УДК 539.3

ВНУТРЕННИЕ НАПРЯЖЕНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

С. П. Киселев

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

На основе калибровочной теории дефектов найдены формулы для расчета внутренних напряжений в материале, создаваемых непрерывно распределенными дислокациями. Показано, что внутренние напряжения являются самоуравновешенными, удовлетворяют уравнениям равновесия и граничным условиям при отсутствии внешних нагрузок.

Ключевые слова: внутренние напряжения, дислокации, упругость, граничные условия, уравнения равновесия, калибровочная теория дислокаций.

Внутренние напряжения, создаваемые дефектами, достигают значительной величины и могут оказывать существенное влияние на физико-механические свойства материалов. По этой причине их расчет является актуальной задачей, которой уделяется значительное внимание. Один из первых методов расчета напряжений от точечного дефекта, предложенный Эшелби, состоит в добавлении в правую часть уравнений равновесия объемной силы, пропорциональной производной от тензора пластической деформации [1]. Затем этот метод был обобщен для расчета напряжений от единичной и непрерывно распределенных дислокаций [1]. Однако он является неполным, так как не учитывает вихревую составляющую тензора напряжений, которая тождественно удовлетворяет уравнениям равновесия. В общем случае вихревая компонента тензора напряжений обсуждалась в [2–4], а применительно к непрерывному полю дефектов — в [5, 6].

В данной работе на основе калибровочной теории дефектов изучаются внутренние напряжения, создаваемые непрерывным распределением дислокаций.

Следуя [7], запишем уравнения равновесия твердого тела с непрерывно распределенным полем дислокаций

$$
\begin{gathered}
\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \qquad \tilde S_{ij} - S^r_{ij} = 0, \qquad \tilde S_{ij}\tilde S_{ij} < \frac{2}{3}\,Y_s^2,\\
\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij}, \quad p = -K\varepsilon^e_{kk}, \quad S_{ij} = 2\mu e^e_{ij}, \quad K = \lambda + 2\mu/3,\\
e^e_{ij} = \varepsilon^e_{ij} - \frac{1}{3}\,\varepsilon^e_{kk}\delta_{ij}, \qquad \varepsilon^e_{ij} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\Big) - \varepsilon^p_{ij}, \qquad \varepsilon^p_{ij} = \frac{1}{2}\,(\beta_{ij} + \beta_{ji}), \qquad (1)\\
\tilde S_{ij} = S_{ij} + S'_{ij}, \qquad S'_{ij} = \sigma'_{ij} - \frac{1}{3}\,\sigma'_{kk}\delta_{ij}, \qquad \sigma'_{ij} = -C\varepsilon_{jkl}\,\frac{\partial \alpha_{li}}{\partial x_k}, \qquad \alpha_{ji} = \varepsilon_{jsp}\,\frac{\partial \beta_{pi}}{\partial x_s}.
\end{gathered}
$$

Здесь u_i — компоненты вектора перемещений; σ_{ij}, ε_{ij}, β_{ij}, α_{ij}, S_{ij}, e_{ij} — соответственно тензоры напряжений, деформаций, пластической дисторсии, плотности дислокаций, девиатора напряжений и деформаций; ε_{ijk} — абсолютно антисимметричный тензор Леви —

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования Российской Федерации (грант № Е 02-4.0-224).

Чивиты; δ_{ij} — символ Кронекера; p — давление; K, μ — модули объемного сжатия и сдвига; индексом e обозначены упругие, а p — пластические деформации; по повторяющимся индексам производится суммирование. Граничные условия для системы уравнений (1) имеют вид (см. [7])

$$f_i = \sigma_{ij} n_j, \qquad \varepsilon_{kjl} n_j \alpha_{li} = 0. \tag{2}$$

Из третьего неравенства системы (1) следует, что стационарные решения этой системы уравнений существуют при условии, что девиатор напряжений $\tilde{S}_{ij}$ не выходит на поверхность текучести. В этом случае напряжения $\tilde{S}_{ij}$ уравновешиваются напряжениями трения покоя S^r_{ij} (см. второе уравнение в (1)). Напряжения "сухого" трения S^r_{ij} аналогичны усредненной (по модулю) силе Пайерлса [8], они имеют неупругое происхождение и связаны с атомной структурой кристалла.

Интересно отметить, что в напряжения $\tilde{S}_{ij}$ наряду с "обычными" напряжениями σ_{ij}, определяемыми из закона Гука, входят напряжения σ'_{ij}, однако они не входят в уравнения равновесия (первое уравнение в (1)) и граничные условия (2). Это позволяет предположить, что напряжения σ'_{ij} тождественно удовлетворяют уравнению равновесия и нулевым граничным условиям (2), когда поверхностная сила в каждой точке границы равна нулю $f_i = 0$. Поскольку напряжения σ'_{ij} выражаются через ротор от тензора плотности дислокаций, ниже они будут называться вихревыми и самоуравновешенными. На основе сделанного предположения полные напряжения в упругом материале с дислокациями даются выражением $\tilde{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} + \sigma'_{ij}$, где напряжения σ_{ij} определяются аналогично [1] из уравнений равновесия и закона Гука, а вихревые самоуравновешенные напряжения σ'_{ij} находятся по формуле

$$\sigma'_{ij} = -C\varepsilon_{jkl} \frac{\partial \alpha_{li}}{\partial x_k} = -C\varepsilon_{jkl}\varepsilon_{lsp} \frac{\partial^2 \beta_{pi}}{\partial x_k \, \partial x_s}. \tag{3}$$

Из формулы (3) следует, что тензор σ'_{ij} не является симметричным. Порядок следования индексов в несимметричных тензорах σ'_{ij} и α_{ij} в формуле (3) однозначно определяется из условия инвариантности системы уравнений (1) относительно группы калибровочных преобразований

$$u'_i = u_i + h_i(x_k), \qquad \beta'_{ji} = \beta_{ji} + \frac{\partial h_i(x_k)}{\partial x_j},$$

где $h_i(x_k)$ — произвольная функция координат. Индекс i, связанный с функцией $h_i(x_k)$, называется групповым, а индекс j — пространственным.

Докажем сделанные выше предположения относительно напряжения σ'_{ij}.

Справедливость первого предположения проверяется прямой подстановкой выражения (3) в уравнение равновесия (первое уравнение в системе (1)):

$$\frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial x_j} = -C\varepsilon_{jkl} \frac{\partial^2 \alpha_{li}}{\partial x_j \, \partial x_k} = -C\varepsilon_{kjl} \frac{\partial^2 \alpha_{li}}{\partial x_k \, \partial x_j} = C\varepsilon_{jkl} \frac{\partial^2 \alpha_{li}}{\partial x_k \, \partial x_j} = 0.$$

Третий член в данной цепочке равенств получается из второго заменой повторяющихся индексов $k \leftrightarrow j$, а четвертый — перестановкой индексов k, j в антисимметричном тензоре ε_{kjl}. В результате получается, что четвертый член равен второму с обратным знаком и поэтому равен нулю. Таким образом, показано, что уравнение равновесия удовлетворяется тождественно при подстановке в него напряжений, определяемых формулой (3).

Для проверки второго предположения рассмотрим сначала частный случай, когда тело имеет форму куба. Введем декартову систему координат x_1, x_2, x_3 и поместим ее начало в центр куба, тогда уравнения граней куба будут $x_i = \pm 1$. Используя формулы (1), (2), найдем величину поверхностной силы $f_i = \sigma'_{ij} n_j$ на грани $x_1 = 1$, для которой $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$. Подставляя эти n_i во второе уравнение в (2), получим, что на грани $x_1 = 1$ справедливо: $\alpha_{3i} = \alpha_{2i} = 0$, а α_{1i} — произвольная функция от координат x_i. Дифференцируя первые два соотношения по x_2, x_3, перепишем граничные условия для α_{ij} на грани $x_1 = 1$ в виде

$$\frac{\partial \alpha_{2i}}{\partial x_2} = \frac{\partial \alpha_{2i}}{\partial x_3} = \frac{\partial \alpha_{3i}}{\partial x_2} = \frac{\partial \alpha_{3i}}{\partial x_3} = 0. \tag{4}$$

Подставляя (4) в первое уравнение в (2), с учетом (3) на грани $x_1 = 1$ получим

$$f_i = \sigma'_{ij} n_j = \sigma'_{i1} = -C\Big(\frac{\partial \alpha_{3i}}{\partial x_2} - \frac{\partial \alpha_{2i}}{\partial x_3}\Big) = 0.$$

Аналогичные тождества справедливы для остальных граней куба, откуда следует, что вихревые напряжения σ'_{ij} тождественно удовлетворяют нулевым граничным условиям и являются самоуравновешенными.

Приведем аналогичное доказательство в общем случае для тела, ограниченного произвольной поверхностью. Свяжем с каждой точкой поверхности локальную декартову систему координат так, чтобы в каждой точке ось ξ^1 была направлена вдоль единичного вектора нормали к поверхности $\boldsymbol{n}$. Это можно сделать с помощью параллельного переноса и поворота декартового репера $\boldsymbol{e}_i$ при переходе от точки ξ^i в точку $\xi^i + d\xi^i$. В этом случае вихревые напряжения (3) будут определяться по формуле

$$\hat{\sigma}' = \sigma'^{j}_{i} \boldsymbol{e}_j \boldsymbol{e}^i, \qquad \sigma'^{j}_{i} = -C\varepsilon^{jkl} \nabla_k \alpha_{li} = -\frac{C}{\sqrt{g}}\Big(\frac{\partial \alpha_{li}}{\partial \xi^k} - \frac{\partial \alpha_{ki}}{\partial \xi^l} - \alpha_{ls}\Gamma^s_{ki} - \alpha_{ks}\Gamma^s_{li}\Big), \tag{5}$$

где Γ^k_{ij} — символы Кристоффеля, которые выражаются через производные от метрического тензора g_{ij} [9], $g = \det\|g_{ij}\|$. В координатах ξ^i граничное условие для α_{ij} (см. второе уравнение в (2)) запишется в виде $\varepsilon^{kjl} n_j \alpha_{li} = 0$. Поскольку в каждой точке поверхности $\xi^1 = 0$ вектор нормали имеет компоненты $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$, после подстановки их в граничные условия получим $\alpha_{3i}(\xi^2, \xi^3) = \alpha_{2i}(\xi^2, \xi^3) = 0$, $\alpha_{1i}(\xi^i)$ — произвольная функция координат. Отсюда найдем ковариантные производные на границе

$$\nabla_2 \alpha_{3i} = \frac{\partial \alpha_{3i}}{\partial \xi^2} - \alpha_{3s}\Gamma^s_{i2} - \alpha_{si}\Gamma^s_{32} = -\alpha_{1i}\Gamma^1_{32}, \qquad \nabla_3 \alpha_{2i} = -\alpha_{1i}\Gamma^1_{23}.$$

Подставляя эти производные в (5) и учитывая, что в евклидовом пространстве символы Кристоффеля симметричны по нижним индексам $\Gamma^k_{ij} = \Gamma^k_{ji}$ [9], получим

$$f_i = \sigma'^{j}_{i} n_j = \sigma'^{1}_{i} = -C(\nabla_2 \alpha_{3i} - \nabla_3 \alpha_{2i}) = C\alpha_{1i}(\Gamma^1_{23} - \Gamma^1_{32}) = 0.$$

Данное тождество завершает доказательство того, что напряжения σ'_{ij} являются самоуравновешенными. Из формул (3), (5) следует, что они зависят от девяти произвольных функций α_{ij} либо β_{ij}, которые должны удовлетворять второму граничному условию в (2). Функции $\alpha_{ij}(x_k)$ являются параметрами состояния, их вид определяется из решения нестационарной задачи, описывающей процесс достижения данного стационарного состояния, либо из эксперимента. Функции $\beta_{ij}(x_k)$ не являются параметрами состояния, так как изменяются при калибровочных преобразованиях. Отметим, что функции α_{ij}, σ'_{ij} при калибровочных преобразованиях не изменяются.

В работах [5, 6] развивается геометрический подход к описанию упругого тела с дефектами, основанный на использовании неевклидовой геометрии для поля дисторсии. В [5, 6] была предложена формула для вихревых напряжений

$$\sigma''_{ij} = A\varepsilon_{jlk}\varepsilon_{isp}\frac{\partial \Gamma_{pl.s}}{\partial x_k}, \tag{6}$$

которая тождественно удовлетворяет уравнению равновесия. Найдем поверхностную силу, создаваемую напряжениями (6) на грани куба $x_1 = 1$, для малых деформаций $\beta_{ij} \ll 1$. В этом случае $\Gamma_{ij.k} = \partial\beta_{jk}/\partial x_i$ и $\sigma''_{ij} = A\varepsilon_{ilk}\,\partial\alpha_{jk}/\partial x_l$, откуда с учетом (4) получим $f_i = \sigma''_{i1} = A\varepsilon_{ilk}\,\partial\alpha_{1k}/\partial x_l$. Поскольку α_{1i} — произвольная функция координат x_i, в общем случае $f_i \neq 0$ и напряжения (6) σ''_{ij} не удовлетворяют нулевым граничным условиям. Чтобы удовлетворить граничным условиям, в [5, 6] вводились упругие напряжения, источником которых были силы на поверхности тела, создаваемые вихревыми напряжениями $f''_i = -\sigma''_{ij}n_j$.

Сравним формулу для самоуравновешенных напряжений (3) и формулу (6) из [5, 6]. Для этого сначала обобщим формулу (3) на конечные деформации. В случае декартовых координат тензор плотности дислокаций α_{ij} выражается через тензор кручения поля дисторсии $T_{ij.k}$ по формуле [6] $\alpha_{lk} = \varepsilon_{lij}T_{ij.k}$, где $T_{ij.k} = (\Gamma_{ij.k} - \Gamma_{ji.k})/2$. Подставляя данные соотношения в (3), получим

$$\sigma'_{ij} = C\varepsilon_{jlk}\varepsilon_{lsp}\,\frac{\partial\Gamma_{sp.i}}{\partial x_k}. \tag{7}$$

Видно, что формулы (6), (7) различаются расположением индексов i, j. В формуле (6) оба индекса пространственные, а в (7) индекс j пространственный, а i — групповой.

Формулу для вихревых напряжений можно определить также из условия, что уравнения равновесия не меняются при добавлении напряжений вида $\sigma'_{ij} = \varepsilon_{jkl}\,\partial F_{il}/\partial x_k$. Производящую функцию F_{il} можно представить в виде ротора некоторой другой функции. Формуле (7) соответствует производящая функция $F'_{il} = \varepsilon_{lsp}\Gamma_{sp.i} = \varepsilon_{lsp}\,\partial\beta_{pi}/\partial x_s$, а формуле (6) — $F''_{il} = \varepsilon_{isp}\Gamma_{pl.s} = \varepsilon_{ips}\,\partial\beta_{lp}/\partial x_s$. Представляя тензор дисторсии β_{ij} в виде суммы симметричного ε_{ij} и антисимметричного ω_{ij} тензоров $\beta_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}$, сравним эти производящие функции $F'_{li} = \varphi_{il} - \psi_{il}$, $F''_{il} = -(\varphi_{il} + \psi_{il})$, где $\varphi_{il} = \varepsilon_{isp}\,\partial\varepsilon_{lp}/\partial x_s$, $\psi_{il} = \varepsilon_{isp}\,\partial\omega_{lp}/\partial x_s$. Видно, что если $\varphi_{il}(x_k) \neq 0$, $\psi_{il}(x_k) \neq 0$, производящие функции F'_{il} и F''_{il} будут различны, если одна из функций $\varphi_{il}(x_k)$, $\psi_{il}(x_k)$ тождественно равна нулю, то F'_{il} выражается через F''_{il}. Из проведенного сравнения следует, что из двух функций F'_{il}, F''_{il} в качестве производящей нужно выбрать F'_{il}, поскольку она в отличие от F''_{il} удовлетворяет нулевым граничным условиям (2).

Рассмотрим обратную задачу об определении плотности дислокаций α_{ij} по заданному полю самоуравновешенных напряжений σ'_{ij}. Сначала исследуем частный случай для напряжений σ'_{ij} из работы [3], а затем сделаем обобщения на произвольные самоуравновешенные напряжения σ'_{ij}. В работе [3] построен частный пример самоуравновешенных напряжений в кубе ($-1 \leqslant x_i \leqslant 1$, $i = 1, 2, 3$) в виде

$$\begin{gathered} \sigma'_{11} = \cos\pi x_1 \cos\pi x_2 + \cos\pi x_2, \qquad \sigma'_{22} = \cos\pi x_1 \cos\pi x_2 + \cos\pi x_1, \\ \sigma'_{12} = \sigma'_{21} = \sin\pi x_1 \sin\pi x_2. \end{gathered} \tag{8}$$

Полагая в формуле (3) $C = 1$ и $\alpha_{ij} = \alpha_{ij}(x_1, x_2)$, получим систему уравнений

$$\frac{\partial\alpha_{31}}{\partial x_2} = -\sigma'_{11}, \quad \frac{\partial\alpha_{31}}{\partial x_1} = \sigma'_{12}, \quad \frac{\partial\alpha_{32}}{\partial x_1} = \sigma'_{22}, \quad \frac{\partial\alpha_{32}}{\partial x_2} = -\sigma'_{21}. \tag{9}$$

Используя равенства $\partial^2\alpha_{31}/\partial x_1\,\partial x_2 = \partial^2\alpha_{31}/\partial x_2\,\partial x_1$, $\partial^2\alpha_{32}/\partial x_1\,\partial x_2 = \partial^2\alpha_{32}/\partial x_2\,\partial x_1$ и уравнения (9), найдем условия интегрируемости (9), представляющие собой уравнения равновесия

$$\frac{\partial\sigma'_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial\sigma'_{12}}{\partial x_2} = 0, \qquad \frac{\partial\sigma'_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial\sigma'_{22}}{\partial x_2} = 0. \tag{10}$$

Отсюда следует, что плотность дислокаций однозначно определяется полем самоуравновешенных напряжений, поскольку последние тождественно удовлетворяют уравнениям равновесия. Подставляя соотношения (8) в уравнения (9), найдем плотность дислокаций

$$\alpha_{31} = -(1/\pi)\sin\pi x_2(\cos\pi x_1 + 1), \qquad \alpha_{32} = (1/\pi)\sin\pi x_1(\cos\pi x_2 + 1). \tag{11}$$

Уравнения (11) описывают распределение прямолинейных дислокаций, параллельных оси x_3. На боковых гранях куба $x_1 = \pm 1$, $x_2 = \pm 1$ плотность дислокаций обращается в нуль. Линии дислокаций перпендикулярны верхней и нижней граням куба $x_3 = \pm 1$, а плотность дислокаций на них дается формулами (11). Интегрируя (11), получим, что суммарный вектор Бюргерса на этих гранях равен нулю

$$B_1 = \int\limits_{-1}^{1} dx_2 \int\limits_{-1}^{1} \alpha_{31}\, dx_1 = 0, \qquad B_2 = \int\limits_{-1}^{1} dx_2 \int\limits_{-1}^{1} \alpha_{32}\, dx_1 = 0.$$

Обобщим уравнение (11) для описания периодического распределения плотности дислокаций с нулевым суммарным вектором Бюргерса $B_1 = B_2 = 0$:

$$\begin{gathered} \alpha_{31} = -A\sin m\pi x_2(\cos n\pi x_1 + 1), \qquad \alpha_{32} = A\sin n\pi x_1(\cos m\pi x_2 + 1), \\ n = 2k+1, \quad m = 2l+1. \end{gathered} \tag{12}$$

Подставляя (12) в уравнения (9), найдем самоуравновешенные напряжения

$$\begin{gathered} \sigma'_{11} = Am\pi\cos m\pi x_2(\cos n\pi x_1 + 1), \qquad \sigma'_{22} = An\pi\cos n\pi x_1(\cos m\pi x_2 + 1), \\ \sigma'_{12} = An\pi\sin m\pi x_2 \sin n\pi x_1, \qquad \sigma'_{21} = Am\pi\sin m\pi x_2 \sin n\pi x_1, \\ n = 2k+1, \qquad m = 2l+1. \end{gathered} \tag{13}$$

Непосредственной проверкой легко убедиться, что напряжения (13) тождественно удовлетворяют уравнениям равновесия (10) и граничным условиям $f_1 = \sigma'_{11} = 0$, $f_2 = \sigma'_{21} = 0$ при $x_1 = \pm 1$ и $f_2 = \sigma'_{22} = 0$, $f_1 = \sigma'_{12} = 0$ при $x_2 = \pm 1$.

В общем случае для определения α_{ij} по заданным σ'_{ij} необходимо решить систему трех уравнений в частных производных (3): $C\varepsilon_{lkj}\,\partial\alpha_{li}/\partial x_k = \sigma'_{ij}$. Дифференцируя левую и правую части этого уравнения по x_j, найдем

$$C\varepsilon_{lkj}\,\frac{\partial^2\alpha_{li}}{\partial x_j \partial x_k} = \frac{1}{2}\,C\varepsilon_{lkj}\Big(\frac{\partial^2\alpha_{li}}{\partial x_j\,\partial x_k} - \frac{\partial^2\alpha_{li}}{\partial x_k\,\partial x_j}\Big) = \frac{\partial\sigma'_{ij}}{\partial x_j}.$$

Используя тождество $\partial^2\alpha_{li}/\partial x_j\,\partial x_k = \partial^2\alpha_{li}/\partial x_k \partial x_j$, получим, что для определения α_{ij} напряжения σ'_{ij} должны удовлетворять уравнениям равновесия $\partial\sigma'_{ij}/\partial x_j = 0$. Поскольку самоуравновешенные напряжения σ'_{ij} тождественно удовлетворяют уравнению равновесия, то плотность дислокаций α_{ij} однозначно определяется при интегрировании уравнений в частных производных (3).

В заключение отметим, что, несмотря на то, что вихревые самоуравновешенные напряжения тождественно удовлетворяют уравнениям равновесия и граничным условиям при отсутствии внешних нагрузок, они играют важную роль при упругопластическом деформировании материала. Это связано с тем, что эволюция поля дислокаций в материале происходит под действием полных напряжений $\tilde{\sigma}_{ij}$, куда входят самоуравновешенные напряжения, создаваемые дислокациями.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Де Вит Р.** Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир, 1977.
2. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теория упругости. М.: Наука, 1987.
3. **Годунов С. К.** Элементы механики сплошных сред. М.: Наука, 1978.
4. **Kiselev S. P., Vorozhtsov E. V., Fomin V. M.** Foundations of fluid mechanics with applications. Problem solving using mathematica. Boston etc.: Birkhauser, 1999.
5. **Мясников В. П., Гузев М. А.** Геометрическая модель внутренних самоуравновешенных напряжений в твердых телах // Докл. РАН. 2001. Т. 380, № 5. С. 627–629.
6. **Мясников В. П., Гузев М. А.** Геометрическая структура поля равновесных напряжений сплошной среды // Модели механики сплошной среды: Тр. математического центра им. Н. И. Лобачевского. Казань, 2002. Т. 15. С. 126–151.
7. **Киселев С. П.** Модель упругопластического деформирования материалов на основе калибровочной теории дефектов с учетом диссипации энергии // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 2. С. 177–187.
8. **Косевич А. М.** Дислокации в теории упругости. Киев: Наук. думка, 1978.
9. **Дубровин Б. А., Новиков С. П., Фоменко А. Т.** Современная геометрия: Методы и приложения. М.: Наука, 1986.

Поступила в редакцию 29/XII 2003 г.