ТЕНЗОРНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА В ТЕОРИИ УПРУГОСТИ АНИЗОТРОПНОЙ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СРЕДЫ

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

Методом Лифшица-Розенцвейга получены компоненты тензорной функции Грина упругоанизотропной гексагональной среды в общем виде, справедливом как для мнимых, так и для комплексных полюсов. Результат точный, и в отличие от предыдущих исследований не содержит неопределенностей типа 0/0 при переходе к изотропному приближению. В качестве примера его использования рассмотрены поля смещений и напряжений, создаваемые инфинитезимальной призматической дислокационной петлей, лежащей в базисной плоскости циркония.

PACS 62.20.Dc; 62.20.Fe

ВВЕДЕНИЕ

Ряд задач в теории радиационного материаловедения связан с корректным вычислением диффузионных потоков точечных дефектов (ТД), генерируемых облучением, на внутренние протяженные дефекты кристалла (макродефекты) с учетом их взаимного упругого взаимодействия. Различие в эффективности поглощения данным макродефектом ТД разного сорта (вакансий и собственных межузельных атомов) является основной движущей силой микроструктурной эволюции материала под облучением. Эта эволюция проявляется, в частности, в зарождении и росте дислокационных петель, ведущих в конечном счете к радиационному упрочнению конструкционных материалов ядерных реакторов [1]. Упругое взаимодействие между ТД и макродефектом определяется моделью конкретного дефекта как источника внутренних напряжений и упругими свойствами неограниченной непрерывной среды, моделирующей кристалл. Математическим выражением этих свойств является тензорная функция Грина (ТФГ) основного уравнения теории упругости. Фактически – это реакция упругой среды на ***сосредоточенную*** силу или сингулярное возмущение. Зная ТФГ, можно определить упругое состояние среды в любой ее точке, вызванное произвольным распределением таких сил, источником которых как раз и служат ТД и макродефекты кристалла, и, тем самым, найти энергию их упругого взаимодействия [2]. Поэтому определение ТФГ является важным элементом теории радиационного материаловедения реальных кристаллов.

В изотропном приближении ТФГ хорошо известна [3, 4]. В случае упругоанизотропной среды регулярный метод ее построения был предложен И.М. Лифшицем и Л.Н. Розенцвейгом в работе [5]. 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 полюса чисто мнимые, а для Zn, Cd и Be – комплексные. По отдельности для мнимых и комплексных полюсов ТФГ посчитана в работах [6, 7]. В этом сообщении результат дается в общем виде, пригодном для любого ГПУ-металла. Результат точный, и в отличие от [5, 6] не содержит неопределенности типа 0/0 при переходе к изотропному приближению. В качестве примера его использования рассмотрены поля смещений и напряжений, создаваемые инфинитезимальной призматической дислокационной петлей, лежащей в базисной плоскости Zr.

1. ИДЕЯ И ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ МЕТОДА

Смещение $\vec{u}(\vec{r})$, возникающее в среде, под действием приложенной в начале координат точечной силы $\vec{f}$ удовлетворяет системе уравнений:

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

Тензор Грина определяется соотношением:

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

т. е. является решением системы

$$C_{iklm}\frac{\partial^2 G_{ln}(\vec{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\vec{r})\delta_{in}, \qquad G_{ln}(\infty)\to 0. \tag{3}$$

Поэтому, если найти компоненту смещения $u_l(\vec{r})$ и в ней заменить f_i на δ_{in}, мы получим соответствующую компоненту $G_{ln}(\vec{r})$ тензора Грина (латинские индексы принимают значения 1,2,3). Решение (1) находим с помощью преобразования Фурье, используя известное разложение δ-функции Дирака:

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

Подстановка (4) в (3) дает для амплитуд Фурье $V_l(\vec{\xi})$ систему алгебраических уравнений. Обозначив символом $\Delta(\vec{\xi})$ ее определитель, а символом $\Delta_{il}(\vec{\xi})$ его алгебраические дополнения, имеем формальное решение для $V_l(\vec{\xi})$:

$$V_l(\vec{\xi}) = \frac{\Delta_{li}(\vec{e})}{\xi^2 \Delta(\vec{e})} \frac{f_i}{(2\pi)^3}, \tag{5}$$

где $\vec{e} = \vec{\xi} / \xi$ – единичный вектор в пространстве векторов $\boldsymbol{\xi}$. В силу действительности выражения (5) интеграл (4) можно представить в виде

$$u_l(\vec{r}) = \int V_l(\vec{\xi}) \cos(\vec{r}\,\vec{\xi}) d^3\xi =$$
$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\Delta_{li}(\vec{e}) f_i}{\Delta(\vec{e})} \left(\int_0^\infty \cos\{ r\xi(\vec{n}\,\vec{e})\} d\xi \right) d\Omega(\vec{e}), \tag{6}$$

где второе интегрирование проводится по полному телесному углу в пространстве $\vec{\xi}$, а $\vec{n} = \vec{r} / r$ – единичный вектор в пространстве $\vec{r}$. Техника вычисления интеграла (6) подробно изложена в оригинальной статье Лифшица-Розенцвейга, поэтому сразу приведем результат:

$$u_l(\vec{r}) = \frac{2\pi}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_{li}(z)}{\Delta(z)} \frac{f_i}{(2\pi)^3} dz. \tag{7}$$

В общем случае $\Delta(z)$, $\Delta_{li}(z)$ – полиномы шестой и четвертой степеней z соответственно, коэффициенты которых выражаются через полярные углы θ, φ вектора $\vec{n}$ в кристаллографической системе осей и упругие модули кристалла. Из формулы (7) видно, что каковы бы ни были модули упругости C_{iklm}, смещение $u_l(\vec{r})$, а значит, и компоненты тензора Грина являются однородными функциями первого порядка от координат. Этот факт заранее очевиден. Он следует из вида уравнений (1), (3) и свойства δ-функции $\delta(\alpha\vec{r}) = \alpha^{-3}\delta(\vec{r})$. Интеграл в (7) берется с помощью вычетов подынтегральной функции относительно полюсов, расположенных в верхней полуплоскости комплексной переменной z. Поэтому формально задача сводится к нахождению корней уравнения шестой степени.

2. ТЕНЗОР ГРИНА КРИСТАЛЛОВ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

В декартовой системе координат с осью x_3 в направлении гексагональной оси кристалла тензор модулей упругости может быть представлен в форме:

$$C_{iklm} = a\delta_{ik}\delta_{lm} + b(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}) + \gamma\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{l3}\delta_{m3} +$$
$$\chi\left(\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{lm} + \delta_{ik}\delta_{l3}\delta_{m3}\right) + \rho(\delta_{im}\delta_{k3}\delta_{l3} + \delta_{il}\delta_{k3}\delta_{m3} +$$
$$\delta_{kl}\delta_{i3}\delta_{m3} + \delta_{km}\delta_{i3}\delta_{l3}); \tag{8}$$

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

где C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, $C_{55} = C_{44}$ – минимальное число отличных от нуля упругих модулей. В нашем случае искомые полюса являются корнями квадратного и биквадратного уравнений вида:

$$\frac{1}{2}A(\theta)z^4 + B(\theta)z^2 + k = 0; \qquad P(\theta)z^2 + b = 0; \tag{9}$$
$$A(\theta) = 2\left(k + l\sin^2\theta - m\sin^4\theta\right); \quad B(\theta) = \left(l\sin^2\theta + 2k\right); \quad P(\theta) = b + \rho\sin^2\theta,$$

а константы k, m, l даются выражениями:

$$k = (a + 2b)(b + \rho); \quad m = (a + b - \rho)\gamma - (\chi + 2\rho)^2; \quad l = (a + 2b)\gamma + (2b - \chi)(\chi + 2\rho). \tag{10}$$

Коэффициенты уравнений (9) вещественны, поэтому их корни являются попарно сопряженными, и вклад в интеграл (7) дают только три из них $z_{1,2,3}$. Наиболее просто результат выглядит для компонент тензора Грина $G_{3k}(\vec{r})$:

$$G_{3k}(\vec{r}) = \frac{2i}{(z_1 + z_2)A(n_3^2)} \left\{ \frac{a + b + \chi + \rho}{4\pi} (\delta_{1k}n_1 + \delta_{2k}n_2) \frac{n_3}{r} + \right.$$
$$\left. + \left((b + \rho) + (a + b - \rho)n_3^2 - \frac{(a + 2b)}{z_1 z_2} \right) \frac{\delta_{3k}}{4\pi r} \right\}. \tag{11}$$

(Здесь $n_1 = \sin\theta\cos\varphi$; $n_2 = \sin\theta\sin\varphi$; $n_3 = \cos\theta$ – компоненты единичного вектора $\vec{n} = \vec{r} / r$; $z_{1,2}$ – корни биквадратного уравнения, лежащие в верхней полуплоскости комплексной переменной z). Аналогичный результат для компонент $G_{\alpha k}(\vec{r})$ ($\alpha = 1, 2$) сложнее:

$$G_{\alpha k}(\vec{r})=\left[\frac{2i}{(z_1+z_2)}\frac{R(n_3^2)}{bA(n_3^2)}-\frac{b\,n_3^2}{\sqrt{b\,P(n_3^2)}\,(b+\rho)(1-n_3^2)}\right]\frac{\delta_{\alpha k}}{4\pi r}-$$
$$-\left[\frac{2i}{(z_1+z_2)}\frac{S(n_3^2)}{(1-n_3^2)bA(n_3^2)}-\frac{P(n_3^2)+bn_3^2}{\sqrt{b\,P(n_3^2)}\,(b+\rho)(1-n_3^2)^2}\right]\frac{(\delta_{1k}n_1+\delta_{2k}n_2)n_\alpha}{4\pi r}+ \qquad (12)$$
$$+\frac{2i}{(z_1+z_2)}\frac{a+b+\chi+\rho}{A(n_3^2)}\frac{n_\alpha n_3}{4\pi r}\delta_{3k},$$

а функции $R(n_3^2)$ и $S(n_3^2)$ даются следующими выражениями:

$$R=\frac{(a+b)(b+\rho)}{z_1\,z_2}-\frac{A(n_3^2)\,P(n_3^2)}{2(b+\rho)(1-n_3^2)}\left(z_1z_2-\frac{b}{P(n_3^2)}\right), \qquad (13)$$
$$S=(a+b)(b+\rho)\left[\frac{1}{z_1z_2}+n_3^2\right]-\frac{A(n_3^2)\,P(n_3^2)}{2(b+\rho)(1-n_3^2)}\left[z_1z_2-\frac{b}{P(n_3^2)}+\left(z_1^2z_2^2+\frac{b}{P}\left[z_1z_2-\frac{2B(n_3^2)}{A(n_3^2)}\right]\right)n_3^2\right].$$

Форма записи (11)-(13) отличается от оригинала [4] и от работы [5], хотя, по сути, они тождественны. Удобство ее заключается в предельной простоте перехода к изотропии. В работах [4, 5] он затруднен неопределенностью типа 0/0, а здесь ее нет. Положим $\gamma=\chi=\rho=0$. Тогда $m=l=0$; $A=B=2k$; $P=b$; $k=b(a+2b)$, биквадратное уравнение (9) становится тривиальным: $\left[z^2+1\right]^2=0$, откуда следует, что $z_1=z_2=i$. В результате из (11), (12) для компонент тензора Грина имеем выражения:

$$G_{3k}(\vec{r})=\frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}\times$$
$$\left[(\delta_{1k}n_1+\delta_{2k}n_2)n_3+\left(\frac{a+3b}{a+b}+n_3^2\right)\delta_{3k}\right]\frac{1}{r}; \qquad (14)$$
$$G_{\alpha k}(\vec{r})=\frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}\times$$
$$\left[\frac{a+3b}{a+b}\delta_{\alpha k}+(\delta_{1k}n_1+\delta_{2k}n_2)n_\alpha+n_\alpha n_3\delta_{3k}\right]\frac{1}{r}, \qquad (15)$$

которые легко сворачиваются в одно

$$G_{ik}(\vec{r})=\frac{1}{8\pi b}\frac{a+b}{a+2b}\times\left[\frac{a+3b}{a+b}\delta_{ik}+n_in_k\right]\frac{1}{r}, \qquad (16)$$

соответствующее изотропной упругой среде ($a\equiv\lambda$; $b\equiv\mu$, где λ и μ – коэффициенты Ламэ) [2, 3].

Результаты (11), (12) требуют некоторого пояснения. В работах [7, 8] приведены экспериментальные и расчетные значения упругих модулей практически всех ГПУ-металлов. Анализ этих данных (в пересчете на мегабары) показывает, что для всех них имеют место неравенства $k=C_{11}C_{44}>0$; $A(\theta)>0$; $B(\theta)>0$; $P(\theta)>0$ для любого значения угла θ. Поэтому нужный корень квадратного уравнения z_3 очевиден: $z_3=i\sqrt{b/P}$, и формула (12) приведена уже с учетом его явного вида. В (11) он вообще вклада не дает. Зависимость от угла θ у коэффициентов $A(\theta)$, $B(\theta)$, $P(\theta)$ входит посредством $\sin^2\theta=1-n_3^2$, поэтому в (11), (12) фигурирует именно n_3^2. Что касается корней биквадратного уравнения $z_{1,2}$, то их явные выражения зависят от знака дискриминанта $D=B^2-2Ak$ или от соотношений между упругими модулями конкретного материала. А вот комбинация $z_1z_2=-(2k/A)^{1/2}$ в этом смысле универсальна, знак минус следует из перехода к изотропии $z_1z_2\to-1$. Таким образом, единственное место, где нужны явные выражения $z_{1,2}$, это отношение $2i/(z_1+z_2)$. При $D>0$ искомые полюса чисто мнимые и компактно могут быть записаны в виде:

$$z_{1,2}=i\sqrt{p_{1,2}(n_3^2)\big/A(n_3^2)},$$
$$p_{1,2}=B\pm\sqrt{B^2-2Ak}=2k+$$
$$+\left(l\pm\sqrt{l^2+4km}\right)(1-n_3^2). \qquad (17)$$

Эта ситуация реализуется у Zr, Mg, Co, Ti, Hf, Y, Sc, Tl, Tc, Ru, Re, Os; для них $l,m>0$, так что $p_{1,2}(n_3)>0$ для любого значения θ. Для Zn, Cd и Be $D<0$, а искомые полюса имеют вид:

$$z_{1,2}=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2k}{A(n_3^2)}}-\frac{B(n_3^2)}{A(n_3^2)}\right)^{1/2}+$$
$$+\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2k}{A(n_3^2)}}+\frac{B(n_3^2)}{A(n_3^2)}\right)^{1/2}. \qquad (18)$$

Видно, что в обоих случаях комбинация $2i/(z_1+z_2)$ вещественна. Важно отметить, что $z_{1,2}$ являются функциями только $n_3^{\,2}$.

3. ПРИЛОЖЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В качестве примера использования формул (12), (13) рассмотрим поля смещений и напряжений, создаваемые инфинитезимальной призматической дислокационной петлей, лежащей в базисной плоскости Zr. Согласно [1, 2] для компонент смещения имеем:

$$u_i(\vec r)=C_{jklm}d_{lm}\frac{\partial G_{ij}(\vec r)}{\partial x_k},\quad d_{lm}=\delta S_l\, b_m\,, \tag{19}$$

где b_m – компонента вектора Бюргерса; δS_l – площадь, ограниченная проекцией петли на плоскость, перпендикулярную l-й координатной оси (смещения конечной петли даются поверхностным интегралом по этой площади). В нашем случае $\vec b=(0,0,b_3)$, $\delta\vec S=(0,0,\delta S_3)$, поэтому

$$C_{jk33}=(a+\chi)\delta_{jk}+(2b+\gamma+\chi+4\rho)\delta_{j3}\delta_{k3},$$

соответственно

$$u_i(\vec r)=d_{33}(a+\chi)\frac{\partial G_{i\alpha}}{\partial x_\alpha}+d_{33}(a+2b+\gamma+2\chi+4\rho)\frac{\partial G_{i3}}{\partial x_3}\equiv d_{33}\left[C_{13}\frac{\partial G_{i\alpha}(\vec r)}{\partial x_\alpha}+C_{33}\frac{\partial G_{i3}(\vec r)}{\partial x_3}\right] \tag{20}$$

(по индексу $\alpha=1,2$ подразумевается суммирование). Так, для компоненты u_3 имеем:

$$\begin{aligned}u_3(\vec r)&=d_{33}C_{13}\frac{\partial G_{3\alpha}(\vec r)}{\partial x_\alpha}+d_{33}C_{33}\frac{\partial G_{33}(\vec r)}{\partial x_3}=-d_{33}C_{13}\frac{n_3}{r^2}\left[(1-3n_3^2)\Phi(n_3^2)+2n_3^2(1-n_3^2)\frac{\partial\Phi(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right]-\\&-d_{33}C_{33}\frac{n_3}{r^2}\left[F(n_3^2)-2(1-n_3^2)\frac{\partial F(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right]\equiv-d_{33}\frac{x_3}{r^3}\Psi(n_3^2),\end{aligned} \tag{21}$$

где согласно (11)

$$G_{3\alpha}(\vec r)=\frac{2i}{(z_1+z_2)A(n_3^2)}\frac{C_{13}+C_{55}}{4\pi}\frac{n_\alpha n_3}{r}\equiv\Phi(n_3^2)\frac{n_\alpha n_3}{r},$$

$$G_{33}(\vec r)=\frac{2i}{(z_1+z_2)A(n_3^2)}\left(C_{55}+(C_{11}-C_{55})n_3^2-\frac{C_{11}}{z_1\,z_2}\right)\times\frac{1}{4\pi r}\equiv F(n_3^2)\frac{1}{r}\cdot$$

Для двух других компонент смещения u_β ($\beta=1,2$) из (20) получаем:

$$\begin{aligned}u_\beta(\vec r)=\;&d_{33}C_{13}\frac{\partial G_{\beta\alpha}(\vec r)}{\partial x_\alpha}+d_{33}C_{33}\frac{\partial G_{\beta3}(\vec r)}{\partial x_3}=\\=&-d_{33}C_{13}\frac{n_\beta}{r^2}\left[\mathrm{N}(n_3^{\,2})+3n_3^2\mathrm{M}(n_3^{\,2})+2n_3^{\,2}\frac{\partial\mathrm{N}(n_3^2)}{\partial n_3^2}-2n_3^{\,2}(1-n_3^2)\frac{\partial\mathrm{M}(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right]+\\&+d_{33}C_{33}\frac{n_\beta}{r^2}\left[(1-3n_3^2)\Phi(n_3^2)+2n_3^2(1-n_3^2)\frac{\partial\Phi(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right]\equiv d_{33}\frac{x_\beta}{r^3}\mathrm{K}(n_3^{\,2}),\end{aligned} \tag{22}$$

где согласно (12)

$$G_{\alpha\beta}(\vec r)=\mathrm{N}(n_3^{\,2})\frac{\delta_{\alpha\beta}}{r}-\mathrm{M}(n_3^{\,2})\frac{n_\alpha n_\beta}{r},$$

а громоздкие функции $\mathrm{N}(n_3^{\,2})$ и $\mathrm{M}(n_3^{\,2})$ – это соответствующие коэффициенты в квадратных скобках (12). В (21), (22) учтено очевидное равенство $\sum_k n_k^{\,2}=1$. Эти выражения справедливы для любой точки наблюдения $\vec r$, но, как видно, они крайне громоздки. Например, в базисной плоскости ($n_3=0$), как и следовало ожидать из соображений симметрии, компонента $u_3(\vec r)$ обращается в нуль для любого ГПУ-металла, а выражение (22) несколько упрощается, но все равно остается очень громоздким. Так для циркония:

$$u_\beta(\vec r)=\frac{n_\beta}{r^2}d_{33}\left[C_{33}\Phi(0)-C_{13}\mathrm{N}(0)\right]\equiv d_{33}\frac{x_\beta}{r^3}\mathrm{K}(0);$$

$$\Phi(0)=\frac{C_{13}+C_{55}}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{A(0)}}\frac{1}{\sqrt{p_1(0)}+\sqrt{p_2(0)}}; \tag{23}$$

$$\mathrm{N}(0)=\frac{1}{2\pi}\frac{R(0)}{b}\frac{1}{\sqrt{A(0)}}\frac{1}{\sqrt{p_1(0)}+\sqrt{p_2(0)}},$$

где величины $A(0)$, $p_{1,2}(0)$, $R(0)$ являются комбинациями упругих модулей циркония и определяются соотношениями (9), (10), (13), (17).

Зная поле смещений и используя закон Гука, нетрудно найти поле напряжений $\sigma_{ik}=C_{iklm}u_{lm}$. В случае гексагональной среды (8) компоненты тензора напряжений принимают вид:

$$\sigma_{11} = aSpu_{ik} + 2bu_{11} + \chi u_{33};$$
$$\sigma_{22} = aSpu_{ik} + 2bu_{22} + \chi u_{33};$$
$$\sigma_{33} = (a+\chi)Spu_{ik} + (2b+\gamma+\chi+4\rho)u_{33};$$
$$\sigma_{\beta 3} = 2(b+\rho)u_{\beta 3}; \qquad \sigma_{12} = 2bu_{12};$$
$$Sp\sigma_{ik} = (3a+2b+\chi)Spu_{ik} + (\gamma+3\chi+4\rho)u_{33}.$$

Видно, что в отличие от изотропии и кубической симметрии $Sp\sigma_{ik}$ не пропорционален Spu_{ik}. Итак, задача сводится к простому дифференцированию выражений (21), (22). Однако, учитывая громоздкость формул, в общем виде приведем лишь промежуточные результаты для компонент тензора деформаций:

$$u_{11}(\vec{r}) = \frac{d_{33}}{r^3}\left[(1-3n_1^2)\mathrm{K}(n_3^2) - 2n_3^2 n_1^2 \frac{\partial \mathrm{K}(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right];$$

$$u_{22}(\vec{r}) = \frac{d_{33}}{r^3}\left[(1-3n_2^2)\mathrm{K}(n_3^2) - 2n_3^2 n_2^2 \frac{\partial \mathrm{K}(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right];$$

$$u_{33}(\vec{r}) = -\frac{d_{33}}{r^3}\left[(1-3n_3^2)\Psi(n_3^2) + 2n_3^2(1-n_3^2)\frac{\partial \Psi(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right],$$

где функции $\Psi(n_3^2)$ и $\mathrm{K}(n_3^2)$ определяются соотношениями (21), (22) как коэффициенты при x_3/r^3 и x_β/r^3 соответственно. С помощью диагональных компонент тензора деформаций легко получаем аналогичные компоненты тензора напряжений и их сумму. Для недиагональных компонент тензора напряжений результат вполне обозрим:

$$u_{12}(\vec{r}) = -d_{33}\frac{x_1 x_2}{r^5}\left[3\mathrm{K}(n_3^2) + 2n_3^2 \frac{\partial \mathrm{K}(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right],$$

$$u_{\beta 3}(\vec{r}) = d_{33}\frac{x_\beta x_3}{2r^5}[3\Psi(n_3^2) - 3\mathrm{K}(n_3^2) + $$
$$+ 2n_3^2\frac{\partial \Psi(n_3^2)}{\partial n_3^2} + 2(1-n_3^2)\frac{\partial \mathrm{K}(n_3^2)}{\partial n_3^2}].$$

Следует, однако, заметить, что функции $\Psi(n_3^2)$ и $\mathrm{K}(n_3^2)$ сами по себе очень громоздкие и выражаются через функции $\Phi(n_3^2)$, $F(n_3^2)$, $\mathrm{N}({n_3}^2)$ и $\mathrm{M}({n_3}^2)$, которые им под стать; поэтому выписать результат в общем виде нереально, хотя, как видим, принципиальных математических трудностей нет, только технические. В базисной плоскости ($n_3 = 0$), например, компоненты тензора напряжений принимают более простой вид:

$$\sigma_{11}(\vec{r}) = -\frac{d_{33}}{r^3}\left[(a-2b)\mathrm{K}(0) + (a+\chi)\Psi(0) + 6b\frac{x_1^2}{r^2}\mathrm{K}(0)\right];$$

$$\sigma_{22}(\vec{r}) = -\frac{d_{33}}{r^3}\left[(a-2b)\mathrm{K}(0) + (a+\chi)\Psi(0) + 6b\frac{x_2^2}{r^2}\mathrm{K}(0)\right];$$

$$\sigma_{33}(\vec{r}) = -\frac{d_{33}}{r^3}\left[(a+\chi)\mathrm{K}(0) + (a+2b+\gamma+2\chi+4\rho)\Psi(0)\right];$$

$$\sigma_{13} = \sigma_{23} = 0; \qquad \sigma_{12}(\vec{r}) = -d_{33}\frac{x_1 x_2}{r^5}6b\mathrm{K}(0).$$

Соответственно

$$Sp\sigma_{ik} = -\frac{d_{33}}{r^3}\left[(C_{11}+C_{12}+C_{13})\mathrm{K}(0) + \right.$$
$$\left. + (C_{33}+2C_{13})\Psi(0)\right], \qquad (24)$$

где согласно (21)

$$\Psi(0) = C_{13}\Phi(0) - C_{33}\left[F(n_3^2) - 2\frac{\partial F(n_3^2)}{\partial n_3^2}\right]\Big|_{n_3^2=0},$$

$$\mathrm{K}(0) = C_{33}\Phi(0) - C_{13}\mathrm{N}(0).$$

4. ЧИСЛЕННЫЕ ОЦЕНКИ

В заключение приведем численные оценки полученных результатов применительно к Zr. Согласно [6] экспериментальные значения упругих модулей циркония следующие, Мбар: $C_{11} = 1,554$; $C_{12} = 0,672$; $C_{13} = 0,646$; $C_{33} = 1,725$; $C_{55} = C_{44} = 0,363$. Тогда для среднего гидростатического давления $\bar{P} = -1/3\, Sp\sigma_{ik}$ в базисной плоскости ($n_3 = 0$) имеем (24): $\bar{P} \simeq 1,44\frac{d_{33}}{6\pi r^3}$ Мбар (напомним, что величина d_{33} имеет размерность объема (19)). Для сравнения аналогичные оценки сделаем для той же призматической петли в изотропной среде, моделирующей реальный гексагональный кристалл. Ось z направим вдоль вектора Бюргерса и нормали к плоскости петли. В этом случае $C_{iklm} = \lambda\delta_{ik}\delta_{lm} + \mu(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl})$, а $Sp\sigma_{ik}^I = (3\lambda + 2\mu)Spu_{ik}^I$. Сделав необходимые вычисления, в плоскости залегания петли получаем: $\bar{P}^I = \mu\frac{3\lambda+2\mu}{\lambda+2\mu}\frac{d_{33}}{6\pi r^3}$. Для средних упругих модулей λ и μ используем усреднение Фогта [3]:

$$\lambda = \frac{1}{15}\left(2C_{iijj} - C_{ijij}\right), \qquad \mu = \frac{1}{30}\left(3C_{ijij} - C_{iijj}\right).$$

В результате $\lambda = \frac{1}{15}\left(15a + \gamma + 10\chi\right)$; $\mu = \frac{1}{15}\left(15b + \gamma + 10\rho\right)$; $\bar{P}^I = 0,805\frac{d_{33}}{6\pi r^3}$ Мбар. Далее, энергия упругого взаимодействия между ТД (в приближении центра дилатации) и рассматриваемым объектом согласно [1] пропорциональна среднему давлению, создаваемому этим объектом в точке нахождения ТД. Поэтому из приведенных оценок следует, что изотропное приближение занижает эффективность этого взаимодействия. В реальном кристалле оно сильнее.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. V.I. Dubinko, S.A. Kotrechko, and V.F. Klepikov // *Radiat. Eff. Defects Solids*. 2009, v. 164, p. 647.
2. Дж. Эшелби. *Континуальная теория дислокаций.* М.: «Наука», 1963, 215 с.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. М.: «Наука», 1987, 246 с.
4. Дж Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций.* М.: «Атомиздат», 1972, 600 с.
5. И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг // *ЖЭТФ*. 1947, т. 17, 783 с.
6. П.Н. Остапчук // *ФТТ*. 2011, т. 55, №1, с. 95.
7. М.А. Баранов, Е.А. Дубов, И.В. Дятлова, Е.В. Черных // *ФТТ*. 2004, т. 46, с. 212.
8. L. Fast, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson // *Phys. Rev. B.* 1995, v. 51, N 17, p. 431.

Статья поступила в редакцию 26.06.2014 г.

ТЕНЗОРНА ФУНКЦІЯ ГРІНА В ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ АНІЗОТРОПНОГО ГЕКСАГОНАЛЬНОГО СЕРЕДОВИЩА

П.М. Остапчук, О.Г. Троценко

Методом Ліфшиця-Розенцвейга отримані компоненти тензорної функції Гріна пружноанізотропного гексагонального середовища в загальному вигляді, справедливому як для уявних, так і для комплексних полюсів. Результат точний, і на відміну від попередніх досліджень не містить невизначеностей типу 0/0 при переході до ізотропного наближення. Як приклад його використання, розглянуті поля зміщень і напружень, що створюються інфінітезимальною призматичною дислокаційною петлею, що лежить у базисній площині цирконію.

THE TENSOR GREEN FUNCTION OF ELASTICALLY ANISOTROPIC HEXAGONAL MEDIUM

P.N. Ostapchuk, O.G. Trotsenko

In this report, components of the tensor Green function of elastically anisotropic hexagonal medium are derived by the Lifshitz and Rosentsveig method. The result is given in a general form suitable for any hcp metal. The result is exact and, in contrast to previous studies, contains no the type of uncertainty 0/0 in the transition to the isotropic limit. As an example of its use, we consider displacements and stress fields generated by a infinitesimal prismatic dislocation loop lying in the basal plane of Zr.