ТЕНЗОР ГРИНА КРИСТАЛЛОВ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

П.Н. Остапчук
Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина
E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

Метод построения тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае анизотропной среды, предложенный И.М. Лифшицем и Л.Н. Розенцвейгом, в принципе, сводится к вычетам и подразумевает нахождение корней (полюсов) некоторого алгебраического уравнения шестой степени. В зависимости от значений упругих модулей кристалла эти полюсы могут быть комплексными либо чисто мнимыми. В работе компоненты тензора Грина кристаллов гексагональной системы получены в общем виде, справедливом как для мнимых, так и для комплексных полюсов. В отличие от металлов кубической сингонии результат является точным. Показан предельный переход к изотропному приближению.

PACS 62.20.Dc; 62.20.Fe

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 просто 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 [1] (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 преференса – предпочтительного поглощения ТД определенного сорта стоком данного типа. Согласно современным представлениям, именно, преференс является причиной разделения диффузионных потоков ТД между стоками разного типа, что в конечном счете приводит к размерной нестабильности облучаемого материала – явлению вакансионного распухания. Известно, что циркониевые сплавы весьма устойчивы к распуханию: вместо вакансионных пор в них, как правило, образуются и эволюционируют вакансионные дислокационные петли в базисных плоскостях [2], что противоречит стандартным представлениям о дислокационном преференсе [3] к СМА. Возможно, их следует пересмотреть, учитывая анизотропию упругих свойств реальных кристаллов гексагональной системы.

Регулярный метод построения тензора Грина в случае неограниченной упругоанизотропной среды был предложен И.М. Лифшицем и Л.Н. Розенцвейгом в работе [4]. Было показано, что задача, в принципе, сводится к вычетам и подразумевает нахождение корней (полюсов) некоторого алгебраического уравнения шестой степени. Расположение полюсов в нужной полуплоскости комплексной переменной определяется конкретными значениями упругих модулей кристалла. Оказывается, что для большинства ГПУ-металлов (Zr, Mg, Co, Ti, Hf, Y, Sc, Tl, Tc, Ru, Re, Os) искомые полюсы чисто мнимые, а для Zn, Cd и Be – комплексные. Для мнимых полюсов тензор Грина посчитан в работе [5]. В этом сообщении аналогичная задача решается для комплексных полюсов.

Идея метода [4] состоит в следующем. Как известно, смещение $\vec{u}(\vec{r})$, возникающее в среде, под действием приложенной в начале координат силы $\vec{f}$, удовлетворяет системе уравнений:

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

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

$$u_l(\vec{r}) = \int d^3r'\, G_{l\mathrm{n}}(\vec{r}-\vec{r}') f_n \delta(\vec{r}') = G_{l\mathrm{n}}(\vec{r}) f_n\,, \tag{2}$$

т. е. является решением системы уравнений:

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

Поэтому, если найдем компоненту смещения $u_l(\vec{r})$ и в ней заменим f_i на δ_{in}, получим соответствующую компоненту G_{ln} тензора Грина. Таким образом, задача сводится к отысканию решения (1).

Следуя [4], перейдем к интегралу Фурье, используя известное разложение δ –функции:

$$u_l(\vec{r}) = \int \mathrm{V}_l(\vec{\xi}) \exp(i\,\vec{r}\vec{\xi}) d\vec{\xi}\,,$$

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

Подстановка (4) в (1) дает для амплитуд Фурье $\mathrm{V}_l(\vec{\xi})$ систему алгебраических уравнений:

$$\lambda_{il}(\vec{\xi})\mathrm{V}_l(\vec{\xi}) = \frac{f_i}{(2\pi)^3},$$

$$\lambda_{il}(\vec{\xi}) = C_{iklm}\xi_k\xi_m . \qquad (5)$$

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

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

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

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

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

$$(b\xi^2 + \rho\xi_3^2)\mathrm{V}_i(\vec{\xi}) + \left[\left(\chi+\rho\right)\xi_i\xi_3 + \delta_{i3}\left(\gamma\xi_3^2 + \rho\xi^2\right)\right]\mathrm{V}_3(\vec{\xi}) + \\ +\left[(a+b)\,\xi_i + \delta_{i3}\left(\chi+\rho\right)\xi_3\right](\vec{\xi}\vec{\mathrm{V}}) = \frac{1}{(2\pi)^3}f_i, \qquad (7)$$

откуда для амплитуд Фурье получаем явные выражения:

$$(2\pi)^3\mathrm{V}_3(\vec{\xi}) = \frac{1}{D(\vec{\xi})}\left\{\left(a+b+\chi+\rho\right)\xi_3\left(f_1\xi_1 + f_2\xi_2\right) - \left[(a+2b)\,\xi^2 - \left(a+b-\rho\right)\xi_3^{\,2}\right]f_3\right\}; \qquad (8)$$

$$(2\pi)^3\mathrm{V}_\alpha(\vec{\xi}) = \frac{f_\alpha}{b\,\xi^2 + \rho\xi_3^{\,2}} + \frac{\xi_\alpha\left(f_1\xi_1 + f_2\xi_2\right)}{D(\vec{\xi})\left(b\,\xi^2 + \rho\xi_3^{\,2}\right)}\left[(a+b)\left(b+\rho\right)\xi^2 + \right. \\ \left. +\left\{(a+b)\left(\gamma+\rho\right) - \left(\chi+\rho\right)^2\right\}\xi_3^{\,2}\right] + \left(a+b+\chi+\rho\right)\frac{\xi_\alpha\xi_3}{D(\vec{\xi})}f_3 \qquad \alpha = 1,2 \qquad (9)$$

$$D(\vec{\xi}) = \left(a+b+\chi+\rho\right)\xi_3^{\,2}\left[\left(\chi+2\rho\right)\xi^2 + \gamma\xi_3^{\,2}\right] - \\ -\left[\left(a+2b\right)\xi^2 + \left(\chi+2\rho\right)\xi_3^{\,2}\right]\left[\left(b+\rho\right)\xi^2 + \left(\chi+\gamma+2\rho\right)\xi_3^{\,2}\right]. \qquad (10)$$

В силу действительности выражений (8)–(10) интеграл (4) можно представить в виде:

$$u_l(\vec{r}) = \int \mathrm{V}_l(\vec{\xi})\cos(\vec{r}\vec{\xi})d^3\xi = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{\Delta_{li}(\vec{e})f_i}{\Delta(\vec{e})}\left(\int_0^\infty \cos\left\{r\mathrm{x}(\vec{n}\,\vec{e})\right\}d\xi\right)d\Omega(\vec{e}), \qquad (11)$$

где $\vec{n} = \vec{r}\,/\,r$ и $\vec{e} = \vec{\xi}\,/\,\xi$, а второе интегрирование проводится по полному телесному углу в пространстве векторов $\vec{\xi}$. Разложим единичный вектор $\vec{e}$ по двум взаимно перпендикулярным направлениям, заданным единичными векторами $\vec{n}$ и $\vec{\tau}$ (вектор $\vec{\tau}$ лежит в плоскости, образованной векторами $\vec{n}$ и $\vec{e}$):

$$\vec{e} = (\vec{n}\,\vec{e})\vec{n} + \sqrt{1-(\vec{n}\,\vec{e})^2}\;\vec{\tau} \equiv x\vec{n} + \sqrt{1-x^2}\;\vec{\tau},$$

$$x \equiv (\vec{n}\,\vec{e}). \qquad (12)$$

Тогда элемент телесного угла $d\Omega(\vec{e})$ в (11) можно записать как $d\Omega(\vec{e}) = dx\,d\varphi_{\vec{\tau}}$. Угол $\varphi_{\vec{\tau}}$ лежит в плоскости, перпендикулярной радиусу-вектору $\vec{n}$, и отсчитывается от произвольно выбранного направления в этой плоскости. Интеграл по ξ в (11) дает δ-функцию:

$$\int_0^\infty \cos\left\{r\mathrm{x}x\right\}d\xi = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(ir\mathrm{x}x)\,d\xi = \frac{\pi}{r}\delta(x), \qquad (13)$$

так что в результате интегрирования по x с учетом (12) ($\vec{e} \to \vec{\tau}$) имеем:

$$u_l(\vec{r}) = \frac{\pi}{r}\int_0^{2\pi}\frac{\Delta_{li}(\vec{\tau}(\theta,\varphi,\varphi_{\vec{\tau}}))}{\Delta(\vec{\tau}(\theta,\varphi,\varphi_{\vec{\tau}}))}\frac{f_i}{(2\pi)^3}d\varphi_{\vec{\tau}}. \qquad (14)$$

Интегрирование проводится по всем возможным направлениям единичного вектора $\vec{\tau}$ ($\vec{\tau} \perp \vec{n}$). Из формулы (14) видно, что, каковы бы ни были модули упругости C_{iklm}, смещение $u_l(\vec{r})$, а значит и компоненты искомого тензора Грина являются однородными функциями первого порядка от координат $u_l(\vec{r}) = F_l(\theta,\varphi)/r$. Этот факт заранее очевиден. Он следует из вида уравнений (1), (3) и свойства δ-функции: $\delta(\alpha\vec{r}) = \alpha^{-3}\delta(\vec{r})$.

Компоненты τ_i выражаются через $\varphi_{\vec{\tau}}$ и полярные углы радиуса-вектора θ, φ следующим образом:

$$\tau_1 = \cos\varphi_{\vec{\tau}} \left(\sin\varphi - z\cos\theta\cos\varphi\right); \qquad (15)$$
$$\tau_2 = \cos\varphi_{\vec{\tau}} \left(-\cos\varphi - z\cos\theta\sin\varphi\right);$$
$$\tau_3 = \cos\varphi_{\vec{\tau}}\ z\sin\theta; \qquad z \equiv \tan\varphi_{\mathbf{t}} .$$

Подставляя (15) в (14) и переходя к переменной z, окончательно получаем

$$u_l(\vec{r}) = \frac{2\pi}{r} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_{li}(\theta,\varphi,z)}{\Delta(\theta,\varphi,z)} \frac{f_i}{(2\pi)^3} dz . \qquad (16)$$

Интеграл (16) берется с помощью вычетов подынтегральной функции относительно полюсов, расположенных в верхней полуплоскости. Полюсы эти являются корнями уравнения $\Delta(\theta,\varphi,z) = 0$, поэтому задача сводится к нахождению корней этого уравнения.

Начнем с компоненты $u_3(\vec{r})$. Для нее, согласно (8), это корни биквадратного уравнения:

$$\Delta(\theta,\varphi,z) = D(\vec{\tau}) = A\left(\theta\right)z^4 - B\left(\theta\right)z^2 - k = 0; \qquad (17)$$
$$A(\theta) = \left(m\sin^4\theta - l\sin^2\theta - k\right);$$
$$B(\theta) = \left(l\sin^2\theta + 2k\right),$$

где константы k, m, l даются выражениями:

$$k = \left(a+2b\right)\left(b+\rho\right);$$
$$m = \left(a+b-\rho\right)\gamma - \left(\chi+2\rho\right)^2; \qquad (18)$$
$$l = \left(a+2b\right)\gamma + \left(2b-\chi\right)\left(\chi+2\rho\right).$$

Корни биквадратного уравнения попарно противоположного знака и, поскольку его коэффициенты вещественны, то четыре его корня попарно комплексно сопряженные и вклад в интеграл (16) дают только два из них. Поэтому, применяя теорему о вычетах, из (16) получаем:

$$4\pi r\, u_3(\vec{r}) = \frac{i}{\sqrt{B^2+4Ak}} \times \qquad (19)$$
$$\times\left[\frac{\Delta_{3k}(z^{(1)})f_k}{z^{(1)}} - \frac{\Delta_{3k}(z^{(2)})f_k}{z^{(2)}}\right],$$

где $z^{(1)}$ – нужный корень из пары $z_{1,2}$; $z^{(2)}$ – из пары $z_{3,4}$ (нужный, в смысле лежащий в верхней полуплоскости комплексной переменной z). Числитель дроби в квадратных скобках (19) следует из (8) после замены $\vec{e}$ на $\vec{\tau}$ и подстановки выражений (15):

$$\Delta_{3k}(z)f_k = \left(a+b+\chi+\rho\right)\left[z\,(f_1n_2 - f_2n_1) - z^2\,(f_1n_1 + f_2n_2)n_3\right] - \qquad (20)$$
$$-\left[(a+2b) + \left\{(a+2b) - (a+b-\rho)(1-n_3{}^2)\right\} z^2\right] f_3.$$

(Здесь $n_1 = \sin\theta\cos\varphi$; $n_2 = \sin\theta\sin\varphi$; $n_3 = \cos\theta$ – компоненты единичного вектора $\vec{n} = \vec{r}/r$). Заметим, что линейное по z слагаемое в (20) вклада в искомое выражение (19) не дает. В результате имеем:

$$4\pi r\, u_3(\vec{r}) = \frac{2i}{q(z_1+z_2)}\left\{\left(a+b+\chi+\rho\right)(f_1n_1+f_2n_2)n_3 + \right. \qquad (21)$$
$$\left. +\left(\left[(b+\rho)+(a+b-\rho)n_3{}^2\right] - (a+2b)\frac{1}{z_1z_2}\right)f_3\right\}.$$

Чтобы избежать громоздкости формул, ввели обычные обозначения для полюсов $z^{(k)} \equiv z_k$, а также воспользовались тождеством $(z_1^2 - z_2^2) = (z_1 - z_2)(z_1 + z_2)$ и равенством $(z_1^2 - z_2^2) = -\frac{2}{q}\sqrt{B^2+4Ak}$.

После этого заменяем f_k на δ_{kn} и получаем соответствующие компоненты тензора Грина:

$$G_{3\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r}\frac{2i}{q\,(z_1+z_2)}\left(a+b+\chi+\rho\right)n_\alpha n_3; \qquad \alpha = 1,2 \qquad (22)$$
$$G_{33}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r}\frac{2i}{q\,(z_1+z_2)}\left((b+\rho) - \frac{(a+2b)}{z_1z_2} + (a+b-\rho)n_3{}^2\right).$$

Анализ экспериментальных и расчетных значений упругих модулей гексагональных металлов, приведенных в работах [6, 7], показывает, что для всех металлов имеют место неравенства $k = C_{11}C_{44} > 0$, $A(\theta) < 0$, $B(\theta) > 0$ для любого значения угла θ. При этом для Zn, Cd и Be дискриминант $B^2 + 4Ak < 0$, а искомые полюсы имеют вид:

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

$$+\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}}+\frac{B(n_3)}{q(n_3)}\right)^{1/2},$$

$$q\equiv -2A\,, \tag{23}$$

где под радикалами стоят только положительные величины. Соответственно

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

$$z_1 z_2=-\sqrt{\frac{2k}{q(n_3)}}\,,$$

и, таким образом, компоненты $G_{3\alpha}(\vec{r})$ ($\alpha=1,2$) и $G_{33}(\vec{r})$ найдены.

Перейдем к вычислению компонент $u_\alpha(\vec{r})$ и $G_{\alpha n}(\vec{r})$ ($\alpha=1,2$). Здесь согласно (9) три слагаемых ($u_\alpha=u_\alpha^{(1)}+u_\alpha^{(1)}+u_\alpha^{(3)}$). Самое простое последнее, поскольку оно содержит те же полюсы, что и $u_3(\vec{r})$, и для него остается справедливой формула (19). Различие лишь в выражении (20), которое в данном случае имеет вид:

$$\begin{aligned}&\Delta_{\alpha k}^{(3)}(z)f_k=\left(a+b+\chi+\rho\right)\times\\&\times\left[z\,(n_2\delta_{\alpha 1}-n_1\delta_{\beta 2})-z^2 n_\alpha n_3\right]f_3.\end{aligned} \tag{24}$$

Как уже отмечалось, линейное слагаемое по z в (24) вклада в (19) не дает. Поэтому результат следующий:

$$4\pi r\,u_\alpha^{(3)}(\vec{r})=\frac{2i}{q(z_1+z_2)}\left(a+b+\chi+\rho\right)n_\alpha n_3\,f_3\,. \tag{25}$$

Напомним, что компоненты смещения u_α дают компоненты тензора Грина $G_{\alpha n}(\vec{r})$ при замене f_i на δ_{in}. Поэтому, если интересоваться компонентами $G_{\alpha 3}(\vec{r})$, то они следуют из $u_\alpha^{(m)}$, содержащих f_3. Согласно (9) $u_\alpha^{(1,2)}(\vec{r})$ не содержат f_3, поэтому $G_{\alpha 3}(\vec{r})$ следуют именно из (25) при замене f_3 на δ_{33}:

$$G_{\alpha 3}(\vec{r})=\frac{1}{4\pi r}\,\frac{2i}{q\,(z_1+z_2)}\left(a+b+\chi+\rho\right)n_\alpha n_3\,,\quad \alpha=1,2 \tag{26}$$

и в точности совпадают с (22), т. е. $G_{\alpha 3}(\vec{r})=G_{3\alpha}(\vec{r})$.

Рассмотрим компоненту смещения $u_\alpha^{(1)}(\vec{r})$. Из (9) следует, что здесь полюсы являются корнями квадратного уравнения:

$$\Delta(\theta,\varphi,z)=\left(b+\rho\sin^2\theta\right)z^2+b=0\,. \tag{27}$$

Коэффициент при z^2 – положительный при любом θ, поскольку $b=\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})>0$ для всех ГПУ-металлов, а $\rho=C_{55}-b$. Поэтому искомый полюс и его вклад в (16) имеют вид:

$$z^{(3)}=\sqrt{-\frac{b}{b+\rho\sin^2\theta}}\,;$$

$$4\pi r\,u_\alpha^{(1)}(\vec{r})=\frac{f_\alpha}{\sqrt{b\,P}}\,;$$

$$P(n_3)\equiv b+\rho(1-n_3^{\,2})\,. \tag{28}$$

Осталось слагаемое $u_\alpha^{(2)}(\vec{r})$. Согласно (9) имеем три полюса: два из них от биквадратного уравнения (23) и один от – (28). Применяя теорему о вычетах, из (14) получаем:

$$4\pi r u_\alpha^{(2)}=-\frac{2i}{qP}\left(\frac{1}{(z_1^2-z_2^2)}\sum_{\beta=1}^{2}(-1)^{\beta+1}\,\frac{F_\alpha(z_\beta)}{z_\beta(z_\beta^2-z_3^2)}+\frac{F_\alpha(z_3)}{z_3(z_1^2-z_3^2)(z_2^2-z_3^2)}\right); \tag{29}$$

$$F_\alpha(z)=\left[\Phi_\alpha(z,\theta,\varphi)-z\Psi_\alpha(\theta,\varphi)\right]\left[\left(a+b\right)\left(b+\rho\right)+N(n_3)\,z^2\right]; \tag{30}$$

$$N(n_3)=\left(a+b\right)\left(b+\rho\right)+\left[\left(a+b\right)\left(\gamma+\rho\right)-\left(\chi+\rho\right)^2\right](1-n_3^{\,2})\,;$$

$$\Phi_\alpha(z,\theta,\varphi)=\left(f_\alpha-\frac{n_\alpha(n_1f_1+n_2f_2)}{1-n_3^{\,2}}\right)+z^2n_3^{\,2}\,\frac{n_\alpha(n_1f_1+n_2f_2)}{1-n_3^{\,2}}\equiv I_\alpha^{(0)}(\theta,\varphi)+z^2I_\alpha^{(2)}(\theta,\varphi)\,;$$

$$\Psi_1=\frac{n_3}{1-n_3^{\,2}}\left\{2n_1n_2f_1-\left(n_1^{\,2}-n_2^{\,2}\right)f_2\right\};\qquad \Psi_2=\frac{n_3}{1-n_3^{\,2}}\left\{\left(n_1^{\,2}-n_2^{\,2}\right)f_1+2n_1n_2f_2\right\}.$$

Легко проверить, что слагаемое $z\Psi_\alpha(\theta,\varphi)$ из (30) вклада в (29) не дает. Поэтому, опуская довольно громоздкие вычисления, для компонент $u_\alpha^{(2)}$ окончательно получаем:

$$4\pi r u_\alpha^{(2)}(\vec r) = -\frac{2i}{bq}\frac{1}{z_1+z_2}\left((a+b)(b+\rho)\left[-\frac{1}{z_1z_2} I_\alpha^{(0)} + I_\alpha^{(2)} \right] - \right.$$

$$-\frac{q\,P}{2(b+\rho)(1-n_3{}^2)}\left[-\left(z_1z_2 - \frac{b}{P} \right) I_\alpha^{(0)} + \left(z_1^2 z_2^2 + \frac{b}{P}\left[z_1z_2 - \frac{2B}{q} \right] \right) I_\alpha^{(2)} \right] \Bigg) - \tag{31}$$

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

Подставляем в (31) явные выражения для $I_\alpha^{(0)}$, $I_\alpha^{(2)}$ из (30) и суммируем с (25), (28). Вводя обозначения

$$\mathrm{H}_1(n_3) = \frac{(a+b)(b+\rho)}{z_1z_2} - \frac{q\,P}{2(b+\rho)(1-n_3{}^2)}\left(z_1z_2 - \frac{b}{P} \right);$$

$$\mathrm{H}_2 = \left((a+b)(b+\rho)\left[\frac{1}{z_1z_2} + n_3{}^2 \right] - \frac{q\,P}{2(b+\rho)(1-n_3{}^2)}\left[\left(z_1z_2 - \frac{b}{P} \right) + \left(z_1^2z_2^2 + \frac{b}{P}\left[z_1z_2 - \frac{2B}{q} \right] \right) n_3{}^2 \right] \right),$$

для $u_\alpha(\vec r)$ получаем:

$$4\pi r u_\alpha(\vec r) = \left[\frac{2i}{bq}\frac{1}{z_1+z_2}\mathrm{H}_1(n_3) - \frac{bn_3{}^2}{\sqrt{bP}(b+\rho)(1-n_3{}^2)} \right] f_\alpha -$$

$$-\left[\frac{2i}{bq}\frac{1}{z_1+z_2}\mathrm{H}_2(n_3) - \frac{P+bn_3{}^2}{\sqrt{bP}\,(b+\rho)(1-n_3{}^2)} \right] \frac{(n_1f_1+n_2f_2)n_\alpha}{1-n_3{}^2} + \tag{32}$$

$$+\frac{2i}{q}\frac{(a+b+\chi+\rho)}{z_1+z_2} n_\alpha n_3 f_3.$$

Компоненты тензора Грина $G_{33}(\vec r)$ и $G_{3\alpha}(\vec r)$ следуют из $u_3(\vec r)$ и даются формулами (22). Компоненты $G_{\alpha 3}(\vec r)$ получаются из $u_\alpha^{(3)}(\vec r)$ или (32) заменой $f_n \to \delta_{n3}$ и, как было показано выше, совпадают с $G_{3\alpha}(\vec r)$. Наконец, компоненты $G_{\alpha\beta}(\vec r)$ следуют из суммы $u_\alpha^{(1)}$ и $u_\alpha^{(2)}$ или из (32) заменой $f_\alpha \to \delta_{\alpha\beta}$:

$$4\pi r\, G_{\alpha\beta}(\vec r) =$$

$$= \left[\frac{2i}{bq}\frac{1}{z_1+z_2}\mathrm{H}_1(n_3) - \frac{bn_3{}^2}{\sqrt{bP}(b+\rho)(1-n_3{}^2)} \right] \delta_{\alpha\beta} -$$

$$-\left[\frac{2i}{bq}\frac{1}{z_1+z_2}\mathrm{H}_2(n_3) - \frac{P+bn_3{}^2}{\sqrt{bP}\,(b+\rho)(1-n_3{}^2)} \right] \frac{n_\alpha n_\beta}{1-n_3{}^2}. \tag{33}$$

Обратим внимание, что выражение (33) симметрично как относительно замены $z_1 \leftrightarrow z_2$, так и относительно перестановки индексов $\alpha \leftrightarrow \beta$, т. е. $G_{\alpha\beta} = G_{\beta\alpha}$.

Переход к изотропному приближению, которому соответствуют условия $\gamma = \chi = \rho = 0$ и соотношения:

$$C_{13} = C_{12} = a\,;\quad C_{33} = C_{11} = C_{22} = a + 2b\,;$$

$$C_{55} = C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = b\,,$$

делается элементарно. Действительно, как для комплексных, так и для чисто мнимых полюсов имеет место предельный переход: $z_1z_2 \to -1$ и $(z_1+z_2) \to 2i$. Поэтому из (22) сразу следуют изотропные компоненты ($q \to 2k \to 2b(a+2b)$) [8]:

$$G_{3\alpha}^{(0)}(\vec r) = \frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}\frac{n_\alpha n_3}{r},$$

$$G_{33}^{(0)}(\vec r) = \frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}\left[\frac{a+3b}{a+b} + n_3{}^2 \right]\frac{1}{r}. \tag{34}$$

Из (33) имеем:

$$4\pi r\, G_{\alpha\beta}(\vec r) \to \left[\frac{1-n_3{}^2}{2bk}\mathrm{H}_1(n_3) - \frac{n_3{}^2}{b} \right] \frac{\delta_{\alpha\beta}}{(1-n_3{}^2)} -$$

$$-\left[\frac{1-n_3{}^2}{2bk}\mathrm{H}_2(n_3) - \frac{1+n_3{}^2}{b} \right] \frac{n_\alpha n_\beta}{(1-n_3{}^2)^2},$$

а с учетом $\mathrm{H}_1(n_3)\rightarrow\dfrac{2k}{1-n_3{}^2}-b(a+b)$;

$$\mathrm{H}_2(n_3)\rightarrow 2k\frac{1+n_3{}^2}{1-n_3{}^2}-b(a+b)(1-n_3{}^2)$$

приходим к изотропным компонентам [8]:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r})\rightarrow G_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{r})=\frac{1}{8\pi b}\,\frac{a+b}{a+2b}\,\frac{n_\alpha n_\beta}{r};$$

$$\alpha\neq\beta; \tag{35}$$

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r})\rightarrow G_{\alpha\alpha}^{(0)}(\vec{r})=$$

$$\frac{1}{8\pi b}\,\frac{a+b}{a+2b}\left[\frac{a+3b}{a+b}+n_\alpha{}^2\right]\frac{1}{r};$$

$$\alpha=\beta. \tag{36}$$

Итак, применительно к гексагональной системе процедура нахождения компонент тензора Грина формально сводится к сумме вычетов относительно полюсов в верхней полуплоскости комплексной переменной подынтегральной функции (16). Характер полюсов определяется упругими модулями конкретного кристалла. Они могут быть комплексными либо чисто мнимыми. В обоих случаях искомые компоненты тензора Грина вычисляются точно. Обратим внимание, что конечные выражения (22), (33) для каждой компоненты тензора Грина структурно совпадают с изотропным приближением [9]:

$$G_{ik}(\vec{x},\vec{x}')=\frac{1}{4\pi}\left(\Psi_1(n_3)\frac{\delta_{ik}}{r}+\Psi_2(n_3)\frac{n_i n_k}{r}\right),$$

$$\vec{r}=\vec{x}-\vec{x}'.$$

Только в случае изотропии коэффициенты $\Psi_{1,2}$ – это константы (см. (34), (35), (36)), а у нас это громоздкие функции переменной $n_3=(x_3-x_3')/r$, да еще и разные для комплексных и мнимых полюсов. Если теперь вспомнить, что координата $\vec{x}'$ связана, как правило, с распределением фиктивных сил, моделирующих упругое влияние стока, и что по ней надо 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.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Дж. Эшелби. *Континуальная теория дислокаций*. М.: «Наука», 1963, 215 с.
2. M. Griffiths // *J. Nucl. Mater*. 1988, v. 159, p. 190.
3. И.Г. Маргвелашвили, З.К. Саралидзе // *ФТТ*. 1973, v. 15, p. 2665.
4. И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг // *ЖЭТФ*. 1947, v. 17, p. 783.
5. П.Н. Остапчук. Тензорная функция грина гексагональных переходных металлов // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2011, №4, с. 20-25.
6. М.А. Баранов, Е.А. Дубов, И.В. Дятлова, Е.В. Черных // *ФТТ*. 2004, v. 46, p. 212.
7. L. Fast, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson // *Phys. Rev. B*. 1995, v. 51, p. 17431.
8. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. М.: «Наука», 1987, 246 с.

Статья поступила в редакцию 24.09.2012 г.

ТЕНЗОР ГРІНА КРИСТАЛІВ ГЕКСАГОНАЛЬНОЇ СИСТЕМИ

П.М. Остапчук

Метод побудови тензора Гріна для основного рівняння теорії пружності у випадку анізотропного середовища, запропонований І.М. Ліфшицем та Л.Н. Розенцвейгом, в принципі, зводиться до вичетів та має на увазі знаходження коренів (полюсів) деякого алгебраїчного рівняння шостого ступеню. В залежності від значень пружних модулей кристала ці полюси можуть бути комплексними або уявними. У роботі компоненти тензора Гріна кристалів гексагональної системи одержані в загальному виді, який справедливий як для уявних, так і для комплексних полюсів. На відміну від металів кубічної сингонії результат є точним. Показано граничний перехід до ізотропного наближення.

GREEN TENSOR FOR CRYSTALS HEXAGONAL SYSTEM

P.N. Ostapchuk

Components of the Green tensor for crystals of hexagonal system are obtained in a general form by the Lifshitz, Rosenzweig method. The result is valid for both imaginary and complex poles. In contrast to cubic crystals, the result for HCP crystals is exact. The procedure of reducing the results to an isotropic limit is shown.