**Расчет энергии взаимодействия ядра стопорной дислокации со скоплением.**

***Паниотов Ю.Н., Прокопенко Н.А.***
*Донецкий национальный технический университет*

Монокристаллы с о.ц.к. решеткой в большинстве своем склонны к хрупкому раскалыванию. Коттреллом [1] был предложен механизм, согласно которому образование трещины происходит в результате взаимодействия пересекающихся систем скольжения. Пара скользящих дислокаций типа $\frac{1}{2}\langle 111\rangle$ вступая в реакцию, образуют стопорную дислокацию $\langle 100\rangle$, перед которыми выстраиваются скопления скользящих. Эффективность этого механизма зависит от устойчивости барьера , которая в немалой степени определяется энергией взаимодействия ядра стопорной дислокации со скоплением.

Как показало машинное моделирование ядро краевой дислокации $\langle 100\rangle$ можно рассматривать как дислокацию Вольтера плюс эллиптический источник расширения (ЭИР), расположенный ниже края экстраплоскости на расстоянии $h$, примерно равном двум векторам Бюргерса. Энергия взаимодействия ЭИР со скоплением определяется выражением:

$$E = -(1-\nu)\delta A\left[\sigma_{xx} + \sigma_{yy} - 2\varpi\sigma_{xy}\right] \quad , \tag{1}$$

Где $\sigma_{ik}$ - напряжения от дислокаций скопления на линии ЭИР, $\nu$ - коэффициент Пуассона, $\delta A$ - параметр расширения,
$\varpi$ - параметр эллиптичности.

Напряжения могут быть найдены методом, предложенным в [2]. Распределение дислокаций в скоплении определятся условием равновесия $j$-той дислокации в скоплении:

$$\frac{(3-\nu)\mu a^2}{8\pi(1-\nu)}\sum_{i\neq j}\frac{1}{x_j - x_i} + \frac{\mu a^2}{4\pi(1-\nu)}\frac{1}{x_j} - \frac{\sigma a}{\sqrt{2}} = 0 \tag{2}$$

где $\mu$ - модуль сдвига,
$a$ - постоянная решетки,
$\sigma$ - приложенные напряжения,
$x_j$ - координата $j$ - той дислокации.

Следуя развитой в [2] методике, приходим к уравнению:

$$xf''(x) + \left(1 + \alpha - \frac{x}{x^*}\right)f'(x) + \frac{n}{x^*}f(x) = 0 \tag{3}$$

решением которого является полином $n$ - ой степени с корнями, совпадающими с $x_j$.

Здесь введены обозначения:

$$\alpha = \frac{1+\nu}{3-\nu}; \qquad x^* = a\frac{\mu}{\sigma}\frac{\sqrt{2}(3-\nu)}{16\pi(1-\nu)} \equiv \frac{\mu a\lambda}{\sigma} \tag{4}$$

Вводя обозначение $t = \frac{x}{x^*}$, приходим к уравнению:

$$tf''(t) + (1+\alpha - t)f'(t) + nf(t) = 0 \tag{5}$$

решение которого – обобщенный полином Лагерра:

$$f(t) = L_n^\alpha(t) \tag{6}$$

Необходимые для вычисления энергии напряжения (см. (1)), с помощью полиномов представляются в виде:

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \frac{8\sigma}{3-\nu}\mathrm{Re}\frac{iL\alpha_{n-1}^{\alpha+1}(w)}{L_n^\alpha(w)}, i = \sqrt{-1}$$

$$2\sigma_{xy} = -\frac{8\sigma}{3-\nu}\mathrm{Re}\left[\frac{L_{n-1}^{\alpha+1}(w)}{L_n^\alpha(w)} + is\left(\frac{L_{n-2}^{\alpha+2}(w) - L_{n-1}^{\alpha+1}(w)}{L_n^\alpha(w)}\right)\right] \tag{7}$$

где $w = t + is = x/x^* + i\, y/x^*$ $\mathrm{Re}$ - означает действительную часть. Напряжения $\sigma_{ik}$ относятся к точке $w = \frac{h}{x^*}e^{\frac{5\pi i}{4}}$. Учитывая малость $h/x^*$ порядка $\sigma/\mu$, для определения $\sigma_{ik}$ можно воспользоваться асимптотикой полиномов Лагерра при малых значениях аргумента [3] :

$$L_n^\alpha(w) = e^{\frac{w}{2}}\frac{\Gamma(1+n+\alpha)}{n!}\left(n + \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2}\right)^{-\frac{\alpha}{2}} w^{-\frac{\alpha}{2}}\left\{J_\alpha(z) + \frac{1+\alpha}{2}\frac{w}{4n+2\alpha+2} \times J_{\alpha+2}(z) + \ldots\right\}, \tag{8}$$

$z = \sqrt{w(4n+2\alpha+1)}$,

где $J_\alpha(z)$ - функция Бесселя, $\Gamma(z)$ - гамма-функция.

Очевидно, при $|w| \prec\prec 1$, отвечающем нашему случаю, можно ограничиться первым членом разложения. Кроме того, можно положить $4n \succ\succ 2\alpha + 2$. В этом случае

$$\frac{L_{n-1}^{\alpha+1}(w)}{L_n^{\alpha}(w)} \approx \sqrt{\frac{n}{w}}\,\frac{J_{\alpha+1}\left(2\sqrt{nw}\right)}{J_{\alpha}\left(2\sqrt{nw}\right)}; \qquad \frac{L_{n-2}^{\alpha+2}(w)}{L_n^{\alpha}(w)} \approx \frac{n}{w}\,\frac{J_{\alpha+2}\left(2\sqrt{nw}\right)}{J_{n}\left(2\sqrt{nw}\right)}$$

(9)

Можно упростить вычисления, если заметить, что при $\nu = 1/3$ параметр $\alpha$ принимает значение $1/2$. В этом случае функции Бесселя выражаются в элементарных функциях (сферические функции Бесселя) [3]:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(w) = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi w}}\, w^{n+1} \frac{d^n}{dw^n}\frac{\sin w}{w} \qquad (10)$$

Отсюда, в частности, следует, что у головы скопления дислокации располагаются эквидистантно с интервалом

$$d = \frac{\pi^2}{4}\frac{\mu a}{\sigma n}. \qquad (11)$$

Из (9) и (10) следует:

$$\frac{L_{n-1}^{\alpha+1}(w)}{L_n^{\alpha}(w)} \approx \sqrt{\frac{n}{w}}\left(\frac{1}{2\sqrt{nw}} - \cot\left(2\sqrt{nw}\right)\right); \frac{L_{n-2}^{\alpha+2}(w)}{L_n^{\alpha}(w)} \approx \frac{n}{w}\left(\frac{3}{4nw} - 1 - \frac{3}{2\sqrt{nw}}\cot\left(2\sqrt{nw}\right)\right)$$

(12)

Таким образом, напряжения в любой точке определены. Вблизи начала координат, где $2\left|\sqrt{nw}\right| \prec\prec 1$

$$\frac{L_{n-1}^{\alpha+1}(w)}{L_n^{\alpha}(w)} \approx \sqrt{\frac{n}{w}}\left(\frac{1}{2\sqrt{nw}} - \left(\frac{1}{\sqrt{4nw}} - \frac{\sqrt{4nw}}{3} - \frac{\left(\sqrt{4nw}\right)^3}{45} - \ldots\right)\right) \approx$$

$$\approx \frac{2}{3}n + \frac{16\sqrt{2}\pi n^2}{45}\frac{\sigma}{\mu}\frac{x+iy}{a} \qquad (13)$$

Если число дислокаций в скоплении таково, что $n \prec\prec \mu a/\sigma h$, то

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \frac{16\sqrt{2}\pi n^2 h \sigma^2}{15\mu a} \qquad (14)$$

При больших скоплениях, когда $n \succ\succ \mu a/\sigma h$, учитывая, что $\cot w$ при $\mathrm{Im}(nw) \succ\succ 1$ равен $-i$, имеем:

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = 3\sqrt{\frac{\mu\sigma a n}{2\sqrt{2}\pi h}}\sin\frac{\pi}{8} = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{\left(\sqrt{2}-1\right)\mu\sigma a n}{2\pi h}}. \qquad (15)$$

Аналогично находим

$$\sigma_{xy} = -n\sigma\left(1 - \frac{8\pi h\sigma}{15\mu a}\right) \approx -n\sigma \tag{16}$$

при $n \prec\prec \mu a / \sigma h$ .

$$\sigma_{xy} = -3\sqrt{\frac{\mu\sigma an}{2\sqrt{2}\pi h}}\sin\frac{5\pi}{8} = -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{\left(\sqrt{2}+1\right)\mu\sigma an}{2\pi h}} \tag{17}$$

при $n \succ\succ \mu a / \sigma h$ .

Энергия взаимодействия ядра стопорной дислокации со скоплением может быть представлена в виде:

$$E = -\frac{2}{3}\mu\delta A \bullet \begin{cases} 16\sqrt{2}\pi n^2\sigma^2 y / 15\mu^2 a; & n \prec\prec \mu a / \sigma h \\ 3\sqrt{\sigma an / 8\pi h\mu}\left(\sqrt{\sqrt{2-1}} + \varpi\sqrt{\sqrt{2}+1}\right) & ; n \succ\succ \mu a / \sigma h \end{cases} \tag{18}$$

Отрицательное значение $E$ указывает на то, что скопление приводит к повышению устойчивости стопора в модели с ЭИР.

*Литература*


1. Cottrell A.H. Theory of brittle fracture in steel and similar metals. – Trans. Met. Soc. AIME, 1958 , v. 212, 192 – 203.
2. Eshelby J.D., Frank F.C., Nabarro F.R.N. The equilibrium of linear arrays of dislocation. – Phil. Mag., 1951, v.42, N.327,351-364.
3. Бейтмен Г., Эрдейи А. – Высшие трансцендентные функции. Том 2. М.,»Наука» 1974.