Прикладная математика и механика. Том 34, 1970

ЛОКАЛЬНЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ В УПРУГОЙ СРЕДЕ

И. А. Кунин, Э. Г. Соснина

(Новосибирск)

Предлагается метод расчета возмущений внешнего поля, вызванных системой локальных неоднородностей (дефектов) в упругой среде. В основе метода лежит некоторое специальное представление тензора Грина среды с дефектами через оператор энергии взаимодействия, удобное для описания асимптотического поведения возмущенных полей. В случае, когда размеры дефектов малы по сравнению с расстояниями между ними, это представление позволяет построить эффективные решения и найти выражения для энергии и сил взаимодействия между дефектами.

В п. 1 вводится оператор энергии взаимодействия и строится асимптотическое представление тензора Грина для однородной среды с одиночным дефектом. Методика вычисления коэффициентов разложения показывается в п.2 на примере эллипсоидальной неоднородности. В п. 3 исследуется общий случай взаимодействия системы дефектов. В п. 4 приведены конкретные расчеты для двух эллипсоидальных неоднородностей. Получено явное выражение для асимптотики энергии взаимодействия, рассмотрены частные случаи.

1. Начнем с общей схемы. Пусть L_0 — линейный оператор, для которого известна функция Грина G_0, удовлетворяющая определенным граничным условиям, т. е. $L_0G_0 = I$, где I — тождественный оператор. Если L_1 — возмущение оператора L_0 такое, что существует функция Грина G оператора $L = L_0 + L_1$, то можно показать, что для G справедливо представление

$$G = G_0 - G_0PG_0 \tag{1.1}$$

где оператор P определяется выражением

$$P = L_1 (L_1 + L_1G_0L_1)^{-1}L_1 \tag{1.2}$$

Действительно, подставляя P в (1.1) и применяя L слева, получим

$$LG = (L_0 + L_1) [G_0 - G_0L_1 (L_1 + L_1G_0L_1)^{-1}L_1G_0] =$$
$$= I + [I - (L_1 + L_1G_0L_1) (L_1 + L_1G_0L_1)^{-1}]L_1G_0 = I$$

Таким образом, построение G сводится к нахождению P из уравнения (1.2), что в задаче о дефектах оказывается более удобным, так как ядро оператора L_1 локализовано в ограниченной области, которую обычно можно считать малой. Отметим, что в тех случаях, когда имеет смысл оператор L_1^{-1}, выражение (1.2) можно также представить в виде

$$P = (L_1^{-1} + G_0)^{-1} \tag{1.3}$$

Перейдем к случаю однородной упругой среды с одиночным дефектом. Оператор L определяется уравнениями, связывающими смещение $u_\mu(x)$ и внешние силы $q^\beta(x)$

$$\partial_\alpha [c^{\alpha\beta\lambda\mu}(x) \partial_\lambda u_\mu(x)] = - q^\beta(x) \tag{1.4}$$

Предполагается, что тензор упругих модулей имеет вид

$$c^{\alpha\beta\lambda\mu}(x) = c_0^{\alpha\beta\lambda\mu} + c_1^{\alpha\beta\lambda\mu}(x) \tag{1.5}$$

Здесь $c_0^{\alpha\beta\lambda\mu}$ — тензор упругих констант однородной среды, $c_1^{\alpha\beta\lambda\mu}(x)$ — возмущение, вызванное дефектом, локализованным в (малой) области V. Случай $c_1 \to \infty$ соответствует жесткому включению, $c_1 = -c_0$ — полости.

Считая известным тензор Грина $\overset{\circ}{G}_{\alpha\beta}(x, x')$ для однородной среды и используя приведенную выше схему, запишем выражение тензора Грина $G_{\alpha\beta}(x, x')$ для среды с дефектом

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = G^\circ{}_{\alpha\beta}(x, x') - \\ - \iint G^\circ{}_{\alpha(\nu}(x, y)\,\partial_{\lambda)} P^{\lambda\nu\sigma\tau}(y, y')\,\partial_{(\sigma} \overset{\circ}{G}_{\tau)\beta}(y', x')\,dy dy' \tag{1.6}$$

или в операторной форме

$$G = G^\circ - G^\circ \nabla P \nabla G^\circ \tag{1.7}$$

где, как легко показать, P удовлетворяет интегральному уравнению в области V

$$P(x, x') - c_1(x) \int_V \nabla G^\circ(x, y) \nabla P(y, x')\,dy = - c_1(x)\,\delta(x - x'), \quad x \in V,\ x' \in V' \tag{1.8}$$

Его решение символически можно записать в форме, аналогичной (1.2)

$$P = c_1 (c_1 \nabla G^\circ \nabla c_1 - c_1)^{-1} c_1 = c_1 Q^{-1} c_1 \tag{1.9}$$

$$Q(y, y') = - c_1(y) \nabla\nabla' G^\circ(y, y') c_1(y') - c_1(y) \delta(y - y') \\ y \in V,\ y' \in V' \tag{1.10}$$

Если можно придать смысл оператору c_1^{-1}, то P записывается в виде

$$P = (\nabla G^\circ \nabla - c_1^{-1})^{-1} = R^{-1} \tag{1.11}$$

$$R(y, y') = - \nabla\nabla' G^\circ(y, y') - c_1^{-1}(y)\,\delta(y - y'), \quad y \in V,\ y' \in V' \tag{1.12}$$

Легко видеть, что оператор P самосопряженный, его ядро удовлетворяет условиям симметрии

$$P^{\lambda\nu\sigma\tau}(y, y') = P^{\nu\lambda\sigma\tau}(y, y') = P^{\sigma\tau\lambda\nu}(y', y) \tag{1.13}$$

и сосредоточено в (малой) области $V \times V'$.

Решение уравнений (1.4) теперь имеет вид

$$u_\alpha(x) = u_\alpha^\circ(x) - \int \overset{\circ}{G}_{\alpha\nu}(x, y)\ \partial_\lambda P^{\lambda\nu\sigma\tau}(y, y')\,\overset{\circ}{\varepsilon}_{\sigma\tau}(y')\,dy dy' \tag{1.14}$$

где $\overset{\circ}{u}_\alpha(x)$ и $\overset{\circ}{\varepsilon}_{\alpha\beta}(x)$ — смещение и деформация в среде без дефекта. При помощи оператора P явно записывается также выражение для $u_\alpha(x)$, если заданы силы и моменты, действующие на дефект.

Для энергии взаимодействия дефекта с внешним полем $\overset{\circ}{\varepsilon}_{\alpha\beta}(x)$ находим

$$\Phi = \frac{1}{2} \iint_{VV'} \overset{\circ}{\varepsilon}_{\alpha\beta}(y) P^{\alpha\beta\lambda\mu}(y, y')\,\overset{\circ}{\varepsilon}_{\lambda\mu}(y')\,dy dy' \tag{1.15}$$

Отсюда следует, что P можно интерпретировать как оператор энергии взаимодействия дефекта с внешним полем.

В ряде задач, например в случае, когда локальная неоднородность моделирует вакансию или инородный атом в кристалле, представляет интерес сила, действующая на дефект [1]. Для ее вычисления предположим, что дефект может поступательно перемещаться в среде. Тогда ядро оператора P, а следовательно, и энергия взаимодействия Φ будут зависеть от координат x_0^ν центра масс дефекта, и для силы, действующей на дефект, находим

$$f_\nu = -\frac{\partial\Phi(x_0)}{\partial x_0^\nu} = -\frac{1}{2}\iint\limits_{VV'} \overset{\circ}{\varepsilon}_{\alpha\beta}(y)\frac{\partial}{\partial x_0^\nu} P^{\alpha\beta\lambda\mu}(y, y', x_0)\overset{\circ}{\varepsilon}_{\lambda\mu}(y')\,dydy' \qquad (1.16)$$

Аналогично находится результирующий момент, действующий на дефект со стороны внешнего поля.

В общем случае ядро $P^{\alpha\beta\lambda\mu}(y, y')$ оператора энергии взаимодействия может быть найдено численными методами, применение которых облегчается тем, что $P^{\alpha\beta\lambda\mu}(y, y')$ в отличие от $G_{\alpha\beta}(x, x')$ сосредоточено в ограниченной области.

Задача существенно упрощается и в ряде случаев может быть решена аналитически, если интерес представляет лишь асимптотика возмущенного поля. Это равносильно предположению о малости размеров дефекта (по сравнению с расстояниями от дефекта) или, что то же, аппроксимации P первыми членами разложения по мультиполям.

Разложение P в ряд по мультиполям в точке x_0 имеет вид

$$P^{\alpha\beta\lambda\mu}(y, y') = \sum_{mn}(-1)^{m+n}P^{\alpha\beta\lambda\mu\lambda_1\ldots\lambda_m\mu_1\ldots\mu_n}\delta_{,\lambda_1\ldots\lambda_m}(y-x_0)\,\delta_{,\mu_1\ldots\mu_n}(y'-x_0) \qquad (1.17)$$

$$P^{\alpha\beta\lambda\mu\lambda_1\ldots\lambda_m\mu_1\ldots\mu_n} = \frac{1}{m!n!}\iint P^{\alpha\beta\lambda\mu}(y+x_0, y'+x_0)\,y^{\lambda_1}\ldots y^{\lambda_m}y'^{\mu_1}\ldots y'^{\mu_n}dydy'$$

или в сокращенной записи

$$P(y, y') = \sum_{mn}(-1)^{m+n}P_{mn}\,\delta_{(m)}(y-x_0)\,\delta_{(n)}(y'-x_0) \qquad (1.18)$$

Подставляя это разложение в (1.8), можно в конечном счете получить линейную систему уравнений для определения коэффициентов P_{mn}.

Из (1.14) следует, что для получения асимптотики $u_\alpha(x)$ порядка $|x-x_0|^{-l}$ в разложении (1.17) следует удержать члены до порядка $m+n=l-2$ включительно. В нулевом приближении остается один член с коэффициентом P_{00}. Можно показать, что это приближение соответствует рассмотренной в [2] модели точечного дефекта в упругом квазиконтинууме.

Отметим, что в случае однородного внешнего поля $\overset{\circ}{\varepsilon}_{\alpha\beta} = \mathrm{const}$ для энергии взаимодействия дефекта с полем имеет место точная формула

$$\Phi = {}^1/_2\,\varepsilon_{\alpha\beta}{}^\circ P_{00}{}^{\alpha\beta\lambda\mu}\varepsilon_{\lambda\mu}{}^\circ \qquad (1.19)$$

которая позволяет физически интерпретировать P_{00}.

Ниже будет показано, что для системы с дефектом можно построить асимптотику решения, если известны первые коэффициенты P_{mn} для каждого дефекта.

2. Рассмотрим подробнее представляющий самостоятельный интерес случай эллипсоидальной анизотропной неоднородности в неограниченной изотропной однородной среде. Пусть

$$c_1^{\alpha\beta\lambda\mu}(x) = c_1^{\alpha\beta\lambda\mu} V(x) \tag{2.1}$$

где $c_1^{\alpha\beta\lambda\mu}$ — постоянный тензор, $V(x)$ — характеристическая функция эллипсоида, заданного каноническим уравнением

$$\frac{(x^1)^2}{a_1^2} + \frac{(x^2)^2}{a_2^2} + \frac{(x^3)^2}{a_3^2} = 1 \tag{2.2}$$

Можно показать, что система уравнений для P_{mn} в этом случае расщепляется на независимые уравнения для каждого из коэффициентов P_{m0} и P_{m1}. Остальные коэффициенты связаны рекуррентными соотношениями. Таким образом, выражения для коэффициентов находятся в замкнутой форме в квадратурах.

В дальнейшем будут рассматриваться лишь главные члены асимптотики возмущенных полей, в связи с чем можно ограничиться явным выражением для коэффициента P_{00}. Опуская громоздкие выкладки, приведем окончательный результат

$$P_{00} = -vc_1(c_1 + c_1Ac_1)^{-1}c_1 = -v(c_1^{-1} + A)^{-1} \tag{2.3}$$

где v — объем эллипсоида, A — постоянный тензор, имеющий по индексам симметрию $c^{\alpha\beta\lambda\mu}$ и зависящий от геометрических характеристик эллипсоида, модуля сдвига μ_0 и коэффициента Пуассона ν_0 внешней среды. Отсюда следует, что A должен иметь симметрию эллипсоида и определяться девятью существенными компонентами. В выбранной системе координат, связанной с главными осями эллипсоида

$$A_{1111} = \varkappa_0[3I_{11} + (1-4\nu_0)I_1], \qquad A_{1122} = \varkappa_0[I_{21} - I_1] \tag{2.4}$$

$$A_{1212} = {}^1/_2\varkappa_0[I_{21} + I_{12} + (1-2\nu_0)(I_1 + I_2), \quad \varkappa_0 = {}^1/_{16}[\pi\mu_0(1-\nu_0)]^{-1}$$

Величины

$$I_p = \frac{3}{2}v\int_0^\infty \frac{d\xi}{(a_p^2+\xi)\Delta(\xi)}, \quad I_{pq} = \frac{3}{2}va_p^2\int_0^\infty \frac{d\xi}{(a_p^2+\xi)(a_q^2+\xi)\Delta(\xi)}$$

$$\left(\Delta(\xi) = \sqrt{(a_1^2+\xi)(a_2^2+\xi)(a_2^3+\xi)}\right) \tag{2.5}$$

выражаются через эллиптические интегралы.

Остальные отличные от нуля шесть компонент тензора $A_{\alpha\beta\lambda\mu}$ получаются из (2.4) циклической перестановкой индексов 1, 2, 3.

Полученное выражение для P_{00} позволяет, используя соотношение (1.14), найти главный член асимптотики для возмущенного поля в произвольном внешнем поле. Для однородного внешнего поля выражение (1.19), как было отмечено, является точным, а асимптотика возмущенного поля в частном случае изотропной эллипсоидальной неоднородности совпадает с асимптотикой, полученной ранее Дж. Эшелби другим способом [1].

3. Перейдем к рассмотрению однородной упругой среды с системой дефектов. Оператор L по-прежнему определяется уравнением (1.4), но тензор упругих модулей имеет вид

$$c^{\alpha\beta\lambda\mu}(x) = c_0^{\alpha\beta\lambda\mu} + \sum_i c_i^{\alpha\beta\lambda\mu}(x) \tag{3.1}$$

где $c_i^{\alpha\beta\lambda\mu}(x)$ — возмущение, вызванное дефектом, локализованным в (малой) области V_i.

Нетрудно показать, что для среды с системой дефектов тензор Грина $G_{\alpha\beta}(x, x')$ представим в виде (1.6), но в отличие от случая одного дефекта оператор энергии взаимодействия P есть сумма операторов

$$P = \sum_{ij} P^{ij} \tag{3.2}$$

причем каждый оператор P^{ij} имеет ядро, сосредоточенное в области $V_i \times V_j'$, и представим в форме, аналогичной (1.9)

$$P^{ij} = c_i\,(c_j \nabla G^\circ \nabla c_i - c_j \delta_{ij})^{-1} c_j = (\nabla G^\circ \nabla - c_i^{-1}\delta_{ij})^{-1} = R_{ij}^{-1} \tag{3.3}$$

$$R_{ij}(y, y') = -\nabla\nabla' G^\circ(y, y') - c_i^{-1}(y)\delta(y - y')\delta_{ij}$$

$$y \in V_i, \quad y' \in V_j' \tag{3.4}$$

Отсюда видно, что оператор P самосопряженный, его ядро удовлетворяет условиям симметрии (1.13) и сосредоточено в области $\bigcup_{ij} V_i \times V_j$.

Для смещения, обусловленного наличием дефектов, и для энергии взаимодействия справедливы выражения (1.14) и (1.15), а сила, действующая на k-й дефект со стороны внешнего поля и остальных дефектов, вычисляется по формуле (1.16), где x_0^α следует заменить на координаты x_k^α центра масс k-го дефекта.

Компоненты матрицы P^{ij} зависят от расстояний $r_{ij} = |x_i - x_j|$ между дефектами. Рассмотрим случай, когда расстояния между дефектами велики по сравнению с размерами дефектов, и найдем главный член разложения матрицы P^{ij} по расстояниям. В нулевом приближении дефекты не взаимодействуют и $P^{ij} = P^i\delta^{ij}$, где P^i — оператор i-го дефекта. Можно показать, что в первом приближении задача сводится к парным взаимодействиям. Поэтому достаточно рассмотреть случай двух дефектов.

Для двух дефектов P^{ij} — матрица второго порядка, причем, согласно (3.3)

$$R_{ij} = \begin{Vmatrix} (P^1)^{-1} & \nabla G^\circ \nabla \\ \nabla G^\circ \nabla & (P^2)^{-1} \end{Vmatrix} \qquad (i, j = 1, 2) \tag{3.5}$$

Непосредственно проверяется, что операторные компоненты P^{ij} вычисляются по формулам (не суммировать!)

$$P^{ii} = (R_{ii} - R_{ij}R_{jj}^{-1}R_{ji})^{-1}, \qquad P^{ij} = (R_{ji} - R_{jj}R_{ij}^{-1}R_{ii})^{-1} \quad (i \neq j) \qquad (3.6)$$

Удерживая в этих выражениях главные члены по $r_{12} = | x_1 - x_2 |$, находим

$$P^{ij} = \begin{pmatrix} P^1 & -P^1\nabla G^\circ \nabla P^2 \\ -P^2\nabla G^\circ \nabla P^1 & P^2 \end{pmatrix} + O(r_{12}^{-6}) \qquad (3.7)$$

т. е. главный член по r_{12} матрицы P^{ij} записывается в явном виде через операторы P^i отдельных дефектов.

Если, как и в случае одного дефекта, интерес представляет лишь асимптотика возмущенного поля и энергии взаимодействия дефектов, ядро $P(y, y')$ можно аппроксимировать первыми членами его разложения по мультиполям в окрестности каждого из дефектов

$$P(y, y') = \sum_{mn} (-1)^{m+n} \sum_{ij} P_{mn}^{ij}(r_{ij})\,\delta_{(m)}(y - x_i)\,\delta_{(n)}(y' - x_j), \quad x_i \in V_i, \ x_j \in V_j' \qquad (3.8)$$

Существенно, что главные члены по r_{ij} первых коэффициентов разложения можно найти в явном виде, если известны первые коэффициенты P_{mn} для каждого дефекта в отсутствие других.

Отметим, что в случае внешнего однородного поля для энергии взаимодействия дефектов с внешним полем и между собой имеет место точная (для любого r_{12}) формула

$$\Phi = {}^1\!/_2\, \varepsilon^\circ P_{00}(r_{12})\,\varepsilon^\circ, \qquad P_{00}(r_{12}) = \sum_{ij} P_{00}{}^{ij}(r_{12}) \qquad (3.9)$$

Отсюда следует, что в главный член асимптотики Φ по r_{12} в однородном внешнем поле вклад дает лишь асимптотика матрицы $P_{00}{}^{ij}(r_{12})$. В случае произвольного внешнего поля необходимо также учитывать вклад в асимптотику Φ от асимптотик диагональных компонент матриц $P_{01}{}^{ij}(r_{12})$ и $P_{10}{}^{ij}(r_{12})$. Этот вклад равен нулю, если дефекты обладают центральной симметрией или внешнее поле медленно изменяется на расстояниях порядка размеров дефектов.

4. В качестве примера найдем главный член асимптотики энергии взаимодействия Φ двух эллипсоидальных неоднородностей в неограниченной упругой среде.

Для каждого эллипсоида, рассматриваемого как одиночный дефект, известен главный член $P_{00}{}^i$ разложения ядра оператора P^i

$$P_{00}{}^i = -v_i(A_i + c_i^{-1})^{-1} \qquad (4.1)$$

Тензо́ры A_i в системах координат, связанных с эллипсоидами, имеют структуру (2.4)

Учитывая (3.7), найдем в рассматриваемом приближении компоненты матрицы

$$P_{00}^{ij}(r_{12}) = \begin{Vmatrix} P_{00}^{1} & P_{00}^{1}\nabla\nabla G^\circ(x_1 - x_2)\,P_{00}^{2} \\ P_{00}^{2}\nabla\nabla G^\circ(x_2 - x_1)\,P_{00}^{1} & P_{00}^{2} \end{Vmatrix} \qquad (4.2)$$

В силу центральной симметрии эллипсоидов, как указывалось выше, матрицы $P_{01}{}^{ij}$ и $P_{10}{}^{ij}$ можно не рассматривать.

Подставляя $P_{00}{}^{ij}(r_{12})$ в (3.9), получим

$$\Phi = \Phi_0^1 + \Phi_0^2 + \Phi_1 r_{12}^{-3} + O(r_{12}^{-4}) \tag{4.3}$$

$$\Phi_0^i = {}^1\!/_2\, \varepsilon^\circ P_{00}^i \varepsilon^\circ, \qquad \Phi_1 r_{12}^{-3} = \varepsilon^\circ P_{00}^{\,1} \nabla\nabla G^\circ (x_1 - x_2) P_{00}^{\,2} \varepsilon^\circ \tag{4.4}$$

Здесь $\Phi_0{}^i$ — собственная энергия i-го дефекта, а Φ_1 — квадратичная функция внешнего поля, зависящая также от упругих констант среды и параметров дефектов.

Приведем явные выражения Φ_0^i и Φ_1 для случая, когда внешнее поле — чистая дилатация

$$\varepsilon^\circ_{\alpha\beta} = \varepsilon_0 \delta_{\alpha\beta} \tag{4.5}$$

а включения — два сфероида с общей осью вращения x^2 и изотропными упругими константами

$$\Phi_0^i = -\frac{v_i \varepsilon_0^2}{2\varkappa_0 \Delta_i}(3p_1^i + p_2^i) \tag{4.6}$$

$$\Phi_1 = \frac{4v_1 v_2 \varepsilon_0^2}{\varkappa_0 \Delta_1 \Delta_2}\left[(1-2\nu_0)(p_1^1 p_2^2 + p_2^1 p_1^2) + 2(1-\nu_0) p_2^1 p_2^2\right] \tag{4.7}$$

$$p_1^i = (5-4\nu_0) I_2^i - 3I_{12}^{\ i} + 8\pi(1-\nu_0)\mu_0/\mu_i, \qquad p_2^i = 2(1-2\nu_0)(I_1^i - I_2^i) \tag{4.8}$$

$$\Delta_i = \left[4(1-\nu_0) I_2^i - 2I_{12}^{\ i} - 8\pi(1-\nu_0)\frac{\mu_0}{\mu_i}\frac{1}{1+\nu_i}\right]\left[(3-4\nu_0) I_1^i - I_{21}^{\ i} - \right.$$
$$\left. - 8\pi(1-\nu_0)\frac{\mu_0}{\mu_i}\frac{1-\nu_i}{1+\nu_i}\right] - 2\left[-I_2{}^i + I_{12}{}^i + 8\pi(1-\nu_0)\frac{\mu_0}{\mu_i}\frac{\nu_i}{1+\nu_i}\right]^2$$

Здесь индекс i — номер дефекта, а нижний индекс величин $p_q{}^i$ связан с главными осями эллипсоидов, причем в силу вращательной симметрии пробегает только значения 1,2.

Предельный случай жесткого включения получится, если в (4.8) устремить $\mu_i \to \infty$, случай полости — если положить $\mu_i = -\mu_0$, $\nu_i = \nu_0$.

Если один из эллипсоидов сфера, например второй, то $p_2{}^2 = 0$ и выражение для Φ_1 значительно упрощается

$$\Phi_1 = \frac{3v_1 v_2 \varepsilon_0^2}{\pi\varkappa_0}\left[1 + 3\frac{\mu_0}{\mu_2}\frac{1-\nu_0}{1-2\nu_0}\frac{1-2\nu_2}{1+\nu_2}\right]^{-1}\frac{I_1^1 - I_2^1}{\Delta_1}(1-2\nu_0) \tag{4.9}$$

Если оба эллипсоида — сферы, то $p_2{}^1 = p_2{}^2 = 0$ и $\Phi_1 = 0$. Это согласуется с известным результатом [3], что энергия взаимодействия изотропных сферических включений $\sim r^{-6}$.

Поступила 13 I 1970

ЛИТЕРАТУРА

1. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М., Изд-во иностр. лит., 1963.
2. Косилова В. Г., Кунин И. А., Соснина Э. Г. Взаимодействие дефектов с учетом пространственной дисперсии. Физ. твердого тела, 1968, т. 10, вып. 2.
3. Лифшиц И. М., Танатаров Л. В. Об упругом взаимодействии атомов примеси в кристалле. Физ. металлов и металловедение, 1961, т. 12, вып. 3.