08

Тензор Грина слабоанизотропного кубического кристалла: эффективность поглощения точечных дефектов сферической порой

© П.Н. Остапчук

Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина

E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 9 июня 2011 г.)

С помощью метода Лифшица–Розенцвейга получено уточненное выражение для тензора Грина в случае слабоанизотропного кубического кристалла. Оно содержит ряд дополнительных слагаемых, не учтенных ранее. Найдено выражение для энергии упругого взаимодействия точечного дефекта с газонаполненной порой, которое отличается от своего аналога (обычно используемого со ссылкой на Эшелби) дополнительным множителем в радиальной части. В случае слабого взаимодействия (по сравнинию с тепловой энергией) получена поправка к эффективности поглощения точечных дефектов газонаполненной порой, которая оказывается квадратичной по параметру анизотропии и отрицательной. В результате пора имеет предпочтение к поглощению вакансий по сравнению с поглощением междоузельных атомов.

1. Введение

Как известно, концепция упругого изотропного кристалла является идеализацией. Все реальные кристаллы анизотропны. Тем не менее изотропное приближение широко используется. Для этого имеются две вполне обоснованные причины. Первая — математические сложности и чрезвычайная громоздкость вычислений, возникающие при учете анизотропии. Вторая причина обусловлена тем, что ошибки, связанные с изотропным приближением, оказываются во многих случаях того же порядка или даже меньше ошибок эксперментальных наблюдений. И все же учет анизотропии важен как в теории, так и на практике.

В континуальной теории упругости ряд задач решается с помощью тензорной функции Грина. Если известна реакция неограниченной упругой среды на сосредоточенную силу, то с помощью интегрирования можно найти деформацию этой среды, вызванную любым распределением сил. Примером может служить задача об определении упругого поля „включения“ [1]. В изотропном приближении тензорная функция Грина давно известна [2]. В случае неограниченной упругоанизотропной среды регулярный метод ее построения был предложен Лифшицом и Розенцвейгом в работе [3]. Было показано, что для кристаллов кубической системы все вычисления могут быть проведены до конца лишь при условии слабой анизотропии. Детальный анализ вычислений [3], однако, показал, что при разложении выражения для амплитуд Фурье по малому параметру анизотропии были учтены не все слагаемые, имеющие один и тот же порядок малости. В результате полученный в [3] тензор Грина кубических кристаллов представляется неполным. В настоящей работе дается краткий вывод уточненного выражения тензора Грина для кристаллов кубической системы.

Важную роль в физике радиационных повреждений твердого тела играет концепция предпочтительного поглощения внутренними стоками точечных дефектов (ТД) определенного сорта. Причину такого предпочтения обычно связывают с различием в упругом взаимодействии вакансий и собственных междоузельных атомов (СМА) со стоком данного типа [4,5]. Это различие приводит к некоторой асимметрии диффузионных потоков ТД на сток, что интерпретируется как предпочтение (преференс) данного стока к поглощению ТД определенного сорта. Коэффициенты асимметрии, или эффективности поглощения ТД, и представляют наибольший интерес при описании кинетики роста пор. Используя уточненный тензор Грина, автор получил выражение для энергии упругого взаимодействия ТД с газонаполненной порой (размерный эффект). В отличие от аналогичной формулы Эшелби [6] оно содержит иную радиальную зависимость (угловая зависимость такая же). Для случая слабого взаимодействия методом последовательных приближений показано, что анизотропная часть эффективности поглощения ТД газовой порой квадратична по малому параметру анизотропии, а сама пора имеет предпочтение к поглощению вакансий.

2. Тензор Грина слабоанизотропного кубического кристалла

Идея метода [3] построения тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упругоанизотропной среды состоит в следующем. Как известно, смещение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, возникающее в среде под действием приложенной в начале координат силы $\mathbf{f}$, удовлетворяет системе уравнений

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

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

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

т. е. является решением системы

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

Поэтому если мы найдем $u_l(\mathbf{r})$ и заменим в нем f_i на δ_{in}, то получим компоненту G_{ln} тензора Грина. Таким образом, задача сводится к отысканию решения (1). Следуя [3], 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

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

Тензор модулей упругости в соответствующей кристаллографической системе координат имеет вид

$$C_{iklm} = a\delta_{ik}\delta_{lm} + b(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}) + d\sum_{p=1}^{3}\delta_{ip}\delta_{kp}\delta_{lp}\delta_{mp},$$

$$a \equiv C_{12}, \quad b \equiv C_{44}, \quad d \equiv C_{11} - C_{12} - 2C_{44}, \tag{6}$$

где C_{11}, C_{12}, C_{44} — минимальное число отличных от нуля упругих модулей в кристаллах кубической системы, d — фактор анизотропии. С учетом (6) вместо (5) имеем

$$(a+b)\xi_i(\boldsymbol{\xi}\mathbf{V}) + (b\xi^2 + d\xi_i^2)V_i(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^3}f_i. \tag{7}$$

Далее, умножая (7) на $1/\xi_i$ и суммируя по i, получаем

$$(\boldsymbol{\xi}\mathbf{V})[3(a+b)+d] + b\xi^2\sum_i V_i/\xi_i = \frac{1}{(2\pi)^3}\sum_i f_i/\xi_i. \tag{8}$$

Подставляя в (8) V_i из (7), получаем явное выражение для скалярного произведения $(\boldsymbol{\xi}\mathbf{V})$, а следовательно, и для искомых амплитуд Фурье

$$\xi^2V_i(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^3 b\left(1+\frac{d}{b}e_i^2\right)}\left[f_i - \frac{e_i\sum\limits_m \frac{f_m e_m}{1+(d/b)e_m^2}}{\frac{b}{a+b}+\sum\limits_k\frac{e_k^2}{1+(d/b)e_k^2}}\right],$$

$$\mathbf{e} = \boldsymbol{\xi}/\xi. \tag{9}$$

В силу действительности выражения (9) интеграл (4) можно записать в виде

$$u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\boldsymbol{\xi})\cos(\mathbf{r}\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi}$$

$$= \int \xi^2 V_l(\boldsymbol{\xi})\left(\int_0^\infty \cos\{r\xi(\mathbf{ne})\}d\xi\right)d\Omega(\mathbf{e}), \quad \mathbf{n} = \mathbf{r}/r, \tag{10}$$

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

$$\mathbf{e} = (\mathbf{ne})\mathbf{n} + \sqrt{1-(\mathbf{ne})^2}\,\boldsymbol{\tau} \equiv x\mathbf{n} + \sqrt{1-x^2}\,\boldsymbol{\tau}, \quad x \equiv (\mathbf{ne}). \tag{11}$$

Тогда элемет телесного угла $d\Omega(\mathbf{e})$ в (10) может быть записан в виде

$$d\Omega(\mathbf{e}) = dx\,d\varphi_\tau. \tag{12}$$

Угол φ_τ лежит в плоскости, перпендикулярной радиус-вектору $\mathbf{n}$, и отсчитывается от произвольно выбранного направления в этой плоскости. Интеграл по ξ в (10) выражается через δ-функцию

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

так что в результате интегрирования по x имеем

$$u_l(\mathbf{r}) = \frac{\pi}{r}\int_0^{2\pi}\Delta_l(\boldsymbol{\tau})d\varphi_\tau, \tag{14}$$

где $\Delta_l(\boldsymbol{\tau})$ — это правая часть (9) с заменой компонент e_i на τ_i. Тот факт, что $u_l(\mathbf{r})$, а значит, и компоненты искомого тензора Грина — однородные функции координат первого порядка, заранее очевиден. Он следует из вида уравнений (1), (3) и свойства δ-функции $\delta(\alpha x) = \alpha^{-3}\delta(x)$. Теперь нам остается выразить компоненты τ_i через φ_τ и полярные углы радиус-вектора θ, φ, после чего вычислить интеграл. Согласно [3],

$$\tau_1 = \cos\varphi_\tau\sin\varphi - \sin\varphi_\tau\cos\theta\cos\varphi,$$

$$\tau_2 = -\cos\varphi_\tau\cos\varphi - \sin\varphi_\tau\cos\theta\sin\varphi,$$

$$\tau_3 = \sin\varphi_\tau\sin\theta. \tag{15}$$

Однако вычислить интеграл (14) в общем виде для произвольных θ и φ не представляется возможным. Поэтому рассмотрим случай слабой анизотропии, когда $d \ll b, a$. В этом случае из (9) имеем

$$(2\pi)^3 b\Delta_l(\boldsymbol{\tau}) \simeq f_l - \frac{a+b}{a+2b}\tau_l(\boldsymbol{\tau}\mathbf{f}) + \frac{d}{b}\left\{-\tau_l^2 f_l + \frac{a+b}{a+2b}\right.$$

$$\left.\times\left[\tau_l\sum_k \tau_k^3 f_k + \tau_l^3(\boldsymbol{\tau}\mathbf{f}) - \frac{a+b}{a+2b}\tau_l(\boldsymbol{\tau}\mathbf{f})\sum_k\tau_k^4\right]\right\}. \tag{16}$$

Первые два слагаемых в (16) после подстановки в (14) с учетом (15) дают известный результат для изотропной ($d = 0$) упругой среды [2]

$$u_l^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{8\pi b}\,\frac{a+b}{a+2b} \times \left(\frac{a+3b}{a+b}\, f_l + n_l(\mathbf{nf})\right)\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \tag{17}$$

а после замены f_l на δ_{lm}

$$G_{lm}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{8\pi E}\,\frac{1+\nu}{1-\nu}\,[(3-4\nu)\delta_{lm} + n_l n_m]\,\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \tag{18}$$

где E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона. Что касается поправок, связанных с анизотропией, то здесь ситуация следующая. В работе [3] фигурируют только первые три слагаемых из соотношения (16), пропорциональные d/b. Они дают

$$u_l'^{(1)} = \frac{1}{8\pi b}\,\frac{a+b}{a+2b}\,\frac{d}{b}\left(\frac{a-b}{2(a+b)}\,(1-n_l^2)\,f_l - \frac{3}{2}\,n_l(\mathbf{nf}) + \frac{3}{4}\Big(n_l\sum_k n_k^3 f_k + n_l^3(\mathbf{nf})\Big)\right)\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{19}$$

Последнее слагаемое в (16) (порядка τ^6) в [3], по-видимому, просто упущено. Его вклад в анизотропную часть смещения имеет вид

$$\mathbf{u}_l''^{1} = -\frac{1}{8\pi b}\left(\frac{a+b}{a+2b}\right)^2\frac{d}{b}\left(\frac{1}{2}\,(1-n_l^2)\,f_l - \frac{5}{8}\,n_l(\mathbf{nf}) + \frac{1}{2}\Big(n_l\sum_k n_k^3 f_k + n_l^3(\mathbf{nf})\Big) + \frac{1}{8}\Big(1+\sum_k n_k^4\Big)f_l - \frac{5}{8}\,n_l(\mathbf{nf})\sum_k n_k^4\right)\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{20}$$

Поэтому уточненное выражение для анизотропной части смещения $\mathbf{u}_l^{(1)}$ будет суммой (19) и (20), а после замены f_l на δ_{lm} анизотропная часть искомого тензора Грина $G_{lm}^{(1)}$ принимает вид

$$G_{lm}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{8\pi b}\left(\frac{a+b}{a+2b}\right)\frac{d}{8b(a+2b)} \times \left(4b\,\frac{a+3b}{a+b}(1-n_l^2)\delta_{lm} + (7a+19b)n_l n_m - 2(a+4b)\big(n_l n_m^3 + n_l^3 n_m\big) + (a+b)\Big(1+\sum_k n_k^4\Big)\delta_{lm} - 5(a+b)n_l n_m\sum_k n_k^4\right)\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{21}$$

Видно, что (21) отличается от аналогичного выражения Лифшица–Розенцвейга не только коэффициентами при первых трех слагаемых, но и наличием двух новых слагаемых (последние два), пропущенных в [3].

3. Энергия упругого взаимодействия сферической поры с точечными дефектами в слабоанизотропном кубическом кристалле

В общем случае энергия взаимодействия ТД α-го сората с полем упругих деформаций $u_{lm}(\mathbf{r})$ содержит разные вклады, каждый из которых связан с конкретным физическим аспектом ТД. Основной вклад или размерное взаимодействие, согласно [4,5], имеет вид

$$E_\alpha(\mathbf{r}) = -K\Omega_\alpha u_{mm}(\mathbf{r}), \quad u_{lm} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_l}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m}{\partial x_l}\right), \tag{22}$$

где $u_{mm}(\mathbf{r}) = \mathrm{Sp}\, u_{lm}(\mathbf{r})$ — дилатация поля дефеормаций $u_{lm}(\mathbf{r})$ в месте нахождения ТД, Ω_α — объем несоответствия ТД α-го сорта, K — модуль всестороннего сжатия (по повторяющимся индексам, естественно, подразумевается суммирование). Таким образом, задача сводится к нахождению дилатации поля деформаций, создаваемого (по Эшелби [6]) сферическим „неоднородным“ включением, моделирующим пору, в бесконечной упругой среде, характеризуемой тензором модулей упругости (6). Сосредоточенная сила f_m, приложенная в точке $\mathbf{r}'$, создает в произвольной точке среды $\mathbf{r}$ смещение, определяемое соотношением (2). Если же сила распределена по поверхности и имеет величину $\sigma_{mk}^T n_k dS$ на каждый элемент поверхности dS с нормалью $\mathbf{n}$, то суммарное смещение в точке $\mathbf{r}$ равно

$$u_l(\mathbf{r}) = \int G_{lm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\sigma_{mk}^T n_k dS'. \tag{23}$$

Напряжения σ_{mk}^T, согласно [6], обусловлены однородной деформацией „трансформации“ u_{mk}^T условного неоднородного включения и связаны с ней законом Гука. Учитывая сферическую симметрию задачи, вслед за авторами [4] будем считать, что $u_{mk}^T = u^T\delta_{mk}$, соответственно $\sigma_{mk}^T = \sigma^T\sigma_{mk}$. Тогда (23) и (22) принимают вид

$$u_l(\mathbf{r}) = \sigma^T\int\frac{\partial}{\partial x_k'}\,G_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')dV' = -\sigma^T\,\frac{\partial}{\partial x_k}\int G_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')dV' = \sigma^T\Phi_{lk,k}(\mathbf{r}), \tag{24}$$

$$u_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma^T}{2}\big(\Phi_{lk,km}(\mathbf{r}) + \Phi_{mk,kl}(\mathbf{r})\big), \tag{25}$$

где $\Phi_{lk}(\mathbf{r}) \equiv -\int G_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')dV'$, $\Phi_{lk,km}(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial x_m\partial x_k}\,\Phi_{lk}(\mathbf{r})$, а интегрирование проводится по объему сферы радиуса R. Далее удобно (18) представить в виде

$$G_{lk}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\mu}\left[\frac{\delta_{lk}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - \frac{1}{4(1-\nu)}\,\partial_l\partial_k|\mathbf{r}--\mathbf{r}'|\right], \quad \partial_k \equiv \partial/\partial x_k, \tag{26}$$

$$G^{(1)}_{lk}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{8\pi b}\left(\frac{a+b}{a+2b}\right)\frac{d}{8b}\Bigg(4\,\frac{a+2b}{a+b}$$

$$\times\delta_{lk}(\partial_l^2+\partial_k^2)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| - \frac{2}{3}\,(\partial_l\partial_k^3+\partial_l^3\partial_k)\big|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\big|^3$$

$$+\frac{1}{45}\,\frac{a+b}{a+2b}\,\partial_l\partial_k\sum_i\partial_i^4\big|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\big|^5\Bigg). \qquad (27)$$

Тогда все вычисления сводятся к частным производным от выражений [4,7]

$$\psi(\mathbf{r}) = \int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,d^3r' = \frac{4\pi}{3}\,R^3\,\frac{1}{r},$$

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \int|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|d^3r' = \frac{4\pi}{3}\,R^3r\left(1+\frac{1}{5}\,\frac{R^2}{r^2}\right),$$

$$\psi_3(\mathbf{r}) = \int\big|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\big|^3d^3r' = \frac{4\pi}{3}\,R^3r^3\left(1+\frac{6}{5}\,\frac{R^2}{r^2}+\frac{3}{35}\,\frac{R^4}{r^4}\right),$$

$$\psi_5(\mathbf{r}) = \int\big|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\big|^5d^3r'$$

$$= \frac{4\pi}{3}\,R^3r^5\left(1+3\,\frac{R^2}{r^2}+\frac{9}{7}\,\frac{R^4}{r^4}+\frac{1}{21}\,\frac{R^6}{r^6}\right).$$

Нетрудно проверить, что в изотропном случае ($d=0$) выражения (25), (26) дают

$$u^{(0)}_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma^T}{6\mu}\,\frac{1-2\nu}{1-\nu}\left(\frac{R}{r}\right)^3(\delta_{lm}-3n_ln_m), \quad n_m = x_m/r, \qquad (28)$$

откуда следует, что $u^{(0)}_{mm}(\mathbf{r})=0$, т.е. $G^{(0)}_{lm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ вклада в размерное взаимодействие не дает [4,6]. Перейдем теперь к анизотропной части тензора Грина. Заметим, что первые два слагаемых в (27) есть не что иное, как анизотропная поправка Лифшица–Розенцвейга [3], третье слагаемое — неучтенный ими дополнительный вклад. Анизотропная часть поля деформаций (25) и его дилатация могут быть представлены в виде

$$u^{(1)}_{lm}(\mathbf{r}) = \sigma^T\,\frac{1}{8\pi b}\left(\frac{a+b}{a+2b}\right)\frac{d}{8b}\partial^2_{lm}$$

$$\times\Bigg(4\,\frac{a+2b}{a+b}(\partial_l^2+\partial_m^2)\psi_1 - \frac{2}{3}\sum_i\partial_i^4\psi_3$$

$$-\frac{1}{3}\,(\partial_l^2+\partial_m^2)\nabla^2\psi_3 + \frac{1}{45}\,\frac{a+b}{a+2b}\,\nabla^2\sum_i\partial_i^4\psi_5\Bigg), \qquad (29)$$

$$u^{(1)}_{mm}(\mathbf{r}) = \sigma^T\frac{1}{8\pi b}\left(\frac{a+b}{a+2b}\right)\frac{d}{b}\Bigg[\frac{a+2b}{a+b}\sum_i\partial_i^4\psi_1$$

$$\frac{1}{6}\sum_i\partial_i^4(\nabla^2\psi_3)+\frac{1}{360}\,\frac{a+b}{a+2b}\,\nabla^2\Bigg(\sum_i\partial_i^4(\nabla^2\psi_5)\Bigg)\Bigg]. \qquad (30)$$

Из вида (29), (30) можно заключить следующее. Поскольку $\nabla^2(1/r)=0$, слагаемые из выражений для $\psi_5(\mathbf{r})$ и $\psi_3(\mathbf{r})$, пропорциональные $1/r$, вклада в $u^{(1)}_{lm}$ и $u^{(1)}_{mm}$ не вносят. Поскольку $\nabla^2(r)=2/r$, в $u^{(1)}_{mm}$ отсутствует вклад слагаемого из $\psi_5(\mathbf{r})$, пропорционального r. Таким образом,

$$\sum_i\partial_i^4\psi_1 = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{R}{r}\right)^3 15\left(\frac{3}{5}-\sum\frac{x_i^4}{r^4}\right)\left(1-\frac{7}{5}\,\frac{R^2}{r^2}\right),$$

$$\sum_i\partial_i^4(\nabla^2\psi_3) = 12\sum_i\partial_i^4\psi_1,$$

$$\nabla^2\Bigg(\sum_i\partial_i^4(\nabla^2\psi_5)\Bigg) = 360\sum_i\partial_i^4\psi_1. \qquad (31)$$

Подставляя (31) в (30), получаем искомую дилатацию

$$u^{(1)}_{mm}(\mathbf{r}) = \frac{5}{2}\,\frac{\sigma^T}{a+2b}\,\xi\left(\frac{R}{r}\right)^3\left(\frac{3}{5}-\sum_i\frac{x_i^4}{r^4}\right)$$

$$\times\left(1-\frac{7}{5}\,\frac{R^2}{r^2}\right), \quad \xi\equiv d/(C_{12}+2C_{44}). \qquad (32)$$

Отметим два момента. Во-первых, существенную роль последнего слагаемого в (30), поскольку оно меняет не только абсолютное значение коэффициента в (32), но и его знак. Без него коэффициент в (32) был равен $-\frac{5}{2}\,\frac{\sigma^T a}{b^2}\,\xi$. Второй момент касается определения величины σ^T. Поскольку анизотропия кристалла предполагается малой $\xi\ll 1$, σ^T можно найти из решения аналогичной задачи для мнимой изотропной среды, моделирующей реальную. Средние по Фогту упругие константы (λ^{im}, μ^{im}) такой среды даются соотношениями [8]

$$\lambda^{im} = C_{12}+\frac{1}{5}\,d, \quad \mu^{im} = C_{44}+\frac{1}{5}\,d,$$

$$\lambda^{im}+2\mu^{im} = C_{11}-\frac{2}{5}\,d. \qquad (33)$$

Тогда, используя вслед за авторами [4] условие

$$-\left(P-\frac{2\gamma}{R}\right)n_i = \sigma^{im}_{ij}(R)n_j = C^{im}_{ijkl}n_ju^{im}_{kl}(R),$$

$$C^{im}_{ijkl} = \lambda^{im}\delta_{ij}\delta_{kl}+\mu^{im}(\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk}) \qquad (34)$$

(P — давление газа в поре, γ — поверхностное натяжение на границе поры) и соотношение, аналогичное (28),

$$u^{im}_{kl}(R) = \frac{\sigma^T}{4(\lambda^{im}+2\mu^{im})}\,(\delta_{kl}-3n_kn_l), \qquad (35)$$

имеем оценку

$$\frac{\sigma^T}{a+2b} = \frac{3}{4\mu^{im}}\left(P-\frac{2\gamma}{R}\right). \qquad (36)$$

С учетом (32) и (36) для размерного взаимодействия (22) окончательно получаем

$$E_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{5}{4}\,\Omega_\alpha\frac{1+\nu^{im}}{1-2\nu^{im}}\,\xi\left(P-\frac{2\gamma}{R}\right)$$

$$\times\left(\sum_i\frac{x_i^4}{r^4}-\frac{3}{5}\right)\left(\frac{R}{r}\right)^3\left(1-\frac{7}{5}\,\frac{R^2}{r^2}\right). \qquad (37)$$

Обратим внимание на множитель $\left(1-\frac{7}{5}\frac{R^2}{r^2}\right)$. Он отсутствует в аналогичной формуле у Эшелби [6]. При $r \gg R$ он действитиельно несущественный, но на малых расстояниях он кардинально меняет картину взаимодействия ТД с порой.

4. Диффузионные потоки ТД к поре

В теории радиационных повреждений металлов при высоких температурах имеются два основных аспекта. Первый связан с производством и начальным распределением ТД (вакансий и междоузельных атомов), второй — с их диффузией к макроскопическим вторичным дефектам струткуры: порам, дислокациям, границам зерен и другим кластерам ТД. Вторичные дефекты служат внутренними стоками для мигрирующих ТД, а их поглощение является одной из причин медленной эволюции вторичной структуры материала.

Нас будет интересовать решение простейшей диффузионной задачи, учитывающей упругое взаимодействие ТД с порой радиуса R,

$$\operatorname{div}\mathbf{j}(\mathbf{r})=0,\quad C|_{r=R}=C_R^e\exp\bigl(-\beta E(R)\bigr),\quad C|_{r=\infty}=\overline{C},$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r})=-\exp\bigl(-\beta E(\mathbf{r})\bigr)\nabla\left(\frac{DC(\mathbf{r})}{\omega}\exp\bigl(\beta E(\mathbf{r})\bigr)\right). \quad (38)$$

Здесь $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ — плотность потока ТД; ω — атомный объем; $C(\mathbf{r})$ — концентрация ТД в точке $\mathbf{r}$; D — объемный коэффициент диффузии (для простоты он считается константой, т.е. не учитывается возможный эффект изменения энергии активации миграции ТД [4]); C_R^e — равновесная концентрация ТД на границе поры в отсутствие упругого взаимодействия; $\beta=1/k_\mathrm{B}T$, k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Индекс, фиксирующий тип ТД, опущен чтобы упростить формулы. Удобно ввести новую переменную

$$\psi(\mathbf{r})=\frac{\overline{C}-C(\mathbf{r})\exp\bigl((\beta E\mathbf{r})\bigr)}{\overline{C}-C_R^e}. \quad (39)$$

Тогда (38) принимает вид

$$\Delta\psi(\mathbf{r})=\beta\nabla\psi(\mathbf{r})\nabla E(\mathbf{r}),\quad \psi(R)=1,\quad \psi(\infty)=0, \quad (40)$$

а искомый полный поток ТД на пору равен

$$I(R)=-\int(\mathbf{nj})dS$$
$$=-\frac{D}{\omega}\bigl(\overline{C}-C_R^e\bigr)\int dS(\mathbf{n}\nabla\psi)\exp(-\beta E). \quad (41)$$

Интеграл берется по поверхности поры. В отсутствие упругого взаимодействия из (40), (41) имеем $I_0(R)=4\pi R\,\frac{D}{\omega}\bigl(\overline{C}-C_R^e\bigr)$, поэтому (41) можно переписать в виде

$$I(R)=I_0(R)Z(R),$$
$$Z(R)=-\frac{1}{4\pi R}\int dS(\mathbf{n}\nabla\psi)\exp(-\beta E), \quad (42)$$

где $Z(R)$ — эффективность поглощения ТД порой, обусловленная их упругим взаимодействием (при $E=0$ $Z(R)=1$). В частности, если $E(\mathbf{r})=E(r)$, т.е. имеет место чисто радиальная зависимость, из (40), (42) следует

$$Z(R)=\left[R\int_R^\infty\frac{dr}{r^2}\exp\bigl(\beta E(r)\bigr)\right]^{-1}. \quad (43)$$

В нашем случае ввиду малости параметра $\xi\ll 1$ правую часть (40) можно считать малым возмущением. Тогда решение (40) ищем в виде ряда $\psi=\psi_0+\xi\psi_1+\xi^2\psi_2+\dots$. Аналогичное разложение имеет место и для $Z(R)$. Нулевое приближение соответствует отсутствию упругого взаимодействия и имеет вид

$$\psi_0(\mathbf{r})=R/r,\quad Z_0=1.$$

Для приближения первого порядка имеем

$$\Delta\psi_1(\mathbf{r})=\beta\nabla\psi_0(\mathbf{r})\nabla\tilde{E}(\mathbf{r}),\quad \psi_1(R)=0,\quad \psi_1(\infty)=0,$$
$$Z_1(R)=-\frac{1}{4\pi R}\int dS\mathbf{n}(\nabla\psi_1-\beta\tilde{E}\nabla\psi_0), \quad (44)$$

где $\tilde{E}(\mathbf{r})$ дается формулой (37) без параметра ξ. Решение (44) легко написать, если учесть, что множитель в (37), содержащий угловую зависимость, есть поверхностная сферическая гармоника четвертой степени.

$$\frac{1}{r^4}\sum_k x_k^4-\frac{3}{5}\equiv Y_4(\theta,\varphi)$$
$$=\frac{2}{5}P_4(\cos\theta)+\frac{1}{420}P_4^4(\cos\theta)\cos(4\varphi), \quad (45)$$

$P_n^m(\cos\theta)$ — присоединеннные функции Лежандра, θ и φ — углы сферической системы координат. Тогда (44) допускает разделение переменных, и его решение можно легко построить, используя решение вспомогательной задачи [9]:

$$\Delta\psi(\mathbf{r})=Y_j(\theta,\varphi)B/r^l,\quad \psi(R)=0,\quad \psi(\infty)=0,$$
$$\psi(\mathbf{r})=\frac{Y_j(\theta,\varphi)}{(l-2)(l-3)-j(j+1)}\left[\frac{B}{r^{l-2}}-\frac{B}{R^{l-2}}\left(\frac{R}{r}\right)^{j+1}\right]. \quad (46)$$

В нашем случае $j=4$, $l_1=6$, $B_1=3R^4$ и $l_2=8$, $B_2=-7R^6$. Тогда

$$\psi_1(\mathbf{r})=\eta Y_4(\theta,\varphi)\left[\frac{3}{8}\left(\frac{R^5}{r^5}-\frac{R^4}{r^4}\right)-\frac{7}{10}\left(\frac{R^6}{r^6}-\frac{R^5}{r^5}\right)\right],$$
$$\eta\equiv\frac{5}{4}\,\Omega_\alpha\beta\,\frac{1+\nu^{im}}{1-2\nu^{im}}\left(P-\frac{2\gamma}{R}\right). \quad (47)$$

Далее, поскольку $\mathbf{n}\nabla\psi_1=\frac{\partial}{\partial r}\psi_1$, $\mathbf{n}\nabla\psi_0=\frac{\partial}{\partial r}\psi_0$, а поверхностный интеграл от $Y_4(\theta,\varphi)$ равен нулю, очевидно, что

$Z_1 = 0$. Таким образом, поправка в $Z(R)$, обусловленная анизотропией кристалла, квадратична по малому параметру ξ [7].

Для приближения второго порядка имеем

$$\Delta\psi_2(\mathbf{r}) = \beta\nabla\psi_1(\mathbf{r})\nabla\tilde{E}(\mathbf{r}), \quad \psi_2(R) = 0, \quad \psi_2(\infty) = 0,$$

$$Z_2(R) = -\frac{1}{4\pi R}\int dS\mathbf{n}\left(\nabla\psi_2 - \beta\tilde{E}\nabla\psi_1 + \frac{1}{2}\left(\beta\tilde{E}\right)^2\nabla\psi_0\right). \tag{48}$$

Поскольку нас интересует только величина Z_2 (именно она входит в полный поток ТД на пору (42)), приводить решение для $\psi_2(\mathbf{r})$ нет смысла. Ограничимся анализом слагаемых, входящих в Z_2. Начнем с последних двух. Представим их в виде

$$\beta\tilde{E}\mathbf{n}\nabla\psi_1 = \left(\eta Y_4\right)^2 U(r)\,\frac{d}{dr}W(r),$$

$$\left(\beta\tilde{E}\right)^2\mathbf{n}\nabla\psi_0 = \left(\eta Y_4\right)^2 U^2(r)\,\frac{d}{dr}\left(\frac{R}{r}\right), \tag{49}$$

где U и W — радиальные части энергии (37) и ψ_1 (47) соответственно. Тогда вклад этих слагаемых в поверхностный интеграл (48) очевиден

$$Z_2^{(2)}(R) = -\frac{\eta^2}{20}\,\frac{1}{4\pi}\int\limits_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_0^{\pi}\left[Y_4(\theta,\varphi)\right]^2 \sin\theta d\theta. \tag{50}$$

Чтобы найти вклад первого слагаемого $\mathbf{n}\nabla\psi_2 = \partial\psi_2/\partial r$, рассмотрим более детально правую часть уравнения (48)

$$\beta\nabla\psi_1(\mathbf{r})\nabla\tilde{E}(\mathbf{r}) = \eta^2\left[Y_4\right]^2\frac{dW}{dr}\,\frac{dU}{dr} + \frac{\eta^2}{r^2}WU\left[\left(\frac{\partial Y_4}{\partial\theta}\right)^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial Y_4}{\partial\varphi}\right)^2\right]. \tag{51}$$

В силу линейности (48) его решение можно искать в виде суммы двух слагаемых $\psi_2 = \eta^2\left(\psi_2^{(1)} + \psi_2^{(2)}\right)$, соответствующих слагаемым правой части (51). Тогда (48) разбивается на два уравнения. Рассмотрим первое из них

$$\Delta\psi_2^{(1)}(\mathbf{r}) = \left[Y_4\right]^2\frac{dW}{dr}\,\frac{dU}{dr}, \quad \psi_2^{(1)}(R) = 0, \quad \psi_2^{(1)}(\infty) = 0. \tag{52}$$

Разложим сомножитель $[Y_4]^2$, содержащий угловую зависимость, по собственным функциям угловой части оператора Лапласа [10]

$$\Phi(\theta,\varphi) = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{2}\,\alpha_{j0}P_j(\cos\theta) + \sum_{m=1}^{j}P_j^m(\cos\theta)(\alpha_{jm}\cos m\varphi + \beta_{jm}\sin m\varphi). \tag{53}$$

Разложение (53) и линейность снова разбивают (52) на j уравнений, но уже таких, которые допускают разделение переменных и аналитическое решение. Эти уравнения и их решения аналогичны (46), а их преимущество состоит в том, что в качестве угловой зависимости в них входят сферические функции, которые вносят нулевой вклад в искомый поверхностный интеграл (48). Таким образом, нам не нужно выписывать необъятное решение для ψ_2. Достаточно в соответствующих рядах (53) выделить слагаемые $\alpha_{00}/2$, поскольку только они дадут вклад в Z_2. Итак, из (45) имеем

$$\left[Y_4\right]^2 = \left(\frac{2}{5}\right)^2\left[P_4\right]^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{420}\right)^2\left[P_4^4\right]^2 + \frac{1}{525}P_4P_4^4\cos 4\varphi + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{420}\right)^2\left[P_4^4\right]^2\cos 8\varphi. \tag{54}$$

Коэффициенты разложения (53), согласно [10], даются выражением

$$\alpha_{jm} = \frac{2j+1}{2\pi}\,\frac{(j-m)!}{(j+m)!} \times \int\limits_0^{2\pi} d\varphi\cos m\varphi \int\limits_0^{\pi} d\theta\Phi(\theta,\varphi)P_j^m(\cos\theta)\sin\theta. \tag{55}$$

Поскольку $\left[P_4^4(x)\right]^2 = \frac{7}{1287}P_8^8(x)$, а $P_4P_4^4 = \frac{18}{143}P_4^4 - \frac{4}{99}P_6^4 + \frac{7}{1287}P_8^4$, очевидно, что два последних слагаемых в (54) не вносят вклада ни в (50), ни в (52). Разложение $\left[P_4\right]^2$ и $\left[P_4^4\right]^2$ по $P_j(x)$ начинается с констант $\frac{\alpha_{00}}{2} = \frac{1}{9}$ и соответственно $\frac{\alpha_{00}}{2} = 105^2\,\frac{128}{315}$. В результате для оценки $Z_2(R)$ от $\left[Y_4\right]^2$ нам следует оставить лишь константу $c^{(1)} = 16/525$. Подставляя ее в (50) и (52), получаем $Z_2^{(2)}(R) \approx -1.524\cdot 10^{-3}\eta^2$ и уравнение для $\psi_2^{(1)}$. Его решение имеет вид

$$\psi_2^{(1)}(r) = c^{(1)}\left[\int\limits_0^{R/r}\varphi(x)dx - \frac{R}{r}\int\limits_0^{1}\varphi(x)dx\right],$$

$$\varphi(x) = \frac{147}{50}x^{10} - \frac{301}{72}x^9 - \frac{21}{80}x^8 + \frac{129}{56}x^7 - \frac{3}{4}x^6, \tag{56}$$

а вклад $\psi_2^{(1)}$ в искомую величину $Z_2(R)$ следующий:

$$Z_2^{(1,1)}(R) = -R\eta^2\,\frac{\partial}{\partial r}\,\psi_2^{(1)}(r)|_{r=R} = -\eta^2c^{(1)}\left[\int\limits_0^1\varphi(x)dx - \varphi(1)\right] \approx 1.514\cdot 10^{-3}\eta^2. \tag{57}$$

Действуя аналогичным образом, можно показать, что из сомножителя в квадратных скобках (51) вклад в Z_2 даст только константа $c^{(2)} = 64/105$. Соответственно

$$\psi_2^{(2)}(r) = c^{(2)}\left[\int\limits_0^{R/r}\varphi(x)dx - \frac{R}{r}\int\limits_0^1\varphi(x)dx\right], \qquad (58)$$

$$\varphi(x) = \frac{49}{500}x^{10} - \frac{301}{1800}x^9 - \frac{7}{320}x^8 + \frac{43}{280}x^7 - \frac{1}{16}x^6,$$

$$Z_2^{(1,2)}(R) = -R\eta^2\frac{\partial}{\partial r}\psi_2^{(2)}(r)|_{r=R}$$

$$= -\eta^2c^{(2)}\left[\int\limits_0^1\varphi(x)dx - \varphi(1)\right] \approx -3.045\cdot10^{-5}\eta^2. \quad (59)$$

Окончательно имеем $Z_2(R) = Z_2^{(1,1)}(R) + Z_2^{(1,2)}(R) + Z_2^{(2)}(R) \approx -4\cdot10^{-5}\eta^2$. Таким образом,

$$Z_\alpha(R) \cong 1 - 6.3\cdot10^{-5}\xi^2\left[\Omega_\alpha\frac{1+\nu^{im}}{1-2\nu^{im}}\beta\left(P - \frac{2\gamma}{R}\right)\right]^2. \qquad (60)$$

5. Заключение

Итак, с помощью метода Лифшица–Розенцвейга в работе получено уточненное по сравнению с [3] выражение для тензора Грина неограниченного слабоанизотропного кристалла кубической системы. С его помощью найдено выражение для энергии упругого взаимодействия ТД с газонаполненной порой. Оно отличается от своего аналога, обычно используемого со ссылкой на Эшелби, дополнительным множителем $\left(1 - \frac{7}{5}\frac{R^2}{r^2}\right)$. В влучае слабого взаимодействия ($\beta E \ll 1$) рассчитаны потоки ТД на сферическую пору. Показано, что вклад анизотропии кубической решетки в коэффициент эффективности поглощения ТД порой $Z(R)$ пропорционален ξ^2 и является отрицательным. Это означает, что анизотропия в данном случае ухудшает поглощающую способность поры как стока для ТД. Поскольку $\Omega_i > |\Omega_v|$, этот эффект для СМА больше, чем для вакансий, что можно интерпретировать как предпочтительное поглощение вакансий. Однако, как видно из (60), такая асимметрия в поглощающей способности поры, как и сам эффект влияния анизотропии, очень мала. Поэтому в кубических кристаллах их, вероятнее всего, можно не учитывать. Тем более что имеется более сильный размерный эффект, связанный с энергией изображения [11].

В заключение вернемся к упомянутому выше множителю в выражении для энергии упругого взаимодействия $\left(1 - \frac{7}{5}\frac{R^2}{r^2}\right)$. В работе Эшелби его нет. Если им пренебречь, то $U = (R/r)^3$, а $W = \frac{3}{8}\left(\frac{R^5}{r^5} - \frac{R^4}{r^4}\right)$. Тогда $Z_2^{(2)} \approx 3.81\cdot10^{-3}\eta^2$, $Z_2^{(1.1)} \approx 1.84\cdot10^{-3}\eta^2$, $Z_2^{(1.2)} \approx -4.08\cdot10^{-3}\eta^2$ и $Z_\alpha(R) \cong 1 + 1.6\cdot10^{-3}\xi^2\eta_\alpha^2$. Получается, что анизотропия увеличивает поглощающую способность поры, а предпочтение возникает теперь к СМА, а не к вакансиям, как в (60). В результате перепрессованный газовый пузырек вместо релаксации путем поглощения вакансий эффективнее поглощал бы СМА, еще больше увеличивая напряжения в окружающем его кристалле. Такой эффект представляется маловероятным.

Автор выражает благодарность В.В. Слезову за полезные дискуссии и интерес к работе.

Список литературы

[1] J.D. Eshelby. Proc. Roy. Soc. **241**, 376 (1957).
[2] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 246 с.
[3] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ **17**, 783 (1947).
[4] W.G. Wolfer, M. Ashkin. J. Appl. Phys. **46**, 151 (1975).
[5] W.G. Wolfer, M. Ashkin. J. Appl. Phys. **47**, 791 (1975).
[6] Дж. Эшелби. Континуальная теория дислокаций. Наука, М. (1963). 215 с.
[7] П.Н. Остапчук. ФТТ **34**, 3655 (1992).
[8] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
[9] А.А. Васильев, М.Д. Корольков, А.И. Мелькер. ФТТ **32**, 3345 (1990).
[10] Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике. Наука, М. (1968). 720 с.
[11] V.I. Dubinko, P.N. Ostapchuk, V.V. Slezov. J. Nucl. Mater. **161**, 239 (1989).