решение (в единицах $\mu_1 b_z / 2\pi$) имеет вид

$$\sigma_{xz}^{(1,2)} = \sigma_{xz}^{0(1,2)} + \frac{y}{\sqrt{cr_-}} K_1 \left(\frac{r_-}{\sqrt{c}} \right) + \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \int_0^{+\infty} \frac{s}{\lambda} \sin(sy) e^{-|x|\lambda - x's} ds, \quad (14)$$

$$\sigma_{yz}^{(1,2)} = \sigma_{yz}^{0(1,2)} - \frac{x - x'}{\sqrt{cr_-}} K_1 \left(\frac{r_-}{\sqrt{c}} \right) - \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \text{sign}(x) \int_0^{+\infty} \cos(sy) e^{-|x|\lambda - x's} ds, \quad (15)$$

где $\sigma_{iz}^{0(1,2)}$ определяются равенствами (3)–(4) и $\lambda = \sqrt{1/c + s^2}$. Обе компоненты непрерывны на границе в отличие от классического решения (3)–(4), в котором компонента σ_{yz}^0 испытывает скачок (5) на границе. Это отличие хорошо видно на рис. 2 и 3. Величина классического скачка увеличивается по мере приближения дислокации к границе. На рис. 3 также хорошо видно, что градиентное решение дает конечные значения напряжений на линии дислокации, в то время как классическое решение там сингулярно. Классическое и градиентное решения совпадают вдали ($r > 5\sqrt{c}$) от границы и от дислокационной линии, но сильно отличаются на наноскопических расстояниях ($r < 5\sqrt{c}$) от них.

Когда дислокация расположена прямо на границе ($x' = 0$), интегралы в (14)–(15) берутся в явном виде, что дает (в единицах $\mu_1 \mu_2 b_z / [\pi(\mu_1 + \mu_2)]$)

$$\sigma_{xz} = -\frac{y}{r^2} + \frac{y}{\sqrt{cr}} K_1 \left(\frac{r}{\sqrt{c}} \right),$$

$$\sigma_{yz} = \frac{x}{r^2} - \frac{x}{\sqrt{cr}} K_1 \left(\frac{r}{\sqrt{c}} \right), \quad (16)$$

где $r^2 = x^2 + y^2$. Отметим, что градиентные решения (16) для такой межфазной дислокации отличаются от градиентных решений (2) для дислокации в бесконечной однородной среде лишь постоянным множителем $2\mu_2 / (\mu_1 + \mu_2)$. То же самое справедливо и для классических решений.

Рассмотрим теперь силу изображения F_x^{el} , которая действует на единицу длины дислокации со стороны межфазной границы (рис. 1). Градиентное решение (в единицах $\mu_1 b_z^2 / 2\pi$) имеет вид

$$F_x^{el}(x') = b_z \sigma_{yz}^{(1)}(x = x', y = 0)$$

$$= \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \left\{ \frac{1}{2x'} - \int_0^{+\infty} e^{-x'(\lambda+s)} ds \right\}, \quad (17)$$

где первое слагаемое в фигурных скобках — это классическое сингулярное решение, а второе слагаемое — дополнительный градиентный член. Численный анализ выражения (17) представлен на рис. 4, где приведено также аналогичное решение для дислокации, расположенной в среде 2 ($x' < 0$). Видно, что классическая сингулярность устраняется из градиентных решений для силы изображения, которая достигает максимальных значений на расстоянии $\approx \sqrt{c}$ от границы и обращается на ней в нуль.

Этот результат имеет особое значение в случае дислокации у свободной поверхности, когда $\Gamma = 0$ (см. сплошную и пунктирную кривые в области отрицательных значений силы F_x^{el} на рис. 4). Действительно, представляется естественным, что пока дислокация находится на свободной поверхности, на нее не действует никакая сила. Сила изображения появляется и возрастает с началом проникновения в материал дислокационного ядра (радиус ядра естественно возникает в градиентной теории упругости и оценивается величиной $\approx 4\sqrt{c}$ [5]), достигает максимума и затем уменьшается по мере удаления дислокации от свободной поверхности в глубь материала. Эта последняя стадия хорошо описывается классическим решением (рис. 4), которое, однако, не может описать предыдущие стадии. В рамках градиентной теории упругости с определяющим соотношением (1) можно оценить максимальное скалывающее напряжение $\tau_{\max} = |F_x^{el}|_{\max} / b_z$, которое должна преодолеть винтовая дислокация, чтобы проникнуть в материал. Из кривой на рис. 4 получаем оценку $\tau_{\max} \approx \mu / 2\pi$, т.е. величину порядка теоретической прочности на сдвиг [18].

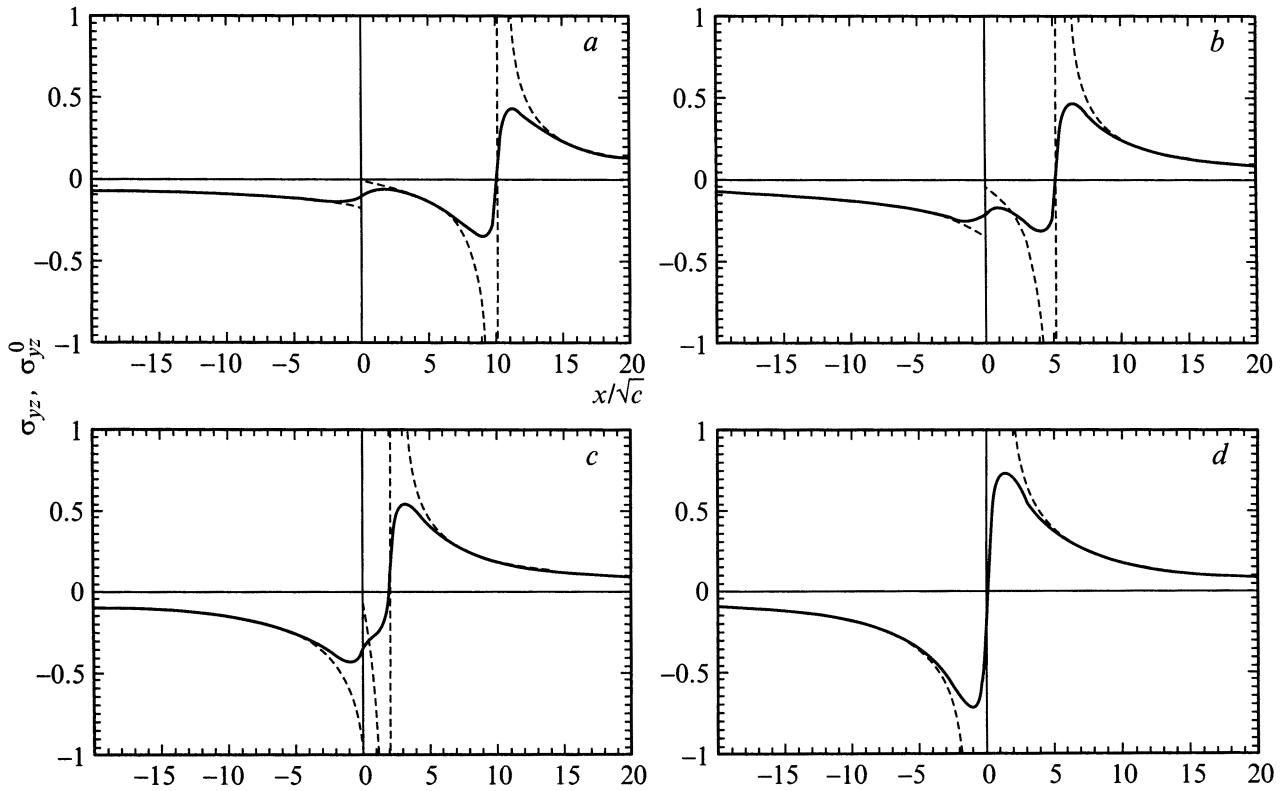


Рис. 3. Распределение компоненты напряжений $\sigma_{yz}(x, y = 0)$ вблизи линии винтовой дислокации, расположенной на расстоянии $x'/\sqrt{c} = 10$ (a), 5 (b), 2 (c) и 0 (d) от границы раздела ($x = 0$), при $\mu_2 = 10\mu_1$ и $c_1 = c_2 = c$. Напряжения даны в единицах $\mu_1 b_z / (2\pi\sqrt{c})$. Пунктиром показаны распределения для классического решения σ_{yz}^0 .

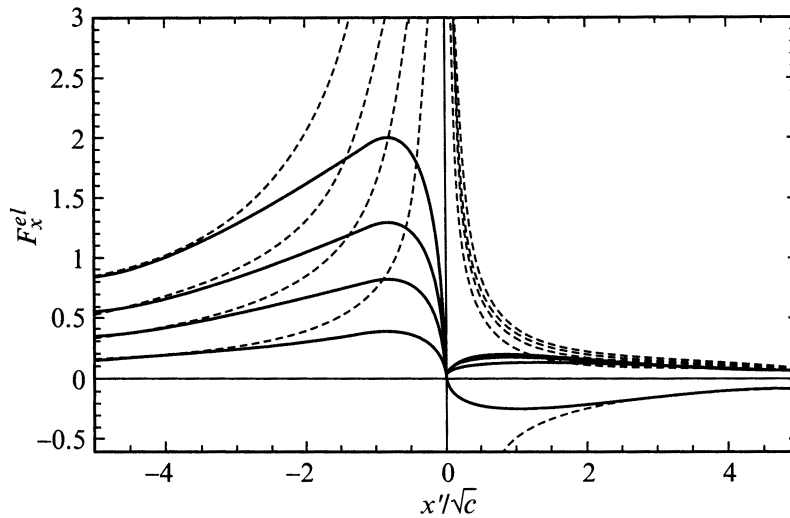


Рис. 4. Зависимость силы изображения F_x^{el} от положения дислокации x'/\sqrt{c} у "чисто упругой" границы раздела ($x' = 0$) при $c_1 = c_2 = c$ и $\mu_2/\mu_1 = 10, 7, 5, 3$ и 0 (сверху вниз). Значения силы даны в единицах $\mu_1 b_z^2 / (2\pi\sqrt{c})$. Пунктиром показаны зависимости для классического решения.

Что касается случая внутренней межфазной границы, то обращение в нуль силы изображения на границе (наличие там неустойчивого положения равновесия) пока не нашло объяснения.

3.2. Чисто градиентная граница ($\Gamma = 1$, $c_1 \neq c_2$). В этом случае градиентное решение определяется выражениями (10)–(13) при $\Gamma = 1$. Рассмотрим только соответствующую силу изображения F_x^{gr} ,

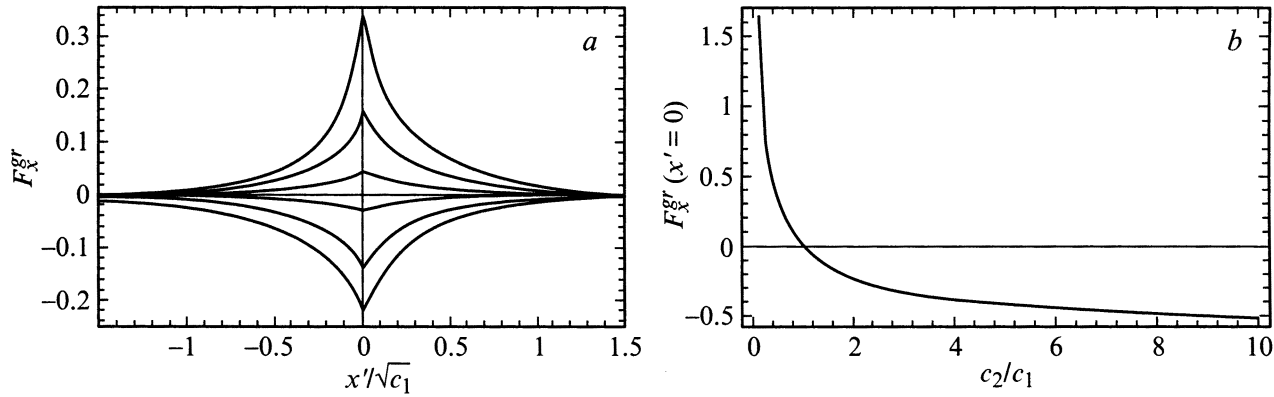


Рис. 5. Зависимость силы изображения F_x^{gr} от положения дислокации x'/\sqrt{c} у "чисто градиентной" границы раздела ($x' = 0$) при $\mu_2 = \mu_1$ и $c_2/c_1 = 0.5, 0.7, 0.9, 1.1, 1.5, 2$ (сверху вниз) (a). Зависимость величины силы изображения на границе $F_x^{gr}(x' = 0)$ от отношения c_2/c_1 (b). Значения силы даны в единицах $\mu_1 b_z^2 / (2\pi \sqrt{c_1})$.

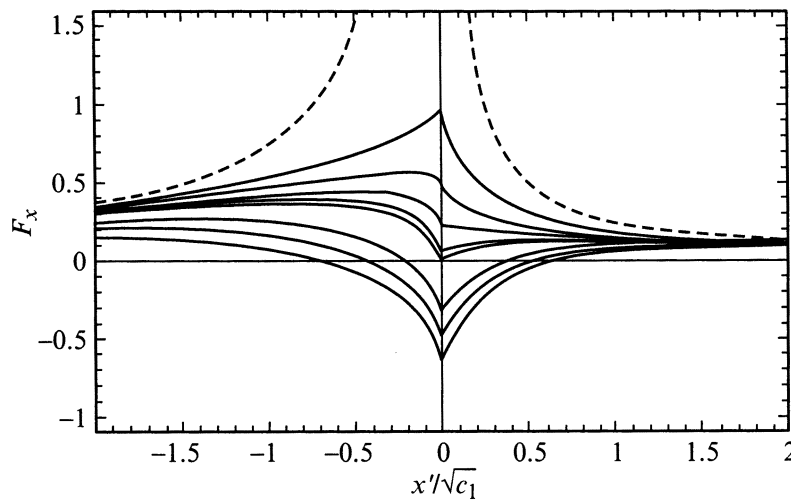


Рис. 6. Зависимость силы изображения F_x от положения дислокации $x'/\sqrt{c_1}$ у "смешанной градиентно-упругой" границы раздела ($x' = 0$) при $\mu_2 = 3\mu_1$ и $c_2/c_1 = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1, 2, 3, 5$ (сверху вниз). Значения силы даны в единицах $\mu_1 b_z^2 / (2\pi \sqrt{c_1})$. Пунктиром показаны зависимости для классического решения.

действующую на дислокацию со стороны границы из-за разных градиентных коэффициентов c_1 и c_2 . Она выражается (в единицах $\mu_1 b_z^2 / 2\pi$) как

$$F_x^{gr}(x') = b_z \sigma_{yz}^{(1)}(x = x', y = 0) = - \int_0^{+\infty} \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} e^{-2x'\lambda_1} ds. \quad (18)$$

Если $c_1 > c_2$, т.е. $\lambda_1 < \lambda_2$, то интеграл в (18) оказывается отрицательным, а сила F_x^{gr} положительной. Это означает, что дислокация отталкивается от границы в глубь материала 1, имеющего больший градиентный коэффициент. Этот эффект хорошо согласуется с градиентным решением для упругой энергии винтовой дислокации [7,8,10] $W = \mu b_z^2 / (4\pi) \{ \gamma + \ln(R/2\sqrt{c_1}) \}$, где $\gamma = 0.577 \dots$ — постоянная Эйлера, а R — характерный

размер твердого тела. Очевидно, чем больше c_1 , тем меньше энергия W . Кривые $F_x^{gr}(x')$ представлены на рис. 5, откуда можно заключить, что эта сила является очень короткодействующей и отлична от нуля только в непосредственной близости от границы. На самой границе она принимает наибольшее значение, которое сильно зависит от отношения c_2/c_1 (рис. 5).

3.3. Смешанная градиентно-упругая граница ($\Gamma \neq 1, c_1 \neq c_2$). В этом случае градиентное решение дается выражениями (10)–(13), и сила изображения F_x (в единицах $\mu_1 b_z^2 / 2\pi$) представима в виде

$$F_x(x') = \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} \frac{1}{2x'} - \int_0^{+\infty} \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} \left\{ \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} e^{-2x'\lambda_1} + 2 \frac{\Gamma - 1}{\Gamma + 1} e^{-x'(\lambda_1 + s)} \right\} ds. \quad (19)$$

Важно отметить, что сила F_x не является простой суперпозицией сил F_x^{el} и F_x^{gr} , определяемых соответственно формулами (17) и (18). Тем не менее она обладает некоторыми характерными особенностями этих сил (рис. 6). Так же как F_x^{el} , сила (19) является дальнедействующей несингулярной силой, совпадающей с классической силой изображения вдали ($|x'| > 5\sqrt{c_1}$) от межфазной границы. Аналогично силе F_x^{gr} , на границе она принимает конечные значения, которые зависят от отношений μ_2/μ_1 и c_2/c_1 . Фактически знак и качественное поведение силы F_x вблизи границы полностью определяются отношением градиентных коэффициентов c_2/c_1 . Например, при $\mu_2 > \mu_1$ возможны три различных типа поведения F_x (рис. 6). Если $c_2 < c_1$, то $F_x > 0$ для любых x' и достигает максимума на границе или вблизи от нее. Если $c_2 = c_1$, то $F_x \equiv F_x^{el}$ и обращается в нуль на границе (см. п. 3.1). Если $c_2 > c_1$, то $F_x > 0$ для любых x' , кроме малой области вокруг границы. Размер этой области, зависящий от отношения c_2/c_1 , равен примерно $\sqrt{c_1}$, и $F_x < 0$ внутри нее, достигая минимального значения на границе. Соответственно можно выделить три характерных типа поведения дислокации у границы при $\mu_2 > \mu_1$. Если $c_2 < c_1$, то дислокация выталкивается из материала 2 в материал 1 и не имеет равновесных положений вблизи границы. Если $c_2 = c_1$, то дислокация ведет себя так же, но имеет при этом одно положение неустойчивого равновесия на границе. Если $c_2 > c_1$, то дислокация, расположенная в материале 2, притягивается к границе и "запирается" вблизи нее в положении устойчивого равновесия $x' \approx -(0.2-0.8)\sqrt{c_1}$. В свою очередь дислокация, расположенная в материале 1, имеет одно положение неустойчивого равновесия $x' \approx (0.4-0.7)\sqrt{c_1}$ около границы; она притягивается к нему в пределах малой области $x' < (0.4-0.7)\sqrt{c_1}$ и отталкивается от него за пределами этой области.

4. Таким образом, в рамках градиентной теории упругости с определяющим соотношением (1) получено решение граничной задачи о прямолинейной винтовой дислокации, параллельной плоской границе раздела между двумя упругими изотропными средами с разными упругими постоянными и разными градиентными коэффициентами. В общем интегральном виде представлены поле упругих напряжений дислокации и сила изображения, действующая на нее со стороны межфазной границы. Показано, что обе компоненты поля напряжений не имеют сингулярностей на линии дислокации и остаются непрерывными на границе, в то время как классическое решение [22] сингулярно на дислокационной линии и допускает скачок одной из компонент на межфазной границе. Вдали от границы и дислокационной линии (на расстояниях $\gg 10\sqrt{c_1}$) градиентное и классическое решения совпадают. Следствием непрерывности напряжений на границе стало устранение классической сингулярности [22] силы изображения при выходе дислокации на границу. Кроме того, найдена дополнительная упругая сила изображения, обусловленная разницей градиентных коэффициентов контактирующих фаз. Показано, что эта

сила, короткодействующая и максимальная на границе, выталкивает винтовую дислокацию в материал с большим градиентным коэффициентом. В общем случае, когда модули сдвига μ_i и градиентные коэффициенты c_i контактирующих фаз оказываются различными, общая сила изображения может вести себя у границы совершенно по-разному в зависимости от отношений μ_2/μ_1 и c_2/c_1 , хотя ее дальнедействующая составляющая остается такой же, как и в классической теории упругости.

Список литературы

- [1] J.D. Eshelby. In: *Dislocations in Solids* / Ed. by F.R.N. Nabarro. North-Holland, Amsterdam (1979). Vol. 1. P. 167.
- [2] M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. *Phys. Stat. Sol. (a)* **125**, 1, 107 (1991).
- [3] R. Bonnet. *Phys. Rev.* **B53**, 16, 10 978 (1996).
- [4] A.E. Romanov. In: *Nanostructured Materials: Science & Technology* / Ed. by G.M. Chow, N.I. Noskova. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht–Boston–London (1998). P. 207.
- [5] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. *Scripta Mater.* **35**, 11, 1353 (1996).
- [6] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. *Scripta Mater.* **36**, 1, 129 (1997).
- [7] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. *Scripta Mater.* **40**, 5, 559 (1999).
- [8] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. *Phys. Stat. Sol. (b)* **214**, 2, 245 (1999).
- [9] М.Ю. Гуткин, Е.С. Аифантис. *ФТТ* **41**, 12, 2158 (1999).
- [10] M.Yu. Gutkin, A.E. Aifantis. In: *Nanostructured Films and Coatings, NATO ARW Series, High Technology, Vol. 78* / Ed. by G.-M. Chow, I.A. Ovid'ko, T. Tsakalakos. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2000). P. 247.
- [11] B.S. Altan, E.C. Aifantis. *Scripta Metall. Mater.* **26**, 2, 319 (1992).
- [12] C.Q. Ru, E.C. Aifantis. *Acta Mechanica* **101**, 1, 59 (1993).
- [13] E.C. Aifantis. *J. Mech. Behaviour of Materials* **5**, 3, 355 (1994).
- [14] D.J. Unger, E.C. Aifantis. *Int. J. Fracture* **71**, R27 (1995).
- [15] B.S. Altan, E.C. Aifantis. *J. Mech. Behavior of Materials* **8**, 3, 231 (1997).
- [16] C.Q. Ru, E.C. Aifantis. Preprint MTY Report, Houghton, MI (1993), unpublished.
- [17] W.W. Milligan, S.A. Hackney, E.C. Aifantis. In: *Continuum Models for Materials with Microstructure* / Ed. by H. Mühlhaus. Wiley (1995). P. 379.
- [18] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [19] A.C. Eringen. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10**, 671 (1977).
- [20] A.C. Eringen. *J. Appl. Phys.* **54**, 9, 4703 (1983).
- [21] A.C. Eringen. In: *The Mechanics of Dislocations* / Ed. by E.C. Aifantis, J.P. Hirth. American Society for Metals, Metals Park, OH (1985). P. 101.
- [22] T. Mura. In: *Advances in Materials Research* / Ed. by H. Herman. Interscience Publishers, N. Y. (1968). Vol. 3. P. 1.