

УДК 539.4

РОЗРАХУНОК ПОТЕНЦІАЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ ТА ГЕОМЕТРИЧНИХ РОЗМІРІВ ДИСЛОКАЦІЙНОЇ ТРІЩИНИ*М. Г. СТАЩУК, М. І. ДОРОШ**Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України, Львів*

Досліджено дислокаційну тріщину, де на одній вершині задано стрибок переміщень, а на другій – береги змикаються. Вказано фізичну суть задачі з позицій механіки руйнування для дислокаційної тріщини, якій ставиться у відповідність математична модель, яку описують півнескінченим дефектом у твердому тілі зі вставленою у нього екстраплощиною заданої товщини та розрізом на продовженні. В межах такої моделі записано інтегральне рівняння, а також знайдено його розв'язок, на основі якого встановлено напружено-деформований стан навколо дислокаційної тріщини. У результаті визначено геометричні параметри та розраховано енергію тіла з дислокаційною тріщиною.

Ключові слова: дислокаційна тріщина, вектор Бюргерса, напружено-деформований стан, комплексні потенціали Колосова–Мухелішвілі, енергія пружної деформації, поверхнева енергія, рівноважна довжина дислокаційної тріщини.

Відомо, що руйнування та пластична деформація у кристалічних тілах є взаємозв'язані. В основному пластичне деформування в кристалах відбувається завдяки зародженню та руху особливих лінійних дефектів – дислокацій. За великих густин дислокацій у навантаженому матеріалі взаємодія між ними настільки суттєва, що розпочинаються колективні ефекти, тобто кореляційний рух дислокацій та локалізація їх потоків [1]. Саме такий кореляційний рух дислокацій значною мірою визначає зародження та ріст тріщин, а також основні міцнісні характеристики матеріалів.

Формулювання задачі. Сформульовано [1–4] розрахункові моделі утворення мікротріщини в деформованому металічному тілі, коли рух крайових дислокацій у ньому зупиняє певний бар'єр (рис. 1а). Під дією зовнішніх зусиль крайові дислокації об'єднуються і утворюють нову супердислокацію з вектором Бюргерса $\vec{B} = n\vec{b}$ (рис. 1б). Береги у ній розходяться на достатні відстані, щоб уже не притягуватись. Їх можна вважати вільними поверхнями [1].

Таку супердислокацію названо [1] дислокаційною тріщиною і віднесено до зароджених субмікротріщин у матеріалі. На сьогодні такі тріщини в механіці руйнування та теорії дислокацій мало вивчені, хоча приблизно оцінена [1, 3] енергія тіла з дислокаційною тріщиною та її довжина. Тому вивчення дислокаційної тріщини та доопрацювання в точній постановці є важливою актуальною задачею.

Нехай в ідеальний кристал вставлена атомна півплощина товщини B . Такого типу дефект у кристалічному тілі є дислокаційною тріщиною, яка, своєю чергою, створює внутрішній напружено-деформований стан (НДС). Згідно з працями [1, 5, 6], крайні атоми вставленої півплощини та порожнина в їх околі є порушенням регулярної структури кристала. На одній вершині тріщини, де закінчується атомна вставка, стрибок переміщень рівний вектору Бюргерса \vec{B} [5, 6]. У другій вершині тріщини, де закінчується порушення структури кристала, її береги змика-

ються. Потрібно встановити у кристалі форму поверхні дислокаційної тріщини та її довжину, напруження в тілі, компоненти вектора переміщень, об'єм порожнини та енергію кристала з таким тріщиноподібним дефектом.

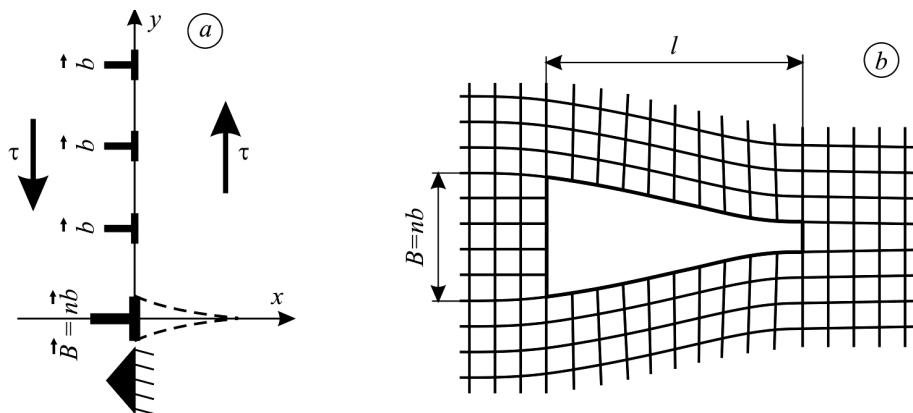


Рис. 1. Схема зародження тріщини в моделі Зінера–Стро (а) та дислокаційна тріщина [1, 5] (b).

Fig. 1. Crack initiation in the Zener–Stroh model (a) and a dislocation crack [1, 5] (b) (schematically).

Математичне формулювання задачі. Змодельємо дислокаційну тріщину довжини l півнескінченим дефектом, тобто вставленою атомною півплощиною та порожниною на її продовженні. Зв'яжемо тріщиноподібний дефект із прямокутною системою координат xOy , причому вісь Ox сумістимо з його віссю симетрії, а центр O – з кінцевим атомом вставленої атомної півплощини (рис. 2).

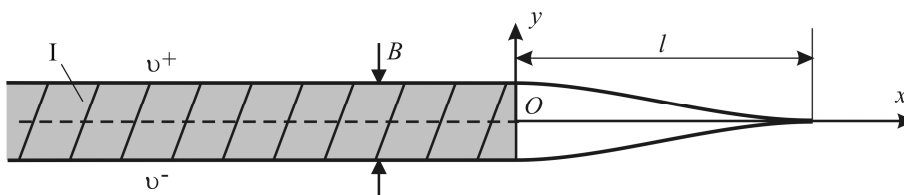


Рис. 2. Схема дислокаційної тріщини: I – вставлена атомна півплощина.

Fig. 2. Dislocation crack: I – inserted nuclear half-plane (schematically).

Вважаємо, що уздовж дефекту, де вставлена атомна півплощина, тобто для $x \in (-\infty, 0]$ задані переміщення $v^+ = -v^- = B/2$ відповідно на її верхньому і нижньому берегах, а на берегах тріщини – нульові напруження, оскільки її поверхня вільна.

Комплексні потенціали для півнескінченного дефекту. Для встановлення НДС тіла з дислокаційною тріщиною використовуємо співвідношення Колосова–Мусхелішвілі:

$$\sigma_x + \sigma_y = 2[\Phi(z) + \overline{\Phi(z)}], \quad (1)$$

$$\sigma_y - i\tau_{xy} = \Phi(z) + \Omega(\bar{z}) + (z - \bar{z})\overline{\Phi'(z)}, \quad (2)$$

$$2\mu(u' + iv') = \chi\Phi(z) - \Omega(\bar{z}) - (z - \bar{z})\overline{\Phi'(z)}, \quad (3)$$

де $z = x + iy$; $u' = \partial u / \partial x$, $v' = \partial v / \partial x$.

Комплексні потенціали $\Phi(z)$, $\Omega(z)$ для півнескінченного тріщиноподібного дефекту такі [7, 8]:

$$\Phi(z) = \frac{1}{4\pi\rho^* \sqrt{z-l}} \int_{-\infty}^l \frac{\sqrt{l-t} F(\rho^*, t)}{t-z} dt + \frac{1}{4\pi\rho^* i} \int_{-\infty}^l \frac{G(\rho^*, t)}{t-z} dt, \quad (4)$$

$$\Omega(z) = -\frac{1}{4\pi\sqrt{z-l}} \int_{-\infty}^l \frac{\sqrt{l-t}F(\rho^*, t)}{t-z} dt + \frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^l \frac{G(\rho^*, t)}{t-z} dt, \quad (5)$$

$$G(\rho, x) = \frac{\rho^* + \rho}{2\rho^*} G(\rho^*, x) - \frac{i(\rho^* - \rho)}{2\pi\rho^* \sqrt{l-x}} \int_{-\infty}^l \frac{\sqrt{l-t}F(\rho^*, t)}{t-x} dt, \quad x \in (-\infty, l]. \quad (6)$$

Тут уведені функції [7]:

$$\{G(\rho^*, x), F(\rho^*, x)\} = \begin{cases} \{-2q(x), -2p(x)\}, & \rho^* = -1, \\ \{2g'(x), 2f'(x)\}, & \rho^* = \chi; \end{cases} \quad (7)$$

$$\sigma_y^\pm(x, 0) - i\tau_{xy}^\pm(x, 0) = p(x) \pm q(x), \quad (8)$$

$$2\mu \frac{d}{dx} (u^\pm(x, 0) + iv^\pm(x, 0)) = f'(x) \pm g'(x), \quad (9)$$

де $\sigma_y^\pm(x, 0)$, $\tau_{xy}^\pm(x, 0)$; $u^\pm(x, 0)$, $v^\pm(x, 0)$ – компоненти напружень та вектора переміщень, відповідно; $p(x)$, $q(x)$, $f'(x)$, $g'(x)$ – задані функції на відповідних ділянках контуру дефекту; μ – модуль зсуву; параметр ρ^* (ρ) набуває значення χ (-1) за наявності у кристалічному тілі атомної півплощини та -1 (χ) для тріщиноподібного дефекту. При цьому $\chi = 3 - 4\nu$ – для плоскої деформації і $\chi = (3 - \nu)/(1 + \nu)$ – для плоского напруженого стану, де ν – коефіцієнт Пуассона.

Модельювання дислокаційної тріщини. Приймаємо, що на берегах вставленої атомної півплощини (рис. 2) виконуються крайові умови

$$v^+(x) - v^-(x) = B, \quad x \in (-\infty, 0], \quad (10)$$

тобто на ділянці $x \in (-\infty, 0]$ задано стрибок переміщень. Виконання умови (10) на $x \in (-\infty, 0]$ можемо реалізувати, вказавши на цій ділянці деякі (поки що невідомі) нормальні зусилля

$$\sigma_y^\pm(x) = p(x), \quad x \in (-\infty, 0] \quad (11)$$

та нульові дотичні напруження

$$\tau_{xy}^\pm = 0, \quad x \in (-\infty, 0]. \quad (12)$$

На ділянці $x \in (0, l]$ поверхня вільна від навантажень, а тому

$$\sigma_y^\pm(x) = 0 \text{ та } \tau_{xy}^\pm = 0, \quad x \in (0, l]. \quad (13)$$

Враховуючи крайові умови (10)–(13) та введені позначення (7)–(9), функції $G(\rho, x)$, $G(\rho^*, x)$, $F(\rho^*, x)$, що входять у співвідношення (4)–(6), при $\rho = \chi$, $\rho^* = -1$ запишемо так:

$$G(-1, x) = (\sigma_y^+ - \sigma_y^-) - i(\tau_{xy}^+ - \tau_{xy}^-) = q(x) \equiv 0, \quad x \in (-\infty, l], \quad (14)$$

$$F(-1, x) = (\sigma_y^+ + \sigma_y^-) - i(\tau_{xy}^+ + \tau_{xy}^-) = \begin{cases} -2p(x), & x \in (-\infty, 0], \\ 0, & x \in (0, l], \end{cases} \quad (15)$$

$$G(\chi, x) = 2\mu \frac{\partial}{\partial x} [u^+(x) - u^-(x) + i(v^+(x) - v^-(x))] = 2g'(x), \quad x \in (-\infty, 0]. \quad (16)$$

За виразами (14)–(16) зі співвідношень (4)–(6) встановлюємо, що

$$\Omega(z) = \Phi(z) = \frac{1}{2\pi\sqrt{z-l}} \int_{-\infty}^0 \frac{\sqrt{l-t}p(t)}{t-z} dt, \quad (17)$$

$$G(\chi, x) = -\frac{1}{\pi\sqrt{l-x}} \int_{-\infty}^0 \frac{\sqrt{l-t}p(t)}{t-x} dt, \quad x \in (-\infty, l]. \quad (18)$$

Невідомий розподіл напружень $p(x)$ для $x \in (-\infty, 0]$ шукаємо з крайової умови (10). Оскільки $u^+(x) = u^-(x)$, $v^+(x) = -v^-(x) = B/2$ для $x \in (-\infty, 0]$, то, врахувавши ці співвідношення та вираз (16), отримаємо:

$$G(\chi, x) = 0, \quad x \in (-\infty, 0]. \quad (19)$$

Зі співвідношення (18) на основі виразу (19) запишемо сингулярне інтегральне рівняння для знаходження розподілу напружень $p(x)$ на берегах вставленої атомної півплощини:

$$\int_{-\infty}^0 \frac{\sqrt{l-t} p(t)}{t-x} dt = 0, \quad x \in (-\infty, 0].$$

З розв'язку цього рівняння невідомі напруження уздовж вставленої півплощини такі:

$$p(x) = \sigma_y^\pm(x, 0) = \frac{C}{\sqrt{l-x}\sqrt{-x}}, \quad x \in (-\infty, 0], \quad (20)$$

де $C = \text{const}$, яку потрібно знайти з фізичної суті задачі.

Спосіб знаходження константи C . В граничному випадку, коли $l \rightarrow 0$, співвідношення (20) перепишемо у вигляді

$$p(x) = -C/x, \quad x \in (-\infty, 0]. \quad (21)$$

Водночас напруження за класичної дислокації [5, 6] рівні

$$\sigma_y(x, 0) = \frac{\mu B}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x}, \quad x \in (-\infty, 0]. \quad (22)$$

Тому, врахувавши рівність (21) та співвідношення (22), отримаємо:

$$C = -\frac{\mu B}{2\pi(1-\nu)}. \quad (23)$$

Тоді на основі співвідношень (20) та (23) одержимо розподіл напружень $p(x)$ на берегах вставленої атомної півплощини:

$$p(x) = -\frac{\mu B}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{\sqrt{l-x}\sqrt{-x}}, \quad x \in (-\infty, 0]. \quad (24)$$

Враховуючи вираз (24), комплексні потенціали (17) запишемо так:

$$\Omega(z) = \Phi(z) = \frac{\mu B}{4\pi(1-\nu)} \frac{1}{\sqrt{z}\sqrt{z-l}}. \quad (25)$$

Із формул (1), (2) та (25) випливає, що напруження в околі вершин дислокаційної тріщини мають антисиметричний характер, тобто вони однакові за значенням, але – протилежні за знаком.

В частковому випадку, спрямувавши l до 0, отримали енергію та напруження для класичної крайової дислокації [5, 6].

У формулі (25) поки що невідомою залишається довжина дислокаційної тріщини l . Для її визначення вирахуємо енергію пружної деформації, обумовленої дислокаційною півплощиною у тілі.

Енергія пружної деформації тіла з дислокаційною тріщиною. Енергію пружної деформації U знаходимо з теореми Клапейрона [9], згідно з якою, робота деформації за відсутності об'ємних сил рівна половині роботи зовнішніх сил A на зніційованих ними переміщеннях

$$U = \frac{1}{2} A = \frac{1}{2} \iint_S t_i u_i ds = - \int_{-\infty}^l \sigma_y^+(x, 0) v^+(x, 0) dx, \quad (26)$$

де t_i – поверхневі сили; u_i – компоненти переміщень.

Скориставшись рівностями (10)–(13), (24), вираз (26) перепишемо у вигляді

$$U = -\frac{CB}{2} \lim_{r \rightarrow 0} \int_{-R}^{-r} \frac{1}{\sqrt{l-x}\sqrt{-x}} dx = -\frac{CB}{2} \lim_{r \rightarrow 0} \ln \frac{l/2 + r - \sqrt{r^2 + lr}}{l/2 + R - \sqrt{R^2 + lR}}. \quad (27)$$

Для остаточного підрахунку енергії тіла з дислокаційною тріщиною приймаємо, що l – фіксована величина, та спрямовуємо $r \rightarrow 0$. Вважаючи $r < l$ і $R > l$ та розкладаючи підлогарифмічні функції у виразі (27) в ряди Тейлора [8], одержуємо:

$$U \approx \frac{\mu B^2}{4\pi(1-\nu)} \left[2\ln(2) + \ln\left(\frac{R}{l}\right) \right]. \quad (28)$$

Встановлення геометричних розмірів дислокаційної тріщини. За присутності півнескінченної вставки на її продовженні утворюються вільні поверхні (див. рис. 2). На це потрібно затратити певну роботу, а саме:

$$F = 2\gamma l, \quad (29)$$

де γ – поверхнева енергія. Довжину l визначимо з балансового рівняння

$$\frac{\partial U}{\partial l} + \frac{\partial F}{\partial l} = 0. \quad (30)$$

Тоді на основі (28) та (29) з рівняння (30) одержуємо співвідношення для визначення l_d – довжини дислокаційної тріщини:

$$l_d = \frac{\mu B^2}{8\pi(1-\nu)\gamma} = \frac{EB^2}{16\pi(1-\nu^2)\gamma}. \quad (31)$$

Зображено (рис. 3) графічні залежності поверхневої енергії тріщини F , енергії пружної деформації U та повної енергії $F + U$ від довжини дислокаційної тріщини l для $E = 2 \cdot 10^{11}$ Па, $\gamma = 0,01Ea = 0,6$ Дж/м², $\nu = 0,3$; параметра ґратки $a = 3 \cdot 10^{-10}$ м, модуля вектора Бюргерса $B = a$.

Як бачимо (рис. 3), дислокаційна тріщина є рівноважна. Її довжина прямопропорційна модулям зсуву, Юнга, квадрату довжини вектора Бюргерса і оберненопропорційна до поверхневої енергії матеріалу. Аналогічний висновок зроблено раніше [1, 5].

На основі формули (3), явного вигляду потенціалів (25) та з врахуванням того, що $v(0) = 0,5B$, переміщення берега дислокаційної тріщини запишемо так:

$$v(x) = -\frac{B}{2\pi} \arcsin \frac{2x-l}{l} + \frac{B}{4}. \quad (32)$$

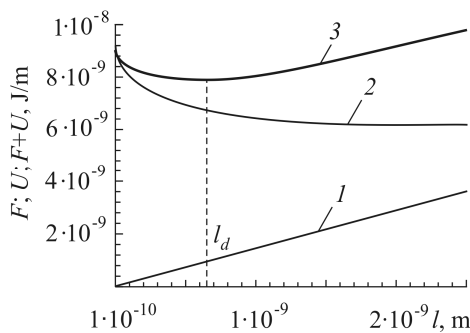


Рис. 3. Залежність енергетичних складових дислокаційної тріщини від її довжини l :
1 – поверхнева енергія тріщини F ;
2 – енергія пружної деформації U ;
3 – повна енергія $F + U$.

Fig. 3. Dependence of the energy components of a dislocation crack on its length l :
1 – crack surface energy F ; 2 – elastic strain energy U ; 3 – total energy $F + U$.

Розрахунок одиничного об'єму ядра-тріщини призводить до результату:

$$V = \frac{EB^3}{32\pi(1-\nu^2)\gamma}. \quad (33)$$

Приклад розрахунку форми контуру ядра. Нехай $E = 2 \cdot 10^{11}$ Па, $\gamma = 0,01Ea = 0,6$ Дж/м², $\nu = 0,3$; $a = 3 \cdot 10^{-10}$ м. Якщо довжина вектора Бюргерса рівна $B = a$, $2a$ та $3a$, то на основі співвідношення (31) отримаємо такі значення довжини дислока-

ційної тріщини: $l_d = 6,56 \cdot 10^{-10}$; $26,23 \cdot 10^{-10}$; $59,0 \cdot 10^{-10}$ м. Відносне переміщення берега такого дефекту на основі співвідношення (32) зображено на рис. 4. Об'єм порожнини, що припадає на один період ґратки, з виразу (33) такий: $V_a = 0,295 \cdot 10^{-28}$; $2,361 \cdot 10^{-28}$ та $7,969 \cdot 10^{-28}$ м³ відповідно для $B = a$; $2a$ та $3a$.

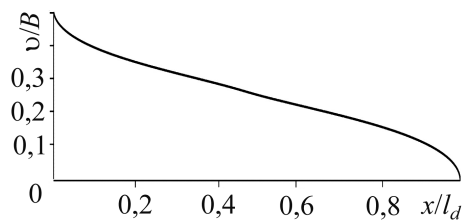


Рис. 4. Відносне переміщення берега ядра v/B .

Fig. 4. Relative movement of the edge of nucleus v/B .

ВИСНОВКИ

Змодельовано дислокаційну тріщину, де на одній вершині заданий стрибок переміщень, а на другій – береги змикаються. Показано, що дислокаційна тріщина, на відміну від класичної тріщини Гріффітса, рівноважна. Її довжина квадратично залежна від вектора Бюргерса та значно перевищує його значення. З огляду на її довжину l_d та об'єм V_a можемо зазначити, що крайова дислокація та дислокаційна тріщина є пасткою для молекул водню, діаметр яких становить $2,3 \cdot 10^{-10}$ м. Зі збільшенням вектора Бюргерса кількість таких молекул зростає, що ініціює тиск у дислокаційній тріщині та може бути причиною окрихнення або пластифікації металу.

РЕЗЮМЕ. Исследовано дислокационную трещину, где на одной из вершин задан скачок перемещений, а на другой берега смыкаются. Указана физическая сущность задачи с позиций механики разрушения для дислокационной трещины, которой ставится в соответствие математическая модель, которую описывают полубесконечным дефектом в твердом теле со вставленной в него экстраплоскостью заданной толщины и разрезом на продолжении. В рамках такой модели записано интегральное уравнение, а также найдено его решение, на основе которого установлено напряженно-деформированное состояние вокруг дислокационной трещины. В результате определены геометрические параметры и рассчитана энергия тела с дислокационной трещиной.

SUMMARY. A dislocation crack, where on one of its peaks the jump movement is set, and on the second – the edges are closed, is investigated. The physical essence of the problem is specified from the position of fracture mechanics for a dislocation crack, which is associated with a mathematical model, described by a semi-infinite defect in a solid with extra plane of the given thickness and a cut on its continuation in it. Within this model the integral equation was written and solution is found basing on which the stress-strain state is established. As a result the set geometric parameters are determined and the body energy with a dislocation crack is calculated.

1. *Владимиров В. И.* Физическая природа разрушения металлов. – М.: Металлургия, 1984. – 280 с.
2. *Stroh A. N.* A theory of the fracture of metals // *Advances in Physics.* – 1957. – **6.** – P. 418–465.
3. *Владимиров В. И., Ханнанов Ш. Х.* Взаимодействие дислокационного скопления с дислокационной трещиной // *Физ. твердого тела.* – 1969. – **11,** № 6. – С. 1667–1676.
4. *Панасюк В. В., Андрейкив А. Е., Харин В. С.* Зарождение и рост микротрещин, порождаемых заблокированными скоплениями дислокаций // *Физ.-хим. механика материалов.* – 1985. – **21,** № 2. – С. 5–16.
5. *Фридель Ж.* Дислокации. – М.: Наука, 1967. – 294 с.
6. *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
7. *Стацук Н. Г.* Задачи механики упругих тел с трещиноподобными дефектами. – К.: Наук. думка, 1993. – 358 с.
8. *Стацук М. Г., Дорош М. І.* Визначення геометричних параметрів та енергії ядра крайової дислокації // *Механіка руйнування матеріалів і міцність конструкцій / Під заг. ред. В. В. Панасюка.* – Львів: Фіз.-мех. ін-т ім. Г. В. Карпенка НАНУ, 2014. – С. 55–62.
9. *Демидов С. П.* Теория упругости. – М.: Высш. шк., 1979. – 432 с.

Одержано 24.10.2014