

Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras.

Fernando Rajadell, Josep Planelles y Juan Ignacio Climente

Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I,
Apartado 224, E-12080 Castelló de la Plana, Spain
email: josep.planelles@exp.uji.es

Abstract

The present paper is a pedagogical approach to the calculation of strain in quantum dots of arbitrary shape buried in a matrix. We assume the isotropic strain model, which has good performance and is not computationally heavy. The paper is self-contained: we start from the definitions of strain and stress and obtain the Navier equation. Then, the elasticity formalism is applied to the problem of spherical inclusion. Finally, using the superposition principle, we obtain the strain in an inclusion of arbitrary shape as a sum of effects coming from the inclusion of many small spheres. The resulting strain formula is a surface integral which can be numerically solved and compared to results published in recent scientific literature.

PACS: 73.21.La; 81.40.Jj

Introducción

Desde hace años hay un considerable interés en la síntesis, caracterización y estudio de puntos cuánticos, QDs, autoordenados. Éste viene sin duda estimulado por la posible utilización de estos QDs en nuevos nanodispositivos optoelectrónicos (tales como láseres de puntos cuánticos), fotodetectores, o su uso como puertas cuánticas en el procesado cuántico de la información, entre otras muchas aplicaciones [1,2,3].

Uno de los métodos más empleados para el crecimiento de QDs en matrices semiconductoras es el llamado método de Stranski-Krastanow [4] el cual permite un control de la densidad, tamaño, composición y forma de los puntos cuánticos, consiguiendo un producto con una alta homogeneidad. Las fuerzas de tensión son en parte responsables de ello. Una vez depositada una primera serie de puntos cuánticos sobre la matriz, y después de quedar éstos cubiertos de nuevo por material de la matriz, cada punto cuántico origina un campo de tensiones que promueve el ordenamiento vertical de los nuevos puntos cuánticos que se van depositando y cubriendo sucesivamente. De este modo se consiguen pilas ordenadas de QDs.

Las tensiones que quedan presentes provocan, a su vez, cambios en la estructura de las bandas del material obtenido. Básicamente, el borde de la banda de conducción se estabiliza/desestabiliza proporcionalmente a la deformación hidrostática, mientras que en la banda de valencia los huecos pesados y ligeros (que son degenerados en el punto Γ de la zona de Brillouin) rompen su degeneración proporcionalmente al campo de deformaciones biaxial, a la vez que también son afectados por la presión hidrostática, de manera similar a como lo es la banda de conducción [5]. Adicionalmente, el campo de tensiones genera un potencial piezoeléctrico, aunque éste es generalmente pequeño y, excepto en algunos casos concretos, contribuye poco a la energía electrónica.

Por todos estos motivos, entre otros, se hace necesario calcular el campo de tensiones/deformaciones en un QD. Los métodos que se emplean para su cálculo se pueden clasificar en dos categorías: modelos de elasticidad continua (continuous model CM) y modelos atomísticos (valence force field VFF). En general VFF y CM conducen a resultados que están en razonable acuerdo [6,7]. Dentro del modelo continuo, la descripción más simple se consigue con el modelo continuo isótropo (isotropic elasticity, IE) propuesto por Davies y Downes[8] el cual rinde resultados acordes con aquellos que se obtienen de modelos continuos anisótropos y atomísticos [9,10]. El método IE es conceptualmente simple, computacionalmente asequible y, desde el punto de vista de sus resultados, robusto.

En el presente artículo derivaremos el método IE a partir de la ecuación básica de la elasticidad (ecuación de Navier) con el objeto de proporcionar al no especialista una aproximación didáctica al tema. Creemos que la programación de la fórmula de deformaciones y su aplicación a casos concretos donde pueden contrastarse con la bibliografía puede constituir una buena propuesta de práctica para estudiantes universitarios.

1. Deformaciones en el entorno de un punto. Tensores de deformación y de tensión.

La teoría de la elasticidad estudia la mecánica de los cuerpos sólidos considerándolos como medios continuos. Bajo la acción de las fuerzas aplicadas, los sólidos se deforman, es decir, cambian de forma y de volumen en mayor o menor grado. Como veremos, el concepto de tensor de deformación está ligado a las deformaciones dentro del sólido, mientras que el concepto de tensor de tensiones está relacionado con los agentes responsables de estas deformaciones, es decir, con las fuerzas.

En este apartado presentaremos una breve exposición de aquellos elementos necesarios de la elasticidad lineal que nos permitan abordar el estudio de la inclusión esférica como un paso intermedio al estudio de las deformaciones elásticas en los puntos cuánticos.

En lo que sigue, los medios continuos que consideraremos serán elásticos, isótropos y lineales. Así, existirá una relación lineal entre el tensor de deformación y el de tensiones (ley de Hooke), las propiedades mecánicas de los sólidos no tendrán direcciones preferentes y las deformaciones de los puntos materiales del sólido serán infinitésimos de primer orden.

1.1 Tensor de deformación específica

Consideremos un sólido elástico inicialmente no deformado y sean P y Q dos puntos del mismo infinitamente próximos.

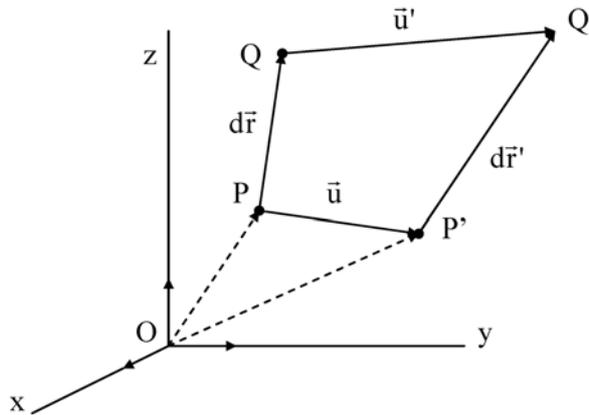


Figura 1

Producida una pequeña deformación, el punto P pasa al P' y el punto Q al Q'. Representaremos por \vec{u} el desplazamiento de P' respecto de P y por \vec{u}' el de Q' respecto de Q. En coordenadas cartesianas:

$$\vec{u} = u_x \vec{i} + u_y \vec{j} + u_z \vec{k} \quad \vec{u}' = u'_x \vec{i} + u'_y \vec{j} + u'_z \vec{k} \quad (1)$$

Teniendo en cuenta que los desplazamientos \vec{u} y \vec{u}' son infinitesimales, podemos expresar las componentes de \vec{u}' en función de las de \vec{u} y de sus derivadas mediante un desarrollo de Taylor hasta primer orden:

$$u'_i = u_i + \frac{\partial u_i}{\partial x} dx + \frac{\partial u_i}{\partial y} dy + \frac{\partial u_i}{\partial z} dz \quad (i = x, y, z) \quad (2)$$

Las ecuaciones (2) pueden representarse como $[\bar{u}'] = [\bar{u}] + [M][d\bar{r}]$ (3)
 donde $[\bar{u}']$, $[\bar{u}]$ y $[d\bar{r}]$ son matrices 3x1 y $[M]$ es una matriz 3x3 cuyos elementos son $m_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$.

La matriz $[M]$ podemos descomponerla como suma de una matriz simétrica y otra antisimétrica según

$$[M] = \frac{[M] + [M]^T}{2} + \frac{[M] - [M]^T}{2} = [D] + [H] \quad (4)$$

donde $[M]^T$ es la matriz transpuesta de $[M]$.

De la figura 1 se desprende $\bar{u} + d\bar{r}' = d\bar{r} + \bar{u}' \rightarrow d\bar{r}' = d\bar{r} + (\bar{u}' - \bar{u})$, que expresada en forma matricial y teniendo en cuenta las ecuaciones (3) y (4), así como el concepto de matriz identidad, conduce a

$$[d\bar{r}'] = [I][d\bar{r}] + ([D] + [H])[d\bar{r}] = [D][d\bar{r}] + [I + H][d\bar{r}] \quad (5)$$

La matriz simétrica $[D]$ es lo que denominamos tensor de deformación específica. Sus elementos son del tipo

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (6)$$

$[I+H]$ es una matriz infinitesimal y, por ser $[H]$ antisimétrica, ortogonal; cuyos elementos son del tipo $\delta_{ij} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, donde δ_{ij} es el delta de Kronecker.

La matriz $[I+H]$, al aplicarla al vector $d\bar{r}$, le produce un giro pero le conserva el módulo. En cambio el tensor de deformación específica $[D]$ cuando aplica a $d\bar{r}$ le produce, en general, un cambio de módulo y de dirección.

Al ser $[D]$ un tensor simétrico, existirán, en un punto P del sólido, tres direcciones perpendiculares entre sí tales que el vector dado por la transformación $[D][d\bar{r}]$ no cambia de dirección, sino únicamente de módulo. Estas tres direcciones son las llamadas direcciones principales del tensor de deformación. Para cualquier vector $d\bar{r}$, cuya dirección coincida con alguna de las tres direcciones principales del tensor de deformación, se verificará

$$[D][d\bar{r}] = \varepsilon [d\bar{r}] \rightarrow [D - \varepsilon I][d\bar{r}] = [\bar{0}] \quad (7)$$

La ecuación matricial (7) constituye un sistema de ecuaciones homogéneo cuya condición de compatibilidad proporciona la ecuación característica

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{xx} - \varepsilon & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} - \varepsilon & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

La ecuación (8) constituye una ecuación cúbica en ε cuyas raíces ε_1 , ε_2 y ε_3 se denominan deformaciones principales.

La traza del tensor de deformación específica es un invariante respecto de cualquier rotación, suele denominarse invariante lineal (o dilatación cúbica unitaria). Si lo representamos por e , tendremos

$$e = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = \text{div } \bar{u} \quad (9)$$

Los términos del tensor de deformación específica tienen la siguiente interpretación:

a) Los términos ε_{ii} ($i = x, y, z$) de la diagonal representan la diferencia de desplazamientos a lo largo del eje i que experimentan dos puntos P y Q, distanciados la unidad a lo largo del mencionado eje en el sólido libre, como consecuencia de la deformación. Veamos como ejemplo el caso de ε_{xx} :

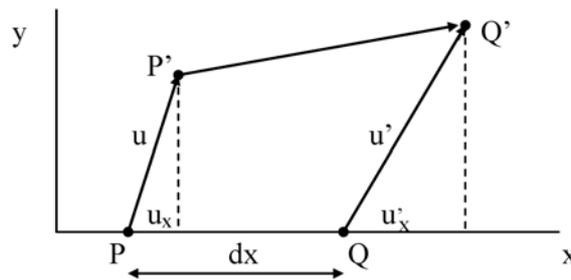


Figura 2

La deformación del sólido afecta desigualmente a los puntos P y Q. P pasa a P' (se deforma u_x en la dirección x) y Q pasa a Q' (se deforma u'_x en la dirección x).

De acuerdo con lo anterior,
$$\varepsilon_{xx} = \frac{u'_x - u_x}{dx} = \frac{u_x + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx - u_x}{dx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$$

(Idéntica interpretación para los restantes términos de la diagonal, ε_{yy} y ε_{zz}).

b) Los elementos extradiagonales del tensor de deformación están asociados a un “efecto de cizalla” que se traduce en la variación experimentada por el ángulo, inicialmente recto, de lados paralelos a los ejes etiquetados en la correspondiente componente extradiagonal del tensor de deformación. Consideremos, por ejemplo, el

término
$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right):$$

En la figura siguiente, figura 3, la deformación implica que P pasa a P', S pasa a S' y Q pasa a Q'. Además, en el estado inicial no deformado, los segmentos PQ y PS forman un ángulo recto.

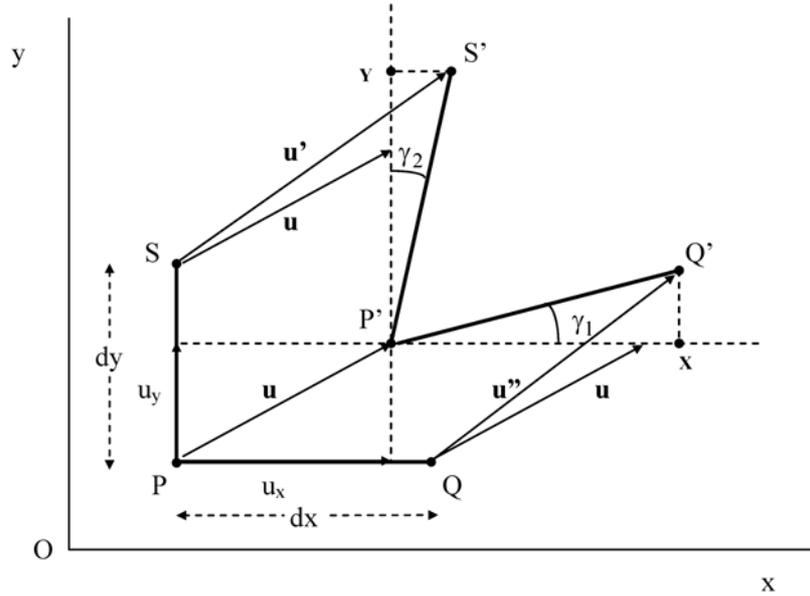


Figura 3

En la figura anterior se tienen las siguientes distancias:

$$\overline{P'Y} = \overline{PS} + u'_y - u_y = dy + \frac{\partial u_y}{\partial y} dy = \left(1 + \frac{\partial u_y}{\partial y}\right) dy \quad (10.1)$$

$$\overline{YS'} = u'_x - u_x = \frac{\partial u_x}{\partial y} dy \quad (10.2)$$

$$\overline{XQ'} = u''_y - u_y = \frac{\partial u_y}{\partial x} dx \quad (10.3)$$

$$\overline{P'X} = \overline{PQ} + u''_x - u_x = dx + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx = \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right) dx, \quad (10.4)$$

De la figura 3 y de las ecuaciones (10), aceptando que $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ y $\frac{\partial u_y}{\partial y}$ son despreciables

$$\text{como sumandos frente a 1, se tiene } \text{tg}\gamma_1 \cong \gamma_1 = \frac{\partial u_y}{\partial x} \text{ y } \text{tg}\gamma_2 \cong \gamma_2 = \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (11)$$

$$\text{con lo cual } \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \quad (12)$$

Obsérvese que si ε_{ij} ($i \neq j$) es positivo, el ángulo inicialmente recto disminuye. En cambio, si es negativo, dicho ángulo aumenta.

1.2 Tensor de tensiones

Sobre un sólido pueden actuar dos tipos de fuerzas externas: fuerzas de volumen y fuerzas de superficie. Las fuerzas de volumen actúan sobre cada elemento de volumen del sólido. Un ejemplo de este tipo de fuerzas lo tenemos en el propio peso del cuerpo.

Por el contrario, las fuerzas de superficie actúan sobre cada elemento de superficie del sólido.

Además de estas fuerzas externas existen fuerzas internas que provienen de las interacciones mutuas entre partes del sólido. En un cuerpo que no esté deformado, todas las partes del cuerpo se hallan en equilibrio mecánico. Esto significa que si consideramos una porción del sólido, la resultante de las fuerzas que actúan sobre ella, debida a todas las demás, es cero. Cuando ocurre una deformación el cuerpo abandona el estado de equilibrio original. Entonces aparecen fuerzas internas que tienden a llevar el cuerpo al estado de equilibrio. Estas fuerzas internas están relacionadas con las tensiones internas y son el origen del tensor de tensiones. Si no hay deformación no existen tensiones internas.

Las tensiones internas se deben a fuerzas entre las individualidades del material. Un hecho importante para la teoría de la elasticidad es que estas fuerzas tienen un “radio de acción” muy corto. Su efecto se extiende a la vecindad de la individualidad que la ejerce, hasta una distancia del orden de distancias atómicas, mientras que la teoría de la elasticidad, por ser una teoría macroscópica, sólo considera distancias grandes comparadas con las distancias atómicas. Podemos decir que las fuerzas que producen las tensiones internas son “fuerzas de corto alcance”. Por consiguiente, las que ejercen sobre cualquier parte del sólido las partes vecinas, sólo se ejercen sobre la superficie de dicha parte.

Consideremos una parte del sólido elástico ocupando una región V encerrada por la superficie S en el estado deformado. De acuerdo con lo anterior, la acción del material exterior ($R-V$) ejercerá sobre V unas fuerzas externas localizadas en la frontera S . Se admite que tales fuerzas están distribuidas de forma continua sobre S . Los elementos de volumen dV interiores a V , por el principio de acción y reacción, ejercerán fuerzas que se cancelarán mutuamente.

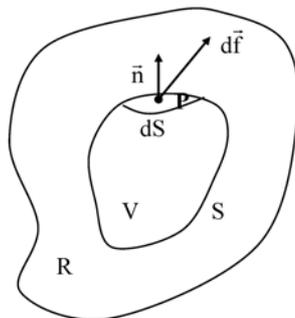


Figura 4

Para especificar la tensión en un elemento de superficie dS alrededor del punto P de S , asumimos que $d\vec{f}$ compensa la resultante de las fuerzas internas, debidas a las interacciones entre individualidades, sobre el elemento de superficie dS , y que el límite

$\lim_{dS \rightarrow 0} \frac{d\vec{f}}{dS}$ existe. Así, este límite es lo que denominamos vector tensión en el punto P :

$$\vec{\sigma} = \lim_{dS \rightarrow 0} \frac{d\vec{f}}{dS} \quad (13)$$

En general, el vector tensión no es normal al elemento de superficie dS sobre el que actúa, y por tanto siempre podemos descomponerlo en sus componentes intrínsecas:

tensión normal, perpendicular el elemento de superficie dS , y *tensión de cizalla* que actúa en el plano del elemento de superficie dS . Alternativamente, podemos resolver la tensión en sus componentes cartesianas. Para ello consideremos un pequeño elemento cúbico cuyos lados son paralelos a los ejes de coordenadas x, y, z .

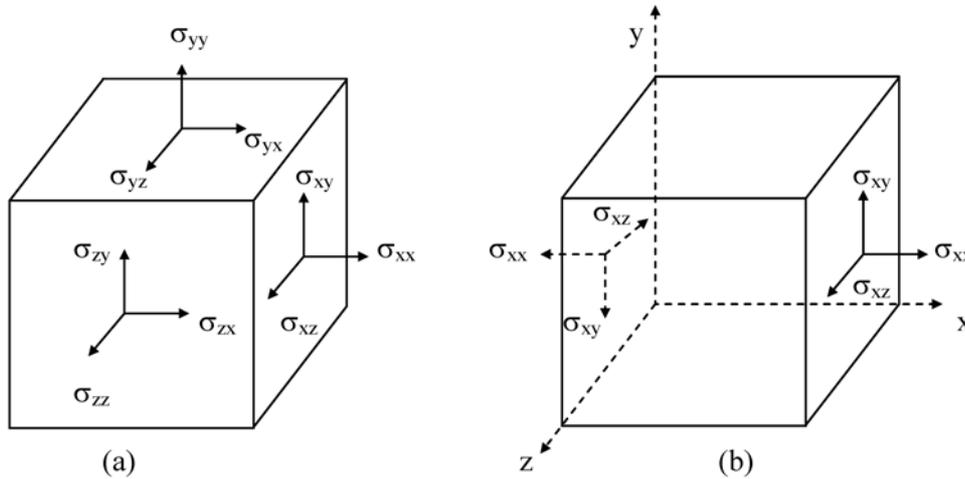


Figura 5

En la figura 5 vemos que las componentes de la tensión actuando en la cara del cubo normal al eje x y en el sentido positiva son $(\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz})$. Análogamente, para las caras perpendiculares a los ejes y, z , tenemos, respectivamente, $(\sigma_{yx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz})$ y $(\sigma_{zx}, \sigma_{zy}, \sigma_{zz})$. Estas componentes, dispuestas matricialmente, nos dan el tensor de tensiones

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Las componentes $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ representan las *tensiones normales* y las restantes componentes $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yx}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}, \sigma_{zy}$ representan las *tensiones de cizalla*. Por convenio, la *tensión normal* en una superficie será positiva cuando produzca tensión y negativa si produce compresión del material dentro del elemento. El sentido positivo de cualquier componente de las *tensiones de cizalla*, en cualquier cara del elemento cúbico, se hace coincidir con el sentido positivo (negativo) del eje coordenado si la *tensión normal*, en la misma cara, coincide con el sentido positivo (negativo) del correspondiente eje. Esta regla está ilustrada en la figura 5(b), indicando los sentidos positivos de $\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}$ correspondientes a dos caras, del elemento cúbico, normales a la dirección del eje x .

A continuación vamos a demostrar que el tensor de tensiones, al igual que sucedía con el tensor de deformación específica, es simétrico. Para ello consideremos el equilibrio de un pequeño paralelepípedo rectangular con centro en el punto $P(x, y, z)$ y longitudes de lados iguales a dx, dy, dz . Con estas condiciones, los centros de las seis caras serán

$$\left(x \pm \frac{1}{2} dx, y, z\right), \quad \left(x, y \pm \frac{1}{2} dy, z\right) \quad \left(x, y, z \pm \frac{1}{2} dz\right)$$

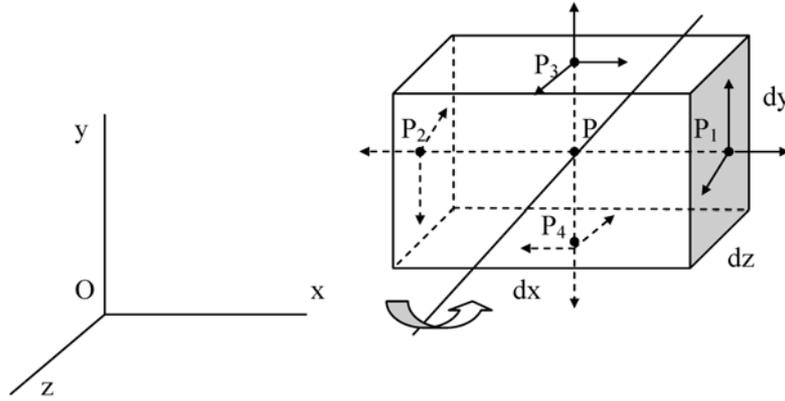


Figura 6

Si las componentes del tensor de tensiones en el punto P son σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yx} , σ_{yy} , ..., σ_{zz} , entonces dichas componentes en las caras de centros P_1 , P_2 , P_3 y P_4 serán

$$\text{En } P_1(x+dx/2, y, z): \quad \sigma_{xx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xz} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} dx$$

$$\text{En } P_2(x-dx/2, y, z): \quad \sigma_{xx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xy} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xz} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} dx$$

$$\text{En } P_3(x, y+dy/2, z): \quad \sigma_{yx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yy} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yz} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} dy$$

$$\text{En } P_4(x, y-dy/2, z): \quad \sigma_{yx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yy} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yz} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} dy$$

El equilibrio para el pequeño elemento de volumen paralelepípedo implica que no exista rotación alrededor de ningún eje, por ejemplo del eje dibujado en la figura 6 que pasa por P y es paralelo al eje z. Por ello, el momento resultante de todas las fuerzas, respecto de ejes que pasen por P y sean paralelos a los ejes coordenados, deben ser separadamente cero.

El equilibrio respecto de la rotación alrededor del eje dibujado en la figura 6, teniendo en cuenta que la tensión es fuerza/superficie, da lugar a la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} dx \left(\sigma_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx \right) dz dy + \frac{1}{2} dx \left(\sigma_{xy} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx \right) dz dy = \\ = \frac{1}{2} dy \left(\sigma_{yx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy \right) dx dz + \frac{1}{2} dy \left(\sigma_{yx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy \right) dx dz \end{aligned}$$

Dividiendo la anterior igualdad por $dx dy dz$ y simplificando obtenemos $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$.

De forma análoga podemos demostrar $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$ y $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$.

Vemos, por tanto, que el tensor de tensiones es simétrico, por lo que sólo es necesario conocer seis de las nueve componentes.

Si representamos por [T] el tensor de tensiones, el vector tensión $[\vec{\sigma}]$ en un plano π del sólido, cuyo vector director sea $[\vec{n}_\pi]$, vendrá dado por

$$[\vec{\sigma}] = [T] [\vec{n}_\pi] \quad (14)$$

(en la ecuación (14), los vectores $[\vec{\sigma}]$ y $[\vec{n}_\pi]$ están escritos como matrices columna)

Al ser [T] un tensor simétrico, siempre podemos encontrar tres direcciones, mutuamente perpendiculares, para las que el vector tensión de la ecuación (14) sea paralelo al vector $[\vec{n}_\pi]$. En estas condiciones la ecuación (14) se escribirá como $[\vec{\sigma}] = [T] [\vec{n}_\pi] = \sigma [\vec{n}_\pi]$ (donde σ es un escalar). Introduciendo la matriz identidad [I], la anterior ecuación puede escribirse como

$$[T] [\vec{n}_\pi] = \sigma [I] [\vec{n}_\pi]$$

o equivalentemente

$$[T - \sigma I] [\vec{n}_\pi] = [\vec{0}] \quad (15)$$

La ecuación matricial (15) constituye un sistema de ecuaciones homogéneo cuya condición de compatibilidad proporciona la ecuación característica

$$\begin{vmatrix} \sigma_{xx} - \sigma & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} - \sigma & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} - \sigma \end{vmatrix} = 0 \quad (16)$$

La ecuación (16) constituye una ecuación cúbica en σ , cuyas raíces σ_1 , σ_2 y σ_3 se denominan tensiones principales.

2. Ley de Hooke generalizada

Hasta este punto, hemos considerado la descripción matemática de los tensores de deformación y de tensiones sin entrar en consideraciones acerca de la naturaleza específica del material. Para continuar en la formulación matemática, necesitamos introducir ecuaciones adicionales que relacionen las componentes de ambos tensores en un sólido determinado. En lo que sigue consideraremos que el material es elástico, isótropo, homogéneo y lineal. Un material es elástico cuando desaparecido el agente deformador, la forma y el tamaño vuelve a su aspecto original. Un material elástico se dice que es isótropo cuando las propiedades elásticas en un punto son las mismas independientemente de la dirección. Si las propiedades del material son las mismas en cualquier punto dentro del sólido, decimos que es homogéneo. Finalmente, un medio lineal es aquel en el que existe una relación lineal entre los tensores de deformación y de tensiones.

El concepto de elasticidad lineal fue introducido por Hooke en 1678 cuando postuló la ley “*ut tensio sic vis*”, que puede ser traducido como “*la extensión es proporcional a la fuerza*”.

En sólidos tridimensionales necesitamos seis componentes del tensor de deformación para describir la deformación en un punto. Similarmente, la especificación completa de las fuerzas internas actuando en un punto requiere el uso de las seis componentes del tensor de tensiones. Cauchy y Poisson en 1820 desarrollaron, para un sólido elástico,

isótropo, la relación lineal entre las componentes de los tensores de tensiones y deformación, que hoy conocemos como ley de Hooke generalizada.

Un sólido elástico isótropo se caracteriza por la coincidencia de los ejes principales de los tensores de deformación y de tensiones; además, poseen únicamente dos constantes elásticas independientes, por ejemplo: el módulo de Young (E) y coeficiente de Poisson (ν).

Para cada una de las direcciones principales de los tensores de tensiones y de deformación se cumple la proporcionalidad:

$$\sigma_i = E \varepsilon_i \quad (i = 1,2,3) \quad (17)$$

La extensión del material en una dirección, por ejemplo la dirección principal 1, lleva asociada la contracción del material en las dos restantes direcciones principales perpendiculares

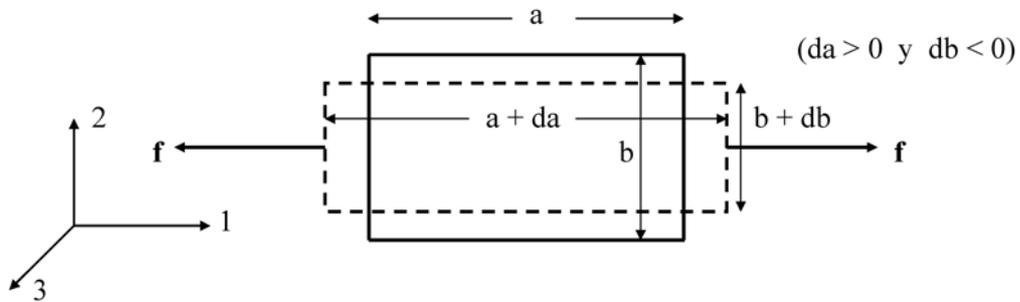


Figura 7

El coeficiente de Poisson expresa la proporcionalidad entre las deformaciones unitarias. Extendiendo mentalmente la figura 7 a la tercera dimensión de la barra estirada únicamente en la dirección 1, tendremos, de acuerdo con el concepto de coeficiente de Poisson,

$$\frac{|db/b|}{da/a} = \frac{|dc/c|}{da/a} = \nu \rightarrow \frac{|\varepsilon_2|}{\varepsilon_1} = \frac{|\varepsilon_3|}{\varepsilon_1} = \nu \quad (18)$$

Como ε_2 y ε_3 serán negativos ($db < 0$ y $dc < 0$), las igualdades (18) podemos escribirlas como $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = -\nu \varepsilon_1$ (19)

En la figura 7 vemos que la deformación se realiza en la dirección principal 1, por tanto, de acuerdo con la ecuación (17), $\varepsilon_1 = \frac{\sigma_1}{E}$; con lo cual la expresión (19) podemos

escribirla en la forma $\varepsilon_i = -\nu \frac{\sigma_1}{E}$ (donde la dirección principal $i \neq 1$)

Puesto que la relación entre la tensión y la deformación es lineal, se cumplirá el principio de la superposición. Por tanto, estamos en condiciones de poder obtener la deformación unitaria, en un elemento de volumen y en una dirección principal, cuando sobre el elemento de volumen actúan simultáneamente tensiones en las tres direcciones principales. Consideremos, para ello, un elemento de volumen de forma cúbica, cuyas aristas tengan longitud unidad y direcciones coincidentes con las direcciones principales del tensor de tensiones:

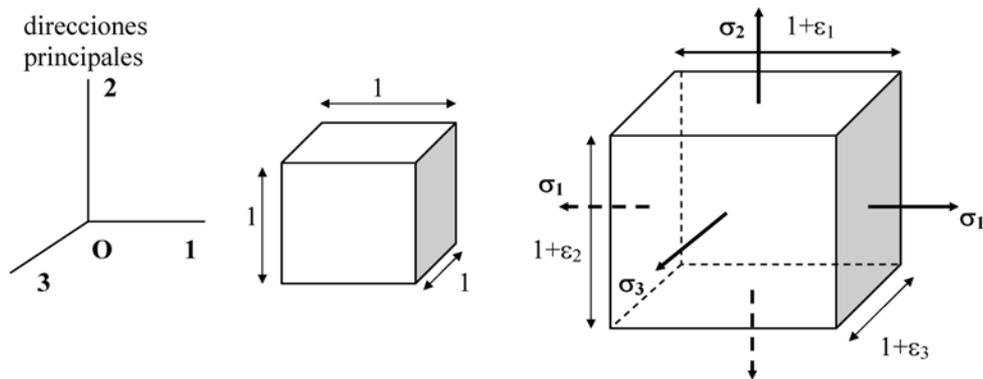


Figura 8

En las deformaciones que hemos considerado, las direcciones principales de los tensores de deformación y de tensiones coinciden en todo momento.

De acuerdo con el principio de superposición, la deformación unitaria en una dirección principal será la suma del efecto, sobre ella, de las tres tensiones principales. Así, de acuerdo con las ecuaciones (17) y (19), tendremos:

$$\varepsilon_1 = \frac{\sigma_1}{E} - \nu \frac{\sigma_2}{E} - \nu \frac{\sigma_3}{E} \rightarrow \varepsilon_1 = \frac{1}{E} (\sigma_1 - \nu (\sigma_2 + \sigma_3))$$

ecuación, ésta última, que genéricamente podemos escribir en la forma

$$\varepsilon_i = \frac{1}{E} (\sigma_i - \nu (\text{tr}\sigma - \sigma_i)) \quad \text{o equivalentemente,} \quad \boxed{\varepsilon_i = \frac{1+\nu}{E} \left(\sigma_i - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma \right)} \quad (20)$$

(donde $i = 1, 2, 3$ y $\text{tr}\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$)

La ecuación (20) constituye la ley de Hooke generalizada para las direcciones principales de los tensores de deformación y de tensiones.

En un sistema de referencia $Oxyz$, resultado de una rotación $[R]$ arbitraria del sistema de ejes principales $Ox^*y^*z^*$ ($O123$ en la figura 8), las expresiones matriciales de los tensores de tensiones σ y σ^* vienen relacionados por esta misma matriz de rotación según:

$$[\sigma] = [R]^+ [\sigma^*] [R] \quad (21)$$

donde, recordemos, el tensor $[\sigma^*]$ es diagonal.

En estos nuevos ejes, el tensor de deformación $[\varepsilon]$ puede escribirse, teniendo en cuenta las ecuaciones (20) y (21), como

$$[\varepsilon] = [R]^+ [\varepsilon^*] [R] = \frac{1+\nu}{E} [R]^+ \left([\sigma^*] - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma [I] \right) [R]$$

$$[\varepsilon] = \frac{1+\nu}{E} \left([\sigma] - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma [I] \right) \quad (22)$$

donde su elemento ε_{ij} se particulariza como

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \left(\sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma \delta_{ij} \right) \quad (23)$$

De la ecuación (23) podemos obtener la relación entre las trazas de los tensores de deformación y de tensiones:

$$\text{tr}\varepsilon = \frac{1-2\nu}{E} \text{tr}\sigma \quad (24)$$

Despejando σ_{ij} de la ecuación (23) y teniendo en cuenta (24), obtenemos las ecuaciones de Lamé, que expresan las componentes del tensor de tensiones en función de las del tensor de deformación

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \lambda \text{tr}\varepsilon \quad (25)$$

donde los coeficientes $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ y $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ (26)

son los coeficientes de Lamé.

3. Ecuación fundamental de la elasticidad

En un cuerpo elástico en equilibrio, las fuerzas internas se ajustan para hacer mínima la energía. Veamos qué sucede cuando las fuerzas internas no están en equilibrio. Para ello consideremos un trozo pequeño de material, de volumen V , encerrado en una superficie S .

Si el trozo está en equilibrio, $\vec{F} = 0$.

Podemos considerar \vec{F} como suma de dos contribuciones: $\vec{F} = \vec{F}_{\text{ext}} + \vec{F}_{\text{int}}$.

La contribución exterior puede ser debida a fuerzas tales como la gravedad que actúan a distancia produciendo una fuerza por unidad de volumen \vec{f}_{ext} . Así, $\vec{F}_{\text{ext}} = \int_V \vec{f}_{\text{ext}} dV$.

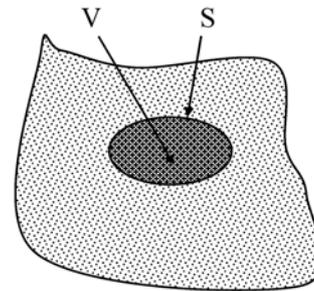


Figura 9

En el equilibrio esta fuerza exterior estaría equilibrada por la fuerza total interior, \vec{F}_{int} , proveniente del material cercano que actúa a través de la superficie S . Si el trozo de material no está en equilibrio,

$$\vec{F}_{\text{int}} + \int_V \vec{f}_{\text{ext}} dV = \int_V \rho \vec{r} dV \rightarrow \vec{F}_{\text{int}} = \int_V (-\vec{f}_{\text{ext}} + \rho \vec{r}) dV \rightarrow \vec{F}_{\text{int}} = \int_V \vec{f} dV \quad (27)$$

donde ρ es la densidad del material y \vec{r} el vector aceleración.

Lo que hemos llamado \vec{F}_{int} está relacionado con las tensiones o esfuerzos en el material. El vector tensión, $\vec{\sigma}$, en cualquier punto de la superficie S caracterizado por el vector unitario normal \vec{n} , viene dado por $[\vec{\sigma}] = [T][\vec{n}]$. Si denominamos dS a un elemento de superficie de S y tenemos en cuenta que $\vec{\sigma} = \frac{d\vec{F}_{int}}{dS}$, las componentes de la ecuación matricial anterior serán

$$\frac{dF_{int,i}}{dS} = \sigma_{ix} n_x + \sigma_{iy} n_y + \sigma_{iz} n_z \rightarrow dF_{int,i} = \left(\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k \right) dS \quad (i,k = x,y,z) \quad (28)$$

Integrando (28) a toda la superficie S y teniendo en cuenta (27) obtenemos

$$\int_V \vec{f}_i dV = \int_S \left(\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k \right) dS \quad (29)$$

Desde un punto de vista matemático, $\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k$ representa el producto escalar del vector $\vec{\sigma}_i$ por \vec{n} . La integral de superficie que aparece en la ecuación (29) representa, por tanto, el flujo de $\vec{\sigma}_i$ que sale del volumen V a través de la superficie S. Lo cual, de acuerdo con el teorema de la divergencia, se puede escribir como la integral de volumen de la divergencia de $\vec{\sigma}_i$ extendida a todo el volumen V:

$$\int_S \left(\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k \right) dS = \int_S \vec{\sigma}_i \cdot \vec{n} dS = \int_V (\nabla \cdot \vec{\sigma}_i) dV = \int_V \left(\frac{\partial \sigma_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{iz}}{\partial z} \right) dV \quad (30)$$

$$\text{De (29) y (30) se tiene: } f_i = \frac{\partial \sigma_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{iz}}{\partial z} \quad (i = x,y,z). \quad (31)$$

Para obtener la ecuación fundamental de la elasticidad, es decir la relación de la fuerza \vec{f} con las apropiadas derivadas del vector desplazamiento \vec{u} , combinamos las ecuaciones (31) y (25). Obtenemos:

$$f_i = 2\mu \left(\frac{\partial \varepsilon_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \varepsilon_{iz}}{\partial z} \right) + \lambda \frac{\partial \text{tr} \varepsilon}{\partial x_i} \quad (x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z) \quad (32)$$

Las derivadas de las componentes del tensor de deformación, así como la derivada de su traza, podemos obtenerlas de la expresión (6). Haciendo esto para cada una de las expresiones implícitas en la ecuación (32), obtenemos:

$$f_x = (\lambda + \mu) \frac{\partial(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{\partial x} + \mu \nabla^2 u_x, \quad f_y = (\lambda + \mu) \frac{\partial(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{\partial y} + \mu \nabla^2 u_y, \\ f_z = (\lambda + \mu) \frac{\partial(\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{\partial z} + \mu \nabla^2 u_z$$

Las anteriores ecuaciones constituyen las componentes x,y,z de la ecuación vectorial

$$\boxed{\vec{f} = (\lambda + \mu) \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) + \mu \nabla^2 \vec{u}} \quad (33)$$

La ecuación (33) se conoce con el nombre de ecuación de Navier.

Haciendo uso de la identidad vectorial $\nabla^2 \vec{u} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u}$, la ecuación de Navier puede expresarse también como

$$\vec{f} = (\lambda + 2\mu)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \mu\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} \quad (34)$$

4. El problema de la esfera hueca sometida a presiones constantes

En algunos problemas de elasticidad lineal la ecuación diferencial de Navier puede ser integrada analíticamente. Las constantes de integración las podemos obtener a partir de las condiciones de contorno. La simetría esférica del problema que abordamos a continuación hace que sea didácticamente adecuado. Además, tiene un interés adicional porque podemos considerarlo como un problema previo al de la inclusión esférica.

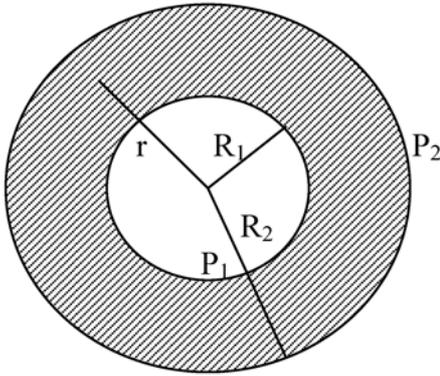


Figura 10

Condiciones de contorno:

$$\sigma_{rr}(R_1) = -P_1$$

$$\sigma_{rr}(R_2) = -P_2$$

La simetría esférica implica:

$$u_r = u_r(r); \quad u_\theta = u_\phi = 0 \quad (35)$$

y por consiguiente $\vec{u} = u_r \vec{e}_r$, donde \vec{e}_r es un vector unitario radial

Como suponemos que no hay fuerzas de volumen ni aceleraciones dentro del material, la ecuación de Navier, ecuación (34), queda $(\lambda + 2\mu)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \mu\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} = 0$. Además, la simetría radial implica $\vec{\nabla} \times (u_r \vec{e}_r) = 0$. En estas condiciones la ecuación de Navier queda reducida a

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot (u_r \vec{e}_r)) = 0 \rightarrow \vec{\nabla}(u_r \vec{e}_r) = \text{cte} \quad (36)$$

Utilizando el operador divergencia en coordenadas esféricas,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 A_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial(A_\theta \sin \theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial A_\phi}{\partial \phi}$$

y teniendo en cuenta (35), obtenemos

$$\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 u_r)}{dr} = \text{cte} \rightarrow u_r = a r + \frac{b}{r^2} \quad (37)$$

En coordenadas esféricas los elementos diagonales del tensor de deformación son

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}; \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_r \right); \quad \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \sin \theta u_r + \cos \theta u_\theta \right) \quad (38)$$

En este caso los elementos extradiagonales, debido a la simetría esférica, son nulos.

De las ecuaciones (35) y (38) tenemos

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{u_r}{r} \quad (39)$$

$$\text{De (37) y (39):} \quad \varepsilon_{rr} = a - \frac{2b}{r^3}; \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = a + \frac{b}{r^3} \quad (40)$$

A partir de (40), utilizando la ecuación de Lamé, ecuación (25), podemos obtener

$$\sigma_{rr} = (2\mu + 3\lambda)a - \frac{4\mu b}{r^3} \quad \sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = (2\mu + 3\lambda)a + \frac{2\mu b}{r^3} \quad (41)$$

Es inmediato comprobar que, en este caso, también los elementos extradiagonales del tensor de tensiones son nulos.

De las ecuaciones (41), teniendo en cuenta las condiciones de contorno del problema ($\sigma_{rr}(R_1) = -P_1$, $\sigma_{rr}(R_2) = -P_2$), obtenemos las constantes a y b

$$a = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} \quad b = \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \quad (42)$$

Finalmente, llevando estos valores de a y b a las ecuaciones (37), (40) y (41) obtenemos

$$u_r = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} r + \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^2} \quad (43.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} - \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.2)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} + \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.3)$$

$$\sigma_{rr} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(R_2^3 - R_1^3)} - \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.4)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(R_2^3 - R_1^3)} + \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{2(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.5)$$

Como caso particular del problema que estamos tratando, podemos considerar el caso de una esfera maciza de radio R sometida a una presión P. Las fórmulas anteriores son aplicables haciendo $R_1 = 0$, $R_2 = R$ y $P_2 = P$. Se obtiene:

$$u_r = \frac{-P}{2\mu + 3\lambda} r \quad (44.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{-P}{2\mu + 3\lambda} \quad (44.2)$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\phi\phi} = -P \quad (44.3)$$

Todavía podemos contemplar un segundo caso particular del problema que estamos considerando. Se trataría de obtener el desplazamiento u_r y las componentes diagonales de los tensores de deformación y de tensiones para el caso de un medio elástico grande con una cavidad esférica de radio R , sometido a una compresión hidrostática. Para ello hacemos, en las ecuaciones (43), $R_2 \gg R_1 = R$. Se obtiene:

$$u_r = \frac{-P_2}{2\mu + 3\lambda} r + \frac{(P_1 - P_2) R^3}{4\mu} \frac{1}{r^2} \quad (45.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{-P_2}{2\mu + 3\lambda} - \frac{(P_1 - P_2) R^3}{2\mu} \frac{1}{r^3} \quad (45.2)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{-P_2}{2\mu + 3\lambda} + \frac{(P_1 - P_2) R^3}{4\mu} \frac{1}{r^3} \quad (45.3)$$

$$\sigma_{rr} = -P_2 - (P_1 - P_2) \frac{R^3}{r^3} \quad (45.4)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = -P_2 + \frac{1}{2}(P_1 - P_2) \frac{R^3}{r^3} \quad (45.5)$$

Si suponemos que P_2 es cero y $P_1 = P$, las ecuaciones anteriores quedarán

$$u_r = \frac{P R^3}{4\mu} \frac{1}{r^2} \quad (46.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{-P R^3}{2\mu} \frac{1}{r^3} \quad (46.2)$$

$$\sigma_{rr} = -P R^3 \frac{1}{r^3} \quad (46.4)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{P R^3}{4\mu} \frac{1}{r^3} \quad (46.3)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = \frac{P R^3}{2} \frac{1}{r^3} \quad (46.5)$$

5. El problema de la inclusión esférica

En este problema vamos a considerar el caso en el que en una matriz de un cierto material 2, con una cavidad esférica de radio R despreciable frente a las dimensiones de la matriz, “embutimos” una esfera maciza de radio $R+dR$ de un material distinto que llamaremos material 1. El material 1 (interior) ejerce una presión P sobre la superficie de la cavidad esférica de la matriz.

Este problema lo resolveremos combinando los dos resultados que hemos obtenido, como casos particulares, en el problema anterior de la esfera hueca: la esfera maciza y la matriz con una cavidad esférica sometida a una presión desde dentro proveniente del material colocado.

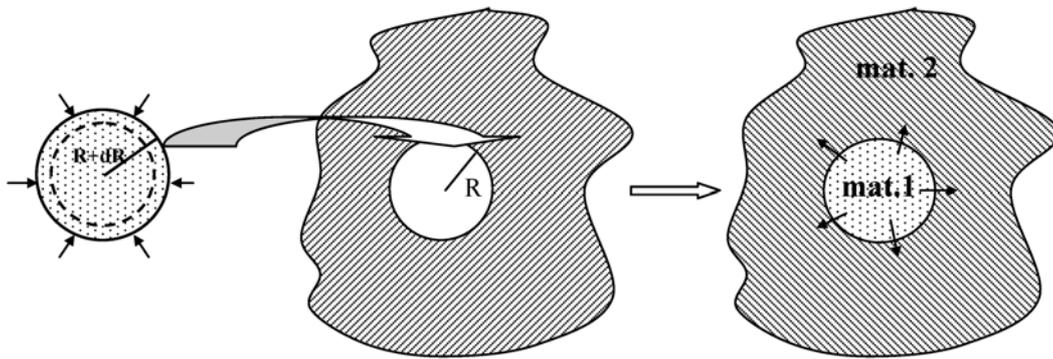


Figura 11

Supondremos que a una distancia r muy grande, contada desde el centro de la inclusión esférica, la presión es nula. Así, para la matriz podemos utilizar las ecuaciones (46).

Cuando la esfera maciza se introduce en la matriz hueca, se produce un “acoplamiento forzado” entre las constantes de red de ambos materiales. Este hecho impone una condición de contorno para u_r que podemos derivar de la siguiente forma:

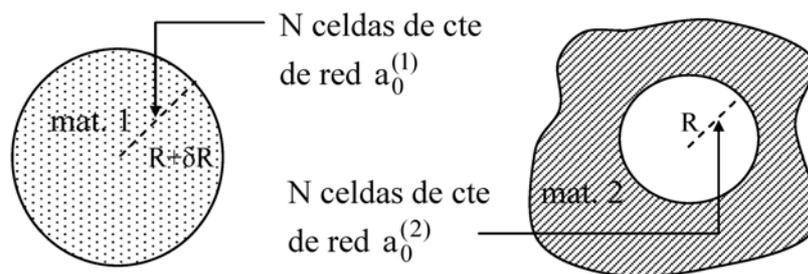


Figura 12

$$\left. \begin{array}{l} N a_0^{(1)} = R + \delta R \\ N a_0^{(2)} = R \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{a_0^{(1)}}{a_0^{(2)}} = 1 + \frac{\delta R}{R} \Rightarrow \delta R = R \left(\frac{a_0^{(1)}}{a_0^{(2)}} - 1 \right) \Rightarrow \delta R = R \varepsilon_0$$

siendo $\varepsilon_0 = a_0^{(1)} / a_0^{(2)} - 1$ un parámetro que caracteriza lo forzado que resulta la inclusión correspondiente.

Asimilando este δR a la diferencia del desplazamiento u_r en la superficie de contacto entre los materiales 1 y 2, tendremos $u_r^{(2)}(R) - u_r^{(1)}(R) = \varepsilon_0 R$ (47)

Particularizando la solución de la esfera maciza, ecuación (44.1), para $r = R$, tendremos

$$u_r^{(1)}(R) = \frac{-P}{2\mu_1 + 3\lambda_1} R \quad (48.1)$$

Asimismo, de las soluciones para un medio con una cavidad esférica, ecuación (46.1), para $r = R$, se tiene

$$u_r^{(2)} = \frac{P R}{4\mu_2} \quad (48.2)$$

Llevando (48.1) y (48.2) a la ec. (47) se tiene $P = \frac{\varepsilon_0}{1/(2\mu_1 + 3\lambda_1) + 1/(4\mu_2)}$. Ecuación

en la que al sustituir las expresiones de las constantes de Lamé, ecs (26), conduce a

$$P = \frac{\varepsilon_0}{(1 - 2\nu_1)/E_1 + (1 + \nu_2)/(2E_2)} \quad (49)$$

Si las constantes elásticas de la esfera (material 1) y de la matriz (material 2) se suponen iguales, la ecuación (49) queda

$$P = \frac{2E \varepsilon_0}{3(1 - \nu)} \quad (50)$$

Para este último caso, donde tiene validez la ecuación (50), podemos obtener las expresiones de u_r , ε_{rr} , $\varepsilon_{\theta\theta}$, $\varepsilon_{\phi\phi}$, σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$ y $\sigma_{\phi\phi}$, dentro y fuera de la inclusión. En efecto,

a) *Dentro de la inclusión:* sustituimos la ecuación (50) en las ecuaciones (44) y tenemos en cuenta las ecuaciones (26) para las constantes de Lamé. De esta forma obtenemos

$$u_r^{(1)} = -\frac{2(1 - 2\nu)\varepsilon_0}{3(1 - \nu)} r \quad (51.1)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = \varepsilon_{\phi\phi}^{(1)} = -\frac{2(1 - 2\nu)\varepsilon_0}{3(1 - \nu)} \quad (51.2) \quad \sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = \sigma_{\phi\phi}^{(1)} = -\frac{2E\varepsilon_0}{3(1 - \nu)} \quad (51.3)$$

b) *Fuera de la inclusión:* sustituimos la ecuación (50) en las ecuaciones (46) y tenemos en cuenta las ecuaciones (26) para las constantes de Lamé. Se obtiene

$$u_r^{(2)} = \frac{(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^2} \quad (52.1)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = -\frac{2(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.2)$$

$$\varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = \varepsilon_{\phi\phi}^{(2)} = \frac{(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.3)$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -\frac{2E\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.4)$$

$$\sigma_{\theta\theta}^{(2)} = \sigma_{\phi\phi}^{(2)} = \frac{E\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.5)$$

Un ejemplo de inclusión esférica lo podemos encontrar en un punto cuántico esférico de InAs de radio R incluido en una matriz muy grande del material GaAs. Se supone que

ambos medios son isótropos y que las constantes elásticas son las mismas para los dos tipos de material. Un punto cuántico de esta naturaleza puede ser generado mediante la siguiente secuencia estándar de procesos:

- Se comienza con una muestra de GaAs (matriz) a la que se le extrae una esfera de radio R que constituirá el punto.
- Se transmuta este material extraído a InAs en un ambiente relajado. De esta forma, debido a que la constante de red del InAs es mayor que la del GaAs, se expande una fracción ε_0 de su tamaño original: $\varepsilon_0 = a_0^{InAs} / a_0^{GaAs} - 1 \cong 0,072$.
- Se aplica una presión hidrostática para reducir el volumen del punto hasta su valor original.
- Finalmente, se introduce el punto en la cavidad original y se permite su relajación. Esto provoca un desplazamiento radial u_r y, por consiguiente, una presión en el propio punto y en material más próximo de la matriz.

6. Deformaciones en inclusiones con forma arbitraria

En este apartado veremos cómo, a partir de la solución para la inclusión esférica, podemos obtener una solución para una inclusión de forma arbitraria. Al igual que hemos considerado en la inclusión esférica, el material incluido y la matriz serán isótropos y tendrán idénticas constantes elásticas (módulo de Young y coeficiente de Poisson).

El procedimiento, y la forma en que hacemos uso del resultado de la inclusión esférica, se vislumbra en el siguiente esquema:

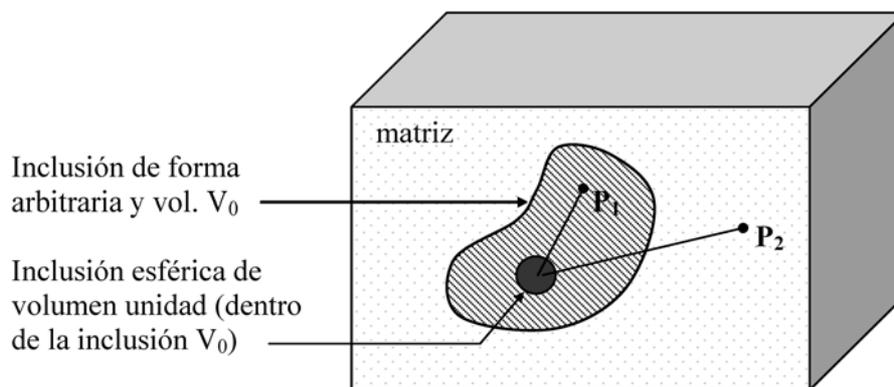


Figura 13

La estrategia consiste en considerar la inclusión de forma arbitraria y volumen V_0 como superposición de inclusiones esféricas de volumen unidad y evaluar y superponer (sumar) las deformaciones y tensiones que provocan en los puntos interiores a V_0 , como el punto P_1 , y en los exteriores a V_0 como el P_2 . La suma (principio de la superposición) de todas las contribuciones provenientes de las inclusiones esféricas de volumen unidad, interiores a la inclusión arbitraria, nos dará la deformación y la tensión debidas a la totalidad de la inclusión arbitraria.

De acuerdo con lo anterior, el desplazamiento, por unidad de volumen de inclusión arbitraria, en puntos tales como P_1 y P_2 , se obtendrá a partir de la ecuación (52.1) dividiendo por el volumen $(4/3)\pi R^3$ de la inclusión (téngase en cuenta que la mencionada ecuación es únicamente válida para inclusiones esféricas y en puntos exteriores a la inclusión). Si denominamos \tilde{u}_r a este desplazamiento por unidad de volumen, se tiene

$$\tilde{u}_r = \frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{1}{r^2} \quad (53)$$

Debido a la simetría radial de la *subinclusión* esférica de volumen unidad podemos escribir

$$\tilde{\mathbf{u}}_r = \tilde{u}_r \frac{\vec{r}}{r} \xrightarrow{\text{ec. (53)}} \tilde{\mathbf{u}}_r = \frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k}}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \quad (54)$$

De la ecuación (54) se desprende que

$$\tilde{u}_{x_i} = \frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{x_i}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{(3/2)}} \quad (\text{donde } x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z) \quad (55)$$

De la ecuación (55) podemos obtener las componentes del tensor de deformación específica (que serán también por unidad de volumen de inclusión). Teniendo en cuenta

que $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{x_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{x_j}}{\partial x_i} \right)$, obtenemos las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{xx} &= -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{2x^2 - y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\varepsilon}_{yy} &= -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{-x^2 + 2y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\varepsilon}_{zz} &= -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{-x^2 - y^2 + 2z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\varepsilon}_{xy} &= -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3xy}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\varepsilon}_{xz} &= -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3xz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\varepsilon}_{yz} &= -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3yz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \end{aligned}$$

Estas componentes del tensor de deformación por unidad de volumen de inclusión pueden escribirse, de acuerdo con la simbología utilizada en la ec. (55), como:

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3x_i x_j - \delta_{ij} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{(5/2)}} \quad (\text{siendo } x_1=x, x_2=y, x_3=z) \quad (56)$$

Ahora ya estamos en condiciones de evaluar las componentes del tensor de tensiones por unidad de volumen de inclusión. Para ello utilizaremos la ecuación de Lamé,

ecuación (25), en la que previamente habremos sustituido los coeficientes μ y λ según las ecuaciones (26). La ecuación de Lamé queda en la forma

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left\{ (1-2\nu) \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \nu \text{tr} \varepsilon \right\} \quad (57)$$

Llevando las ecuaciones (56) a la ecuación (57) obtenemos

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{xx} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{2x^2 - y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\sigma}_{yy} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{-x^2 + 2y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\sigma}_{zz} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{-x^2 - y^2 + 2z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\sigma}_{xy} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3xy}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\sigma}_{xz} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3xz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\sigma}_{yz} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3yz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \end{aligned}$$

Al igual que hemos hecho con las componentes del tensor de deformación, las anteriores expresiones del tensor de tensiones por unidad de volumen de inclusión, podemos escribirlas conjuntamente como

$$\tilde{\sigma}_{ij}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3x_i x_j - \delta_{ij} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{(5/2)}} \quad (58)$$

donde hemos explicitado el punto arbitrario (x_1, x_2, x_3) en el que se define $\tilde{\sigma}_{ij}$.

La ecuación (58) permite calcular las componentes del tensor de tensiones por unidad de volumen de inclusión. Si aplicamos el principio de la superposición podemos hallar las componentes del tensor de tensiones, en un punto P cualquiera, como la integral de las componentes elementales anteriores extendida a todo el volumen de la inclusión arbitraria. No debemos olvidar que las coordenadas que aparecen en las ecuaciones (58) están referidas a la inclusión esférica elemental.

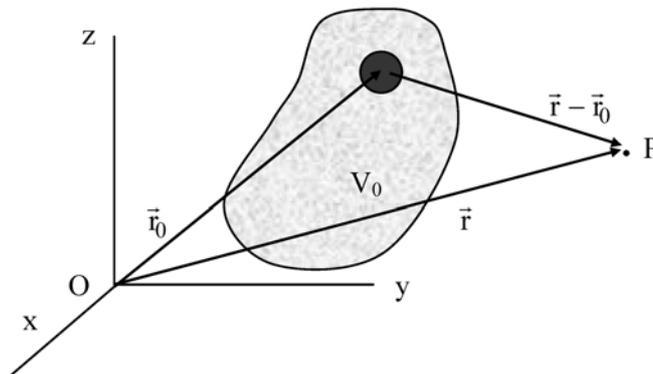


Figura 14

De acuerdo con la figura anterior, las componentes del tensor de tensiones en un punto P se obtendrán como

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 \quad (59)$$

donde \vec{r} es el vector posición del punto P.

Teniendo en cuenta el teorema de la divergencia, podemos transformar la integral de volumen de (59) en una integral de superficie extendida a toda la superficie de la frontera de la inclusión arbitraria. Para ello cualquier $\tilde{\sigma}_{ij}$ debe poder expresarse como la divergencia de cierto vector \vec{A}_{ij} . La elección de estos vectores no es única; nosotros vamos a considerar la que propone Bimberg:

$$\vec{A}_{ij} = -\frac{E \varepsilon_0}{8\pi(1-\nu)} \frac{x_i \vec{e}_j + x_j \vec{e}_i}{|\vec{r}|^3} \quad (60)$$

donde $\vec{e}_1 = \vec{i}$, $\vec{e}_2 = \vec{j}$, $\vec{e}_3 = \vec{k}$ y $|\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

(Nótese que si $i = j$ la ecuación (60) conduce a $\vec{A}_{ii} = -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{x_i \vec{e}_i}{|\vec{r}|^3}$)

El lector puede comprobar que los vectores dados por la ecuación (60) cumplen la igualdad

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) = \vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (61)$$

Importante: Debe tenerse presente que las derivadas implícitas en el operador divergencia afectan a las coordenadas de \vec{r}_0 .

De acuerdo con la expresión (61), podemos escribir la ecuación (59) como

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 = \iiint_{V_0} \vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 \quad (62)$$

A la hora de aplicar el teorema de la divergencia, hemos de contemplar separadamente los casos en los que el punto P, donde se quieren calcular las componentes del tensor de tensiones, esté dentro o fuera de la inclusión arbitraria de volumen V_0 .

Caso 1. El punto P está fuera de la inclusión arbitraria

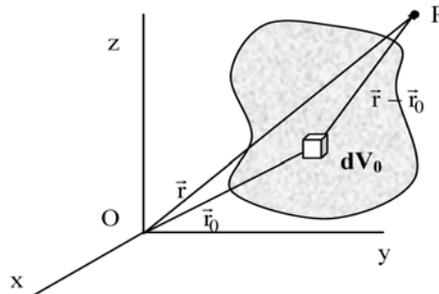


Figura 15

En este caso no existe ningún punto singular en la integral $\iiint_{V_0} \vec{\nabla} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0$. Por tanto, la aplicación directa del teorema de la divergencia conduce a

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0} \vec{\nabla} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 = \iint_{S_0} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{S}_0(\vec{r}_0) \quad (63)$$

donde S_0 es la superficie que delimita la inclusión arbitraria.

Así, por ejemplo, la componente σ_{xx} del tensor de tensiones sería, teniendo en cuenta la ecuación (60),

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(x, y, z) &= \iint_{S_0} \vec{A}_{xx}(x - x_0, y - y_0, z - z_0) d\vec{S}_0(x_0, y_0, z_0) = \\ &= \frac{-E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{(x - x_0) \vec{i} d\vec{S}_0}{((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)^{3/2}} \end{aligned}$$

Caso 2. El punto P está dentro de la inclusión arbitraria

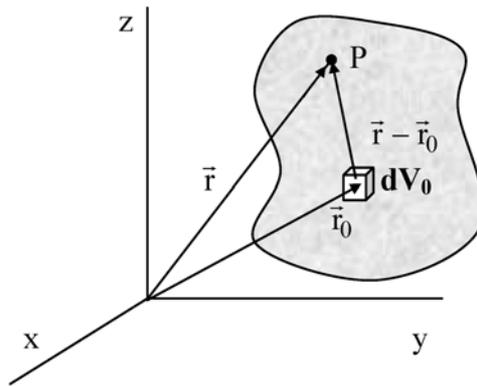


Figura 16

Cuando elemento de volumen dV_0 , que recorre todo el volumen V_0 , contenga al punto P, éste último constituirá un punto singular al hacer indeterminado el vector \vec{A}_{ij} . La singularidad se evita descomponiendo la integral de la expresión (59) en suma de dos integrales de volumen, de acuerdo con el siguiente esquema:

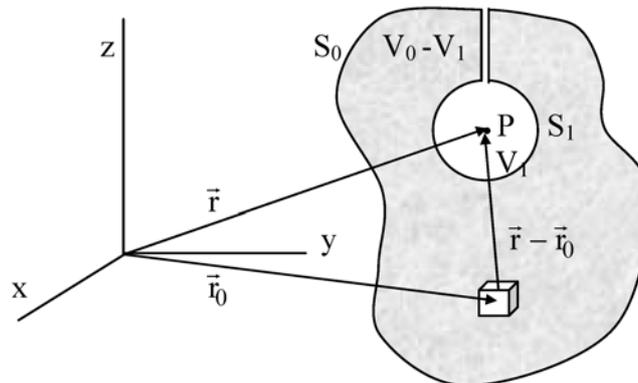


Figura 17

De acuerdo con la anterior figura, la inclusión arbitraria la suponemos como “suma” de una inclusión esférica centrada en P, de volumen V_1 y superficie S_1 más una segunda inclusión de volumen V_0-V_1 y de superficies S_0 (exterior) y S_1 (interior). Así, tendremos

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0-V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_{01} + \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 \quad (64)$$

Como el punto P es exterior al volumen V_0-V_1 , la primera integral de la ecuación (64) puede evaluarse igual que en el caso 1; es decir

$$\begin{aligned} \iiint_{V_0-V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_{01} &= \iiint_{V_0-V_1} \vec{\nabla} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_{01} = \\ &= \iint_{S_0} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{S}_o(\vec{r}_0) + \iint_{S_1} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_1) d\vec{S}_1(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (65)$$

En la expresión (65) \vec{r}_0 y \vec{r}_1 son vectores que caracterizan la posición de un elemento de superficie de S_0 y S_1 , respectivamente.

Llevando (65) a (64) tenemos

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iint_{S_0} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{S}_o(\vec{r}_0) + \iint_{S_1} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_1) d\vec{S}_1(\vec{r}_1) + \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 \quad (66)$$

La segunda y tercera integrales de la ecuación (66) pueden obtenerse analíticamente. Comencemos evaluando la segunda integral; es decir la integral de $\vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_1)$ sobre la superficie esférica S_1 . Para ello, en aras de una mayor simplicidad, hacemos coincidir el origen de coordenadas O con el punto P (centro de la superficie esférica S_1). De esta forma, $\vec{r} = (0,0,0)$.

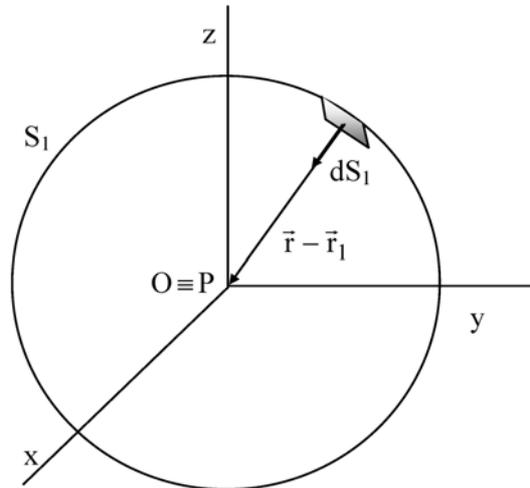


Figura 18

El vector $\vec{r} - \vec{r}_1$ tendrá módulo constante. Hacemos $|\vec{r} - \vec{r}_1| = a$ (radio de la esfera S_1). La simetría hace que sea idónea la utilización de coordenadas esféricas. Así, teniendo en cuenta que

$$x = a \sin\theta \cos\phi, \quad y = a \sin\theta \sin\phi, \quad z = a \cos\phi$$

$$d\bar{S}_1 = -a^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, \bar{e}_r$$

$$\bar{e}_r = \sin\theta \cos\phi \, \bar{i} + \sin\theta \sin\phi \, \bar{j} + \cos\theta \, \bar{k}$$

podemos obtener

$$\iint_{S_1} \bar{A}_{ij}(\bar{r} - \bar{r}_1) \, d\bar{S}_1(\bar{r}_1) = -\frac{E \varepsilon_0}{3(1-\nu)} \delta_{ij} \quad (67)$$

La evaluación de la tercera integral de (66), $\iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\bar{r} - \bar{r}_0) \, dV_1$, requiere la obtención previa de las componentes del tensor de tensiones, por unidad de volumen, para puntos interiores de la propia inclusión.

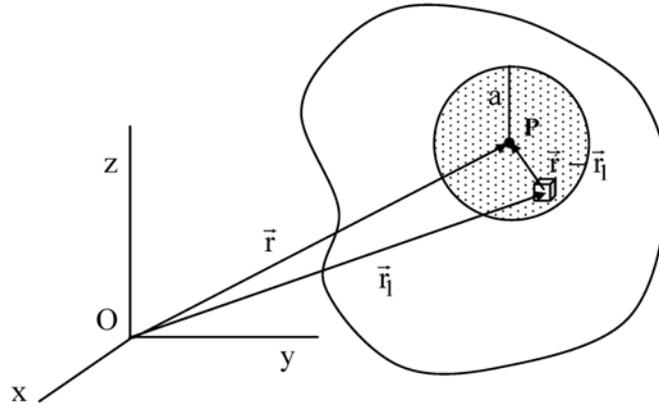


Figura 19

A partir de la ecuación (51.1), dividiendo por $(4/3) \pi a^3$, tenemos

$$\tilde{u}_r = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{(1-2\nu) \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \bar{r}$$

cuyas componentes cartesianas serán $\tilde{u}_{x_i} = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{(1-2\nu) \varepsilon_0}{2(1-\nu)} x_i \quad (68)$

A partir de (68), las componentes del tensor de deformación, $\tilde{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_{x_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_{x_j}}{\partial x_i} \right)$, serán

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{(1-2\nu) \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \quad (69)$$

Llevando (69) a la ecuación de Lamé (ecuación (25)) particularizada para deformaciones y tensiones por unidad de volumen,

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left\{ (1-2\nu) \tilde{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij} \nu \, tr \tilde{\varepsilon} \right\},$$

obtenemos

$$\tilde{\sigma}_{ij} = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{E \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \quad (70)$$

Podemos observar cómo $\tilde{\sigma}_{ij}$ es constante dentro de la inclusión. Por tanto, la integral buscada quedará

$$\begin{aligned} \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 &= -\frac{1}{\pi a^3} \frac{E \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \iiint_{V_1} dV_1 = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{E \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \frac{4}{3} \pi a^3 \Rightarrow \\ \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 &= -\frac{2E \varepsilon_0}{3(1-\nu)} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (71)$$

Llevando los resultados (67) y (71) a la expresión (66) obtenemos, para un punto interior a la inclusión arbitraria, la expresión

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iint_{S_0} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{S}_0(\vec{r}_0) - \frac{E \varepsilon_0}{1-\nu} \delta_{ij} \quad (72)$$

La ecuación (63) (válida para P fuera de la inclusión arbitraria) y la (72) (válida cuando P está dentro de la inclusión arbitraria) podemos escribirlas conjuntamente en la forma

$$\boxed{\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iint_{S_0} \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{S}_0(\vec{r}_0) - q \frac{E \varepsilon_0}{1-\nu} \delta_{ij}} \quad (73)$$

donde $q = 0,1$ (fuera/dentro de la inclusión arbitraria) y \vec{A}_{ij} está definido en la ecuación (60).

A partir de (73), teniendo en cuenta las expresiones de \vec{A}_{ij} podemos obtener la $\text{tr}\sigma$. En efecto,

$$\begin{aligned} \text{tr}\sigma(\vec{r}) &= -\frac{E\varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{(x-x_0)\vec{i} + (y-y_0)\vec{j} + (z-z_0)\vec{k}}{\left((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2\right)^{(3/2)}} d\vec{S}_0(\vec{r}_0) - q \frac{3E\varepsilon_0}{1-\nu} = \\ &= -\frac{E\varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{S}_0(\vec{r}_0) - q \frac{3E\varepsilon_0}{1-\nu} \end{aligned} \quad (74)$$

La integral que aparece en (74) es el ángulo sólido cambiado de signo, y vale 4π dentro de la inclusión y cero fuera de ella. Es decir,

$$\iint_{S_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{S}_0(\vec{r}_0) = -4\pi q \quad (q = 0,1 \text{ fuera/dentro de la inclusión arbitraria}) \quad (75)$$

De acuerdo con esto último, la ecuación (74) para la traza de σ queda finalmente

$$\boxed{\text{tr}\sigma(\vec{r}) = -\frac{2E\varepsilon_0}{1-\nu} q} \quad (76)$$

Llegado a este punto ya estamos en disposición de obtener una expresión para las componentes del tensor de deformación. En efecto, si en la ecuación (23) sustituimos las ecuaciones (73) y (76) obtendremos:

$$\boxed{\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = -\varepsilon_0 \delta_{ij} q + \frac{1+\nu}{E} \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0)} \quad (77)$$

(Téngase presente que $q = 0,1$ para puntos exteriores/interiores a la inclusión arbitraria y la integral doble se realiza sobre la superficie que delimita dicha inclusión arbitraria). El vector \bar{A}_{ij} está definido en la ecuación (60).

A partir de la ecuación (77) podemos calcular la traza del tensor de deformación. Así, teniendo en cuenta la identidad (75), se tiene

$$\text{tr}\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon_{xx}(\vec{r}) + \varepsilon_{yy}(\vec{r}) + \varepsilon_{zz}(\vec{r}) = -3\varepsilon_0 q - \frac{\varepsilon_0(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^3} d\bar{S}_0(\vec{r}_0) \Rightarrow$$

$$\boxed{\text{tr}\varepsilon(\vec{r}) = -\frac{2\varepsilon_0(1-2\nu)}{1-\nu} q} \quad (78)$$

donde puede observarse que la traza del tensor deformación, al igual que la del tensor de tensiones, se anula fuera de la inclusión.

Puede comprobarse que las ecuaciones (78) y (76), para las trazas de los tensores de deformación y de tensiones, respectivamente, cumplen la ecuación (24).

La ecuación (77) puede usarse tanto para el caso en que el punto cuántico tenga menor constante de red que la matriz (ε_0 será positivo), como en el caso contrario (lo cual implica un valor negativo de ε_0), de acuerdo con el criterio asumido para la definición del parámetro ε_0 en la sección 5.

La ecuación (77), excepto para geometrías muy simples, no tiene integración analítica. (un ejercicio simple e ilustrativo es la obtención de las ecuaciones (51.2), (52.2) y (52.3), válidas para un nanocrystal esférico, a partir de (77)). Por ello, en la práctica, debemos recurrir a la integración numérica. La discretización implícita en la integración numérica reemplaza la superficie continua por una superficie formada por cuadrados muy pequeños, cuyo vector superficie es paralelo a alguno de los ejes coordenados.

Hay que tener presente que la ecuación (77) la hemos obtenido para puntos \vec{r} dentro o fuera del punto cuántico, pero no para puntos exactamente en la superficie matemática que separa la inclusión de la matriz. Podemos hacer el cálculo en puntos separados una distancia muy pequeña de la superficie, pero nunca en la superficie. Esto, desde el punto de vista práctico, no supone ningún problema.

Un ejercicio interesante que proponemos es la integración numérica de la ecuación (77) para un punto cuántico esférico de radio R . El resultado que se obtiene coincidirá con los resultados que se derivan de las ecuaciones (51.2), (52.2) y (52.3). Esta comparación puede servir además para determinar la precisión del cálculo numérico al variar el grado de discretización, es decir, el lado de los pequeños cuadrados en que consideramos

descompuesta la superficie de integración. Finalmente, es recomendable reproducir algunos cálculos de la bibliografía reciente como, por ejemplo, los que podemos encontrar en las referencias [8,10].

Agradecimientos

Agradecemos el soporte financiero del proyecto UJI-Bancaixa P1-B2002-01 y de una beca MEC-FPU.

Bibliografía

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, (Wiley, Chichester, 1998).
- [2] L. Jacak, P. Hawrylak and A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998)
- [3] T. Chakraborty, *Quantum Dots* (Elsevier, Amsterdam, 1999)
- [4] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 3203.
- [5] John P. Loehr, *Physics of Strained Quantum Well Lasers*, (Kluwer, Boston 1998).
- [6] C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, and A. Zunger, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 2548.
- [7] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 5688.
- [8] J.H. Davies, *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 1358; J.R. Downes, D.A. Faux, and E.P. O'Reilly, *J. Appl. Phys.*, 81 (1997) 6700.
- [9] M. Tadic, F.M. Peeters, K.L. Janssens, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 5819.
- [10] M. Tadic, F.M. Peeters and K.L. Janssens *Phys. Rev. B* 65 (2002) 165333

Textos generales sobre teoría de la elasticidad

- L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1995)
- Ortiz Berrocal Luis, *Elasticidad*, (Mc CrawHill, Buenos Aires, 1998)
- Ajit K. Mal and Sarva Jit Singh, *Deformation of Elastic Solids* (Prentice Hall, New Jersey, 1991)
- Feynman Richard y Leighton Robert B., *Física* (volumen II) (Addison-Wesley Iberoamericana, Mexico, 1987)