

НЕЛОКАЛЬНА І ГРАДІЄНТНА ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ ДО ОПИСУ НЕДОСКОНАЛОСТЕЙ У ТВЕРДИХ ТІЛАХ

Нелокальна теорія пружності враховує сили далекої взаємодії між атомами, при цьому залежність між тензором напружень і тензором деформації є інтегральною. Градієнтна теорія пружності враховує похідні тензора деформації у рівнянні стану для тензора напружень. Піонерські роботи Я. С. Підстригача відіграли важливу роль в обох вказаних теоріях. На відміну від розв'язків, отриманих у рамках класичної теорії пружності, напруження, викликані недосконаlostями в нелокально-пружному середовищі, і деформації у градієнтно-пружному середовищі не містять нефізичних сингулярностей.

1. Вступ. Використовуючи методи термодинаміки нерівноважних процесів і механіки суцільних середовищ, Я. С. Підстригач розробив дифузійну теорію деформації твердих тіл [10]. У цій теорії напружено-деформований стан тіла визначається із системи взаємозв'язаних рівнянь

$$G\Delta \mathbf{u} + (\lambda + G) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} = \beta K \operatorname{grad} \mu - \mathbf{f}, \quad (1)$$

$$B \frac{\partial \mu}{\partial t} + \beta K \frac{\partial \operatorname{tr} \mathbf{e}}{\partial t} = \Lambda \Delta \mu, \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G \mathbf{e} + (\lambda \operatorname{tr} \mathbf{e} - \beta K \mu) \mathbf{I}, \quad (3)$$

$$c = B \mu + \beta K \operatorname{tr} \mathbf{e}, \quad (4)$$

$$\mathbf{e} = \operatorname{Def} \mathbf{u}, \quad (5)$$

де \mathbf{u} – вектор переміщення; \mathbf{f} – вектор об'ємних сил; $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напружень; \mathbf{e} – тензор деформації; μ – хімічний потенціал; c – концентрація; λ і G – сталі Ляме; $K = \lambda + 2G/3$; β – коефіцієнт дифузійного розширення; Λ – коефіцієнт масопровідності; t – час; \mathbf{I} – одиничний тензор; B – термодинамічний коефіцієнт, який пов'язує концентрацію з хімічним потенціалом.

Розглянемо згортку тензорного співвідношення (3):

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma} = 3K (\operatorname{tr} \mathbf{e} - \beta \mu). \quad (6)$$

Продиференціювавши рівність (6) за часом t і подіявши на обидві сторони цієї рівності оператором Лапласа Δ , з рівняння (2) можна виключити хімічний потенціал і отримати реологічне співвідношення

$$\Delta \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma} - n \frac{\partial \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 3 \left(K \Delta \operatorname{tr} \mathbf{e} - n K_c \frac{\partial \operatorname{tr} \mathbf{e}}{\partial t} \right). \quad (7)$$

Вирази для коефіцієнтів, які входять у співвідношення (7), можна знайти у роботах Я. С. Підстригача [17, 19].

Відомо, що при переході від рідини до деформівного твердого тіла замість тиску і густини вводяться тензорні параметри стану – тензори напруження $\boldsymbol{\sigma}$ і деформації \mathbf{e} . При описі масової взаємодії термодинамічних систем при переході від рідини до твердого тіла в багатьох випадках вистачає скалярних хімічного потенціалу і концентрації. Разом з тим при цьому виникає ряд концептуальних труднощів. Зокрема, при введенні відомими способами скалярного хімічного потенціалу для твердих тіл із співвідношень, які при цьому отримуються, у випадку гідростатичного тиску не випливають відповідні співвідношення для рідин. Вказані труднощі вдасть-

ся усунути, ввівши тензорний хімічний потенціал. Вперше ідея про необхідність розгляду в твердих тілах тензорів хімічного потенціалу та концентрації була висунута в роботах Я. С. Підстригача [9, 17, 18]. У подальшому до цієї ідеї різними шляхами прийшло багато дослідників. Детальний огляд цієї проблематики можна знайти в монографіях [2, 20]. Однією з причин, які спонукали Я. С. Підстригача до введення тензорного хімічного потенціалу, був той факт, що реологічне співвідношення (7) отримується тільки для згортки тензора напружень.

Наступним кроком у розвитку теорії була взаємозв'язана система рівнянь [9, 17]

$$G\Delta\mathbf{u} + (\lambda + G)\text{grad div } \mathbf{u} = \beta K \text{grad tr } \boldsymbol{\mu} - \zeta \text{div } \boldsymbol{\mu} - \mathbf{f}, \quad (8)$$

$$B_1 \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial t} + B_2 \frac{\partial \text{tr } \boldsymbol{\mu}}{\partial t} \mathbf{I} - \zeta \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} + \beta K \frac{\partial \text{tr } \mathbf{e}}{\partial t} \mathbf{I} = \Lambda_1 \Delta \boldsymbol{\mu} + \Lambda_2 (\Delta \text{tr } \boldsymbol{\mu}) \mathbf{I}, \quad (9)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G\mathbf{e} + \zeta \boldsymbol{\mu} + (\lambda \text{tr } \mathbf{e} - \beta K \text{tr } \boldsymbol{\mu}) \mathbf{I}, \quad (10)$$

$$\mathbf{c} = B_1 \boldsymbol{\mu} - \zeta \mathbf{e} + (B_2 \text{tr } \boldsymbol{\mu} + \beta K \text{tr } \mathbf{e}) \mathbf{I}, \quad (11)$$

яка узагальнює систему (1)–(4) на випадок тензорного хімічного потенціалу і тензорної концентрації.

Із рівняння (10) можна отримати не тільки співвідношення (6) для згорток введених тензорів, але також і для їх девіаторів, які надалі позначатимемо оператором «dev». Описана вище процедура диференціювання і виключення тензора хімічного потенціалу з рівняння (9) дозволяє отримати реологічні співвідношення для всіх компонент тензора напружень [19]:

$$\Delta \text{tr } \boldsymbol{\sigma} - n \frac{\partial \text{tr } \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 3 \left(K \Delta \text{tr } \mathbf{e} - n K_c \frac{\partial \text{tr } \mathbf{e}}{\partial t} \right), \quad (12)$$

$$\Delta \text{dev } \boldsymbol{\sigma} - m \frac{\partial \text{dev } \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 2 \left(G \Delta \text{dev } \mathbf{e} - m G_c \frac{\partial \text{dev } \mathbf{e}}{\partial t} \right). \quad (13)$$

Розглянемо рівняння (12) і (13) у нескінченному середовищі й застосуємо до них інтегральне перетворення Лапласа за часом t та інтегральне перетворення Фур'є за просторовими координатами. Обчисливши відповідні інтеграли і використавши теореми про згортку, отримаємо нелокальні співвідношення [19]

$$\begin{aligned} \text{tr } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) &= \\ &= 3K_c \text{tr } \mathbf{e}(\mathbf{x}, t) + \frac{K - K_c}{nK_c} \int_0^t \int_V \gamma_n(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, t - t') \text{tr } \mathbf{e}(\mathbf{x}', t') dV(\mathbf{x}') dt', \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \text{dev } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) &= \\ &= 2G_c \text{dev } \mathbf{e}(\mathbf{x}, t) + \frac{G - G_c}{mG_c} \int_0^t \int_V \gamma_m(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, t - t') \text{dev } \mathbf{e}(\mathbf{x}', t') dV(\mathbf{x}') dt', \end{aligned} \quad (15)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma_n(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, t - t') &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{k/2}} \frac{n^{k/2+1}}{2(t - t')^{k/2+1}} \left(k - \frac{n|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{t - t'} \right) \exp\left(- \frac{n|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{t - t'} \right), \end{aligned} \quad (16)$$

а вираз для γ_m отримуємо з (16) заміною коефіцієнта n на коефіцієнт m . Параметр k відповідає розмірності розглядуваного простору.

2. Нелокальні та градієнтні теорії. У випадку просторової нелокальності тензор напружень $\boldsymbol{\sigma}$ у даній точці простору \mathbf{x} в момент часу t залежить від тензора деформації \mathbf{e} в усіх точках тіла у той самий момент часу (для зручності подальші співвідношення будемо записувати окремо для кульової і девіаторної частин тензорів):

$$\text{tr } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_V \alpha_1(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \text{tr } \mathbf{e}(\mathbf{x}', t) dV(\mathbf{x}'), \quad (17)$$

$$\text{dev } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_V \alpha_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \text{dev } \mathbf{e}(\mathbf{x}', t) dV(\mathbf{x}'). \quad (18)$$

Для матеріалів з часовою нелокальністю маємо

$$\text{tr } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \beta_1(t - t') \text{tr } \mathbf{e}(\mathbf{x}, t') dt', \quad (19)$$

$$\text{dev } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \beta_2(t - t') \text{dev } \mathbf{e}(\mathbf{x}, t') dt'. \quad (20)$$

При одночасному розгляді ефектів пам'яті та просторової нелокальності отримуємо

$$\text{tr } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \int_V \gamma_1(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, t - t') \text{tr } \mathbf{e}(\mathbf{x}', t') dV(\mathbf{x}') dt', \quad (21)$$

$$\text{dev } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \int_V \gamma_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, t - t') \text{dev } \mathbf{e}(\mathbf{x}', t') dV(\mathbf{x}') dt'. \quad (22)$$

У роботах Я. С. Підстригача [19], Е. Кренера [57, 59], І. А. Куніна [4, 5], А. Ерінгена [37], Д. Еделена [33] були запропоновані різні версії нелокальної теорії пружності. Загальні властивості ядер нелокальності були детально проаналізовані в роботах [40, 41, 72], де також подано кілька конкретних виразів для цих ядер, зокрема, подібних до ядер (16). Методами теорії груп модулі нелокальності досліджувалися у роботі [69]. Слід підкреслити, що результати Я. С. Підстригача дозволяють дати ядрам нелокальності фізичну інтерпретацію у термінах дифузійних процесів.

Градієнтні теорії пружності також можна поділити на три групи:

– в'язкопружні середовища з часовою градієнтністю

$$\text{tr } \boldsymbol{\sigma} = F_1 \left(\text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial t} \text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial t^2} \text{tr } \mathbf{e}, \dots \right), \quad (23)$$

$$\text{dev } \boldsymbol{\sigma} = F_2 \left(\text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial t} \text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial t^2} \text{dev } \mathbf{e}, \dots \right); \quad (24)$$

– середовища з просторовою градієнтністю

$$\text{tr } \boldsymbol{\sigma} = \Phi_1 \left(\text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial x_i} \text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \text{tr } \mathbf{e}, \dots \right), \quad (25)$$

$$\text{dev } \boldsymbol{\sigma} = \Phi_2 \left(\text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial x_i} \text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \text{dev } \mathbf{e}, \dots \right); \quad (26)$$

– середовища з часовою і просторовою градієнтністю

$$\text{tr } \boldsymbol{\sigma} = \Psi_1 \left(\text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial t} \text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial x_i} \text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial t^2} \text{tr } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \text{tr } \mathbf{e}, \dots \right), \quad (27)$$

$$\text{dev } \boldsymbol{\sigma} = \Psi_2 \left(\text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial t} \text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial}{\partial x_i} \text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial t^2} \text{dev } \mathbf{e}, \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \text{dev } \mathbf{e}, \dots \right). \quad (28)$$

Підкреслимо, що реологічні співвідношення (12), (13), отримані Я. С. Підстригачем, дозволяють дати деяким коефіцієнтам у градієнтних рівняннях стану фізичну інтерпретацію в термінах дифузійних ефектів.

3. Моделі недосконалостей у твердих тілах. Реальні кристалічні матеріали завжди містять велику кількість недосконалостей кристалічної ґратки – точкових дефектів, дислокацій, дисклінацій, тріщин, включень, порожнин тощо. У пружному середовищі вказані недосконалості, як правило, моделюють певним розподілом зосереджених сил або певним розподілом тензора несумісності деформації.

Розв'язки, отримані в рамках класичної теорії пружності, є коректними тільки на деякій відстані від дефекту, але не можуть бути використані на малих відстанях від недосконалості, оскільки містять нефізичні сингулярності. Тому були запропоновані різні теорії, які б дозволили обійти цю трудність і отримати фізично більш обґрунтовані результати.

Найпростішою моделлю точкового дефекту в пружному континуумі є центр дилатації. Розглядалися також більш складні мультипольні моделі [21, 58]. Було запропоновано суто дискретний метод розрахунку збурення ґратки, викликаного одиничною вакансією. Сучасний стан досліджень з комп'ютерного моделювання точкових дефектів у твердих тілах проаналізовано в [52, 83].

Детальний огляд досліджень, присвячених комп'ютерному моделюванню ядра дислокації у рамках дискретних моделей кристалічної ґратки, наведено в [29]. Відповідних досліджень для дисклінацій в літературі майже немає, можемо вказати тільки статті [6, 30]. В останні роки появилось багато досліджень тріщин у рамках атомних моделей. В апроксимації статичної ґратки [87] розглядається скінченна кількість атомів, які взаємодіють між собою з дуже ідеалізованими міжатомними потенціалами. З точки зору ідеалізованої геометрії і міжатомних сил, ця модель дуже грубо відображає властивості середовища, оскільки не конкретизує кристалічний матеріал. У молекулярно-динамічному підході [84] диференціальні рівняння руху розв'язують числовим методом для достатньо великої кількості атомів, які взаємодіють між собою із заданим потенціалом. При цьому постає питання: якою великою повинна бути кількість атомів, щоб відобразити властивості відповідної безмежної системи? Обидві вказані моделі розглядають тільки одновимірний і двовимірний випадки, оскільки навіть за наявності сучасних комп'ютерів змоделювати тріщини у тривимірному середовищі не вдається.

Дискретні моделі висвітлюють деякі фізичні аспекти проблеми, але потребують великого об'єму обчислень, зокрема при кожній зміні параметрів матеріалу. У зв'язку з цим було розроблено декілька підходів до моделювання недосконалостей кристалу, які поєднують методи, властиві теорії пружності, і методи дискретної теорії кристалічної ґратки. Першими спробами такого типу були дислокаційні моделі Френкеля – Конторової [3] і Пайерлса – Набарро [67, 70] і різні їх узагальнення, які детально висвітлені в літературі [22, 65, 68]. У моделях Френкеля – Конторової та Пайерлса – Набарро розглядаються тільки прямолінійні дислокації; при ускладненні геометрії або розгляді інших типів дефектів треба залучати інші підходи. Запропоновано також різні узагальнені моделі тріщин, наприклад, Леонова – Панасюка [8], Дагдейла [32], Баренблатта [1]. Ці моделі розроблено виключно для тріщин, і їх не вдається застосувати для опису інших типів дефектів.

При використанні напівдискретного підходу частину кристалу, що містить недосконалисть, моделюють дискретною ґраткою, іншу частину описують рівняннями теорії пружності. Різні версії напівдискретного методу для точкових дефектів описано в [64]. Запропоновано удосконалену версію напівдискретного методу, в якій кристал розбивають на три області: дискретну, пружну та перехідну. У дискретній області атоми поблизу дефек-

ту вважають класичними частинками, розглядають індивідуальні переміщення атомів, а потенціальну енергію розраховують з використанням потенціалів взаємодії. У проміжній області переміщення атомів визначаються полем пружного переміщення, а енергія – потенціалом взаємодії. Нарешті, у пружній області як переміщення, так і енергію розраховують у рамках теорії пружності. Характерною трудністю цього підходу є проблема вибору розміру кристалічної області, оскільки наперед невідомо, які повинні бути розміри дискретної області. У той же час кількість і складність рівнянь, що описують поведінку атомів у дискретній області, дуже швидко зростають зі збільшенням цієї області. Крім того, на границі між дискретною областю і пружним континуумом повинні виконуватися деякі граничні умови, які не так просто сформулювати. Детально переваги і недоліки гібридного підходу проаналізовано в роботах [21, 31, 45, 53]. Гібридний підхід використовується також у роботі [54], де розглядається комбінована схема скінченних елементів і атомної ґратки. У цій схемі дискретна область міститься у континуумі скінченних елементів з двошаровою перехідною зоною, у якій ґратка і континуум скінченних елементів перекриваються. У внутрішньому перехідному шарі кристалічна ґратка нав'язує граничні умови для континууму, у зовнішньому перехідному шарі атоми рухаються відповідно до скінченно-елементного розв'язку.

Для моделювання недосконалостей кристалічної ґратки останнім часом успішно застосовували як нелокальну, так і градієнтну теорії пружності.

4. Ключові рівняння і методи розв'язування задач нелокальної та градієнтної теорій пружності. Система ключових рівнянь просторово нелокальної теорії пружності містить

– рівняння рівноваги

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_{N1} = - \mathbf{F}, \quad (29)$$

– рівняння стану

$$\boldsymbol{\sigma}_{N1}(\mathbf{x}) = \int_V \alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \eta) [\lambda \operatorname{tr} \mathbf{e}(\mathbf{x}') \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{e}(\mathbf{x}')] dV(\mathbf{x}'), \quad (30)$$

– геометричні співвідношення

$$\mathbf{e} = \operatorname{Def} \mathbf{u}, \quad (31)$$

– неоднорідне рівняння сумісності

$$\operatorname{Inc} \mathbf{e}^p = \boldsymbol{\eta}. \quad (32)$$

Тут \mathbf{e}^p – тензор пластичної деформації; $\boldsymbol{\eta}$ – тензор несумісності деформації; індекс «N1» вказує на те, що розглядаються нелокальні напруження. Крім того, повинно виконуватися співвідношення [56, 73]

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \int_V \alpha(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \mathbf{f}(\mathbf{x}') dV(\mathbf{x}').$$

У цій роботі будемо розглядати такі двовимірні

$$\alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, c_{N1}) = \frac{1}{2\pi c_{N1}^2} K_0 \left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{c_{N1}} \right) \quad (33)$$

і тривимірні

$$\alpha(|x - x'|, \xi) = \frac{1}{8(\pi\xi)^{3/2}} \exp \left(- \frac{|x - x'|^2}{4\xi} \right) \quad (34)$$

ядра нелокальності. Тут $K_0(x)$ – функція Макдональда, c_{N1} і ξ – деякі сталі, фізичний зміст яких наведено в роботах [40, 41].

У градієнтній теорії пружності, запропонованій у роботах Е. Айфантіса, рівняння стану для тензора напружень приймають у вигляді [25]

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \operatorname{tr} \mathbf{e} \mathbf{I} + 2G \mathbf{e} - c_g^2 \Delta [\lambda \operatorname{tr} \mathbf{e} \mathbf{I} + 2G \mathbf{e}], \quad (35)$$

де c_g – стала, яка описує градієнтні властивості середовища.

4.1. Безпосереднє інтегрування розв'язку відповідної задачі локальної теорії пружності. Слід підкреслити, що рівняння (30) записано в інваріантній тензорній формі. У декартових координатах інтегрування можна проводити безпосередньо. У випадку криволінійних координат треба спочатку від компонент тензора напружень $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}')$ у криволінійних координатах у точці \mathbf{x}' перейти до декартових компонент у цій точці, зінтегрувати і після цього перейти від декартових компонент тензора напружень $\boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}}(\mathbf{x})$ у точці \mathbf{x} до компонент цього тензора у криволінійних координатах у цій точці. Підкреслимо, що навіть для найпростіших ядер типу (34) при застосуванні цього методу необхідно обчислювати дуже складні інтеграли.

4.2. Зведення задач нелокальної теорії пружності до розв'язування рівнянь дифузії і Гельмгольца. Ядро нелокальності (34) є фундаментальним розв'язком оператора дифузії [60]

$$\frac{\partial \alpha(|\mathbf{x}|, \xi)}{\partial \xi} - \Delta \alpha(|\mathbf{x}|, \xi) = \delta(x) \delta(y) \delta(z) \delta(\xi). \quad (36)$$

При певних додаткових обмеженнях з рівняння стану (30) для тензора нелокальних напружень і рівняння (36) випливає, що тензор $\boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}}$ задовольняє рівняння дифузії

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}}}{\partial \xi} - \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}} = 0 \quad (37)$$

при «початковій» умові

$$\xi = 0: \quad \boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}} = \boldsymbol{\sigma}, \quad (38)$$

де $\boldsymbol{\sigma}$ – розв'язок відповідної локальної задачі теорії пружності. Підкреслимо, що параметр ξ у рівнянні (37) формально є подібним до часу, але в дійсності з часом не має нічого спільного, а є параметром нелокальності.

Тоді з (37) і (38) випливає, що

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{Nl}} - s \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{Nl}} = -\boldsymbol{\sigma}, \quad (39)$$

де рискою позначено інтегральне перетворення Лапласа за параметром ξ ; s – параметр цього перетворення.

Оскільки у двовимірному випадку функція Макдональда є фундаментальним розв'язком рівняння Гельмгольца [60]

$$\frac{1}{2\pi} \left(\Delta - \frac{1}{c_{\text{Nl}}^2} \right) K_0 \left(\frac{r}{c_{\text{Nl}}} \right) = \delta(x) \delta(y), \quad (40)$$

то для ядра нелокальності (33) з рівнянь (30) і (40) отримуємо неоднорідне рівняння Гельмгольца

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}} - \frac{1}{c_{\text{Nl}}^2} \boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}} = -\frac{1}{c_{\text{Nl}}^2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (41)$$

4.3. Використання тензора функцій напружень. За відсутності об'ємних сил так само, як у випадку класичної теорії пружності [58], рівняння рівноваги (29) для тензора нелокальних напружень $\boldsymbol{\sigma}_{\text{Nl}}$ можна задовольнити тотожно, ввівши тензор функцій напружень

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}_{\text{NI}}}{2\mu} = \Delta \boldsymbol{\chi} + \frac{1}{1-\nu} [\nabla \nabla (\text{tr } \boldsymbol{\chi}) - (\Delta \text{tr } \boldsymbol{\chi}) \mathbf{I}] \quad (42)$$

при додатковій умові

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\chi} = 0, \quad (43)$$

де ν – коефіцієнт Пуассона.

Легко показати, що тензор $\boldsymbol{\chi}$ задовольняє рівняння

$$(\Delta - s) \Delta^2 \bar{\boldsymbol{\chi}} = -\boldsymbol{\eta}. \quad (44)$$

4.4. Використання подання Буссінеска – Гальоркіна. При нульовому тензорі несумісності, але за наявності об'ємних сил, так само, як у випадку класичної теорії пружності [7], зручно скористатися з подання вектора переміщення \mathbf{u} через вектор Буссінеска – Гальоркіна \mathbf{w} :

$$2\mu \mathbf{u} = 2(1-\nu)\Delta \mathbf{w} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{w}). \quad (45)$$

Тоді поле тензора напружень $\boldsymbol{\sigma}_{\text{NI}}$ визначається за такою формулою:

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{NI}} = (\nu \mathbf{I} \Delta - \nabla \nabla) \nabla \cdot \mathbf{w} + (1-\nu) \Delta (\nabla \mathbf{w} + \mathbf{w} \nabla), \quad (46)$$

а вектор \mathbf{w} задовольняє рівняння

$$(\Delta - s) \Delta^2 \bar{\mathbf{w}} = -\frac{1}{1-\nu} \mathbf{f}. \quad (47)$$

4.5. Зведення задач градієнтної теорії пружності до розв'язування рівняння Гельмгольца. У роботі [82] було показано, що при виконанні певних умов розв'язування крайових задач градієнтної теорії пружності можна звести до розв'язування неоднорідного рівняння Гельмгольца для тензора деформації

$$\nabla^2 \mathbf{e}_g - \frac{1}{c_g^2} \mathbf{e}_g = -\frac{1}{c_g^2} \mathbf{e}. \quad (48)$$

Відмітимо «дуальність» рівнянь (41) для тензора нелокальних напружень і рівняння (48) для тензора градієнтної деформації.

5. Недосконалість в нелокальному та градієнтному середовищах. Нелокальна теорія пружності виявилась ефективною при усуненні нефізичних сингулярностей тензора напружень, зумовлених точковими дефектами [4, 14, 55, 56, 90, 91], дислокаціями [11, 13, 15, 16, 35, 39, 41, 46, 74–78, 80], дисклінаціями [13, 79, 81], тріщинами [36, 44], зосередженими силами [13, 26, 73], у контактних задачах [27, 43] тощо. Градієнтна теорія пружності довела свою ефективність в усуненні нефізичних сингулярностей тензора деформації при дослідженні дислокацій [49–51], дисклінацій [48] і тріщин [25, 88].

Як приклад наведемо ненульові компоненти тензора напружень, зумовлених прямолінійною клинковою дисклінацією з вектором Франка Ω у нелокально пружному середовищі, – розв'язок рівняння (41) у циліндричних координатах [79]:

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{G\Omega}{2\pi(1-\nu)} \left[\ln r + \frac{\nu}{1-2\nu} + K_0 \left(\frac{r}{c_{\text{NI}}} \right) - K_2 \left(\frac{r}{c_{\text{NI}}} \right) + \frac{2c_{\text{NI}}^2}{r^2} \right], \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{G\Omega}{2\pi(1-\nu)} \left[\ln r + \frac{1-\nu}{1-2\nu} + K_0 \left(\frac{r}{c_{\text{NI}}} \right) + K_2 \left(\frac{r}{c_{\text{NI}}} \right) - \frac{2c_{\text{NI}}^2}{r^2} \right]. \end{aligned} \quad (49)$$

Напруження, що описуються формулами (49), не містять нефізичних сингулярностей на лінії дисклінації при $r = 0$. Як цікавий факт відмітимо, що неоднорідне рівняння Гельмгольца типу (41) отримується також з інших

фізичних міркувань (з іншою структурною сталою c) у калібрувальній теорії дефектів [61–63]. Очевидно, що відповідні вирази для напружень у роботах [62, 63] після заміни структурних сталих співпадають з результатами [79] (так само, як відповідні вирази для компонент тензора деформації в [48] – розв’язки рівняння (48) – безпосередньо отримуються з формул (49) для клинної дисклінації і відповідних формул [79] для дисклінації скруту).

Відзначимо також сучасні спроби поєднати різні моделі: дискретний і континуальний підходи [85, 86], напівдискретний підхід і модель Пайерлса – Набарро [28], дислокацію Пайерлса – Набарро з нелокальністю [66, 71], нелокальний і градієнтний підходи [47, 89]. Рекомендуємо читачеві оглядові роботи [12, 23, 24, 34, 42], підсумкову монографію [38] і матеріали симпозіуму «Nonlocal and Interactive Media» (Pennsylvania State University, October 13–16, 2002), присвяченого 80-річчю одного з творців нелокальної теорії пружності А. Ерінгена. Вказані матеріали опубліковано у спеціальному випуску журналу «International Journal of Engineering Science» (2003, No. 3–5).

1. Баренблатт Г. И. Математическая теория равновесных трещин, образующихся при хрупком разрушении // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1961. – № 4. – С. 3–56.
2. Гринфельд М. А. Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. – М.: Наука, 1990. – 312 с.
3. Конторова Т. А., Френкель Я. И. К теории пластической деформации и двойникования // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1938. – 8, № 1. – С. 89–95.
4. Косилова В. Г., Кунин И. А., Соснина Э. Г. Взаимодействие точечных дефектов с учетом пространственной дисперсии // Физика твердого тела. – 1968. – 10, № 2. – С. 367–374.
5. Кунин И. А. Теория упругих сред с микроструктурой. Нелокальная теория упругости. – М.: Наука, 1973. – 300 с.
6. Михайлин А. И., Романов А. Е. Аморфизация ядра дисклинации // Физика твердого тела. – 1986. – 28, № 2. – С. 601–603.
7. Новацкий В. Теория упругости. – М.: Мир, 1981. – 800 с.
8. Панасюк В. В. Механика квазихрупкого разрушения материалов. – Киев: Наук. думка, 1991. – 416 с.
9. Підстригач Я. С. Диференціальні рівняння задачі термодифузії в твердому деформованому ізотропному тілі // Доп. АН УРСР. – 1961. – № 2. – С. 169–172.
10. Підстригач Я. С. Диференціальні рівняння дифузійної теорії деформації твердого тіла // Доп. АН УРСР. – 1963. – № 3. – С. 336–340.
11. Повстенко Ю. З. Кругова дислокаційна петля обертання в нелокально-пружному середовищі // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1995. – Вип. 38. – С. 95–98.
12. Повстенко Ю. З. Нелокальна теорія пружності та її застосування до опису дефектів у твердих тілах // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1998. – 41, № 1. – С. 90–96.
13. Повстенко Ю. З. Прямолінійні дислокації, дисклінації і зосереджені сили в нелокально пружному середовищі // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2001. – 44, № 1. – С. 124–129.
14. Повстенко Ю. З. Точковий дефект в нелокально-пружному середовищі // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1998. – 41, № 3. – С. 85–89.
15. Повстенко Ю. З., Матковський О. А. Гвинтова дислокація в нелокально-пружному середовищі з моментними напруженнями // Доп. НАН України. – 1995. – № 10. – С. 57–60.
16. Повстенко Ю. З., Матковський О. А. Крайова дислокація в нелокально-пружному середовищі з моментними напруженнями // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1997. – 40, № 3. – С. 98–102.
17. Подстригач Я. С. Диффузионная теория деформации изотропной сплошной среды // Вопр. механики реального твердого тела. – 1964. – Вып. 2. – С. 77–99.
18. Подстригач Я. С. Диффузионная теория неупругости металлов // Журн. прикл. механики и техн. физики. – 1965. – № 2. – С. 67–72.
19. Подстригач Я. С. Об одной нелокальной теории деформирования твердых тел // Прикл. механика. – 1967. – 3, № 2. – С. 71–76.
20. Подстригач Я. С., Повстенко Ю. З. Введение в механику поверхностных явлений в деформируемых твердых телах. – Киев: Наук. думка, 1985. – 200 с.

21. Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. – М.: Мир, 1985. – 352 с.
22. Хурт Дж., Ломе И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
23. Aifantis E. C. On the role of gradients on the localization of deformation and fracture // *Int. J. Engng. Sci.* – 1992. – **30**, No. 10. – P. 1279–1299.
24. Aifantis E. C. Update on a class of gradient theories // *Mech. Mater.* – 2003. – **35**, No. 3–5. – P. 259–280.
25. Altan S. B., Aifantis E. C. On the structure of the mode-III crack-tip in gradient elasticity // *Scripta Metall. Mater.* – 1992. – **26**, No. 2. – P. 319–324.
26. Artan R. Nonlocal elastic half plane loaded by a concentrated force // *Int. J. Engng. Sci.* – 1996. – **34**, No. 8. – P. 943–950.
27. Artan R., Yelkenci T. Rectangular rigid stamp on a nonlocal elastic half-plane // *Int. J. Solids and Struct.* – 1996. – **33**, No. 4. – P. 3577–3586.
28. Bulatov V., Kaziras E. Semidiscrete variational Peierls framework for dislocation core properties // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – **78**, No. 22. – P. 4221–4224.
29. *Dislocations* // C. r. Colloq. Int. CNRS Dislocations: Structure de coeur et proprietes physiques. – Paris, 1984.
30. Doyama M., Cotteril R. M. J. Atomic configurations of disclinations by computer simulation // *Phil. Mag.* – 1984. – **50**, No. 4. – P. L7–L10.
31. Duesbery M. S. Modeling of the dislocation core // *Dislocations in Solids.* – Vol. 8: Basic Problems and Applications. – Amsterdam: North-Holland, 1989. – P. 67–173.
32. Dugdale D. A. Yielding of steel sheets containing slits // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 1960. – **8**, No. 1. – P. 100–104.
33. Edelen D. G. B. Nonlocal field theories // *Continuum Phys.* – 1976. – **4**. – P. 75–204.
34. Engelbrecht J., Braun M. Nonlinear waves in nonlocal media // *Appl. Mech. Rev.* – 1998. – **51**, No. 8. – P. 475–488.
35. Eringen A. C. Edge dislocation in nonlocal elasticity // *Int. J. Engng. Sci.* – 1977. – **15**, No. 3. – P. 177–183.
36. Eringen A. C. Line crack subject to shear // *Int. J. Fracture.* – 1978. – **14**, No. 4. – P. 367–379.
37. Eringen A. C. Linear theory of nonlocal elasticity and dispersion of plane waves // *Int. J. Engng. Sci.* – 1972. – **10**, No. 5. – P. 425–435.
38. Eringen A. C. Nonlocal continuum field theories. – Berlin: Springer-Verlag, 2002. – 376 p.
39. Eringen A. C. On continuous distribution of dislocations in nonlocal elasticity // *J. Appl. Phys.* – 1984. – **56**, No. 10. – P. 2675–2680.
40. Eringen A. C. On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocations and surface waves // *J. Appl. Phys.* – 1983. – **54**, No. 9. – P. 4703–4710.
41. Eringen A. C. Screw dislocation in nonlocal elasticity // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1977. – **10**, No. 5. – P. 671–678.
42. Eringen A. C. Vistas of nonlocal continuum physics // *Int. J. Engng. Sci.* – 1992. – **30**, No. 10. – P. 1551–1565.
43. Eringen A. C., Balta F. Penetration of a half space by a rectangular cylinder // *Trans. ASME. J. Appl. Mech.* – 1979. – **46**, No. 3. – P. 587–591.
44. Eringen A. C., Speciale C. G., Kim B. S. Crack-tip problem in nonlocal elasticity // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 1977. – **25**, No. 5. – P. 339–355.
45. Finnis M. W. Interatomic forces and the simulation of cracks // *Chemistry and Phys. Fract.* – Dordrecht: Martinus Nijhoff Publ., 1987. – P. 177–194.
46. Gao F. Screw dislocation in a bi-medium in non-local elasticity // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1990. – **23**, No. 3. – P. 328–333.
47. Geers M. G. D., Peerlings R. H. J., Brekelmans W. A. M., De Borst R. Phenomenological nonlocal approaches based on implicit gradient-enhanced damage // *Acta Mech.* – 2000. – **144**, No. 1. – P. 1–15.
48. Gutkin M. Yu., Aifantis E. C. Dislocations and disclinations in gradient elasticity // *Phys. Status Solidi b. Basic research.* – 1999. – **214**, No. 2. – P. 245–283.
49. Gutkin M. Yu., Aifantis E. C. Dislocations in the theory of gradient elasticity // *Scripta Mater.* – 1999. – **40**, No. 5. – P. 559–566.
50. Gutkin M. Yu., Aifantis E. C. Edge dislocation in gradient elasticity // *Scripta Mater.* – 1997. – **36**, No. 1. – P. 129–135.
51. Gutkin M. Yu., Aifantis E. C. Screw dislocation in gradient elasticity // *Scripta Mater.* – 1996. – **35**, No. 11. – P. 1353–1358.
52. Harding J. H. Computer simulation of defects in ionic solids // *Rept. Progr. Phys.* – 1990. – **53**, No. 11. – P. 1403–1466.

53. *Hoagland R. G., Dan M. S., Hirth J. P.* Some aspects of forces and fields in atomic models of crack tips // *J. Mater. Res.* – 1991. – **6**, No. 12. – P. 2565–2777.
54. *Kohlhoff S., Gumbsch P., Fischmeister H. F.* Crack propagation in b.c.c. crystals studied with a combined finite-element and atomistic model // *Phil. Mag. A.* – 1991. – **64**, No. 4. – P. 851–878.
55. *Kovács I.* Nonlocal elastic interactions between point defects and dislocations // *Arch. Mech.* – 1981. – **33**, No. 6. – P. 901–908.
56. *Kovács I., Vörös G.* Lattice defects in nonlocal elasticity // *Phys. B.* – 1979. – **96**, No. 1. – P. 111–115.
57. *Kröner E.* Elasticity theory of metals with long range cohesive forces // *Int. J. Solids and Struct.* – 1967. – **3**, No. 5. – P. 731–742.
58. *Kröner E.* *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen.* – Berlin: Springer, 1958. – 180 S.
59. *Kröner E., Datta B. K.* Nichtlokale Elastostatik: Ableitung aus der Gittertheorie // *Z. Phys.* – 1966. – **196**, No. 3. – S. 203–211.
60. *Kythe P. K.* *Fundamental solutions for differential operators and applications.* – Boston: Birkhäuser, 1996. – 410 p.
61. *Lasar M.* Dislocations in the field theory of elastoplasticity. – Leipzig, 2003. – 11 p. – (Prepr. / Max Planck Inst. for Mathematics in the Sciences; No. 37).
62. *Lasar M.* Twist disclination in the field theory of elastoplasticity. – Leipzig, 2003. – 20 p. – (Prepr. / Max Planck Inst. for Mathematics in the Sciences; No. 36).
63. *Lasar M.* Wedge disclination in the field theory of elastoplasticity // *Phys. Lett. A.* – 2003. – **311**, No. 4–5. – P. 416–425.
64. *Lidiard A.* The Mott-Littleton method: an introductory survey // *J. Chem. Soc. Faraday Trans. Pt. 2.* – 1989. – **85**, No. 5. – P. 341–349.
65. *Miller R., Phillips R.* Critical analysis of local constitutive models for slip and decohesion // *Phil. Mag. A.* – 1996. – **73**, No. 4. – P. 803–828.
66. *Miller R., Phillips R., Beltz G., Ortiz M.* A non-local formulation of the Peierls dislocation model // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 1998. – **46**, No. 10. – P. 1845–1867.
67. *Nabarro F. R. N.* Dislocations in a simple cubic lattice // *Proc. Phys. Soc. London.* – 1947. – **59**, No. 332. – P. 256–272.
68. *Ngan A. H. W.* A generalized Peierls-Nabarro model for non-planar screw dislocation cores // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 1997. – **45**, No. 6. – P. 903–921.
69. *Özer T.* On the symmetry group properties of equations of nonlocal elasticity // *Mech. Res. Commun.* – 1999. – **26**, No. 6. – P. 725–733.
70. *Peierls R. E.* The size of a dislocation // *Proc. Phys. Soc. London.* – 1940. – **52**, No. 289. – P. 34–37.
71. *Picu R. C.* On the functional form of non-local elasticity kernels // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 2002. – **50**, No. 9. – P. 1923–1939.
72. *Picu R. C.* The Peierls stress in non-local elasticity // *J. Mech. and Phys. Solids.* – 2002. – **50**, No. 4. – P. 717–735.
73. *Povstenko Y. Z.* Axisymmetric ring loading in nonlocal elastic space // *Int. J. Engng. Sci.* – 2001. – **39**, No. 3. – P. 285–302.
74. *Povstenko Y. Z.* Circular dislocation loops in non-local elasticity // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1995. – **28**, No. 1. – P. 105–111.
75. *Povstenko Y. Z.* Imperfections in nonlocal elasticity // *J. Physique.* – 1998. – **8**, No. 8. – P. 309–316.
76. *Povstenko Y. Z.* Imperfections in nonlocal elasticity // *Proc. 2nd Europ. Conf. «Mechanics of materials with intrinsic length scale».* – Magdeburg, 1998. – P. 299–306.
77. *Povstenko Y. Z.* Modelling of crystal imperfections in non-local elastic continuum // *Multiple Scale Anal. and Coupled Phys. Syst.: Saint-Venant Symp.* – Paris: Press de l'école nat. des ponts et chaussées, 1997. – P. 535–542.
78. *Povstenko Y. Z.* Non-local equations in mathematics and physics. Theory of non-local elasticity // *Prace nauk. WSP w Częstochowie. Matematyka.* – 1997. – **5**. – S. 89–96.
79. *Povstenko Y. Z.* Straight disclinations in nonlocal elasticity // *Int. J. Engng. Sci.* – 1995. – **33**, No. 4. – P. 575–582.
80. *Povstenko Y. Z.* Stress fields produced by circular defects in non-local elastic solid // *Elasticity, Viscoelasticity and Optimal Control. Theoretical and Numerical Aspects.* – Lyon: Univ. Claude Bernard, 1995. – P. 133–134.
81. *Povstenko Y. Z., Matkovskii O. A.* Circular disclination loops in nonlocal elasticity // *Int. J. Solids and Struct.* – 2000. – **37**, No. 44. – P. 6419–6432.

82. Ru C. Q., Aifantis E. C. A simple approach to solve boundary-value problems in gradient elasticity // Acta Mech. – 1993. – **101**, No. 1-4. – P. 59–68.
83. Schober H. P. Point defects and the macroscopic host crystal // Phys. B. – 1985. – **131**, No. 1-3. – P. 27–33.
84. Sieradzki K., Diens G. J., Paskin A., Massoumzadeh B. Atomistic of crack propagation // Acta Metal. – 1988. – **36**, No. 3. – P. 651–663.
85. Tadmor E. B., Ortiz M., Phillips R. Quasicontinuum analysis of defects in solids // Phil. Mag. A. – 1996. – **73**, No. 6. – P. 1529–1563.
86. Tadmor E. B., Phillips R., Ortiz M. Mixed atomistic and continuum models of deformation in solids // Langmuir. – 1996. – **12**, No. 19. – P. 4529–4534.
87. Thomson R. Physics of fracture // Atomistics of Fracture. – New York: Plenum Press, 1983. – P. 167–204.
88. Vardoulakis I., Exadaktylos G., Aifantis E. Gradient elasticity with surface energy: mode-III crack problem // Int. J. Solids and Struct. – 1996. – **33**, No. 30. – P. 4531–4559.
89. Voyiadis G. Z., Abu Al-Rub R. K., Palazotto A. N. Non-local coupling of viscoplasticity and anisotropic viscodamage for impact problems using the gradient theory // Arch. Mech. – 2003. – **55**, No. 1. – P. 39–89.
90. Wang R. Non-local elastic interaction energy between a dislocation and a point defect // J. Phys. D. – 1990. – **23**, No. 2. – P. 263–265.
91. Wang R., Chen G. L., Sun Z. Q. Application of nonlocal elasticity to the energetics for solute atoms in body-centered cubic transition metals with dislocation // Metal. Trans. A. – 1992. – **23**, No. 11. – P. 3115–3120.

НЕЛОКАЛЬНАЯ И ГРАДИЕНТНАЯ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ К ОПИСАНИЮ НЕСОВЕРШЕНСТВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Нелокальная теория упругости учитывает силы дальнего взаимодействия между атомами, при этом зависимость между тензором напряжений и тензором деформации является интегральной. Градиентная теория упругости учитывает производные тензора деформации в уравнениях состояния для тензора напряжений. Пионерские работы Я. С. Подстригача сыграли важную роль в обеих указанных теориях. В отличие от соответствующих решений, полученных в рамках классической теории упругости, напряжения, обусловленные несовершенствами в нелокально-упругой среде, и деформация в градиентно-упругой среде не содержат нефизических сингулярностей.

NON-LOCAL AND GRADIENT ELASTICITY THEORIES AND THEIR APPLICATION TO DESCRIPTION OF IMPERFECTIONS IN SOLIDS

Non-local elasticity theory takes into account the interatomic long-range forces. Thus, the relation between the stress tensor and the strain tensor has the integral form. Gradient elasticity theory takes into account the derivatives of strain tensor in the equation of state for the stress tensor. The pioneer works of Ya. S. Podstrygach play an important role in both these theories. In contrast to the corresponding classical elastic solutions, the stresses caused by imperfections in non-local medium and strains in gradient elasticity, have no non-physical singularities.

Ін-т прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,
Вища педагог. школа, Ченстохова, Польща

Одержано
11.02.03