



رفتار الاستیک نابجایی لبه‌ای واقع در هسته نانوسیم هسته-پوششی در ماتریس بی‌نهایت در تئوری الاستیسیته سطح/میان سطح

کاملیا انزوائی¹، حسین محمدی شجاع^{2*}

1- دانشجوی دکتری، مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

2- استاد، مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

* تهران، صندوق پستی 11155-9313، shodja@sharif.edu

چکیده

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 13 آذر 1395

پذیرش: 08 اسفند 1395

ارائه در سایت: 09 اسفند 1395

کلید واژگان:

اثر سطح/میان سطح

نانوسیم هسته-پوششی

نابجایی لبه‌ای

میدان تنش

در این مقاله اندرکنش نابجایی لبه‌ای در داخل هسته یک نانوسیم هسته-پوششی که در ماتریس بی‌نهایت قرار گرفته است، به کمک تئوری الاستیسیته سطح مورد بررسی قرار گرفته است. در این مسئله به منظور حل معادلات تعادل از روش توابع پتانسیل مختلط و بسط سری لورنت استفاده شده است. پارامتر مشخصه میان سطح که دارای بعد طول می‌باشد و ترکیبی از ضرایب الاستیک سطح است، در معادلات وارد شده است. میدان تنش ناشی از وجود نابجایی، نیروی وارد بر نابجایی و انرژی نابجایی با لحاظ نمودن اثر میان سطح محاسبه شده است. میدان تنش ناشی از وجود نابجایی به صورت گرافیکی نمایش داده شده است و نتایج با حالت کلاسیک و بدون لحاظ نمودن اثر سطح مقایسه شده است. نیروی وارد بر نابجایی نیز به تفصیل مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است و نشان داده شده است که این نیرو وابسته به پارامتر مشخصه میان سطح، ابعاد مدل، جهت‌گیری نابجایی و فاصله نابجایی از میان سطح می‌باشد. همچنین تاثیر پارامتر مشخصه میان سطح بر روی نیروی وارد بر نابجایی که می‌تواند به صورت دافعه و یا جاذبه عمل کند، مورد بررسی قرار گرفته است. به علاوه نقطه تعادل نابجایی نیز بررسی شده است. انرژی نابجایی با لحاظ نمودن اثر میان سطح و بدون آن مقایسه شده است و نشان داده شده با نزدیک شدن نابجایی به میان سطح اختلاف نتایج افزایش می‌یابد.

Elastic behavior of an edge dislocation in a core-shell nanowire embedded in an infinite matrix within surface/interface theory of elasticity

Camelia Enzevae, Hossein Mohammadi Shodja*

Department of Civil Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

* P.O.B. 11155-9313, Tehran, Iran, shodja@sharif.edu

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 03 December 2016
Accepted 27 January 2017
Available Online 27 February 2017

Keywords:
Surface/Interface effect
core-shell nanowire
Edge dislocation
Stress field

ABSTRACT

The elastic behavior of an edge dislocation located inside the core of a core-shell nanowire which is embedded in an infinite matrix is studied within the surface/interface elasticity theory. The corresponding boundary value problem is solved exactly by using complex potential functions and Laurent series expansion. An important parameter, the so-called interface characteristic parameter, which has the dimension of length and is a combination of the interface moduli, enters the formulations. The stress field of the dislocation, image force acting on the dislocation, and the dislocation strain energy is calculated by considering the interface effect. The stress field of the dislocation is shown as contour plots and the results are compared with classical case. The image forces acting on the dislocation are studied in detail and it is shown that they depend on the interface characteristic parameter, nanowire dimension, dislocation orientation, and dislocation distance from the interface. Moreover, the repelling and attracting effects of the interface parameter on the image force are discussed. The equilibrium position of the dislocation is also studied. The dislocation strain energy in the interface elasticity framework is only slightly different from that of traditional elasticity when the dislocation is placed in the central region of the core and reaches its maximum value when it is located near the core-shell interface.

1- مقدمه

به صورت بیضوی می‌باشد و نابجایی لبه‌ای در داخل هسته و یا ماتریس قرار گرفته است حل نموده‌اند. اخیراً چن و همکاران [4] این مساله را برای مکان دلخواه نابجایی بررسی نموده است.

تمامی مسائل فوق‌الذکر به کمک تئوری الاستیسیته کلاسیک مورد بررسی قرار گرفته است که تنها در ابعاد بالا مناسب می‌باشد. براساس تئوری الاستیسیته سطح بسیاری از مسائلی که در الاستیسیته کلاسیک مورد بررسی

نابجایی در نانوسیم‌های هسته-پوششی در گذشته به کمک الاستیسیته کلاسیک بررسی شده است. مسئله نابجایی واقع در داخل پوشش توسط لو و چن [1] و در داخل ماتریس توسط زیا و چن [2] بررسی شده است. در مقاله [3] مسئله را در حالتی که فصل مشترک هسته-پوشش و پوشش-ماتریس

Please cite this article using:

C. Enzevae, H. Mohammadi Shodja, Elastic behavior of an edge dislocation in a core-shell nanowire embedded in an infinite matrix within surface/interface theory of elasticity, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 2, pp. 439-445, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

استفاده نمی‌باشد. ارتباط بین انرژی آزاد سطح Γ و تنش سطح در تئوری الاستیسیته سطح توسط شاتلورث ارائه شده است [14]:

$$\sigma_{\alpha\beta}^S = \tau_0 \delta_{\alpha\beta} + \frac{\partial \Gamma}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}^S} \quad (1)$$

در رابطه (1)، τ_0 تنش پسماند سطح، ε^S و σ^S ، تنش و کرنش سطح و δ ، دلتای کروئکر می‌باشد. اندیس‌های α و β و به دلیل بارگذاری داخل صفحه‌ای سطح، مقادیر 1 و 2 می‌گیرند. معادلات تعادل حاکم بر درون فضای ماده و روی سطح ماده براساس کار شارما و همکاران [15] روی سطح به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\langle \sigma_{\alpha\beta}^B n_\beta \rangle + \sigma_{\beta\alpha,\beta}^S = 0 \quad (2)$$

$$\langle \sigma_{ij}^B n_i n_j \rangle = \sigma_{\beta\alpha,\beta}^S \kappa_{\alpha\beta} \quad (3)$$

$$\sigma_{\beta\alpha}^S = \tau_0 \delta_{\alpha\beta} + 2(\mu_S - \tau_0) \delta_{\beta\gamma} \varepsilon_{\gamma\alpha} + (\lambda_S - \tau_0) \delta_{\beta\alpha} \varepsilon_{\gamma\gamma} \quad (4)$$

در این روابط σ^B و ε^B تانسورهای تنش و کرنش، λ_S و μ_S ثابت‌های الاستیکی لمه برای سطح، B ، S معرف فضای درون ماده و سطح ماده، τ_0 تنش پسماند سطح، n_β مولفه بردار عمود بر سطح، $\kappa_{\alpha\beta}$ تانسور انحنا سطح می‌باشد.

برای حل این مسئله از روش توابع پتانسیل مختلط استفاده شده است که توسط ماسخلیشویلی [16] مورد بسط و بررسی قرار گرفته است. در این روش، برای هر ناحیه می‌توان پارامترهای تنش و جابجایی را براساس دو تابع مختلط تحلیلی ϕ و ψ به صورت زیر نوشت:

$$\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{rr} = 2(\phi' + \bar{\phi}') \quad (5)$$

$$\sigma_{rr} - i\sigma_{r\theta} = \phi' + \bar{\phi}' - z\phi'' - e^{2i\theta}\psi' \quad (6)$$

$$u_r + iu_\theta = \frac{e^{-i\theta}}{2\mu}(k\phi - z\bar{\phi}' - \bar{\psi}) \quad (7)$$

که $k = 3 - 4\nu$ می‌باشد.

به کمک معادلات (2)، (3) و (4)، معادلات مرزی حاکم بر مسئله به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\sigma_{rr}^{(2)}(z) - \sigma_{rr}^{(1)}(z) = \frac{n_{rj}}{R_1} [(1 - \nu_j) \sigma_{\theta\theta}^{(j)}(z) - \nu_j \sigma_{rr}^{(j)}(z)] \quad (8)$$

On $z = R_1 e^{i\theta}, j = 1, 2$

$$\sigma_{r\theta}^{(1)}(z) - \sigma_{r\theta}^{(2)}(z) = \frac{n_{rj}}{R_1} [(1 - \nu_j) \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}^{(j)}(z)}{\partial \theta} - \nu_j \frac{\partial \sigma_{rr}^{(j)}(z)}{\partial \theta}] \quad (9)$$

On $z = R_1 e^{i\theta}, j = 1, 2$

$$\sigma_{rr}^{(3)}(z) - \sigma_{rr}^{(2)}(z) = \frac{n_{\Omega j}}{R_1} [(1 - \nu_j) \sigma_{\theta\theta}^{(j)}(z) - \nu_j \sigma_{rr}^{(j)}(z)] \quad (10)$$

On $z = R_2 e^{i\theta}, j = 2, 3$

$$\sigma_{r\theta}^{(2)}(z) - \sigma_{r\theta}^{(3)}(z) = \frac{n_{\Omega j}}{R_1} [(1 - \nu_j) \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}^{(j)}(z)}{\partial \theta} - \nu_j \frac{\partial \sigma_{rr}^{(j)}(z)}{\partial \theta}] \quad (11)$$

On $z = R_2 e^{i\theta}, j = 2, 3$

که $\eta_{SB} = (2\mu_S + \lambda_S)/2\mu_B$ پارامتر مشخصه میان سطح می‌باشد. با ساده سازی معادلات (8)-(11) و پیوستگی جابجایی و (5)-(7)، معادلات مرزی حاکم بر مسئله به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\{a_1(\phi_1' - z\phi_1'') - a_2(\phi_2' - z\phi_2'') + \left(\frac{z}{2}\right)(\psi_1' - \psi_2')\}_{R_1 e^{i\theta}} + \{a_1(\bar{\phi}_1' + z\bar{\phi}_1'') - a_2(\bar{\phi}_2' + z\bar{\phi}_2'') + z(\bar{\phi}_1'' - \bar{\phi}_2'')\}_{R_1 e^{-i\theta}} = 0 \quad (12)$$

$$\{b_2(\phi_2' - z\phi_2'') - b_3(\phi_3' - z\phi_3'') + \left(\frac{z}{2}\right)(\psi_2' - \psi_3')\}_{R_2 e^{i\theta}} + \{b_2(\bar{\phi}_2' + z\bar{\phi}_2'') - b_3(\bar{\phi}_3' + z\bar{\phi}_3'') + z(\bar{\phi}_2'' - \bar{\phi}_3'')\}_{R_2 e^{-i\theta}} = 0 \quad (13)$$

$$\{z(m_{12}\bar{\phi}_1' - \bar{\phi}_2') + m_{12}\psi_1' - \psi_2'\}_{R_1 e^{-i\theta}} - \{m_{12}\kappa_1\phi_1 - \kappa_2\phi_2\}_{R_1 e^{i\theta}} = 0 \quad (14)$$

$$\{z(m_{23}\bar{\phi}_2' - \bar{\phi}_3') + m_{23}\psi_2' - \psi_3'\}_{R_2 e^{-i\theta}} - \{m_{23}\kappa_2\phi_2 - \kappa_3\phi_3\}_{R_2 e^{i\theta}} = 0 \quad (15)$$

قرار گرفته است، در مقیاس نانو بررسی و تحلیل شده است. تاثیر تنش‌های سطح بر روی اندرکنش نابجایی با ناهمگنی دایروی در مقالات [5] و [6] و بیضوی در مقالات [7] و [8] مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین اندرکنش نابجایی در نانوسیم هسته-پوششی [9] و [10]، در دیواره نانو تیوب [11] و [12] و اندرکنش نابجایی با نانوسیم هسته-پوششی دارای خروج از مرکزیت [13] با در نظر گرفتن اثر سطح مورد مطالعه قرار گرفته است.

قابل ذکر است که اندرکنش نابجایی و ناهمگنی در محیط سه فازی با در نظر گرفتن اثر سطح تنها در مورد نابجایی‌های پیچشی انجام شده است [9] و [10]. در این مقاله اندرکنش نابجایی لبه‌ای در داخل هسته یک نانوسیم هسته-پوششی که در ماتریس قرار گرفته است، به کمک تئوری الاستیسیته سطح مورد بررسی قرار گرفته است. در این مسئله به منظور حل معادلات تعادل از روش توابع پتانسیل مختلط و بسط سری لورنت استفاده شده است. همچنین میدان تنش به تفصیل مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است.

2- بیان مسئله

در این مقاله به بررسی اثر سطح بر روی رفتار الاستیک یک نابجایی لبه‌ای واقع در هسته یک نانوسیم هسته-پوششی در ماتریس بی‌نهایت می‌پردازیم. مطابق شکل (1) یک نابجایی لبه‌ای بر روی محور x در داخل هسته یک نانوسیم هسته-پوششی واقع در محیط بی‌نهایت قرار دارد. نابجایی لبه‌ای در فاصله c از مرکز نانوسیم با بردار برگز $b = b_x e_x + b_y e_y$ قرار دارد. پوشش و ماتریس با اندیس 1، 2 و 3 مشخص می‌شوند. همچنین فصل مشترک هسته-پوشش و پوشش-ماتریس با اندیس Γ و Ω نشان داده می‌شود. بنابراین (ν_1, μ_1) ، (ν_2, μ_2) و (ν_3, μ_3) به ترتیب زوج ثابت‌های لمه برای هسته، پوشش و ماتریس می‌باشد و $(\nu_{S\Omega}, \mu_{S\Omega})$ و $(\nu_{S\Gamma}, \mu_{S\Gamma})$ زوج ثابت‌های لمه سطح برای فصل مشترک هسته-پوشش و پوشش-ماتریس می‌باشند.

3- روش حل

انرژی اتم‌ها روی سطح به دلیل این که این اتم‌ها پیوندهای متفاوتی نسبت به اتم‌های داخل ماده دارا می‌باشند، متفاوت است. در ابعاد نانومتر، تعداد اتم‌های داخل ماده و روی سطح قابل مقایسه می‌باشند و دیگر نمی‌توان از انرژی اتم‌ها روی سطح صرف نظر کرد و به همین دلیل اثرات سطح در اجسام با ابعاد نانو حائز اهمیت می‌گردد. در چنین حالتی نتایج الاستیسیته کلاسیک قابل

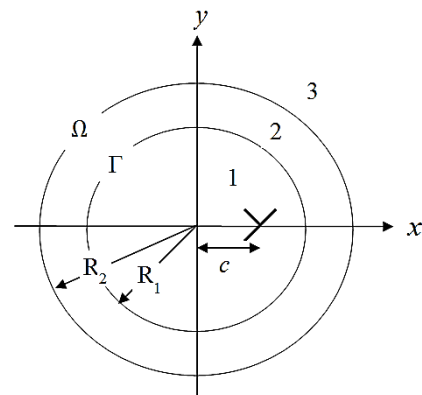


Fig. 1 An edge dislocation in the core of a core-shell nanowire embedded in an infinite matrix

شکل 1 نابجایی لبه‌ای واقع در هسته یک نانوسیم هسته-پوششی در ماتریس بی‌نهایت

که در این روابط:

$$a_k = \frac{2\eta_{11}\eta_{12}(1-\nu_k)}{\alpha} - 1, \quad b_k = \frac{2\eta_{22}\eta_{23}(1-\nu_k)}{\beta} - 1, \quad k = 1, 2, 3$$

$$\alpha = R_1(\eta_{11} - \eta_{12}) + \eta_{11}\eta_{12}$$

$$\beta = R_2(\eta_{22} - \eta_{23}) + \eta_{22}\eta_{23}$$

$$m_{12} = \frac{\mu_2}{\mu_1}, \quad m_{23} = \frac{\mu_3}{\mu_2}$$

برای حل این مسئله توابع مختلط پتانسیل برای هر ناحیه به صورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$\phi_1(z) = \gamma \ln(z - c) + \sum_{n=0}^{+\infty} A_n^{(1)} z^n \quad (16)$$

$$\psi_1(z) = \bar{\gamma} \ln(z - c) - \gamma \frac{c}{z - c} + \sum_{n=2}^{+\infty} B_n^{(1)} z^{n-2} \quad (17)$$

$$\phi_2(z) = A_L^{(2)} \ln z + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(2)} z^n \quad (18)$$

$$\psi_2(z) = B_L^{(2)} \ln z + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_n^{(2)} z^{n-2} \quad (19)$$

$$\phi_3(z) = A_L^{(3)} \ln z + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n^{(3)} z^n \quad (20)$$

$$\psi_3(z) = B_L^{(3)} \ln z + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_n^{(3)} z^{n-2} \quad (21)$$

در این روابط $\gamma = \mu_1(b_y - ib_x)/[4\pi(1 - \nu_1)]$ از بردار برگرز نایجایی می‌باشد.

با استفاده از معادلات (12)-(21) ضرایب مجهول $B_n^{(j)}$ و $A_n^{(j)}$ ، $A_L^{(j)}$ و $B_L^{(j)}$ به دست می‌آیند. برای حل و به دست آوردن ضرایب مجهول، پس به دست آوردن معادلات مرزی براساس توابع پتانسیل مختلط، ضریب $e^{in\theta}$ را در هر یک از معادلات مرزی برای n های مثبت و منفی به دست می‌آوریم. در این حالت برای هر مقدار n هشت معادله و هشت مجهول خواهیم داشت.

با به دست آوردن مجهولات، توابع پتانسیل مختلط برای هر ناحیه بدست می‌آید. به کمک این توابع می‌توان رفتار الاستیک نایجایی را در داخل هسته براساس پارامترهای اصلی مسئله بررسی نمود. در این جا ما به بررسی میدان تنش، نیروی وارد بر نایجایی¹ و انرژی نایجایی² می‌پردازیم.

مؤلفه‌های تنش براساس توابع پتانسیل مختلط به صورت زیر بیان می‌شود [16]

در دستگاه مختصات قطبی:

$$\sigma_{rr}^{(j)} = \text{Re}(\phi_j' + \bar{\phi}_j' - z\phi_j'' - e^{2i\theta}\psi_j') \quad (22)$$

$$\sigma_{\theta\theta}^{(j)} = \text{Re}(\phi_j' + \bar{\phi}_j' + z\phi_j'' + e^{2i\theta}\psi_j') \quad (23)$$

$$\sigma_{r\theta}^{(j)} = -\text{Im}(\phi_j' + \bar{\phi}_j' - z\phi_j'' - e^{2i\theta}\psi_j') \quad (24)$$

و در دستگاه مختصات کارترین:

$$\sigma_{xx}^{(j)} = \text{Re}(2\phi_j' - \bar{z}\phi_j'' - \psi_j') \quad (25)$$

$$\sigma_{yy}^{(j)} = \text{Re}(2\phi_j' + \bar{z}\phi_j'' + \psi_j') \quad (26)$$

$$\sigma_{xy}^{(j)} = \text{Im}(\bar{z}\phi_j'' + \psi_j') \quad (27)$$

همچنین از تئوری کلاسیک سطح، مؤلفه تنش در راستای عمود بر سطح عبارت است از:

$$\sigma_{zz}^{(j)} = \nu_j(\sigma_{rr}^{(j)} + \sigma_{\theta\theta}^{(j)}) \quad (28)$$

یکی دیگر از کمیت‌های مورد بررسی، نیروی وارد بر نایجایی می‌باشد. این کمیت در جابجایی نایجایی‌ها و در نتیجه رفتار ماده در تغییر شکل‌های پلاستیک اهمیت بسزایی دارد.

نیروی وارد بر نایجایی‌ها از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$f_x - if_y = b_x \bar{\sigma}_{xy}^{(1)}(c, 0) + b_y \bar{\sigma}_{yy}^{(1)}(c, 0) + i[b_x \bar{\sigma}_{xx}^{(1)}(c, 0) + b_y \bar{\sigma}_{xy}^{(1)}(c, 0)] \quad (29)$$

که $\bar{\sigma}_{ij}^{(1)}$ مؤلفه اختلالی تنش³ می‌باشد. با در نظر گرفتن تغییرات غیرالاستیک حجم در مواد به دلیل صعود نایجایی‌ها، فرمول زیر را برای محاسبه نیروی وارد بر نایجایی‌ها پیشنهاد کرده است:

$$f_x - if_y = b_x \bar{\sigma}_{xy}^{(1)}(c, 0) + b_y \bar{\sigma}_{yy}^{(1)}(c, 0) + i[b_x \bar{\sigma}_{xx}^{(1)}(c, 0) + b_y \bar{\sigma}_{xy}^{(1)}(c, 0)] - \frac{1+\nu_1}{3}(b_x + ib_y)[\bar{\sigma}_{xx}^{(1)}(c, 0) + \bar{\sigma}_{yy}^{(1)}(c, 0)] \quad (30)$$

نیروی وارد بر نایجایی در راستای لغزش⁴ f_g و در راستای صعود⁵ f_c را به صورت زیر می‌توان محاسبه نمود:

$$f_g = f_x \cos \theta + f_y \sin \theta \quad (31)$$

$$f_c = f_x \sin \theta - f_y \cos \theta \quad (32)$$

که $\theta = \tan^{-1}(b_y/b_x)$.

به کمک روابط (25)-(27) و (31) و (32)، رابطه (30) به صورت زیر ساده می‌شود:

$$f_c - if_g = -\frac{b_x + ib_y}{3b} \{3(b_x + ib_y)[\psi_1'(z) + \bar{z}\phi_1''(z)] - 2(1 - 2\nu)(b_x - ib_y)\text{Re}[\phi_1'(z)]\} \quad (33)$$

در این کار نیروهای وارد بر نایجایی طبق روابط زیر بی‌بعد شده‌اند:

$$f_{g0} = \frac{4\pi(1 - \nu_1)}{\mu_1 b^2} f_g \quad (34)$$

$$f_{c0} = \frac{4\pi(1 - \nu_1)}{\mu_1 b^2} f_c \quad (35)$$

یکی دیگر از کمیت‌های حائز اهمیت انرژی نایجایی است که برابر است با مقدار کاری که باید انجام شود تا نایجایی در میدان تنش خودش ایجاد شود. به طور کلی انرژی نایجایی (در واحد طول) برای یک نایجایی با بردار برگرز در جهت x به صورت زیر قابل محاسبه می‌باشد:

$$W = \frac{b_x}{2} \int_{c+r_0}^h \sigma_{xy}(x, y=0) dx \quad (36)$$

برای یک نایجایی با بردار برگرز در جهت y ، انرژی نایجایی به طور مشابه قابل محاسبه می‌باشد:

$$W = \frac{b_y}{2} \int_{c+r_0}^h \sigma_{yy}(x, y=0) dx \quad (37)$$

با جداسازی انتگرال برای هر ناحیه، روابط (36) و (37) به فرم زیر تبدیل می‌شوند:

$$W = \frac{b_x}{2} \left\{ \int_{c+r_0}^{R_1} \sigma_{xy}^{(1)}(x, y=0) dx + \int_{R_1}^{R_2} \sigma_{xy}^{(2)}(x, y=0) dx + \int_{R_2}^h \sigma_{xy}^{(3)}(x, y=0) dx \right\} \quad (38)$$

³ perturbation stress

⁴ Glide force

⁵ Climb force

¹ Image force

² Dislocation strain energy

کمتر است، با وجود این که طول ذاتی بیشتر از فصل مشترک داخلی می‌باشد. برخلاف نتایج غیرکلاسیک، در روش کلاسیک، کانتور تنش در فصل مشترک‌ها پیوسته می‌باشد و همچنین در طول میان سطح شاهد تغییرات ملایم‌تری در تنش می‌باشیم.

2-4- نیروی وارد بر نابجایی

در این بخش اثر سطح بر روی نیروی وارد بر نابجایی مورد مطالعه قرار گرفته است. تغییرات نیروی وارد بر نابجایی نسبت به مکان نابجایی در "شکل‌های 6 و 7"، نسبت به شعاع هسته در "شکل‌های 8 و 9" نمایش داده شده است.

1-2-4- تاثیر فاصله نابجایی از مرکز هسته

پارامترهای فرض شده برای "شکل‌های 6 و 7" عبارتند از:

$$R_1 = 20 \text{ nm}, \quad R_2 = 40 \text{ nm} \\ \bar{\mu}_2 = 0.9, \quad \bar{\mu}_3 = 0.8, \quad \nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 0.3$$

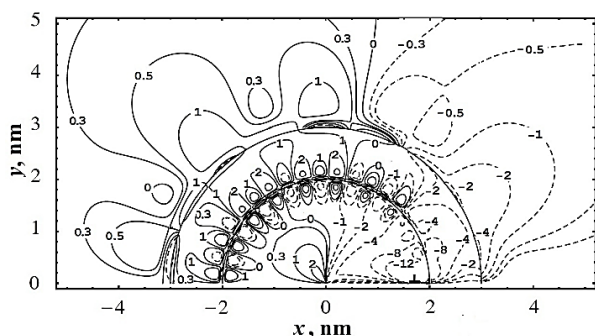


Fig. 2 Distribution of normal stress component (σ_{rr}) considering surface effect

شکل 2 کانتور میدان تنش نرمال (σ_{rr}) با در نظرگیری اثر سطح

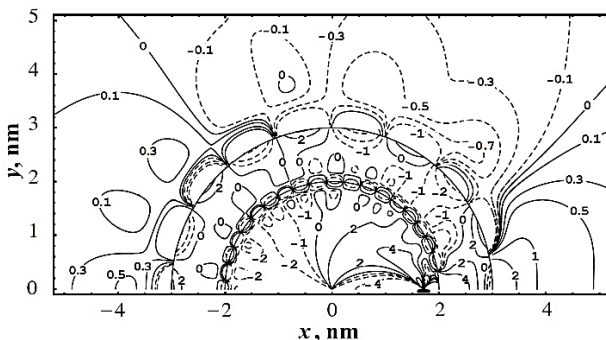


Fig. 3 Distribution of shear stress component ($\sigma_{r\theta}$) considering surface effect

شکل 3 کانتور میدان تنش برشی ($\sigma_{r\theta}$) با در نظرگیری اثر سطح

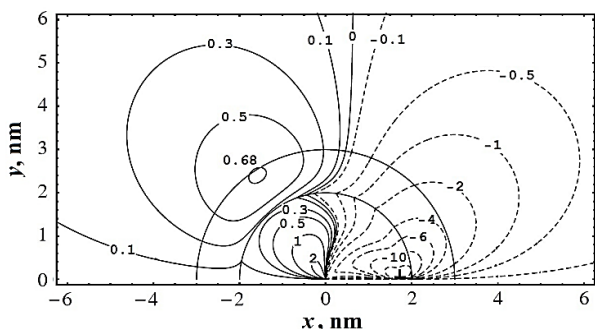


Fig. 4 Distribution of normal stress component (σ_{rr}) without surface effect

شکل 4 کانتور میدان تنش نرمال (σ_{rr}) بدون در نظرگیری اثر سطح

$$W = \frac{b_y}{2} \left\{ \int_{c+r_0}^{R_1} \sigma_{yy}^{(1)}(x, y=0) dx + \int_{R_1}^{R_2} \sigma_{yy}^{(2)}(x, y=0) dx + \int_{R_2}^h \sigma_{yy}^{(3)}(x, y=0) dx \right\} \quad (39)$$

4- نتایج عددی

در این بخش سعی بر آن است که در قالب مثال‌های عددی نزدیک به واقعیت، نتایج خاص ناشی از در نظرگیری اثر تنش‌های سطح را ملاحظه نماییم. به منظور ساده‌سازی از پارامترهای الاستیک بی‌بعد شده در این بخش استفاده می‌کنیم که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\bar{\mu}_2 = \mu_2/\mu_1, \quad \bar{\mu}_3 = \mu_3/\mu_1, \\ \bar{\mu}_{Si} = \mu_{Si}/\mu_1, \quad i = \Gamma, \Omega \\ \bar{\lambda}_{Si} = \lambda_{Si}/\lambda_1, \quad i = \Gamma, \Omega \\ \bar{\eta}_{Si} = 2\bar{\mu}_{Si} + \bar{\lambda}_{Si}, \quad i = \Gamma, \quad (40)$$

قابل ذکر است که $\bar{\mu}_2$ و $\bar{\mu}_3$ بی‌بعد هستند در حالی که $\bar{\lambda}_{Si}$ و $\bar{\mu}_{Si}$ طول می‌باشند و به آن‌ها طول ذاتی¹ نانو ساختار می‌گویند. همچنین پارامترهای هندسی بی‌بعد شده، به صورت زیر معرفی می‌شوند

$$\bar{R}_2 = R_2/R_1, \\ \bar{c} = c/R_1 \quad (41)$$

در ادامه میدان تنش، نیروی وارد بر نابجایی و انرژی نابجایی با در نظر گرفتن اثر سطح به کمک مثال‌های عددی به تفصیل مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است.

1-4- آنالیز میدان تنش

میدان تنش در این قسمت از مثال‌های عددی به تفصیل مورد بررسی قرار می‌گیرد. هدف اصلی این بخش مقایسه مقدار مؤلفه‌های مختلف تنش در نقاط مختلف اعم از نقاط درون ماتریس، درون پوشش، درون هسته و همچنین روی فصل مشترک هسته-پوشش و پوشش-ماتریس می‌باشد.

کانتور میدان تنش نرمال σ_{rr} و تنش برشی $\sigma_{r\theta}$ با در نظر گرفتن اثر سطح در "شکل 2 و 3" و بدون در نظر گرفتن اثر سطح در "شکل 4 و 5" نمایش داده شده است. پارامترهای استفاده شده عبارتند از:

$$b_x = 0.25 \text{ nm}, \quad b_y = 0 \\ c = 1.7 \text{ nm}, \quad R_1 = 2 \text{ nm}, \quad R_2 = 3 \text{ nm} \\ \bar{\mu}_2 = 0.9, \quad \bar{\mu}_3 = 0.85, \quad \nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 0.3$$

"شکل 2 و 3"، میدان تنش را با واحد $\mu_1/100$ با در نظر گرفتن اثر سطح و به کمک تئوری الاستیسیته سطح با فرض $\bar{\lambda}_{S\Gamma} = \bar{\lambda}_{S\Omega} = -0.1 \text{ nm}$ و $\bar{\mu}_S = \bar{\lambda}_S = -0.3 \text{ nm}$ نشان می‌دهد. "شکل 4 و 5"، میدان تنش را بدون در نظر گرفتن اثر سطح و به کمک تئوری الاستیسیته کلاسیک نشان می‌دهد.

به وضوح دیده می‌شود که در نزدیکی نابجایی و در نواحی داخلی هسته ($r < 1 \text{ nm}$)، نتایج حاصل از حل کلاسیک و غیرکلاسیک با تقریب خوبی یکسان می‌باشد، در حالی که در نواحی خارجی هسته ($1 \text{ nm} < r < 4 \text{ nm}$) در پوشش و در نواحی داخلی ماتریس ($3 \text{ nm} < r < 4 \text{ nm}$) شاهد نتایج متفاوتی هستیم.

در حل غیرکلاسیک به دلیل وجود اثر میان سطح، مؤلفه‌های تنش در فصل مشترک ناپیوسته و نوسانی می‌باشند. این ناپیوستگی و نوسانی بودن تنش در فصل مشترک هسته-پوشش Γ که به نابجایی نزدیکتر است، بیشتر می‌باشد. ناپیوستگی و نوسانی بودن تنش در فصل مشترک پوشش-ماتریس

¹ Intrinsic length

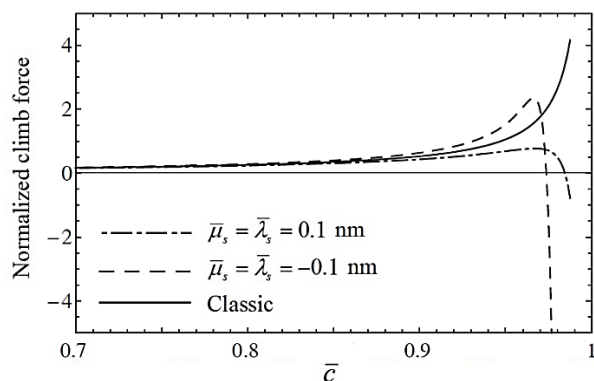


Fig. 7 Dependence of the climb image force on the position of dislocation with Burgers vector $b = (0, b_y)$

شکل 7 نیروی صعودی وارد بر نابجایی نسبت به محل نابجایی برای بردار برگرز $b = (0, b_y)$

سطح دارای نقطه تعادل پایدار در نزدیکی سطح می‌باشند. شایان ذکر است که رفتار ذکر شده (وجود نیروی اضافی و نقطه تعادل) در الاستیسیته سطح در مقالات بسیاری مشاهده و گزارش شده است [5]، [6]، [12] و [13].

2-2-4- تاثیر اندازه

اکنون فرض می‌کنیم که نابجایی در فاصله $\bar{c} = 0.8$ قرار گرفته است و شعاع هسته را از 3 تا 60nm تغییر می‌دهیم، در این حالت شعاع بی‌بعد شده پوشش را ثابت و برابر $\bar{R}_2 = 2$ نگه می‌داریم. سایر پارامترهای مسئله همانند مورد قبل فرض شده است.

"شکل 8" مربوط به نیروی لغزشی و "شکل 9" مربوط به نیروی صعودی وارد بر نابجایی می‌باشد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود نیروی وارد بر نابجایی در تئوری الاستیسیته مستقل از اندازه می‌باشد. اما در حالت غیر کلاسیک، نیروی وارد بر نابجایی وابسته به اندازه نانوسیم هسته-پوششی می‌باشد و این وابستگی با کاهش اندازه، افزایش می‌یابد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش اندازه حل غیر کلاسیک به سمت نتایج کلاسیک میل می‌کند. این اثر اندازه در حل غیر کلاسیک در مقالات [5]، [6]، [12] و [13] مشاهده و گزارش شده است.

2-2-4- تاثیر جهت بردار برگرز نابجایی

تاثیر جهت بردار برگرز بر روی نیروی لغزشی و صعودی وارد بر نابجایی در شکل‌های 10 و 11 نشان داده شده است. این نمودارها با ثابت نگه داشتن

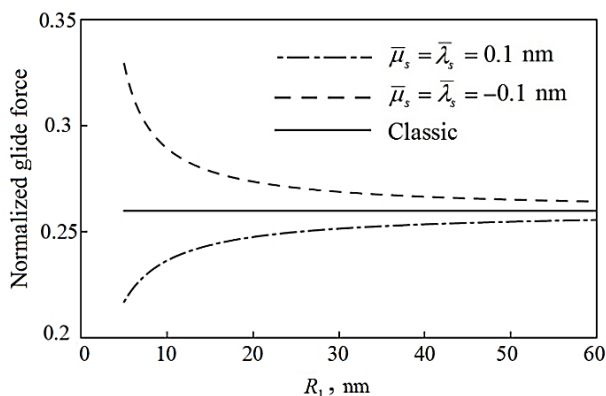


Fig. 8 Dependence of the glide image force on the core size for a dislocation with Burgers vector $b = (b_x, 0)$

شکل 8 نیروی لغزشی وارد بر نابجایی نسبت به اندازه نمونه برای بردار برگرز $b = (b_x, 0)$

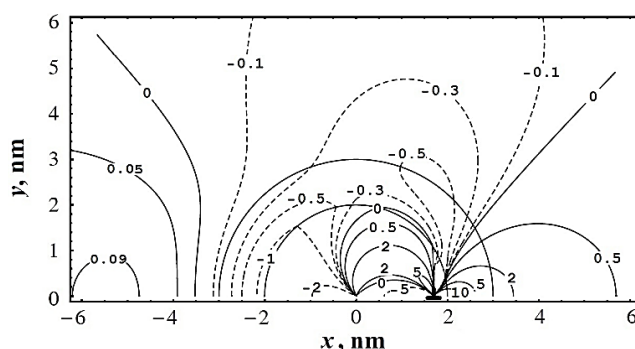


Fig. 5 Distribution of shear stress component ($\sigma_{r\theta}$) without surface effect

شکل 5 کانتور میدان تنش برشی ($\sigma_{r\theta}$) بدون در نظرگیری اثر سطح

"شکل 6" نیروی لغزشی را برای بردار برگرز با مؤلفه‌های $b_x = 0.25$ nm و $b_y = 0$ و "شکل 7" نیروی صعودی را برای بردار برگرز با مؤلفه‌های $b_x = 0$ و $b_y = 0.25$ nm نمایش می‌دهند.

به منظور ساده‌سازی بیشتر پارامترهای فصل مشترک داخلی و خارجی یکسان در نظر گرفته شده‌اند $\bar{\mu}_S = \bar{\mu}_{S\Omega} = \bar{\mu}_S$ و $\bar{\lambda}_{S\Gamma} = \bar{\lambda}_{S\Omega} = \bar{\lambda}_S$ در حل غیر کلاسیک $\bar{\mu}_S = \bar{\lambda}_S = \pm 0.1$ nm فرض شده است.

به دلیل این که هسته نسبت به پوشش و ماتریس سخت‌تر فرض شده است، نیروی وارد بر نابجایی مثبت است و با افزایش فاصله مکان نابجایی از مرکز هسته این نیرو تقریباً در تمامی بخش‌های هسته افزایش می‌یابد که این نشان‌دهنده این است که نابجایی از هسته به بیرون رانده می‌شود. علاوه بر نیروی کلاسیک که باعث جذب نابجایی به سمت فصل مشترک هسته-پوشش می‌شود، $\eta_S > 0$ باعث ایجاد یک نیروی اضافی دفع کننده (جذب کننده) بر روی نابجایی می‌گردد. نیروی وارد بر نابجایی در حالت الاستیسیته سطح با الاستیسیته سطح در ناحیه نازکی در نزدیک فصل مشترک (حدود 0.8nm) متفاوت است. در حالت $\eta_S > 0$ نیروی صعودی به ماکزیمم خود در $\bar{c} = 0.967$ می‌رسد و سپس کاهش یافته و در $\bar{c}_{eq} = 0.984$ صفر می‌شود. بنابراین نابجایی صعودی با در نظر گرفتن اثر سطح دارای یک نقطه تعادل پایدار در نزدیکی فصل مشترک هسته-پوشش می‌باشد. در حالت $\eta_S < 0$ هر دو نیروی لغزشی و صعودی به ماکزیمم مقدار خود در $\bar{c} = 0.965$ و 0.966 می‌رسند و سپس کاهش یافته و در $\bar{c}_{eq} = 0.972$ و 0.974 به صفر می‌رسند، بنابراین هر دو نیروی لغزشی و صعودی با در نظر گرفتن اثر

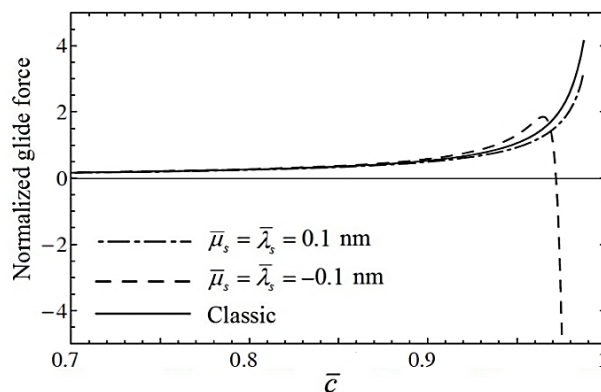


Fig. 6 Dependence of the glide image force on the position of dislocation with Burgers vector $b = (b_x, 0)$

شکل 6 نیروی لغزشی وارد بر نابجایی نسبت به محل نابجایی برای بردار برگرز $b = (b_x, 0)$

نابجایی کاهش (افزایش) می‌یابد. برای حالت $\eta_s > 0$ ، نتایج به‌دست آمده مشابه نتایج به‌دست آمده در مقاله [12] می‌باشد.

3-4- انرژی نابجایی

اثر الاستیسیته سطح بر روی انرژی نابجایی در "شکل‌های 12 تا 15" نمایش داده شده است. در "شکل 12 و 13" نابجایی در جهت x ، $b = (0.25\text{nm}, 0)$ و "شکل‌های 14 و 15" مربوط به نابجایی در جهت y ، $b = (0, 0.25\text{nm})$ می‌باشد. همچنین در "شکل‌های 12 و 14" هسته نسبت به پوشش و ماتریس سخت تر ($\bar{\mu}_2 = 0.9$ ، $\bar{\mu}_3 = 0.8$) و در "شکل-های 13 و 15" نرم تر ($\bar{\mu}_2 = 1.1$ ، $\bar{\mu}_3 = 1.2$) در نظر گرفته شده است. در این قسمت، جهت سهولت نابجایی در جهت x را نابجایی b_x و در جهت y را b_y می‌نامیم.

انرژی نابجایی به‌دست آمده از الاستیسیته کلاسیک، در حالتی که هسته سخت‌تر (نرم‌تر) است، در مرکز هسته دارای ماکزیمم (مینیمم) می‌باشد؛ در نتیجه نابجایی در مرکز هسته دارای نقطه تعادل ناپایدار (پایدار) می‌باشد. $\eta_s > 0$ باعث افزایش (کاهش) انرژی نابجایی نسبت به حالت کلاسیک می‌گردد. اختلاف انرژی در حالت کلاسیک و الاستیسیته سطح با دور شدن مکان نابجایی از مرکز هسته افزایش می‌یابد. اختلاف انرژی کلاسیک و غیرکلاسیک حداکثر به 0.1٪ می‌رسد، که دلیل این اختلاف ناچیز وجود ماتریس بی‌نهایت می‌باشد که تاثیر آن بر روی انرژی غالب می‌باشد.

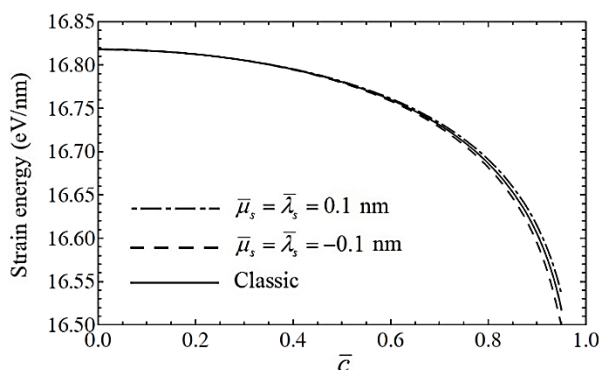


Fig. 12 Dependence of the strain energy on the position of the dislocation with the Burgers vector $b = (b_x, 0)$ ، $\bar{\mu}_2 = 0.9$ ، and $\bar{\mu}_3 = 0.8$

شکل 12 انرژی نابجایی نسبت به مکان نابجایی برای $b = (b_x, 0)$ ، $\bar{\mu}_2 = 0.9$ و $\bar{\mu}_3 = 0.8$

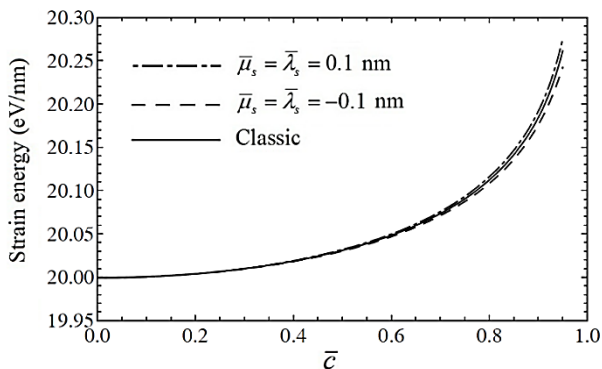


Fig. 13 Dependence of the strain energy on the position of the dislocation with the Burgers vector $b = (b_x, 0)$ ، $\bar{\mu}_2 = 1.1$ ، and $\bar{\mu}_3 = 1.2$

شکل 13 انرژی نابجایی نسبت به مکان نابجایی برای $b = (b_x, 0)$ ، $\bar{\mu}_2 = 1.1$ و $\bar{\mu}_3 = 1.2$

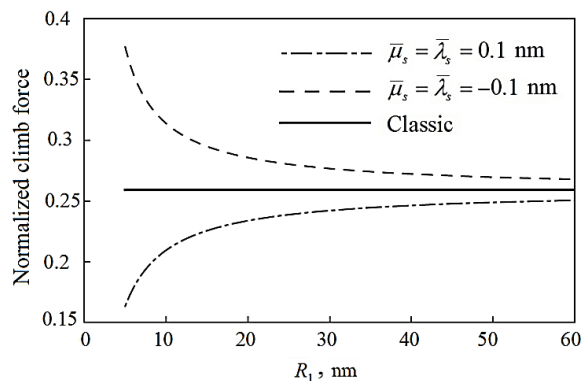


Fig. 9 Dependence of the climb image force on the core size for a dislocation with Burgers vector $b = (0, b_y)$

شکل 9 نیروی صعودی وارد بر نابجایی نسبت به اندازه نمونه برای بردار برگرز $b = (0, b_y)$

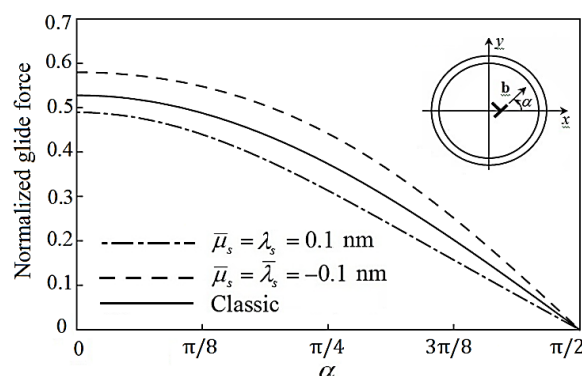


Fig. 10 Dependence of the glide image force on the Burgers vector orientation

شکل 10 نیروی لغزشی وارد بر نابجایی نسبت به جهت بردار برگرز

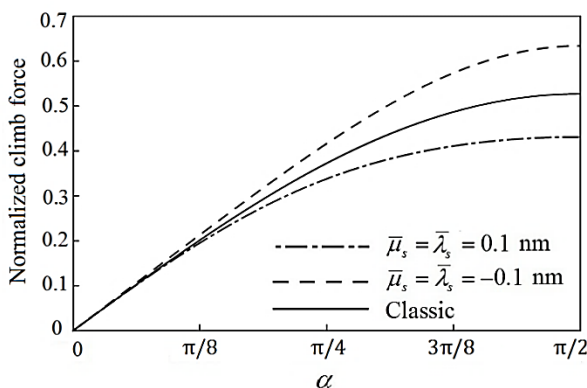


Fig. 11 Dependence of the climb image force on the Burgers vector orientation

شکل 11 نیروی صعودی وارد بر نابجایی نسبت به جهت بردار برگرز

فاصله نابجایی از مرکز هسته $\bar{c} = 0.9$ و تغییر دادن زاویه بین بردار برگرز و جهت مثبت محور x ترسیم شده‌اند. سایر پارامترها عبارتند از:

$$\begin{aligned} |b| &= 0.25 \\ R_1 &= 20 \text{ nm}, \quad R_2 = 40 \text{ nm} \\ \bar{\mu}_2 &= 0.95, \quad \bar{\mu}_3 = 0.9 \\ \bar{\mu}_s &= \bar{\lambda}_s = \pm 0.1 \text{ nm} \end{aligned} \quad (42)$$

به‌دلیل این‌که هسته نسبت به پوشش و ماتریس سخت‌تر فرض شده است، نیروی به‌دست آمده از الاستیسیته کلاسیک و الاستیسیته سطح مثبت است که این نشان دهنده این است که نابجایی از هسته به بیرون رانده می‌شود. در تئوری الاستیسیته سطح چنانچه $\eta_s > 0$ باشد نیروی وارد بر

- [2] Z. M. Xiao, B. J. Chen, On the interaction between an edge dislocation and a coated inclusion, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 38, No. 15, pp. 2533–2548, 2001.
- [3] M. T. Qaissaune, M. H. Santare, Edge dislocation interacting with an elliptical inclusion surrounded by an interfacial zone, *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, Vol. 48, No. 3, pp. 465–482, 1995.
- [4] F. M. Chen, C. K. Chao, C. K. Chen, Interaction of an edge dislocation with a coated elliptic inclusion, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 48, No. 10, pp. 1451–1465, 2011.
- [5] Q. H. Fang, Y. W. Liu, Size-dependent elastic interaction of a screw dislocation with a circular nano-inhomogeneity incorporating interface stress, *Scripta Materialia*, Vol. 55, No. 1, pp. 99–102, 2006.
- [6] Q. H. Fang, Y. W. Liu, Size-dependent interaction between an edge dislocation and a nanoscale inhomogeneity with interface effects, *Acta Materialia*, Vol. 54, No. 16, pp. 4213–4220, 2006.
- [7] J. Luo, Z. M. Xiao, Analysis of a screw dislocation interacting with an elliptical nano inhomogeneity, *International Journal of Engineering Science*, Vol. 47, No. 9, pp. 883–893, 2009.
- [8] H. M. Shodja, H. Ahmadzadeh-Bakhshayesh, M. Yu. Gutkin, Size-dependent interaction of an edge dislocation with an elliptical nano-inhomogeneity incorporating interface effects, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 49, No. 5, pp. 759–770, 2012.
- [9] H. Feng, Q. H. Fang, Y. W. Liu, B. Jin, Image force and stability of a screw dislocation inside a coated cylindrical inhomogeneity with interface stresses, *Acta Mechanica*, Vol. 220, No. 1–4, pp. 315–329, 2011.
- [10] Z. Y. Ou, S. D. Pang, A screw dislocation interacting with a coated nano-inhomogeneity incorporating interface stress, *Materials Science and Engineering A*, Vol. 528, No. 6, pp. 2762–2775, 2011.
- [11] H. M. Shodja, M. Yu. Gutkin, S. S. Moeini-Ardakani, Effect of surface stresses on elastic behavior of a screw dislocation inside the wall of a nanotube, *Physica Status Solidi B*, Vol. 248, No. 6, pp. 1437–1441, 2011.
- [12] S. S. Moeini-Ardakani, M. Yu. Gutkin, H. M. Shodja, Elastic behavior of an edge dislocation inside the wall of a nanotube, *Scripta Materialia*, Vol. 64, No. 8, pp. 709–712, 2011.
- [13] H. Ahmadzadeh-Bakhshayesh, M. Yu. Gutkin, H. M. Shodja, Surface/interface effects on elastic behavior of a screw dislocation in an eccentric core-shell nanowire, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 49, No. 13, pp. 1665–1675, 2012.
- [14] R. Shuttleworth, The surface tension of solids. *Proceeding of the Physical Society*, Sec. A 63, No. 5, pp. 445–458, 1950.
- [15] P. Sharma, S. Ganti, N. Bhate, Effect of surfaces on size-dependent elastic state of nanoinhomogeneities. *Applied Physics Letters*, Vol. 82, No. 4, pp. 535–537, 2003.
- [16] N. I. Muskhelishvili, *Some basic problems of mathematical theory of elasticity*, pp. 16–35, Leyden: Noordhoff, 1975.

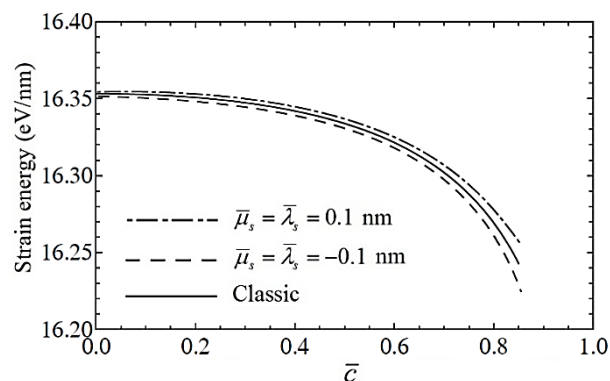


Fig. 14 Dependence of the strain energy on the position of the dislocation with the Burgers vector $b = (0, b_y)$, $\bar{\mu}_2 = 0.9$, and $\bar{\mu}_3 = 0.8$

شکل 14 انرژی نابجایی نسبت به مکان نابجایی برای $\bar{\mu}_2 = 0.9$ ، $b = (0, b_y)$ و $\bar{\mu}_3 = 0.8$

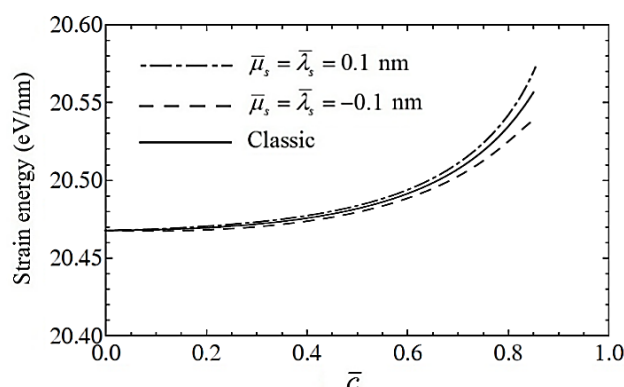


Fig. 15 Dependence of the strain energy on the position of the dislocation with the Burgers vector $b = (0, b_y)$, $\bar{\mu}_2 = 1.1$, and $\bar{\mu}_3 = 1.2$

شکل 15 انرژی نابجایی نسبت به مکان نابجایی برای $\bar{\mu}_2 = 1.1$ ، $b = (0, b_y)$ و $\bar{\mu}_3 = 1.2$

5- مراجع

- [1] H. A. Luo, Y. Chen, An edge dislocation in a three-phase composite cylinder model, *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 58, No. 1, pp. 75–86, 1991.