

УДК 539.3

© 1991 г.

**С. В. КУЗНЕЦОВ**

**ЭНЕРГИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИИ  
В АНИЗОТРОПНОЙ УПРУГОЙ СРЕДЕ**

Определение энергии образования дислокации в анизотропных упругих средах представляет собой весьма важную задачу в связи с описанием поведения различных кристаллов. Имеющиеся весьма немногочисленные исследования в этом направлении посвящены главным образом изотропным [1-3] или гексагональным [4] кристаллам, когда в явном виде удается построить фундаментальные решения уравнений равновесия. В работах [5, 6] рассматривается несколько более простой случай взаимодействия двух удаленных дислокационных петель друг с другом. Ниже получено выражение для энергии образования дислокации Вольтерра в анизотропной упругой среде с анизотропией общего вида.

**1. Основные уравнения.** Рассматривается однородная анизотропная упругая среда, уравнения равновесия которой имеют вид

$$A(\partial_x)u \equiv -\operatorname{div} C[\nabla u] = 0 \tag{1.1}$$

где  $A$  — матричный дифференциальный оператор уравнений равновесия;  $u$  — вектор перемещений;  $C$  — четырехвалентный тензор, называемый тензором упругости. Предполагается, что тензор  $C$  строго эллиптический, т. е.

$$s \cdot C \cdot s > 0, \quad \forall s, s = a \otimes b, \quad a, b \in R^3, \quad a, b \neq 0 \tag{1.2}$$

Кроме того, предполагается, что исследуемая среда является гиперупругой. Таким образом, тензор  $C$  симметричен, как оператор, действующий в шестимерном пространстве симметричных тензоров второго ранга.

Поле перемещений в среде, вызванное дислокацией Вольтерра, дается потенциалом простого слоя

$$u(x) = \int_{\Omega} b(y') \cdot T_{\nu} E(x-y') dy' \tag{1.3}$$

обеспечивающим необходимый разрыв смещений при переходе через зону  $\Omega$ , занятую дислокацией. В формуле (1.3)  $T_{\nu}$  — оператор напряжений

$$T_{\nu}(\partial_x)u \equiv \nu \cdot C[\nabla u] \tag{1.4}$$

$\nu$  — вектор единичной нормали к поверхности, несущей дислокацию;  $E$  — фундаментальное решение уравнений равновесия;  $b$  — вектор Бюргерса. В дальнейшем предполагается, что дислокация занимает некоторую плоскую область  $\Omega$  на плоскости  $\Pi$ . Эта плоскость  $\Pi$  отождествляется с координатной плоскостью при  $x_3 = 0$ , а вектор  $\nu$  имеет компоненты  $(0, 0, 1)$ .

*Замечание 1.* В случае изотропной упругой среды и постоянного вектора Бюргерса интегралы по  $\Omega$  в (1.3) удастся свести к контурным интегралам по границе  $\partial\Omega$  [7, 8]. Однако, энергия образования такой дислокации, называемой иногда дислокационной петлей, оказывается бесконечной из-за слишком большой особенности поля напряжений вблизи от петли  $\partial\Omega$ . Для получения конечных значений энергии выделяют торо-

идеальную окрестность  $V_{\partial\Omega}$ , а интегрирование проводят в  $R^3 \setminus V_{\partial\Omega}$  [1-4]. Другой путь получения конечных значений энергии связан с рассмотрением дислокаций, у которых вектор Бюргерса является переменным так, чтобы поле перемещений, даваемое (1.3), было непрерывным на  $\Pi$ , а напряжения имели особенность не выше корневой в окрестности  $\partial\Omega$ . В этом случае энергия образования дислокации оказывается конечной, но интеграл по  $\Omega$  в (1.3) уже не сводится к контурному, даже для изотропной среды. Этот случай дислокаций Вольтерра исследуется ниже.

Напряжения на плоскости  $\Pi$  и, в частности, в области  $\Omega$  определяются как предел по некасательным направлениям

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}') = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \mathbf{T}_{-\nu}(\partial_{\mathbf{x}}) \int_{\Omega} \mathbf{b}(\mathbf{y}') \cdot \mathbf{T}_{\nu}(\partial_{\mathbf{y}}) \mathbf{E}(\mathbf{x} - \mathbf{y}') d\mathbf{y}'$$

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{x}'} > 0 \quad (1.5)$$

существующий почти всюду на  $\Pi$  при  $\mathbf{b} \in L^2$  [9]. В формуле (1.5) напряжения определяются при подходе к  $\Pi$  из «верхнего» полупространства (при  $x_3 > 0$ ).

Энергия образования дислокации определяется выражением [1-3]:

$$W = 1/2 \int_{\Omega} \mathbf{t}(\mathbf{x}') \cdot \mathbf{b}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1/2 \int_{\Omega} \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \mathbf{T}_{-\nu}(\partial_{\mathbf{x}}) \int_{\Omega} \mathbf{b}(\mathbf{y}') \cdot \mathbf{T}_{\nu}(\partial_{\mathbf{y}}) \mathbf{E}(\mathbf{x} - \mathbf{y}') d\mathbf{y}' d\mathbf{x}' \quad (1.6)$$

Необходимо заметить, что использование выражений (1.5), (1.6) неудобно по двум причинам: во-первых, непосредственный переход к пределу под интегралом при вычислении  $\mathbf{t}(\mathbf{x}')$  невозможен из-за сверхсингулярности ядра; во-вторых, при произвольной анизотропии упругой среды получение фундаментального решения наталкивается на определенные трудности [5].

*Замечание 2.* В случае изотропного упругого тела выражение (1.5) удается свести к псевдодифференциальному оператору от  $\mathbf{b}$  класса  $S^*$  [10-12]. Для анизотропной упругой среды с анизотропией общего вида, несмотря на отдельные публикации [13, 14], такой оператор в явном виде построить не удалось.

**2. Сужение потенциала двойного слоя на плоскость  $\Pi$ .** Для построения псевдодифференциального оператора по (1.5) необходимо рассмотреть сужение потенциала двойного слоя (1.3) на несущую плоскость  $\Pi$ . Рассмотрим преобразование Фурье

$$f^{\vee}(\xi) = \int_{R^n} f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \mathbf{x} \cdot \xi} d\mathbf{x}, \quad \xi \in R^n, \quad f \in L^2(R^n) \quad (2.1)$$

основных операторов, введенных ранее. Это позволяет получить соответствующие символы

$$\mathbf{A}^{\vee}(\xi) = (2\pi)^2 \xi \cdot \mathbf{C} \cdot \xi, \quad \mathbf{T}_{\nu}^{\vee}(\xi) = (2\pi i) \mathbf{v} \cdot \mathbf{C} \cdot \xi, \quad \mathbf{E}^{\vee}(\xi) = \mathbf{A}^{\vee}{}^{-1}(\xi) \quad (2.2)$$

Принимая во внимание, что  $\mathbf{v} = (0, 0, 1)$ , из (2.2) вытекает следующее представление для символа  $\mathbf{T}_{\nu}^{\vee}$ :

$$\mathbf{T}_{\nu}^{\vee}(\xi) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{\mathbf{A}^{\vee}(\xi) - \mathbf{A}^{\vee}(\xi')}{\xi_3} - \mathbf{T}_{\nu}^{\vee}(\xi') \quad (2.3)$$

где  $\mathbf{T}_{\nu}^{\vee}(\xi') = (2\pi i) \xi' \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{v}$  — транспонированный к  $\mathbf{T}_{\nu}^{\vee}$  символ, а вектор  $\xi' \in \Pi$  представляет собой проекцию  $\xi$  на плоскость  $\Pi$ .

Преобразование Фурье потенциала двойного слоя (1.3), с учетом (2.3) дает

$$\begin{aligned} u^\sim(\xi) = & -b^\sim(\xi') \cdot T_v^\sim(\xi) \cdot E^\sim(\xi) = b^\sim(\xi') \cdot \left[ \frac{1}{2\pi i} \left( \frac{I}{\xi_3} - \right. \right. \\ & \left. \left. - A^\sim(\xi') \frac{E^\sim(\xi)}{\xi_3} \right) + T_v^{-1}(\xi') \cdot E^\sim(\xi) \right] \end{aligned} \quad (2.4)$$

где  $I$  — единичная диагональная матрица, а символ « $\sim$ » обозначает частичное преобразование Фурье по переменным, лежащим в плоскости  $\Pi$ . Принимая во внимание преобразование Гильберта

$$Hf(z) = v. p. \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(z-\xi)}{\xi} d\xi, \quad f \in L^2(R^1) \quad (2.5)$$

и тот факт, что мультипликатором сингулярного оператора (2.5) является  $-i \operatorname{sgn} x$  [15], из (2.4) следует

$$W_{\pm}^\sim(\xi'; 0) = \pm I/2 + S^\sim(\xi') \quad (2.6)$$

$$S^\sim(\xi') = -\frac{A^\sim(\xi')}{2\pi i} v. p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E^\sim(\xi)}{\xi_3} d\xi_3 + T_v^{-1}(\xi') \int_{-\infty}^{\infty} E^\sim(\xi) d\xi_3$$

где  $W_{\pm}^\sim$  — символ оператора (2.4) при сужении последнего на плоскость  $\Pi$ . Нижние индексы  $\pm$  в (2.6) указывают на соответствующие пределы при  $x_3 \rightarrow \pm 0$ . Первый несобственный интеграл в (2.6) определен как интеграл в смысле главного значения, а второй — абсолютно сходится при любых  $\xi' \neq 0$ , что вытекает из эллиптичности  $E^\sim$  и асимптотической оценки  $|E^\sim(\xi)| = O(|\xi_3|^{-2})$ ,  $|\xi_3| \rightarrow \infty$ , выполняющейся ввиду (2.2)<sub>3</sub>.

*Предложение 1.* Матричный символ  $S^\sim(\xi')$  из (2.6) является символом матричного сингулярного оператора на  $\Pi$ .

*Доказательство.* Формулы (2.2), (2.6) показывают, что  $S^\sim(\xi')$  вещественно-аналитичен всюду в  $R^2 \setminus 0$ . Анализ несобственных интегралов

$$v. p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E^\sim(\xi', \xi_3)}{\xi_3} d\xi_3, \quad \int_{-\infty}^{\infty} E^\sim(\xi', \xi_3) d\xi_3$$

показывает, что первый из них дает символ, однородный по  $|\xi'|$  степени  $-2$ , в то время как второй, — приводит к символу, однородному по  $|\xi'|$  степени  $-1$ . Последующее домножение этих интегралов на символы  $A^\sim(\xi')$ ,  $T_v^{-1}(\xi')$  соответственно приводит к однородному степени 0 символу  $S^\sim(\xi')$ . Применение теоремы Марцинкевича о мультипликаторах завершает доказательство этого предложения.

**3. Напряжения на плоскости  $\Pi$ .** Запишем формулу Соммильяна для верхнего полупространства

$$\int t(y') \cdot E(x-y') dy' - \int u(y') \cdot T_v(\partial_\nu) E(x-y') dy' = \begin{cases} u(x', x_3) \\ 1/2 u(x', 0) \end{cases} \quad (3.1)$$

причем при  $x_3=0$  второй интеграл в левой части (3.1) понимается в смысле главного значения. Преобразование Фурье формулы (3.1) при  $x_3=0$  с учетом (2.6) дает

$$t^\sim(\xi') \cdot E^\sim(\xi', 0) + u^\sim(\xi') \cdot S^\sim(\xi') = 1/2 u^\sim(\xi') \quad (3.2)$$

где  $u \sim(\xi') = u \sim(\xi', 0)$ . Из (3.2) немедленно следует

$$t \sim(\xi') = u \sim(\xi') \cdot (I/2 - S \sim(\xi')) \cdot E \sim^{-1}(\xi', 0) \quad (3.3)$$

Преобразование Фурье по  $x'$  сужения на  $\Pi$  при  $x^3 \rightarrow +0$  потенциала двойного слоя (1.3) в соответствии с (2.6) дает

$$u \sim(\xi') = b \sim(\xi') \cdot (I/2 + S \sim(\xi')) \quad (3.4)$$

Объединение (3.3), (3.4) позволяет записать

$$\begin{aligned} t \sim(\xi') &= b \sim(\xi') \cdot G \sim(\xi'), \\ G \sim(\xi') &= (I/4 - S \sim(\xi') \cdot S \sim(\xi')) \cdot E \sim^{-1}(\xi', 0) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Непосредственный анализ (3.5) показывает, что матричный символ  $G \sim$  однороден по  $|\xi'|$  степени 1.

**4. Энергия образования дислокации.** Применяя формулу Планшереля к выражению для энергии (1.6), получаем

$$W = \frac{1}{2} \int_{\Omega} t(x') \cdot b(x') dx' = \frac{1}{2} \int_{\pi} t \sim(\xi') \cdot \overline{b \sim(\xi')} d\xi' \quad (4.1)$$

С учетом представления (3.5) для  $t \sim$  формула (4.1) принимает вид

$$W = \frac{1}{2} \int_{\pi} b \sim(\xi') \cdot \overline{G \sim(\xi')} \cdot \overline{b \sim(\xi')} d\xi' \quad (4.2)$$

Поскольку символ  $G \sim$  однороден по  $|\xi'|$  степени 1 для существования интеграла (4.2) необходимо, чтобы  $b \in H_0^{1/2}(\bar{\Omega}, R^3)$ . Здесь через  $H_0^{1/2}$  обозначено пространство вектор-функций с носителем в  $\bar{\Omega}$  и таких, что конечна  $H^{1/2}$ -норма

$$\|b\|_{H^{1/2}}^2 = \int_{\pi} (1 + |\xi'|^2)^{1/2} |b \sim(\xi')|^2 d\xi' < \infty \quad (4.3)$$

При  $b \in H_0^{1/2}(\bar{\Omega}, R^3)$  выражение для энергии (4.2) может рассматриваться как некоторый квадратичный функционал от  $b$ .

*Предложение 2.* Формула для энергии:

$$W = \frac{1}{4} \int_{\pi} b \sim(\xi') \cdot (G \sim^t(\xi') + G \sim(\xi')) \cdot \overline{b \sim(\xi')} d\xi' \quad (4.4)$$

*Доказательство* вытекает из выражения (4.1), обеспечивающего выполнение следующего равенства

$$\begin{aligned} \int_{\pi} b \sim(\xi') \cdot G \sim^t(\xi') \cdot \overline{b \sim(\xi')} d\xi' &= \\ = \int_{\pi} b \sim(\xi') \cdot G \sim(\xi') \cdot \overline{b \sim(\xi')} d\xi' \end{aligned} \quad (4.5)$$

Формула (4.4) особенно удобна для приложений, поскольку функционал энергии оказывается выраженным через значения симметричной квадратичной формы  $G \sim^t + G \sim$ . Вообще говоря, неизвестно, будет ли символ  $G \sim^t + G \sim$  строго эллиптическим; если он является таковым, то справедливо

*Предложение 3.* Если символ  $G \sim$  строго эллиптивен, то функционал  $W$  коэрцитивен (и непрерывен) в  $H_0^{1/2}$ .

*Доказательство.* Непрерывность  $W$  в  $H_0^{1/2}$  вытекает из определения  $H^{1/2}$ -нормы и однородности символа  $G \sim$  по  $|\xi'|$  степени 1. Для доказатель-

ства неравенства коэрцитивности

$$W(\mathbf{b}) \geq c \|\mathbf{b}\|_{H^{1/2}}^2 \quad (4.6)$$

заметим, что в силу неравенства выпуклости

$$\|\mathbf{b}\|_{L^2} \geq \text{mes}(\Omega)^{1/2-1/p} \|\mathbf{b}\|_{L^p}, \quad 1 < p \leq 2 \quad (4.7)$$

Применение неравенства Харди — Литтлвуда — Соболева в теореме о дробном дифференцировании позволяет записать

$$\|\mathbf{b}\|_{L^{4/3}} \geq c' \|I_{1/2}(\mathbf{b})\|_{L^2} \quad (4.8)$$

где  $I_{1/2}$  — потенциал Рисса порядка  $1/2$ . Объединяя (4.7), (4.8) и применяя неравенство Гельдера, получаем следующую цепочку неравенств

$$\begin{aligned} \|\mathbf{b}\|_{L^2} \left( \int_{\pi} |\xi'| |\mathbf{b}^{\sim}(\xi')|^2 d\xi' \right)^{1/2} &\geq c \|I_{1/2}(\mathbf{b})\|_{L^2} \left( \int_{\pi} |\xi'| |\mathbf{b}^{\sim}(\xi')|^2 d\xi' \right)^{1/2} = \\ &= c \left( \int_{\pi} |\xi'|^{-1} |\mathbf{b}^{\sim}(\xi')|^2 d\xi' \right)^{1/2} \left( \int_{\pi} |\xi'| |\mathbf{b}^{\sim}(\xi')|^2 d\xi' \right)^{1/2} \geq c \|\mathbf{b}\|_{L^2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Неравенства (4.9) совместно с неравенствами выпуклости  $2(1+|\xi'|^2)^{1/2} \geq 1+|\xi'| \geq (1+|\xi'|^2)^{1/2}$  доказывают коэрцитивность функционала  $W$ .

**5. Круговые дислокации.** Рассматривается круговая дислокация с вектором Бюргера

$$\mathbf{b}(x') = \mathbf{b}_0 \varphi_{\delta}(|x'|), \quad \varphi_{\delta}(|x'|) = \begin{cases} (1-|x'|^2)^{\delta}, & |x'| \leq 1 \\ 0, & |x'| > 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

*Предложение 4.* Дислокации с вектором Бюргера (5.1) при любых  $\delta > 0$  принадлежат пространству  $H^{1/2}$ .

*Доказательство.* В силу того, что  $\varphi_{\delta}$  — радиальная функция, ее преобразование Фурье будет также радиальной функцией вида [15]:

$$\varphi_{\delta}^{\sim}(\xi') = \pi^{-\delta} \Gamma(\delta+1) |\xi'|^{-1-\delta} J_{1+\delta}(2\pi|\xi'|) \quad (5.2)$$

где  $J_{1+\delta}$  — функция Бесселя. Имея ввиду асимптотические оценки функций Бесселя, из (5.2) следует

$$\varphi_{\delta}^{\sim}(\xi') = \begin{cases} O(1), & |\xi'| \rightarrow 0 \\ O(|\xi'|^{-1/2-\delta}), & |\xi'| \rightarrow \infty \end{cases} \quad (5.3)$$

Оценки (5.3) показывают, что  $\varphi_{\delta} \in H^{1/2}$  при любых  $\delta > 0$ .

Подстановка выражения (5.2) в функционал энергии даёт

$$\begin{aligned} W(\mathbf{b}) &= 1/2 \int_0^{\infty} \pi^{-2\delta} \Gamma^2(1+\delta) r^{-2\delta} J_{1+\delta}^2(2\pi r) dr \mathbf{b}_0 \cdot \int_0^{2\pi} \mathbf{G}^{\sim}(\varphi) d\varphi \cdot \mathbf{b}_0 \\ & \quad r = |\xi'|, \quad \varphi = \arcsin \xi_2 / |\xi'| \end{aligned} \quad (5.4)$$

Анализ (5.4) показывает, что первый интеграл по  $r$  не зависит от физических свойств среды. Он может быть вычислен однажды и использоваться в качестве коэффициента  $k_{\delta}$  при втором интеграле по единичной окружности. Обозначая значение второго интеграла через  $\mathbf{G}_0$  и принимая во внимание формулу (4.4), окончательно получаем следующее выражение для определения энергии круговой дислокации (5.1):

$$W = 1/4 k_{\delta} \mathbf{b}_0 \cdot (\mathbf{G}_0^t + \mathbf{G}_0) \cdot \mathbf{b}_0 \quad (5.5)$$

Обозначая через  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$  собственные числа, а через  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  соответствующие собственные вектора  $\mathbf{G}_0^t + \mathbf{G}_0$ , естественно поставить задачу отыскания собственного вектора  $\mathbf{b}_3$  реализующего минимум (5.5) при фиксированной ориентации круговой дислокации. Очевидно, для заданной ориентации дислокации этот вектор определяет собой наиболее вероятный тип дислокации в кристалле.

Автор выражает благодарность Р. В. Гольдштейну и И. С. Захаревичу за обсуждение результатов настоящей работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кренер Е. Общая континуальная теория дислокаций и собственных напряжений. М.: Мир, 1965. 403 с.
2. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИЛ, 1963. 247 с.
3. Nabarro F. R. N. The mathematical theory of stationary dislocations // Adv. Phys. 1952. V. 1. N 3. P. 269–394.
4. Chou Y. T., Eshelby J. D. The energy and line tension of a dislocation in a hexagonal crystal // J. Mech. Phys. Solids. 1962. V. 10. N 1. P. 27–34.
5. Willis J. R. The elastic interaction energy of dislocation loops in anisotropic media // Quart. J. Mech. Appl. Math. 1965. V. 18. N 4. P. 419–433.
6. Turholme G. E. Dislocation loops in hexagonal crystals // J. Mech. Phys. Solids. 1974. V. 22. N 4. P. 309–321.
7. Burgers J. M. Some considerations of the field of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice // Proc. Kon. Nedel. Akad. Wetensch. 1939. V. 42. P. 293–325; P. 378–399.
8. Peach M. O., Koehler J. S. The forces exerted in dislocations and the stress field produced by them // Phys. Rev. Ser. 2. 1950. V. 80. P. 436–439.
9. Капанадзе Д. В. О граничных значениях решений эллиптических уравнений в полупространстве // Тр. Ин-та вычисл. матем. АН ГССР. 1985. Т. 25. С. 57–66.
10. Willis J. R. A penny-shaped crack on an interface // Quart. J. Mech. Appl. Math. 1972. V. 25. N 3. P. 367–385.
11. Weaver J. Three-dimensional crack analysis // Int. J. Solids Struct. 1977. V. 13. N 4. P. 321–330.
12. Guidera J. T., Lardner B. W. Penny-shaped cracks // J. Elast. 1977. V. 5. N 1. P. 59–73.
13. Willis J. R. Hertzian contact of anisotropic bodies // J. Mech. Phys. Solids. 1966. V. 14. N 3. P. 163–176.
14. Willis J. R. The stress field around an elliptic crack in an anisotropic elastic medium // Int. J. Eng. Sci. 1968. V. 6. N 5. P. 253–263.
15. Крейн И. М. Сингулярные интегралы и дифференциальные свойства функций. М.: Мир, 1973. 343 с.

Москва

Поступила в редакцию  
28.VI.1989