07,12

Аналитическое выражение для распределения упругой деформации, создаваемой включением в форме многогранника с произвольной собственной деформацией

© А.В. Ненашев[1], А.В. Двуреченский[2]

[1] Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
Новосибирск, Россия
[2] Новосибирский государственный университет,
Новосибирск, Россия
E-mail: nenashev@isp.nsc.ru

(Поступила в Редакцию 28 февраля 2018 г.)

Получены аналитические выражения для вектора смещения, тензора деформации и тензора Эшелби в случае, когда включение в упруго-изотропной бесконечной среде имеет форму многогранника. Собственная деформация (например, рассогласование кристалических решеток) предполагается постоянной внутри включения, но не обязательно гидростатической. Найденные выражения описывают деформацию как внутри включения, так и в его окружении. Показано, что сложная трехмерная конфигурация поля упругой деформации (а также вектора смещения) сводится к комбинации простых функций, имеющих наглядную физическую и геометрическую интерпретацию.

Работа профинансирована Российским научным фондом (грант 14-12-00931 П).

DOI: 10.21883/FTT.2018.09.46394.053

1. Введение

Круг задач, связанных с распределением деформации, индуцированной включением в упругой среде, изучается в течение более чем полувека [1,2], однако и в настоящее время появляются новые результаты (обзор современного состояния можно найти в работах [3–6]). Одним из важных применений задачи о включении является исследование электронных свойств полупроводниковых *квантовых точек*, образующихся в процессе эпитаксиального роста [7–10]. Деформации изменяют положение краев энергетических зон в полупроводниках [11,12] и тем самым модифицируют энергетический спектр носителей заряда. Особенно ярко этот эффект проявляется в гетеросистемах 2-го типа, таких как германий–кремний, где деформация приводит к возникновению потенциальных ям для электронов в окрестности Ge квантовых точек [10–13].

Источником деформации в полупроводниковых гетеросистемах является разница между постоянными решетки включения (I) и матрицы (M), как схематично показано на рис. 1, *a*. Это различие можно интерпретировать как наличие *собственной деформации* $\varepsilon_{ij}^{(0)}$ в материале включения, равной

$$\varepsilon_{xx}^{(0)} = \varepsilon_{yy}^{(0)} = \varepsilon_{zz}^{(0)} = \frac{a_I - a_M}{a_M},$$

$$\varepsilon_{xy}^{(0)} = \varepsilon_{xz}^{(0)} = \varepsilon_{yz}^{(0)} = 0, \tag{1}$$

где a_M и a_I — равновесные параметры решеток матрицы и включения. Когда включение оказывается встроенным в матрицу, происходит перераспределение деформации, которое можно описать как перемещение материала $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ под действием сил, приложенных к границе включения, см. рис. 1, *c*.

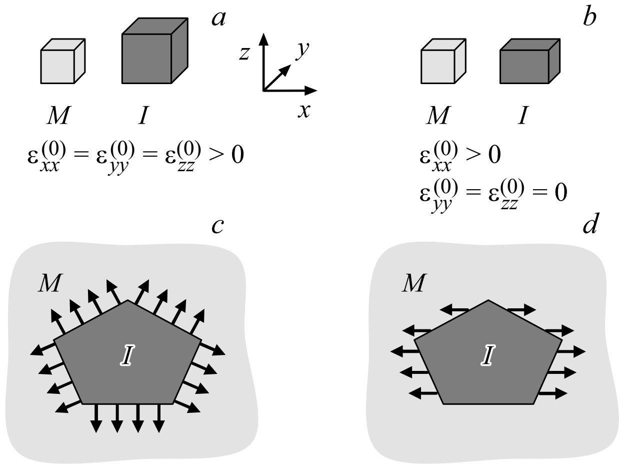

Рис. 1. Иллюстрация различия между гидростатической (a, c) и негидростатической (b, d) собственной деформацией. a — элементарный объем матрицы (M) и включения (I) в релаксированном состоянии в случае гидростатической собственной деформации (материал включения растянут по всем трем направлениям); b — то же для негидростатической собственной деформации, в частном случае когда материал включения растянут только по оси X. Для наглядности растяжение преувеличено; c, d — поверхностные силы, действие которых описывает упругую релаксацию системы „матрица + включение“, в случае гидростатической (c) и негидростатической (d) собственной деформации.

На рис. 1, *a, c* показан случай гидростатической (дилатационной) собственной деформации, когда тензор $\varepsilon_{ij}^{(0)}$ изотропен (как в случае рассогласования решеток между кубическими полупроводниками). Рис. 1, *b, d* демонстрирует пример негидростатической собственной деформации. В этом иллюстративном примере различие между параметрами решетки двух сред имеет место только в направлении оси X. Случай негидростатической собственной деформации, помимо самостоятельного значения, возникает в задаче об упругой *неоднородности* (т.е. включения с модулями упругости, отличными от соответствующих модулей матрицы) как поправка по теории возмущений в рамках метода эффективного включения [14,15].

Целью настоящего исследования является разработка аналитического метода для нахождения пространственного распределения деформации $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$, создаваемой включением, имеющим форму *произвольного многогранника*, с произвольной (гидростатической или негидростатической) собственной деформацией $\varepsilon_{ij}^{(0)}$. Материалы матрицы и включения предполагаются упругоизотропными и имеющими одинаковые модули упругости. Для простоты мы рассмотрим лишь случай *постоянной собственной деформации*. Это, однако, не является ограничением метода: результаты нашей предыдущей работы [5] позволяют обобщить рассмотрение на случай плавно меняющейся в пространстве (полиномиальным образом) собственной деформации. В литературе имеются аналитические решения для случая постоянной собственной деформации [16,17], однако они чрезвычайно сложны и не допускают непосредственного обобщения на случай зависящей от координат собственной деформации. Между тем последний случай важен, во-первых, потому что реальные включения (такие как полупроводниковые квантовые точки) часто имеют плавно меняющийся в пространстве состав [18–20], а во-вторых, потому что задача с переменной собственной деформацией возникает при использовании упомянутого выше метода эффективного включения.

2. Теория

Математическая постановка задачи выглядит следующим образом. Тензор деформации ε_{ij} как функция координат выражается в виде

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial r_i}\right) - \varepsilon_{ij}^{(0)}\chi(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

где $\chi(\mathbf{r}) = 1$ внутри включения и $\chi(\mathbf{r}) = 0$ снаружи. Итоговое распределение деформации определяется уравнениями равновесия, которые имеют вид

$$\frac{\partial \sigma_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = 0, \qquad (3)$$

где σ_{ij} — тензор напряжений, выражаемый через тензор деформации ε_{ij} и упругие константы (коэффициенты Ламэ) λ и μ посредством закона Гука

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \lambda\delta_{ij}\varepsilon_{mm}(\mathbf{r}) + 2\mu\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}). \qquad (4)$$

Как показано в классической работе Эшелби [1], решение уравнений равновесия в данном случае есть комбинация производных от ньютоновского потенциала $\varphi(\mathbf{r})$, создаваемого в точке $\mathbf{r}$ притягивающим веществом, однородно заполняющим объем включения

$$\varphi(\mathbf{r}) = \iiint\limits_V \frac{dV'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \qquad (5)$$

и производных „бигармонического потенциала“ $U(\mathbf{r})$, определяемого как

$$U(\mathbf{r}) = \iiint\limits_V |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\, dV'. \qquad (6)$$

Согласно [1], вектор смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ равен

$$u_i(\mathbf{r}) = -\frac{\sigma_{jk}^{(0)}}{16\pi\mu}\left(4\delta_{ij}\frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial r_k} - \frac{1}{1-\nu}\frac{\partial^3 U(\mathbf{r})}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k}\right), \qquad (7)$$

где $\sigma_{ij}^{(0)}$ — тензор напряжений, соответствующий собственной деформации $\varepsilon_{ij}^{(0)}$ согласно (4), а ν — коэффициент Пуассона. Выражая $\sigma_{ij}^{(0)}$ через $\varepsilon_{ij}^{(0)}$ и учитывая, что $\varphi = \frac{1}{2}\Delta U$ и $\lambda = 2\mu\nu/(1-2\nu)$, получим

$$u_i(\mathbf{r}) = -\frac{1}{8\pi}\left[2\varepsilon_{ik}^{(0)}U_{,kll}(\mathbf{r}) + \frac{\nu}{1-\nu}\varepsilon_{kk}^{(0)}U_{,ill}(\mathbf{r}) - \frac{1}{1-\nu}\varepsilon_{kl}^{(0)}U_{,ikl}(\mathbf{r})\right]. \qquad (8)$$

(Здесь мы используем сокращенное обозначение $U_{,ijk}$ для производных $\partial^3 U/\partial r_i \partial r_j \partial r_k$.) Видно, что компоненты вектора смещения $\mathbf{u}$ являются линейными комбинациями *третьих* производных „бигармонического потенциала“ U.

Подставляя (8) в (2), находим, что компоненты тензора деформации ε_{ij} представляются в виде комбинаций *четвертых* производных от U

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{8\pi}\left(\varepsilon_{ik}^{(0)}U_{,jkll} + \varepsilon_{jk}^{(0)}U_{,ikll} + \frac{\nu}{1-\nu}\varepsilon_{kk}^{(0)}U_{,ijll} - \frac{1}{1-\nu}\varepsilon_{kl}^{(0)}U_{,ijkl}\right) - \varepsilon_{ij}^{(0)}\chi(\mathbf{r}). \qquad (9)$$

Коэффициенты пропорциональности между компонентами тензоров ε_{ij} и $\varepsilon_{kl}^{(0)}$ составляют так называемый тензор Эшелби S_{ijkl}, симметричный по первой и по второй парам индексов:

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = S_{ijkl}(\mathbf{r})\,\varepsilon_{kl}^{(0)} - \chi(\mathbf{r})\,\varepsilon_{ij}^{(0)}. \qquad (10)$$

Сравнивая (9) с (10), находим следующее выражение для тензора S_{ijkl} через производные U

$$S_{ijkl}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{8\pi}\left[\frac{1}{2}\Big(\delta_{ik}U_{,jlmm} + \delta_{jk}U_{,ilmm} + \delta_{il}U_{,jkmm} + \delta_{jl}U_{,ikmm}\Big) + \frac{\nu}{1-\nu}\,\delta_{kl}U_{,ijmm} - \frac{1}{1-\nu}\,U_{,ijkl}\right]. \tag{11}$$

Итак, вычисление вектора смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, тензора деформации $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ и тензора Эшелби $S_{ijkl}(\mathbf{r})$ сводится к нахождению аналитических выражений для третьих и четвертых производных потенциала $U(\mathbf{r})$. В настоящей работе получены такие аналитические выражения (30) и (33), имеющие достаточно простой и компактный вид, для случая включения в форме многогранника.

Для этого мы применили метод, использованный нами в работах [21,5] и аналогичный методу Кувшинова [4]. А именно, мы представили требуемые выражения в виде комбинаций некоторых достаточно простых двумерных и одномерных интегралов по граням и ребрам поверхности включения. Для целей данной работы нам понадобятся следующие интегралы (индекс α нумерует грани, β — ребра, а γ — вершины поверхности)

$$\tilde{\Phi}_\alpha(\mathbf{r}) = \iint\limits_{\text{on facet}\,\alpha} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\, dS', \tag{12}$$

где dS' — элемент площади грани, по которой пробегает вектор $\mathbf{r}'$,

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}) = \iint\limits_{\text{on facet}\,\alpha} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, dS', \tag{13}$$

$$\Omega_\alpha(\mathbf{r}) = \iint\limits_{\text{on facet}\,\alpha} \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\mathbf{n}_\alpha}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\, dS', \tag{14}$$

где $\mathbf{n}_\alpha$ — единичный вектор, направленный по нормали к грани α изнутри включения наружу (см. рис. 2),

$$\tilde{L}_\beta(\mathbf{r}) = \int\limits_{\text{on edge}\,\beta} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\, dl', \tag{15}$$

где dl' — элемент длины ребра, по которому пробегает вектор $\mathbf{r}'$,

$$L_\beta(\mathbf{r}) = \int\limits_{\text{on edge}\,\beta} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, dl', \tag{16}$$

$$\Lambda_\beta(\mathbf{r}) = \int\limits_{\text{on edge}\,\beta} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\, dl'. \tag{17}$$

Покажем теперь, что третьи и четвертые производные потенциала $U(\mathbf{r})$ являются комбинациями интегралов Ω_α, L_β и Λ_β, для которых известны простые аналитические выражения. Для этого, помимо обозначения $\mathbf{n}_\alpha$ для вектора нормали к грани α, введем обозначения $\mathbf{b}_{\alpha\beta}$ для единичного вектора, направленного „изнутри наружу“

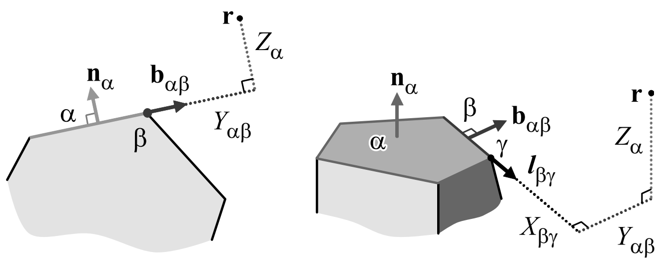

Рис. 2. Единичные векторы $\mathbf{n}_\alpha$, $\mathbf{b}_{\alpha\beta}$, $\mathbf{l}_{\beta\gamma}$ и компоненты радиус-вектора $X_{\beta\gamma}$, $Y_{\alpha\beta}$, Z_α: проекция на плоскость, перпендикулярную ребру β (слева) и вид сбоку (справа). $\mathbf{n}_\alpha$ — нормаль к грани α; $\mathbf{b}_{\alpha\beta}$ — вектор, перпендикулярный к ребру β и лежащий в плоскости грани α; $\mathbf{l}_{\beta\gamma}$ — вектор вдоль ребра β, направленный к вершине γ от противоположной ей вершины.

грани α перпендикулярно к смежному с ней ребру β; и $\mathbf{l}_{\beta\gamma}$ для единичного вектора вдоль ребра β, выходящего из него в вершине γ (рис. 2). Обозначим также через Z_α, $Y_{\alpha\beta}$, $X_{\beta\gamma}$ проекции радиус-вектора $\mathbf{r}$, взятого относительно соответствующих элементов многогранника, на единичные векторы $\mathbf{n}_\alpha$, $\mathbf{b}_{\alpha\beta}$, $\mathbf{l}_{\beta\gamma}$:

$$Z_\alpha(\mathbf{r}) = (\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha)\cdot\mathbf{n}_\alpha, \tag{18}$$

$$Y_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = (\mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta)\cdot\mathbf{b}_{\alpha\beta}, \tag{19}$$

$$X_{\beta\gamma}(\mathbf{r}) = (\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma)\cdot\mathbf{l}_{\beta\gamma}, \tag{20}$$

где $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{r}_\beta$, $\mathbf{r}_\gamma$ — радиус-векторы произвольно выбранных точек на грани α и ребре β и радиус-вектор вершины γ соответственно. Проекцию вектора $\mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta$ на плоскость, перпендикулярную ребру β, обозначим $\mathbf{R}_{\perp\beta}$

$$\mathbf{R}_{\perp\beta}(\mathbf{r}) = Z_\alpha\mathbf{n}_\alpha + Y_{\alpha\beta}\mathbf{b}_{\alpha\beta} = \mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta - [(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta)\cdot\mathbf{l}_{\beta\gamma}]\,\mathbf{l}_{\beta\gamma}. \tag{21}$$

С помощью этих обозначений производные по $\mathbf{r}$ от интегралов U, $\tilde{\Phi}$, Φ, $\tilde{L}$, L, Ω выражаются в следующем виде:

$$\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}} = -\sum_\alpha \mathbf{n}_\alpha\tilde{\Phi}_\alpha, \tag{22}$$

где суммирование идет по всем граням поверхности включения;

$$\frac{\partial\tilde{\Phi}_\alpha}{\partial\mathbf{r}} = \mathbf{n}_\alpha Z_\alpha\Phi_\alpha - \sum_\beta \mathbf{b}_{\alpha\beta}\tilde{L}_\beta, \tag{23}$$

$$\frac{\partial\Phi_\alpha}{\partial\mathbf{r}} = -\mathbf{n}_\alpha\Omega_\alpha - \sum_\beta \mathbf{b}_{\alpha\beta}L_\beta, \tag{24}$$

$$\frac{\partial(Z_\alpha\Omega_\alpha)}{\partial\mathbf{r}} = \mathbf{n}_\alpha\Omega_\alpha + Z_\alpha\sum_\beta(\mathbf{n}_\alpha Y_{\alpha\beta} - \mathbf{b}_{\alpha\beta}Z_\alpha)\Lambda_\beta, \tag{25}$$

где индекс β пробегает по ребрам, окружающим грань α;

$$\frac{\partial\tilde{L}_\beta}{\partial\mathbf{r}} = \mathbf{R}_{\perp\beta}L_\beta - \sum_\gamma \mathbf{l}_{\beta\gamma}\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma|, \tag{26}$$

$$\frac{\partial L_\beta}{\partial\mathbf{r}} = -\mathbf{R}_{\perp\beta}\Lambda_\beta - \sum_\gamma \frac{\mathbf{l}_{\beta\gamma}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma|}, \tag{27}$$

где индекс γ пробегает по двум вершинам, ограничивающим ребро β;

$$\frac{\partial|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma|}{\partial\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma|}. \tag{28}$$

Кроме того, как следует из формулы (55) в работе [5], интеграл Φ_α сводится к комбинации величин Ω_α и L_β:

$$\Phi_\alpha = -Z_\alpha\Omega_\alpha - \sum_\beta Y_{\alpha\beta}L_\beta, \tag{29}$$

где сумма пробегает по ребрам, окружающим грань α.

Применяя последовательно формулы (22)−(24), (26), (29), легко найти выражение для третьих производных $U_{,ijk} \equiv \partial^3 U/\partial r_i\partial r_j\partial r_k$ потенциала $U(\mathbf{r})$

$$U_{,ijk}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha 2n_{\alpha i}n_{\alpha j}n_{\alpha k}Z_\alpha\Omega_\alpha + \sum_\beta p^{(\beta)}_{ijkl}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta)_l L_\beta + \sum_\gamma q^{(\gamma)}_{ijk}|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma|. \tag{30}$$

Здесь индексы α, β, γ пробегают по всем граням, ребрам и вершинам многогранника, соответственно. Тензоры $p^{(\beta)}_{ijkl}$ и $q^{(\gamma)}_{ijk}$ не зависят от $\mathbf{r}$ и выражаются следующим образом через единичные векторы $\mathbf{n}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{l}$:

$$p^{(\beta)}_{ijkl} = \sum_\alpha \big[n_{\alpha i}n_{\alpha j}(n_{\alpha k}b_{\alpha\beta l} + b_{\alpha\beta k}n_{\alpha l}) + n_{\alpha i}b_{\alpha\beta j}(n_{\alpha k}n_{\alpha l} + b_{\alpha\beta k}b_{\alpha\beta l})\big], \tag{31}$$

где суммирование происходит по двум граням, сходящимся в ребре β;

$$q^{(\gamma)}_{ijk} = -\sum_{(\alpha,\beta)} n_{\alpha i}b_{\alpha\beta j}l_{\beta\gamma k}, \tag{32}$$

где суммирование имеет место по парам „грань + смежное с ней ребро" таким, что и грань и ребро проходят через вершину γ.

Аналогично, используя (22)−(28), найдем четвертые производные потенциала U

$$U_{,ijkl}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha 2n_{\alpha i}n_{\alpha j}n_{\alpha k}n_{\alpha l}\Omega_\alpha + \sum_\beta p^{(\beta)}_{ijkl}L_\beta + \sum_\beta v^{(\beta)}_{ijklmn}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta)_m(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\beta)_n\Lambda_\beta + \sum_\gamma w^{(\gamma)}_{ijklm}\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma)_m}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma|}. \tag{33}$$

Входящие в эту формулу тензоры $p^{(\beta)}_{ijkl}$, $v^{(\beta)}_{ijklmn}$ и $w^{(\gamma)}_{ijklm}$ не зависят от $\mathbf{r}$ и являются комбинациями единичных векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{l}$

$$v^{(\beta)}_{ijklmn} = \sum_\alpha n_{\alpha i}\Big\{n_{\alpha j}n_{\alpha k}n_{\alpha m}(n_{\alpha l}b_{\alpha\beta n} - b_{\alpha\beta l}n_{\alpha n}) - \big[n_{\alpha j}b_{\alpha\beta k}n_{\alpha m} + b_{\alpha\beta j}(n_{\alpha k}n_{\alpha m} + b_{\alpha\beta k}b_{\alpha\beta m})\big] \times (n_{\alpha l}n_{\alpha n} + b_{\alpha\beta l}b_{\alpha\beta n})\Big\}, \tag{34}$$

$$w^{(\gamma)}_{ijklm} = -\sum_{(\alpha,\beta)} n_{\alpha i}\big[n_{\alpha j}b_{\alpha\beta k}l_{\beta\gamma l}n_{\alpha m} + b_{\alpha\beta j}l_{\beta\gamma k}\delta_{lm} + b_{\alpha\beta j}l_{\beta\gamma l}(n_{\alpha k}n_{\alpha m} + b_{\alpha\beta k}b_{\alpha\beta m})\big]. \tag{35}$$

Суммирование в (34) и (35) происходит по тому же принципу, что и в (31) и (32) соответственно. Тензор $p^{(\beta)}_{ijkl}$ был определен выше.

Последнее, что необходимо сделать, — это выразить величины $\Omega_\alpha(\mathbf{r})$, $L_\beta(\mathbf{r})$ и $\Lambda_\beta(\mathbf{r})$, фигурирующие в (30) и (33), через элементарные функции. Этим величинам можно придать следующий наглядный смысл. $L_\beta(\mathbf{r})$ — это кулоновский потенциал, создаваемый равномерно заряженным (с единичной плотностью) ребром β в точке $\mathbf{r}$. $\Lambda_\beta(\mathbf{r})$ отличается от $L_\beta(\mathbf{r})$ тем, что „потенциал взаимодействия" убывает с расстоянием как r^{-3}, а не как r^{-1}. Одномерные интегралы L_β и Λ_β вычисляются элементарно

$$L_\beta(\mathbf{r}) = \ln\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\gamma_1}| + |\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\gamma_2}| + |\mathbf{r}_{\gamma_1}-\mathbf{r}_{\gamma_2}|}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\gamma_1}| + |\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\gamma_2}| - |\mathbf{r}_{\gamma_1}-\mathbf{r}_{\gamma_2}|}, \tag{36}$$

$$\Lambda_\beta(\mathbf{r}) = -\frac{1}{(\mathbf{R}_{\perp\beta})^2}\left(\frac{X_{\beta\gamma_1}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\gamma_1}|} + \frac{X_{\beta\gamma_2}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\gamma_2}|}\right), \tag{37}$$

где индексы γ_1 и γ_2 относятся к двум вершинам, ограничивающим ребро β; $\mathbf{r}_{\gamma_1}$ и $\mathbf{r}_{\gamma_2}$ — радиус-векторы этих вершин. Наконец, $\Omega_\alpha(\mathbf{r})$ — это потенциал в точке $\mathbf{r}$, создаваемый дипольным слоем, равномерно распределенным по грани α (дипольный момент направлен в сторону нормали $\mathbf{n}_\alpha$). Как известно [22], модуль этой величины $|\Omega_\alpha(\mathbf{r})|$ равен *телесному углу*, под которым видна грань α из точки $\mathbf{r}$. Знак $\Omega_\alpha(\mathbf{r})$ равен знаку Z_α, т.е. положителен, если точка $\mathbf{r}$ находится с той стороны от грани α, в которую направлена нормаль $\mathbf{n}_\alpha$, и отрицателен в противном случае. Явные выражения для $\Omega_\alpha(\mathbf{r})$ через элементарные (обратные тригонометрические) функции можно найти в [23–25] для треугольной грани и в [25] для прямоугольной грани. Грань более сложной формы можно разбить на треугольники, либо воспользоваться методом вычисления из работы [24].

3. Пример

На рис. 3 показан пример вычисления вектора смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, тензора деформации $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ и тензора напряжений $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ с помощью полученных нами аналитических выражений.

В качестве модельной структуры взято включение пирамидальной формы с квадратным основанием

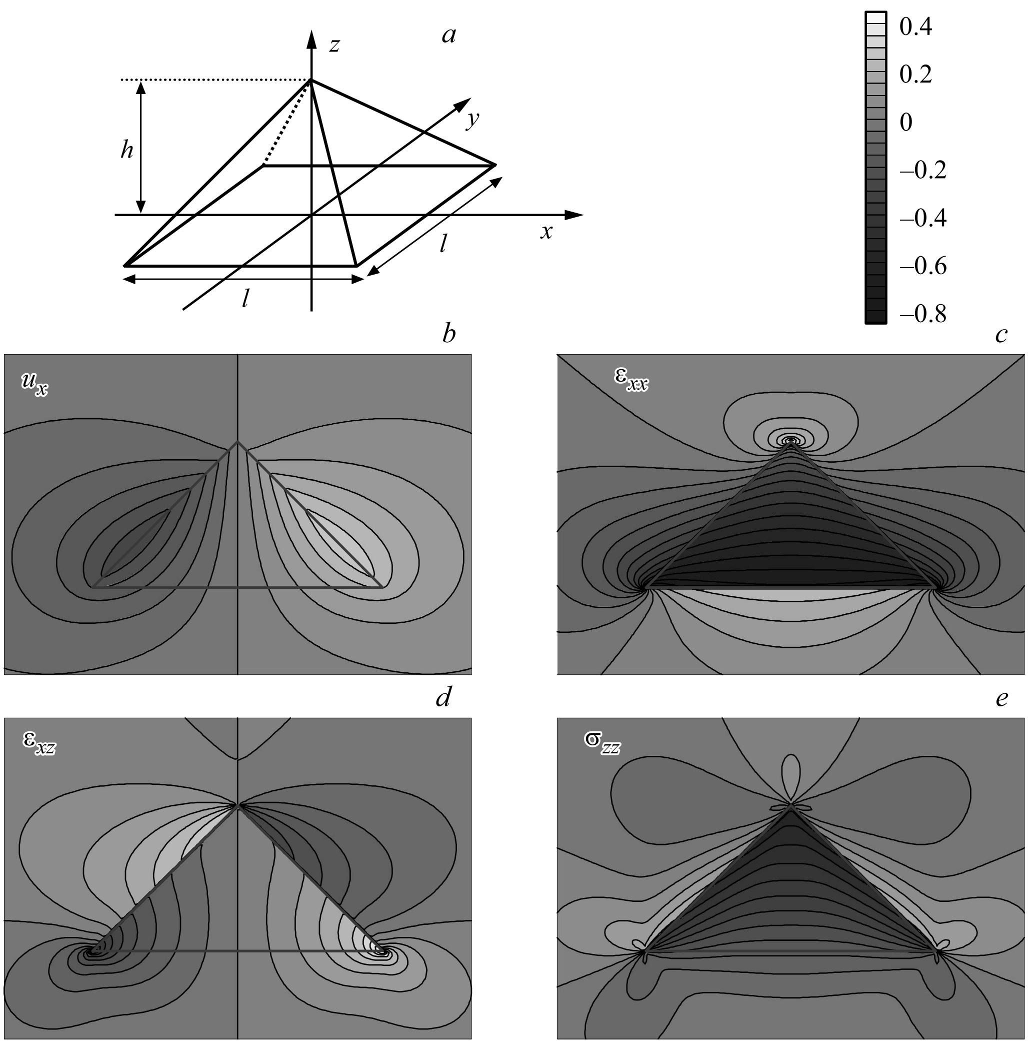

Рис. 3. Компоненты вектора смещения $\mathbf{u}_x(\mathbf{r})$, тензора деформации $\varepsilon_{xx}(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{xy}(\mathbf{r})$ и тензора напряжений $\sigma_{zz}(\mathbf{r})$ для включения пирамидальной формы с собственной деформацией, имеющей характер растяжения по оси X ($\varepsilon_{xx}^{(0)} > 0$, остальные компоненты $\varepsilon_{ij}^{(0)}$ равны нулю). Указанные компоненты приведены в сечении плоскостью $y = 0$, темным треугольником показана граница включения. Значения тензора деформации нормированы на $\varepsilon_{xx}^{(0)}$, тензора напряжений — на $\mu\varepsilon_{xx}^{(0)}$, вектора смещения — на $h\varepsilon_{xx}^{(0)}$.

(рис. 3, a). Размер основания l и высота пирамиды h соотносятся как $l = 2h$. Коэффициент Пуассона ν принят равным 0.25. Как и на рис. 1, b, d, собственная деформация внутри пирамидального включения имела только одну ненулевую компоненту $\varepsilon_{xx}^{(0)} > 0$.

Этот расчет можно рассматривать как численный тест корректности полученных в данной работе аналитических результатов. Действительно, мы проверили, что найденные величины $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ и $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ обладают следующими свойствами: (i) они стремятся к нулю при $|\mathbf{r}| \to \infty$; (ii) функция $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ непрерывна на границе включения (рис. 3, b); (iii) ε_{ij} выражается через производные $\mathbf{u}$ согласно (2); (iv) σ_{ij} и ε_{ij} связаны посредством закона Гука (4); (v) производные σ_{ij} удовлетворяют уравнению равновесия (3); (vi) компоненты тензора деформации σ_{ij}, ортогональные к какой-либо грани поверхности включения, непрерывны на этой грани — например, компоненты $\sigma_{xz} = 2\mu\varepsilon_{xz}$ (рис. 3, d) и σ_{zz} (рис. 3, e) на нижней грани. Эти свойства в совокупности гарантируют, что найденные нашим методом функции $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ и $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ действительно являются решениями уравнений теории упругости.

4. Заключение

Полученные результаты можно подытожить следующим образом. Найдены аналитические выражения для вектора смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ [формулы (8) и (30)], тензора деформации $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ [формулы (9) и (33)] и тензора Эшелби $S_{ijkl}(\mathbf{r})$ [формулы (11) и (33)] в случае, когда включение в упруго-изотропной бесконечной среде имеет форму многогранника. Собственная деформация $\varepsilon_{ij}^{(0)}$ (например, рассогласование кристалических решеток) предполагается постоянной внутри включения, но не обязательно гидростатической. Найденные выражения описывают деформацию как внутри включения, так и в его окружении. Константы $p_{ijkl}^{(\beta)}$, $q_{ijk}^{(\gamma)}$, $v_{ijklmn}^{(\beta)}$, $w_{ijklm}^{(\gamma)}$, входящие в эти формулы, определяются ориентацией граней и ребер поверхности включения согласно (31), (32), (34) и (35). Сложная трехмерная конфигурация поля упругой деформации (а также вектора смещения) сводится к комбинации простых функций Ω_α, L_β и Λ_β, имеющих наглядную физическую и геометрическую интерпретацию. Следует заметить, что в случае *гидростатической* собственной деформации ($\varepsilon_{ij}^{(0)} \propto \delta_{ij}$) выражения для $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ значительно упрощаются и приобретают вид, рассмотренный в статьях [21,5].

Работа профинансирована Российским научным фондом (грант 14-12-00931 П).

Список литературы

[1] J.D. Eshelby. Proc. Roy. Soc. London A **241**, 376 (1957).
[2] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*. Springer (1987).
[3] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Rev. Adv. Mater. Sci. **9**, 17 (2005).
[4] B.N. Kuvshinov. Int. J. Solids Structures **45**, 1352 (2008).
[5] A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii. J. Appl. Phys. **121**, 125102 (2017).
[6] C. Pan, Q. Yu. Int. J. Mech. Sci. **126**, 142 (2017).
[7] M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. Phys. Rev. B **52**, 11969 (1995).
[8] C. Pryor. Phys. Rev. B **57**, 7190 (1998).
[9] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg. Phys. Rev. B **59**, 5688 (1999).
[10] A.V. Dvurechenskii, A.V. Nenashev, A.I. Yakimov. Nanotechnology **13**, 75 (2002).
[11] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
[12] C.G. Van de Walle. Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
[13] A.F. Zinovieva, A.I. Nikiforov, V.A. Timofeev, A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii, L.V. Kulik. Phys. Rev. B **88**, 235308 (2013).
[14] H.J. Chu, E. Pan, J.J. Ramsey, J. Wang, C.X. Xue. Int. J. Solids Structures **48**, 673 (2011).
[15] L. Ma, A.M. Korsunsky. Int. J. Solids Structures **51**, 4477 (2014).
[16] G.J. Rodin. J. Mech. Phys. Solids **44**, 1977 (1996).
[17] H. Nozaki, M. Taya. J. Appl. Mech. **68**, 441 (2000).
[18] P. Offermans, P.M. Koenraad, J.H. Wolter, K. Pierz, M. Roy, P.A. Maksym. Phys. Rev. B **72**, 165332 (2005).
[19] M. Stoffel, A. Malachias, A. Rastelli, T.H. Metzger, O.G. Schmidt. Appl. Phys. Lett. **94**, 253114 (2009).
[20] A. Picco, E. Bonera, F. Pezzoli, E. Grilli, O.G. Schmidt, F. Isa, S. Cecchi, M. Guzzi. Nanoscale Res. Lett. **7**, 633 (2012).
[21] A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii. J. Appl. Phys. **107**, 064322 (2010).
[22] И.Е. Тамм. Основы теории электричества. Наука, М. (1976).
[23] A. Van Oosterom, J. Strackee. IEEE Transact. Biomed. Eng. **BME-30**, 125 (1983).
[24] R.A. Werner, D.J. Scheeres. Celestial Mech. Dynam. Astronomy **65**, 313 (1996).
[25] A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii. arXiv:0707.2183 (2007).

Редактор Т.Н. Василевская