Физика твердого тела, 2013, том 55, вып. 1

07

Тензор Грина кристаллов гексагональной системы

© П.Н. Остапчук

Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина

E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 11 мая 2012 г.)

Методом Лифшица–Розенцвейга получены выражения для компонент тензора Грина основного уравнения теории упругости в случае кристаллов гексагональной системы. Задача в принципе сводится к нахождению корней некоторого алгебраического уравнения шестрой степени. Для всех известных ГПУ-металлов они либо комплексные, либо чисто мнимые. В обоих случаях искомые компоненты тензора Грина вычисляются точно в отличие от металлов кубической системы. Показан предельный переход к изотропному приближению.

1. Введение

Интерес к ГПУ-металлам частично обусловлен их применением в атомной энергетике в качестве конструкционных материалов активных зон реакторов [1]. Так, циркониевые сплавы, обладая низким сечением захвата нейтронов, хорошей радиационной и коррозионной стойкостью, являются основным материалом топливных оболочек в тепловых реакторах с водяным охлаждением. Бериллий используют при изготовлении отражателей и замедлителей нейтронов, а также окон для датчиков рентгеновского и нейтронного излучения.

Для теоретического описания поведения реальных кристаллов при внешних воздействиях (в том числе при облучении частицами больших энергий) часто используется приближение неограниченной непрерывной упругой среды. Одной из ее характеристик является тензорная функция Грина (далее тензор Грина), позволяющая по известной реакции такой среды на сосредоточенную силу найти смещение в любой ее точке, вызванное произвольным распределением сил. Если источником этих сил выступает протяженный внутренний дефект (дислокация, пора и т. д.) кристалла, то знание тензора Грина позволяет найти энергию упругого взаимодействия такого макродефекта с точечными дефектами (ТД), создаваемыми в кристалле облучением [2] (вакансиями и собственными межузельными атомами (СМА)). Поскольку внутренние протяженные дефекты служат стоками для неравновесных ТД, эта энергия определяет эффективность их упругого взаимодействия, лежащую в основе концепции стокового преферанса — предпочтительного поглощения точечных дефектов определенного сорта стоком данного типа. Согласно современным представлениям, именно преферанс является причиной разделения диффузионных потоков ТД между стоками разного типа, что в конечном счете приводит к размерной нестабильности облучаемого материала — явлению вакансионного распухания. Интересно отметить, что циркониевые сплавы весьма устойчивы к распуханию: вместо вакансионных пор в них, как правило, образуются и эволюционируют вакансионные дислокационные петли в базисных плоскостях [3], что противоречит стандартным представлениям о дислокационном преференсе [4] к СМА. Возможно, их следует пересмотреть, учитывая анизотропию упругих свойств реальных кристаллов гексагональной системы. В связи с этим становится понятной актуальность задачи, отраженной в названии настоящей работы. Регулярный метод построения тензора Грина в случае неограниченной упругоанизотропной среды был предложен Лифшицем и Розенцвейгом в работе [5]. Было показано, что задача сводится к вычетам и подразумевает нахождение корней некоторого алгебраического уравнения шестой степени. Коэффициенты в этом уравнении вещественны; следовательно, корни являются попарно сопряженными, т. е. сумма вычетов содержит три слагаемых. Расположение полюсов в нужной полуплоскости комплексной переменной определяется конкретными значениями упругих модулей кристалла, и это обстоятельство не позволяет решить задачу в общем виде в случае кристалла кубической системы [6]. Показано, что для одних ГПУ-металлов искомые полюса чисто мнимые, а для других — комплексные. Тем не менее для всех них задача нахождения тензора Грина решается точно в общем виде.

2. Основные соотношения метода

Идея метода построения тензорной функции Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упругоанизотропной среды [5] состоит в следующем. Как известно, смещение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, возникающее в среде под действием приложенной в начале координат силы $\mathbf{f}$, удовлетворяет систему уравнений

$$C_{iklm}\frac{\partial^2 u_l(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r}) f_i, \qquad u_l(\infty) \to 0, \tag{1}$$

где C_{iklm} — тензор модулей упругости анизотропной среды. Искомый тензор Грина определяется соотношением

$$u_l(\mathbf{r}) = G_{ln}(\mathbf{r}) f_n, \tag{2}$$

т. е. является решением системы

$$C_{iklm}\frac{\partial^2 G_{ln}(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r})\delta_{in}. \tag{3}$$

Поэтому, если мы найдем $u_l(\mathbf{r})$ и в нем заменим f_i на δ_{in}, получим компоненту G_{ln} тензора Грина. Таким образом, задача сводится к отысканию решения (1). Следуя [5], будем искать его в виде интеграла Фурье, используя соответствующее разложение δ-функции

$$u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\boldsymbol{\xi}) \exp(i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi},$$

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \tag{4}$$

Подстановка (4) в (1) дает для амплитуд Фурье $V_l(\boldsymbol{\xi})$ систему алгебраических уравнений

$$C_{iklm} V_l(\boldsymbol{\xi}) \xi_k \xi_m = \frac{1}{(2\pi)^3} f_i. \tag{5}$$

Для гексагонального кристалла тензор модулей упругости в кристаллографической системе координат имеет вид

$$C_{iklm} = a\delta_{ik}\delta_{lm} + b(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl})$$
$$+ \gamma\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{l3}\delta_{m3} + \chi(\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{lm} + \delta_{ik}\delta_{l3}\delta_{m3})$$
$$+ \rho(\delta_{im}\delta_{k3}\delta_{l3} + \delta_{il}\delta_{k3}\delta_{m3} + \delta_{kl}\delta_{i3}\delta_{m3} + \delta_{km}\delta_{i3}\delta_{m3}), \tag{6}$$

где

$$a = C_{12}, \quad b = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \quad \chi = C_{13} - C_{12},$$

$$\rho = C_{55} - \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \ \gamma = C_{11} + C_{33} - 4C_{55} - 2C_{13},$$

C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, $C_{55} = C_{44}$ — минимальное число отличных от нуля упругих модулей. Таким образом, вместо (5) с учетом (6) имеем

$$(b\xi^2 + \rho\xi_3^2)V_i(\boldsymbol{\xi}) + \left[(\chi+\rho)\xi_i\xi_3 + \delta_{i3}(\gamma\xi_3^2 + \rho\xi^2)\right] V_3(\boldsymbol{\xi})$$
$$+ \left[(a+b)\xi_i + \delta_{i3}(\chi+\rho)\xi_3\right](\boldsymbol{\xi}\mathbf{V}) = \frac{1}{(2\pi)^3} f_i. \tag{7}$$

Умножая (7) на ξ_i и суммируя по i, получаем уравнение для скалярного произведения $(\boldsymbol{\xi}\mathbf{V})$

$$\left[(a+2b)\xi^2 + (\chi+2\rho)\xi_3^2\right](\boldsymbol{\xi}\mathbf{V})$$
$$+ \left[(\chi+2\rho)\xi^2 + \gamma\xi_3^2\right]\xi_3 V_3(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\boldsymbol{\xi}\mathbf{f}. \tag{8}$$

После этого для амплитуд Фурье получаем явные выражения

$$(2\pi)^3 V_3(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{D(\boldsymbol{\xi})}\Big\{(a+b+\chi+\rho)\xi_3(f_1\xi_1 + f_2\xi_2)$$
$$- \left[(a+2b)\xi^2 - (a+b-\rho)\xi_3^2\right] f_3\Big\}, \tag{9}$$

$$(2\pi)^3 V_\alpha(\boldsymbol{\xi}) = \frac{f_\alpha}{b\xi^2 + \rho\xi_3^2} + \frac{\xi_\alpha(f_1\xi_1 + f_2\xi_2)}{D(\boldsymbol{\xi})(b\xi^2 + \rho\xi_3^2)}$$
$$\times \left[(a+b)(b+\rho)\xi^2 + \{(a+b)(\gamma+\rho) - (\chi+\rho)^2\}\xi_3^2\right]$$
$$+ (a+b+\chi+\rho)\frac{\xi_\alpha\xi_3}{D(\boldsymbol{\xi})} f_3, \quad \alpha = 1, 2 \tag{10}$$

$$D(\boldsymbol{\xi}) = (a+b+\chi+\rho)\xi_3^2\left[(\chi+2\rho)\xi^2 + \gamma\xi_3^2\right]$$
$$- \left[(a+2b)\xi^2 + (\chi+2\rho)\xi_3^2\right]$$
$$\times \left[(b+\rho)\xi^2 + (\chi+\gamma+2\rho)\xi_3^2\right]. \tag{11}$$

В силу действительности выражений (9), (10) интеграл (4) можно записать в виде

$$u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\boldsymbol{\xi}) \cos(\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}) d^2\xi$$
$$= \int \frac{\Delta_{lk}(\mathbf{e}) f_k}{\Delta(\mathbf{e})} \left(\int_0^\infty \cos\{r\xi(\mathbf{ne})\} d\xi\right) d\Omega(\mathbf{e}), \tag{12}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$; $\mathbf{e} = \mathbf{x}/\xi$, $\frac{\Delta_{lk}(\mathbf{e}) f_k}{\Delta(\mathbf{e})} = \xi^2 V_l(\mathbf{x})$, а второе интегрирование проводится по полному телесному углу в пространстве векторов $\mathbf{x}$. Разложим единичный вектор $\mathbf{e}$ по двум взаимно перпендикулярным направлениям, заданным единичными векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{t}$ (вектор $\mathbf{t}$ лежит в плоскости, образованной векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{e}$),

$$\mathbf{e} = (\mathbf{ne})\mathbf{n} + \sqrt{1 - (\mathbf{ne})^2}\,\boldsymbol{\tau} \equiv x\mathbf{n} + \sqrt{1 - x^2}\,\boldsymbol{\tau}, \ \ x \equiv (\mathbf{ne}). \tag{13}$$

Тогда элемент телесного угла $d\Omega(\mathbf{e})$ в (12) может быть записан в виде

$$d\Omega(\mathbf{e}) = dx d\varphi_t. \tag{14}$$

Угол φ_t лежит в плоскости, перпендикулярной радиус-вектору $\mathbf{n}$, и отсчитывается от произвольно выбранного направления в этой плоскости. Интеграл по ξ в (12) выражается через δ-функцию

$$\int_0^\infty \cos\{r\,\xi x\} d\xi = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ir\,\xi x) d\xi = \frac{\pi}{r}\,\delta(x), \tag{15}$$

так что в результате интегрирования по x с учетом (13) имеем

$$u_l(\mathbf{r}) = \frac{\pi}{r}\int_0^{2\pi} \frac{\Delta_{lk}\big(\boldsymbol{\tau}(\theta,\varphi,\varphi_{\boldsymbol{\tau}})\big) f_k}{\Delta\big(\boldsymbol{\tau}(\theta,\varphi,\varphi_{\boldsymbol{\tau}})\big)} d\varphi_t. \tag{16}$$

Тот факт, что $u_l(\mathbf{r})$, а следовательно, и компоненты искомого тензора Грина — однородные функции координат первого порядка, заранее очевиден. Он следует из вида уравнений (1), (3) и свойства δ-функции $\delta(\alpha\mathbf{r}) = \alpha^{-3}\delta(\mathbf{r})$. Теперь остается выразить компоненты τ_i через φ_t и полярные углы радиус-вектора θ, φ, после чего вычислить интеграл (16). Нетрудно показать, что

$$\tau_1 = \cos\varphi_t(\sin\varphi - z\cos\theta\cos\varphi),$$
$$\tau_2 = \cos\varphi_t(-\cos\varphi - z\cos\theta\sin\varphi), \tag{17}$$
$$\tau_3 = \cos\varphi_t z\sin\theta, \qquad z \equiv \operatorname{tg}\varphi_t.$$

Подставляя (17) в (16) и переходя к переменной z, окончательно получаем

$$u_l(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{r} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_{lk}(\theta, \varphi, z) f_k}{\Delta(\theta, \varphi, z)} dz. \tag{18}$$

Интеграл (18) берется с помощью вычетов подынтегральной функции относительно полюсов, расположенных в верхней полуплоскости.

3. Компоненты тензора Грина

Начнем с компоненты $u_3(\mathbf{r})$. Для нее эти полюсы являются корнями биквадратного уравнения относительно переменной z, которое следует из (11) после замены $\mathbf{e}$ на $\mathbf{t}$ и подстановки выражений (17),

$$\Delta(\theta, \varphi, z) = A(\theta)z^4 - B(\theta)z^2 - k = 0,$$

$$A(\theta) = (m \sin^4\theta - l \sin^2\theta - k),$$

$$B(\theta) = (l \sin^2\theta + 2k), \tag{19}$$

где $k = (a + 2b)(b + \rho)$, $m = (a + b - \rho)\gamma - (\chi + 2\rho)^2$, $l = (a + 2b)\gamma + (2b - \chi)(\chi + 2\rho)$. Применяя теорему о вычетах, из (18) получаем

$$4\pi r u_3(\mathbf{r}) = \frac{i}{\sqrt{B^2 + 4Ak}} \left[\frac{\Delta_{3k}(z_1) f_k}{z_1} - \frac{\Delta_{3k}(z_2) f_k}{z_2} \right]. \tag{20}$$

Числитель дроби в квадратных скобках (20) следует из (9) после замены $\mathbf{e}$ на $\mathbf{t}$ и подстановки выражений (17)

$$\Delta_{3k}(z) f_k = (a + b + \chi + \rho)$$
$$\times [z(f_1 n_2 - f_2 n_1) - z^2(f_1 n_1 + f_2 n_2) n_3]$$
$$- \left[(a + 2b) + \left\{(a + 2b) - (a + b - \rho)(1 - n_3^2)\right\} z^2\right] f_3. \tag{21}$$

Здесь $n_1 = \sin\theta \cos\varphi$, $n_2 = \sin\theta \sin\varphi$, $n_3 = \cos\theta$ — компоненты единичного вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Заметим, что линейное по z слагаемое в (21) вклада в (20) не вносит. В результате

$$4\pi r u_3(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\sqrt{B^2 + 4Ak}}$$
$$\times \left\{ (a + b + \chi + \rho)(f_1 n_1 + f_2 n_2) n_3 (z_1 - z_2) \right.$$
$$+ \left(\left[(b + \rho) + (a + b - \rho) n_3^2\right] (z_1 - z_2) \right.$$
$$\left. \left. + (a + 2b) \left(\frac{1}{z_1} - \frac{1}{z_2} \right) \right) f_3 \right\}. \tag{22}$$

Заменяя f_k на δ_{kn}, с учетом (6) получаем соответствующие компоненты тензора Грина

$$G_{3\alpha}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{4\pi r} \frac{n_\alpha n_3}{\sqrt{B^2 + 4Ak}} (C_{13} + C_{55})(z_1 - z_2), \ \alpha = 1, 2,$$

$$G_{33}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi r} \frac{i}{\sqrt{B^2 + 4Ak}}$$
$$\times \left(\left[C_{55} + (C_{11} - C_{55}) n_3^2\right] (z_1 - z_2) + C_{11} \left(\frac{1}{z_1} - \frac{1}{z_2} \right) \right). \tag{23}$$

Если дискриминант $B^2 + 4AK > 0$, искомые полюса чисто мнимые и компактно могут быть записаны в виде $z_\beta = i\sqrt{p_\beta(n_3)/q(n_3)}$ $(\beta = 1, 2)$, где

$$p_1(n_3) = 2k + (l + \sqrt{l^2 + 4km})(1 - n_3^2),$$

$$p_2(n_3) = 2k + (l - \sqrt{l^2 + 4km})(1 - n_3^2),$$

$$q(n_3) = 2\left[k + l(1 - n_3^2) - m(1 - n_3^2)^2\right]. \tag{24}$$

Тогда

$$\sqrt{B^2 + 4Ak} = \sqrt{l^2 + 4km}(1 - n_3^2),$$

$$(z_1 - z_2) = i \sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} \sqrt{\frac{p_\beta(n_3)}{q(n_3)}},$$

$$\left(\frac{1}{z_1} - \frac{1}{z_2} \right) = \frac{1}{i} \sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} \sqrt{\frac{q(n_3)}{p_\beta(n_3)}},$$

мнимая единица сокращается, и цель достигнута. Согласно работам [7,8], в которых приведены экспериментальные значения упругих модулей ряда гексагональных металлов, данная ситуация реализуется для таких металлов, как Zn, Mg, Co, Ti, Hf, Y, Ru, Re. Для всех них l, $m > 0$; $k = C_{11}C_{55} > 0$, так что $p_\beta(n_3) > 0$ и $q(n_3) > 0$ для любого значения угла θ.

Если дискриминант отрицательный, то $\sqrt{B^2 + 4Ak} = i\sqrt{-(l^2 + 4km)}(1 - n_3^2)$, мнимая единица сокращается, а искомые полюса имеют вид

$$z_{1,2} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}} - \frac{B(n_3)}{q(n_3)} \right)^{1/2}$$
$$+ \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}} + \frac{B(n_3)}{q(n_3)} \right)^{1/2}. \tag{25}$$

Согласно [7], такой вариант реализуется для Zn, Cd, Be. При этом оказалось, что $B(n_3) = 2k + l(1 - n_3^2) > 0$, $q(n_3) > 0$ для любого θ и под знаками радикалов в (25) и дискриминанте стоят положительные величины. Из (25) имеем

$$(z_1 - z_2) = -\sqrt{2}\left(\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}} - \frac{B(n_3)}{q(n_3)}\right)^{1/2}, z_1 z_2 = -\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}},$$

$$\left(\frac{1}{z_1} - \frac{1}{z_2}\right) = -\sqrt{2}\left(\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}} - \frac{B(n_3)}{q(n_3)}\right)^{1/2}\left(\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}}\right)^{-1}, \tag{26}$$

последующая подстановка этих выражений в (23) завершает процедуру расчета компонент $G_{3n}(\mathbf{r})$.

Перейдем к вычислению компонент $u_\alpha(\mathbf{r})$ и $G_{\alpha n}(\mathbf{r})$ ($\alpha = 1, 2$). Здесь, согласно (10), три слагаемых ($u_\alpha = u_\alpha^{(1)} + u_\alpha^{(2)} + u_\alpha^{(3)}$). Самое простое последнее, поскольку оно содержит те же полюсы, что и $u_3(\mathbf{r})$, и для него остается справедливой формула (20). Различие лишь в выражении (21), которое в данном случае имеет вид

$$\Delta_{\alpha k}^{(3)}(z) f_k = (a + b + \chi + \rho) \times \left[z(n_2\delta_{\alpha 1} - n_1\delta_{\alpha 2}) - z^2 n_\alpha n_3\right] f_3. \tag{27}$$

Как уже отмечалось, линейное по z слагаемое в (27) вклада в (20) не вносит. Поэтому получаем следующий результат:

$$4\pi r u_\alpha^{(3)}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\sqrt{B^2 + 4Ak}}(a + b + \chi + \rho) \times n_\alpha n_3 (z_1 - z_2) f_3. \tag{28}$$

Обратим внимание на то, что $u_\alpha^{(1,2)}(\mathbf{r})$ не содержат f_3 (см. (10)). Поэтому компоненты $G_{\alpha 3}(\mathbf{r})$ тензора Грина следуют именно из (28) при замене f_3 на δ_{3n} и в точности совпадают с (23), т.е. $G_{\alpha 3}(\mathbf{r}) = G_{3\alpha}(\mathbf{r})$.

Рассмотрим компоненту смещения $u_\alpha^{(1)}(\mathbf{r})$. Здесь полюсы являются корнями квадратного уравнения

$$\Delta(\theta, \varphi, z) = (b + \rho\sin^2\theta) z^2 + b = 0. \tag{29}$$

Поскольку $\rho = C_{55} - b$, имеем $b + \rho\sin^2\theta = b\cos^2\theta + C_{55}\sin^2\theta$. Для всех приведенных выше металлов $b = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) > 0$; следовательно, коэффициент при z^2 положительный при любом θ. Таким образом, искомый полюс и его вклад в (18) имеют вид

$$z_3 = i\sqrt{\frac{b}{P(n_3)}}, \qquad 4\pi r u_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{f_\alpha}{\sqrt{bP(n_3)}},$$
$$P(n_3) \equiv b + \rho(1 - n_3^2). \tag{30}$$

Осталось слагаемое $u_\alpha^{(2)}(\mathbf{r})$. Согласно (10), имеем три полюса: два от биквадратного уравнения (19) и один представленный формулой (30), поэтому из (18) аналогично (20) получаем

$$4\pi r u_\alpha^{(2)}(\mathbf{r}) = -\frac{2i}{qP}\left(\frac{1}{(z_1^2 - z_2^2)} \times \sum_{\beta=1}^{2}(-1)^{\beta+1}\frac{F_\alpha(z_\beta)}{z_\beta(z_\beta^2 - z_3^2)} + \frac{F_\alpha(z_3)}{z_3(z_1^2 - z_3^2)(z_2^2 - z_3^2)}\right), \tag{31}$$

где числитель в (31) может быть представлен в виде

$$F_\alpha(z) = \Phi_\alpha(z, \theta, \varphi)[M + Nz^2],$$
$$M = (a + b)(b + \rho),$$
$$N = (a + b)(b + \rho) + \left[(a + b)(\gamma + \rho) - (\chi + \rho)^2\right](1 - n_3^2),$$
$$\Phi_\alpha(z, \theta, \varphi) = f_\alpha - z\Psi_\alpha(\theta, \varphi) - (1 - z^2 n_3^2)\frac{(n_1 f_1 + n_2 f_2)}{1 - n_3^2} n_\alpha. \tag{32}$$

Явный вид $\Psi_\alpha(\theta, \varphi)$ при этом не важен. Важно лишь то, что $\Psi_\alpha(\theta, \varphi)$ не содержит зависимости от z. Действительно, используя тождество

$$\frac{F_\alpha(z_\beta)}{z_\beta(z_\beta^2 - z_3^2)} = -\frac{\Phi_\alpha(z_\beta, \theta, \varphi)}{z_3^2}\left[\frac{M}{z_\beta} - \frac{z_\beta(M + Nz_3^2)}{z_\beta^2 - z_3^2}\right],$$
$$\beta = 1, 2, \tag{33}$$

при непосредственной подстановке (33) в (31) легко убедиться, что линейное по z слагаемое вклада в (31) не вносит. Чтобы продвинуться дальше, необходим явный вид полюсов z_β. Начнем с чисто мнимых (24). Предварительно заметив, что

$$M + Nz_3^2 = -\left\{(a + b)(b\gamma - \rho^2) - b(\chi + \rho)^2\right\}\frac{(1 - n_3^2)}{P(n_3)}, \tag{34}$$

введем обозначение

$$H_\beta(n_3) = \frac{(a + b)(b + \rho)}{\sqrt{p_\beta(n_3)}} + \frac{\sqrt{p_\beta(n_3)}\{(a + b)(b\gamma - \rho^2) - b(\chi + \rho)^2\}(1 - n_3^2)}{P(n_3)p_\beta(n_3) - bq(n_3)}, \tag{35}$$

которое следует из (33) с учетом явных выражений для коэффициентов M и N, полюсов (23) и (30), а также соотношений $(z_\beta^2 - z_3^2) = -\frac{1}{qP(n_3)}\big(P(n_3)p_\beta(n_3) - bq(n_3)\big)$. Тогда (33) записывается в компактном виде

$$\frac{F_\alpha(z_\beta)}{z_\beta(z_\beta^2 - z_3^2)} = \frac{1}{i}\frac{P(n_3)\sqrt{q(n_3)}}{b}H_\beta(n_3)\Phi_\alpha(z_\beta, \theta, \varphi). \tag{36}$$

Наконец, используя тождество

$$\frac{2q[M + Nz_3^2]P(n_3)}{\big(P(n_3)p_1(n_3) - bq(n_3)\big)\big(P(n_3)p_2(n_3) - bq(n_3)\big)} = \frac{1}{(b + \rho)(1 - n_3^2)}, \tag{37}$$

последнее слагаемое в (31) можно переписать следующим образом:

$$\frac{F_\alpha(z_3)}{z_3(z_1^2 - z_3^2)(z_2^2 - z_3^2)} = \frac{1}{i}\frac{q(n_3)}{2\sqrt{b}} \times \frac{P(n_3)^{3/2}}{(b + \rho)(1 - n_3^2)}\Phi_\alpha(z_3, \theta, \varphi). \tag{38}$$

Напомним, что в (36) и (38) $\Phi_\alpha(z, \theta, \varphi)$ подразумевает отсутствие линейного по z слагаемого. В результате

$$4\pi r u_\alpha^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{b\sqrt{l^2+4km}} \frac{\sqrt{q(n_3)}}{(1-n_3^2)} \sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} H_\beta(n_3)$$

$$\times \left[f_\alpha - \frac{(q+p_\beta n_3^2)}{q(n_3)} \frac{n_\alpha(n_1 f_1 + n_2 f_2)}{1-n_3^2} \right] - \frac{P(n_3)}{\sqrt{bP}(b+\rho)(1-n_3^2)}$$

$$\times \left[f_\alpha - \frac{(P+bn_3^2)}{P(n_3)} \frac{n_\alpha(n_1 f_1 + n_2 f_2)}{1-n_3^2} \right]. \tag{39}$$

Суммируя (28), (30) и (39), получаем окончательное выражение для $u_\alpha(\mathbf{r})$. Меняя в нем компоненты f_α на $\delta_{\alpha\gamma}$ $(\gamma = 1, 2)$, получаем искомые компоненты $G_{\alpha\gamma}$

$$4\pi r G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\sqrt{q(n_3)}}{b\sqrt{l^2+4km}} \sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} H_\beta(n_3) \right.$$

$$\left. - \frac{bn_3^2}{\sqrt{bP}(b+\rho)} \right] \frac{\delta_{\alpha\gamma}}{(1-n_3^2)} - \left[\frac{\sqrt{q(n_3)}}{b\sqrt{l^2+4km}} \right.$$

$$\left. \times \sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} \frac{q+p_\beta n_3^2}{q(n_3)} H_\beta(n_3) - \frac{P+bn_3^2}{\sqrt{bP}(b+\rho)} \right] \frac{n_\alpha n_\gamma}{(1-n_3^2)^2}. \tag{40}$$

Компоненты $G_{\alpha 3}(\mathbf{r}) = G_{3\alpha}(\mathbf{r})$ и $G_{33}(\mathbf{r})$ найдены выше (см. (23)). В случае комплексных полюсов (25) соотношение (31) принимает вид

$$4\pi r u_\alpha^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{P\sqrt{-(l^2+4km)(1-n_3^2)}}$$

$$\times \sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} \frac{F_\alpha(z_\beta)}{z_\beta(z_\beta^2 - z_3^2)} - \frac{2F_\alpha(z_3)}{q\sqrt{bP}(z_1^2 - z_3^2)(z_2^2 - z_3^2)}. \tag{41}$$

Покажем, что компоненты смещения $u_\alpha^{(2)}$ вещественны. Прямой подстановкой z_β^2 (25) и z_3^2 (30) можно проверить справедливость равенства

$$(z_1^2 - z_3^2)(z_2^2 - z_3^2) = \frac{2}{q(n_3)P(n_3)^2}$$

$$\times \left(kP(n_3)^2 + b^2 \frac{q(n_3)}{2} - bB(n_3)P(n_3) \right), \tag{42}$$

где $B(n_3) = 2k + l(1-n_3^2)$: $P(n_3) = b + \rho(1-n_3^2)$; $q(n_3) = 2[k + l(1-n_3^2) - m(1-n_3^2)^2]$. Собирая коэффициенты при разных степенях $(1-n_3^2) = \sin^2\theta$ у выражения в круглых скобках, убеждаемся, что отличный от нуля только коэффициент при $(1-n_3^2)^2$, равный

$$k\rho^2 - b^2 m - bl\rho = -\left\{ (a+b)(b\gamma - \rho^2) - b(\chi+\rho)^2 \right\}$$

$$\times (b+\rho),$$

так что последнее слагаемое в (41) принимает вид

$$\frac{2F_\alpha(z_3)}{q\sqrt{bP}(z_1^2 - z_3^2)(z_2^2 - z_3^2)} = \frac{1}{\sqrt{bP}} \frac{P(n_3)}{(b+\rho)(1-n_3^2)}$$

$$\times \Phi_\alpha(z_3, \theta, \varphi). \tag{43}$$

и оно действительно вещественно, так как вещественна функция $\Phi_\alpha(z_3, \theta, \varphi)$.

Поскольку структурно $\Phi_\alpha(z, \theta, \varphi) = I_\alpha^{(0)}(\theta, \varphi) + z^2 I_\alpha^{(2)}(\theta, \varphi)$, с учетом равенств (33) и (42), а также соотношений (26) и (30) для полюсов z_β и z_3 имеем

$$\sum_{\beta=1}^{2} (-1)^{\beta+1} \frac{F_\alpha(z_\beta)}{z_\beta(z_\beta^2 - z_3^2)} = -\sqrt{2} \left(\sqrt{\frac{2k}{q}} - \frac{B(n_3)}{q} \right)^{1/2}$$

$$\times \frac{P}{b} \left((a+b)(b+\rho) \left[\sqrt{\frac{q}{2k}} I_\alpha^{(0)} + I_\alpha^{(2)} \right] - \frac{qP}{2(b+\rho)(1-n_3^2)} \right.$$

$$\left. \times \left[\left(\sqrt{\frac{2k}{q}} + \frac{b}{P} \right) I_\alpha^{(0)} + \left(\frac{2k}{q} - \frac{b}{P} \left[\frac{2B}{q} + \sqrt{\frac{2k}{q}} \right] \right) I_\alpha^{(2)} \right] \right), \tag{44}$$

где

$$I_\alpha^{(0)}(\theta, \varphi) \equiv f_\alpha - \frac{(n_1 f_1 + n_2 f_2)}{1-n_3^2} n_\alpha,$$

$$I_\alpha^{(2)}(\theta, \varphi) \equiv \frac{n_3^2(n_1 f_1 + n_2 f_2)}{1-n_3^2} n_\alpha.$$

Подставляя (44) и (43) в (41), получаем окончательное выражение для компонент смещения $u_\alpha^{(2)}$. Под радикалами стоят только положительные величины, т. е. $u_\alpha^{(2)}$, как и следовало ожидать, вещественны. Искомые компоненты тензора Грина $G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r})$ $(\gamma = 1, 2)$ получаются из суммы $u_\alpha^{(1)}$ (30) и u_α^2 (41) заменой $f_\alpha \to \delta_{\alpha\gamma}$. Ввиду крайней громоздкости и очевидности их получения явные выражения $G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r})$ приводить нет смысла. Заметим лишь, что при $f_\alpha \to \delta_{\alpha\gamma}$ меняются только величины $I_\alpha^{(0)}$ и $I_\alpha^{(2)}$

$$I_\alpha^{(0)}(\theta, \varphi) \to I_{\alpha\gamma}^{(0)}(\theta, \varphi) = \delta_{\alpha,\gamma} - \frac{n_\alpha n_\gamma}{1-n_3^2},$$

$$I_\alpha^{(2)}(\theta, \varphi) \to I_{\alpha\gamma}^{(2)}(\theta, \varphi) = \frac{n_3^2}{1-n_3^2} n_\alpha n_\gamma, \tag{45}$$

а все коэффициенты, зависящие от n_3, остаются такими же, как в $u_\alpha^{(1)}$ (30) и $u_\alpha^{(2)}$ (41). Общий вид компонент $G_{\alpha 3}(\mathbf{r}) = G_{3\alpha}(\mathbf{r})$ и $G_{33}(\mathbf{r})$ остается прежним (см. (23)). Нужно только учесть соотношения (26) и равенство $\sqrt{B^2+4Ak} = i\sqrt{-(l^2+4km)(1-n_3^2)}$.

4. Предельный переход к изотропии

Покажем теперь, как осуществляется переход к изотропному приближению, которому соответствуют условия $\gamma=\chi=\rho=0$. При этом из (6) следует

$$C_{13}=C_{12}=a, \qquad C_{33}=C_{11}=C_{22}=a+2b,$$
$$C_{55}=C_{44}=\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})=b,$$

т.е., как и должно быть, остается только два независимых модуля C_{11} и C_{12}. Однако формулы (23), (39) и (40) теряют смысл из-за неопределенности типа 0/0. Поэтому переход к изотропии необходимо проводить, например, следующим образом: $\gamma\to 0$ при $\chi=\rho=0$. В случае чисто мнимых полюсов из (19) и (24) следуют приближенные выражения

$$\sqrt{l^2+4km}\approx 2\sqrt{k(a+b)\gamma},$$
$$\sqrt{\frac{p_\beta(n_3)}{q(n_3)}}\approx 1+\frac{(-1)^{\beta+1}}{2}\sqrt{\frac{a+b}{k}}\gamma(1-n_3^2),$$
$$\sqrt{\frac{q(n_3)}{p_\beta(n_3)}}\approx 1+\frac{(-1)^{\beta}}{2}\sqrt{\frac{a+b}{k}}\gamma(1-n_3^2). \qquad (46)$$

Подстановка (46) в (23) дает соответствующие компоненты тензора Грина изотропной упругой среды [9] ($a\equiv\lambda$; $b\equiv\mu$, где λ и μ — коэффициенты Ламэ)

$$G_{3\alpha}^{(0)}(\mathbf{r})=\frac{1}{8\pi b}\,\frac{(a+b)}{(a+2b)}\,\frac{n_\alpha n_3}{r},$$
$$G_{33}^{(0)}(\mathbf{r})=\frac{1}{8\pi b}\,\frac{a+b}{(a+2b)}\left[\frac{a+3b}{a+b}+n_3^2\right]\frac{1}{r}. \qquad (47)$$

Далее из (30) и (35) имеем

$$H_\beta(n_3)\approx\frac{b(a+b)}{\sqrt{p_\beta(n_3)}}\left[1+\gamma\,\frac{p_\beta(n_3)(1-n_3^2)}{b\,(p_\beta(n_3)-q(n_3))}\right],$$
$$P(n_3)=b. \qquad (48)$$

Подставим (48) сначала во вторую часть (40), соответствующую компонентам тензора Грина с $\alpha\neq\gamma$,

$$4\pi r G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r})\approx\left[\frac{(a+b)}{\sqrt{l^2+4km}}\sum_{\beta=1}^{2}(-1)^\beta\left(\sqrt{\frac{q}{p_\beta}}+\sqrt{\frac{p_\beta}{q}}\,n_3^2\right)\right.$$
$$\left.\times\left(1+\frac{\gamma p_\beta(1-n_3^2)}{b(p_\beta-q)}\right)+\frac{1+n_3^2}{b}\right]\frac{n_\alpha n_\gamma}{(1-n_3^2)^2}.$$

Проделав несложные вычисления с учетом соотношений (46), в пределе $\gamma\to 0$ получаем изотропное приближение [9]

$$G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r})\to G_{\alpha\gamma}^{(0)}(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi r}\,\frac{a+b}{2b(a+2b)}\,n_\alpha n_\gamma. \qquad (49)$$

Аналогичным образом поступаем в случае компонент с $\alpha=\gamma$, но уже с учетом (49)

$$4\pi r G_{\alpha\alpha}(\mathbf{r})\approx\left[\frac{a+b}{\sqrt{l^2+4km}}\sum_{\beta=1}^{2}(-1)^{\beta+1}\sqrt{\frac{q}{p_\beta}}\right.$$
$$\left.\times\left(1+\frac{\gamma p_\beta(1-n_3^2)}{b(p_\beta-q)}\right)-\frac{n_3^2}{b}\right]\frac{1}{1-n_3^2}+\frac{a+b}{2b(a+2b)}\,n_\alpha^2,$$

в пределе $\gamma\to 0$ получаем

$$G_{\alpha\alpha}(\mathbf{r})\to G_{\alpha\alpha}^{(0)}(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi r}\,\frac{a+b}{2b(a+2b)}\left[\frac{a+3b}{a+b}+n_\alpha^2\right]. \qquad (50)$$

В случае комплексных полюсов (25) выражения (23) удобно переписать в эквивалентной форме, используя тождество $(z_1-z_2)=(z_1^2-z_2^2)/(z_1+z_2)$ и равенство $(z_1^2-z_2^2)=-\frac{2}{q}\sqrt{B^2+4Ak}$,

$$G_{3\alpha}(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi r}\,\frac{2i}{q(z_1+z_2)}(a+b+\chi+\rho)n_\alpha n_3,\ \ \alpha=1,\ 2,$$
$$G_{33}(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi r}\,\frac{2i}{q(z_1+z_2)}\Big((b+\rho)$$
$$-\frac{(a+2b)}{z_1z_2}+(a+b-\rho)n_3^2\Big). \qquad (51)$$

Возможно, эта форма даже удобнее для использования, чем (23). Обратим внимание на то, что как для комплексных, так и для чисто мнимых полюсов $z_1z_2\approx -1$, а $(z_1+z_2)\approx 2i$. Поэтому из (51) сразу следуют изотропные компоненты (47). Аналогичным образом осуществляется предельный переход и для компонент $G_{\alpha\gamma}(\mathbf{r})$. Как уже отмечалось выше, он следует из $u_\alpha^{(1)}$ (30) и $u_\alpha^{(2)}$ (31), поскольку только они содержат f_α ($u_\alpha^{(3)}$ содержит только величину f_3, и из нее следуют компоненты $G_{\alpha 3}=G_{3\alpha}$). Слагаемое (43) пропорционально γ и вклада не вносит, коэффициент в (33) тоже стремится к нулю, так как $M+Nz_3^2\approx-\gamma(a+b)(1-n_3^2)$, а оставшиеся слагаемые дают искомые компоненты (49), (50).

5. Заключение

Итак, применительно к гексагональной системе процедура нахождения компонент тензора Грина формально сводится к сумме вычетов относительно полюсов в верхней полуплоскости комплексной переменной подынтегральной функции (18). Характер полюсов определяется упругими модулями конкретного кристалла. Они могут быть комплексными либо чисто мнимыми. В обоих случаях искомые компоненты тензора Грина вычисляются точно в отличие от кристаллов кубической системы. Обратим внимание на то, что структурно-конечные выражения (23) или (51), а также (40), (44) совпадают с изотропным приближением [9]

$$G_{ik}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\frac{1}{4\pi}\left(\Psi_1(n_3)\,\frac{\delta_{ik}}{r}+\Psi_2(n_3)\,\frac{n_in_k}{r}\right),\quad \mathbf{r}=\mathbf{x}-\mathbf{x}'.$$

Только в случае изотропии коэффициенты $\Psi_{1,2}$ — константы (см. (47), (49), (50)), а у нас это громоздкие функции переменной $n_3=(x_3-x_3')/r$, к тому же разные для комплексных и мнимых полюсов. Если теперь вспомнить, что координата $\mathbf{x}'$ связана, как правило, с распределением фиктивных сил, моделирующих упругое влияние стока, и что по ней необходимо интегрировать с учетом его геометрии, становится очевидным, что трудности аналитического применения полученных выражений могут оказаться значительными. Тем не менее точный результат всегда важен хотя бы с точки зрения методологии. Кроме того, он позволяет делать разумные физические приближения, а также использовать вычислительную технику.

Автор благодарен В.В. Слезову за поддержку и интерес к работе.

Список литературы

[1] В.Н. Воеводин, И.М. Неклюдов. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. Наук. думка, Киев (2006). 376 с.

[2] Дж. Эшелби. Континуальная теория дислокаций. Наука, М. (1963). 215 с.

[3] M. Griffiths. J. Nucl. Mater. **159**, 190 (1988).

[4] И.Г. Маргвелашвили, З.К. Саралидзе. ФТТ **15**, 2665 (1973).

[5] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ **17**, 783 (1947).

[6] П.Н. Остапчук. ФТТ **54**, 92 (2012).

[7] М.А. Баранов, Е.А. Дубов, И.В. Дятлова, Е.В. Черных. ФТТ **46**, 212 (2004).

[8] L. Fast, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson. Phys. Rev. B **51**, 17 431 (1995).

[9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 246 с.