УДК 539.32

Е.А. Митюшов, Н.Ю. Одинцова, С.А. Берестова

**Уральский государственный технический университет –
Уральский политехнический институт**

ФОРМАЛЬНАЯ СХЕМА РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНЫХ УПРУГИХ СВОЙСТВ ТЕКСТУРИРОВАННЫХ МЕТАЛЛОВ

Abstract

A general scheme for the solution of problem of averaging elastic properties of textured polycrystals is suggested which is based on the algebraic methods of description of elastic properties.

В предположении, что ориентация зерен в поликристалле равновероятна и поликристалл, как любое изотропное тело, характеризуется двумя упругими константами, задача об определении эффективных упругих свойств была решена сначала Фойгтом [1] путем усреднения матрицы упругих модулей кристалла, а затем Ройсом [2] из усреднения матрицы коэффициентов податливости. Более детальное рассмотрение, выполненное Хиллом [3], показало, что эти усреднения соответствуют предположениям об однородности деформаций в поликристалле в первом случае, и однородности напряжений – во втором, а получаемые значения объемного модуля и модуля сдвига поликристалла дают верхнюю и нижнюю вариационные границы для его эффективных свойств. Им же было предложено определять эффективные упругие характеристики как среднее арифметическое значений, получаемых в приближениях Фойгта и Ройса. Дальнейшее исследование проходило по пути отыскания эффективных упругих характеристик квазиизотропных поликристаллов в рамках тех или иных упрощающих гипотез.

Простой метод усреднения на базе равенства определителей матриц модулей упругости монокристалла и поликристалла был предложен Александровым [4], независимо от него Пересадой [5]. В дальнейшем Александровым и Айзенбергом [6], на примере тензорных свойств второго ранга, была отмечена связь этого способа усреднения с усреднением логарифмов собственных значений соответствующих матриц. Это обстоятельство имело в дальнейшем определяющее значение для развития теории.

Значительно более сложной, чем вычисление упругих свойств квазиизотропных поликристаллов, является задача их вычисления, когда имеется преимущественная ориентация зерен в пространстве – текстура, и в силу этого поликристалл начинает вести себя как анизотропное тело. Методы вычисления упругих характеристик текстурированных поликристаллов развивались по мере совершенствования экспериментальных методов исследования текстуры и ее количественного описания.

Методы количественного текстурного анализа для расчета эффективных упругих свойств поликристаллов в приближениях Фойгта, Ройса и Хилла применялись различными авторами [7,8]. Попытка обобщения метода расчета эффективных упругих характеристик Александрова – Пересады на текстурированные материалы была предпринята Моравиком [9], Матхизом и Гамбертом [10]. Моравиком был предложен алгоритм решения, основанный на свойствах логарифмической тензорной функции, который был реализован им только в случае квазиизотропного материала. Матхизом и

Гамбертом дана численная реализация этого алгоритма на примере некоторых текстурированных поликристаллов, не допускающая аналитической формы записи окончательного решения.

В предлагаемой работе дается аналитическое обобщение метода Александрова – Пересады на примере текстурированных поликристаллов, основанное на алгебраических методах описания их упругих свойств.

Обобщенный закон Гука как линейное преобразование

Как было показано Рыхлевским [11], обобщенный закон Гука может рассматриваться как линейное преобразование пространства симметричных тензоров второго ранга в себя:

$$\boldsymbol{\sigma} = C\boldsymbol{\varepsilon}, \qquad \text{или} \qquad \boldsymbol{\varepsilon} = S\boldsymbol{\sigma},$$

здесь C – линейный оператор упругости, $S = C^{-1}$ – обратный оператор.

В шестимерном пространстве симметричных тензоров особую роль имеют тензоры, удовлетворяющие уравнениям

$$C\,\boldsymbol{\omega} = \lambda\,\boldsymbol{\omega}, \quad \text{или} \quad S\,\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{\lambda}\,\boldsymbol{\omega}.$$

Как и в векторных пространствах, в пространстве симметричных тензоров второго ранга существует такой ортонормированный базис $\boldsymbol{\omega}^{I}, \boldsymbol{\omega}^{II}, \ldots, \boldsymbol{\omega}^{VI}$

$$\boldsymbol{\omega}^{K} \cdot \boldsymbol{\omega}^{L} = \omega_{ij}^{K}\omega_{ij}^{L} = \delta_{KL} = \begin{cases} 0 & K \neq L \\ 1 & K = L \end{cases}, \tag{1}$$

в котором тензоры напряжений и деформаций представимы в виде

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_1\,\boldsymbol{\omega}^{I} + \sigma_2\,\boldsymbol{\omega}^{II} + \ldots + \sigma_6\,\boldsymbol{\omega}^{VI},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_1\,\boldsymbol{\omega}^{I} + \varepsilon_2\,\boldsymbol{\omega}^{II} + \ldots + \varepsilon_6\,\boldsymbol{\omega}^{VI}.$$

Элементы тензорного базиса $\boldsymbol{\omega}^{K}\ (K = I, II, \ldots, VI)$ соответствуют различным напряженно-деформированным состояниям (собственные упругие состояния).

Тензор четвертого ранга модулей упругости $\boldsymbol{c}$, поставленный в соответствие линейному оператору C, записывается следующим спектральным разложением:

$$\boldsymbol{c} = \lambda_1\,\boldsymbol{\omega}^{I} \otimes \boldsymbol{\omega}^{I} + \lambda_2\,\boldsymbol{\omega}^{II} \otimes \boldsymbol{\omega}^{II} + \ldots + \lambda_6\,\boldsymbol{\omega}^{VI} \otimes \boldsymbol{\omega}^{VI}, \tag{2}$$

аналогично для тензора коэффициентов податливости $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{c}^{-1}$

$$\boldsymbol{s} = (\lambda_1)^{-1}\,\boldsymbol{\omega}^{I} \otimes \boldsymbol{\omega}^{I} + (\lambda_2)^{-1}\,\boldsymbol{\omega}^{II} \otimes \boldsymbol{\omega}^{II} + \ldots + (\lambda_6)^{-1}\,\boldsymbol{\omega}^{VI} \otimes \boldsymbol{\omega}^{VI}, \tag{3}$$

здесь

$$(\boldsymbol{\omega}^{K} \otimes \boldsymbol{\omega}^{K})_{ijmn} = \omega_{ij}^{K}\,\omega_{mn}^{K}.$$

Параметры $\lambda_K\ (K = 1, 2, \ldots, 6)$ есть собственные значения линейного оператора C. Эти параметры определяются модулями упругости анизотропного тела и названы Рыхлевским истинными модулями жесткости, а с учетом комментария, данного в работе [11], их уместно назвать модулями Кельвина – Рыхлевского. Модули Кельвина – Рыхлевского являются корнями уравнения шестой степени

$$\det(\tilde{c}_{KL} - \lambda\delta_{KL}) = 0 \quad (K, L = 1, \ldots, 6),$$

где

$$\tilde{c}_{KL} = \boldsymbol{\omega}^{K} \cdot c \cdot \boldsymbol{\omega}^{L}.$$

Не следует путать величины $\tilde{c}_{KL}$ [12] с элементами матрицы модулей упругости c_{kl} в обозначениях Фойгта.

Формальная схема расчета эффективных упругих свойств текстурированных поликристаллов

В рамках модели Фойгта и модели Ройса эффективные упругие характеристики находятся путем осреднения тензоров модулей упругости и коэффициентов податливости по множеству ориентаций зерен в поликристалле:

$$\boldsymbol{c}^V = \langle \boldsymbol{c} \rangle, \qquad \boldsymbol{s}^R = \langle \boldsymbol{s} \rangle$$

или с учетом разложений (2) и (3):

$$\boldsymbol{c}^V = \lambda_1 \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^I \otimes \omega^I\right) + \lambda_2 \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{II} \otimes \omega^{II}\right) + \ldots + \lambda_6 \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{VI} \otimes \omega^{VI}\right), \tag{4}$$

$$\boldsymbol{s}^R = \left(\lambda_1\right)^{-1} \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^I \otimes \omega^I\right) + \left(\lambda_2\right)^{-1} \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{II} \otimes \omega^{II}\right) + \ldots + \left(\lambda_6\right)^{-1} \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{VI} \otimes \omega^{VI}\right).$$

Здесь

$$\left(\langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\boldsymbol{\omega}^K \otimes \boldsymbol{\omega}^K\right)\right)_{ijmn} = \left\langle Q_{ip} Q_{jq} Q_{mr} Q_{ns} \right\rangle \omega^K_{pq} \omega^K_{rs},$$

где Q_{ip} – элементы матрицы перехода при повороте кристаллографической системы координат случайным образом ориентированного зерна до совмещения ее с осями лабораторной системы координат, $\langle ... \rangle$ – операция осреднения по множеству ориентаций зерен в поликристалле, λ_K – модули Кельвина – Рыхлевского зерен.

С другой стороны, тензоры $\boldsymbol{c}^{\boldsymbol{V}}$ и $\boldsymbol{s}^{\boldsymbol{R}}$ могут быть представлены спектральными разложениями по элементам тензорного базиса макросимметрии $\tilde{\boldsymbol{\omega}}^{\boldsymbol{K}}$:

$$\boldsymbol{c}^V = \lambda_1^V \,\tilde{\omega}^I \otimes \tilde{\omega}^I + \lambda_2^V \,\tilde{\omega}^{II} \otimes \tilde{\omega}^{II} + \ldots + \lambda_6^V \,\tilde{\omega}^{VI} \otimes \tilde{\omega}^{VI}, \tag{5}$$

$$\boldsymbol{s}^R = \left(\lambda^R{}_1\right)^{-1} \tilde{\omega}^I \otimes \tilde{\omega}^I + \left(\lambda^R{}_2\right)^{-1} \tilde{\omega}^{II} \otimes \tilde{\omega}^{II} + \ldots + \left(\lambda^R{}_6\right)^{-1} \tilde{\omega}^{VI} \otimes \tilde{\omega}^{VI}.$$

Сравнивая разложения (4) и (5) и используя условие ортогональности (1), находим модули Кельвина – Рыхлевского в приближении Фойгта:

$$\lambda_K^V = \lambda_1 \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^I \otimes \omega^I\right) +$$

$$+ \lambda_2 \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{II} \otimes \omega^{II}\right) + \ldots + \lambda_6 \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{VI} \otimes \omega^{VI}\right).$$

Аналогично в приближении Ройса

$$\left(\lambda_K^R\right)^{-1} = \left(\lambda_1\right)^{-1} \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^I \otimes \omega^I\right) +$$

$$+ \left(\lambda_2\right)^{-1} \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{II} \otimes \omega^{II}\right) + \ldots + \left(\lambda_6\right)^{-1} \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^{VI} \otimes \omega^{VI}\right),$$

или

$$\lambda_K^V = p_{KI} \lambda_1 + p_{KII} \lambda_2 + \ldots + p_{KVI} \lambda_6,$$

$$\left(\lambda_K^R\right)^{-1} = p_{KI} \left(\lambda_1\right)^{-1} + p_{KII} \left(\lambda_2\right)^{-1} + \ldots + p_{KVI} \left(\lambda_6\right)^{-1},$$

где

$$p_{KL} = \left(\tilde{\boldsymbol{\omega}}^K \otimes \tilde{\boldsymbol{\omega}}^K\right) \cdot \langle \mathbf{Q} \rangle \cdot \left(\omega^L \otimes \omega^L\right),$$

при этом $$p_{KI}+p_{KII}+...+p_{KVI}=1.$$

Таким образом, модули Кельвина – Рыхлевского в приближениях Фойгта и Ройса находятся как частный случай взвешенного степенного среднего значения соответствующих модулей кристаллитов,

$$\lambda_K^{(\alpha)}=\left(p_{KI}\lambda_1^{\alpha}+p_{KII}\lambda_2^{\alpha}+...+p_{KVI}\lambda_6^{\alpha}\right)^{1/\alpha}.$$

При $\alpha=1$ имеем средние значения, вычисленные по схеме Фойгта, при $\alpha=-1$ – средние значения по схеме Ройса. При $\alpha\to 0$ степенное среднее стремится к геометрическому среднему,

$$\lambda_K^{(0)}=\lambda_1^{p_{KI}}\lambda_2^{p_{KII}}\lambda_3^{p_{KIII}}\lambda_4^{p_{KIV}}\lambda_5^{p_{KV}}\lambda_6^{p_{KVI}}, \tag{6}$$

что является обобщением метода Александрова – Пересады на текстурированные материалы.

Соотношение (6) с формальной точки зрения исчерпывающим образом решает задачу об усреднении упругих характеристик текстурированных материалов. Переход к тензорным обозначениям осуществляется на основании формул (2) и (3).

Модули упругости текстурированных поликристаллов кубической симметрии

Элементы базиса (1) микро- и макросимметрии соответствуют одному напряженному состоянию всестороннего сжатия и пяти напряженным состояниям чистых сдвигов. Базис макросимметрии не зависит от способа усреднения и определяется лишь параметрами текстуры поликристалла [13]:

$$\Delta_i=\left\langle Q_{i1}^2Q_{i2}^2+Q_{i2}^2Q_{i3}^2+Q_{i3}^2Q_{i1}^2\right\rangle \quad (i=1,2,3).$$

Модули Кельвина – Рыхлевского кубического кристалла выражаются через модули упругости в матричных обозначениях Фойгта равенствами

$$\lambda_1=c_{11}+2c_{12}=3K,\qquad \lambda_2=\lambda_3=c_{11}-c_{12},\quad \lambda_4=\lambda_5=\lambda_6=2c_{44},$$

где K - объемный модуль упругости.

Модули Кельвина – Рыхлевского поликристалла определяются на основании равенства (6):

$$\lambda_1^{(0)}=\lambda_1,$$

$$\lambda_{2,3}^{(0)}=\lambda_2^{\left(1-3\Delta_1+\Delta_2-\Delta_3+2p_{2,3}\left(\Delta_2-\Delta_3\right)\right)}\lambda_4^{\left(3\Delta_1-\Delta_2+\Delta_3-2p_{2,3}\left(\Delta_2-\Delta_3\right)\right)},$$

$$\lambda_4^{(0)}=\lambda_2^{\left(2\Delta_2+2\Delta_3-2\Delta_1\right)}\lambda_4^{\left(1-\left(2\Delta_2+2\Delta_3-2\Delta_1\right)\right)},$$

$$\lambda_5^{(0)}=\lambda_2^{\left(2\Delta_3+2\Delta_1-2\Delta_2\right)}\lambda_4^{\left(1-\left(2\Delta_3+2\Delta_1-2\Delta_2\right)\right)},$$

$$\lambda_6^{(0)}=\lambda_2^{\left(2\Delta_1+2\Delta_2-2\Delta_3\right)}\lambda_4^{\left(1-\left(2\Delta_1+2\Delta_2-2\Delta_3\right)\right)},$$

где $p_{2,3}=k\pm\sqrt{k^2+k+1}$, $k=\dfrac{\Delta_1-\Delta_2}{\Delta_2-\Delta_3}$.

Некоторые результаты, вытекающие из этих соотношений, были получены ранее другими методами. Так, решение Александрова [4] для квазиизотропного материала получается при $\Delta_1=\Delta_2=\Delta_3=\dfrac{1}{5}$, $k=0$. Для сдвиговых модулей ортотропного поликристалла обобщение этого решения получено в работе [14]. В случае аксиальных текстур решение приведено в работе [15], а для частного случая при $\Delta_1 = \Delta_2 = \frac{1}{4}$, $\Delta_3 = 0$ это решение является точным [16].

Библиографический список

1. Voight W. Lehrbuch der Kristallphusik. − Berlin: Teubner, 1928. − 625p.
2. Reuss A. Berechnund der Fliebgrenze von Misch-kristallen fut Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // Z. angew. Math. und Mech. − 1929. − Bd. 9. − № 1. − P. 49-54.
3. Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate // Proc. Phys. Soc. − 1952. − A 65. − № 389. − P. 349-356.
4. Александров К.С. Средние значения тензорных величин // ДАН СССР. − 1965. − Т.164. − № 4. − С. 800-804.
5. Peresada G.I. On the calculation of elastic moduli of polycrystalline systems from single crystal data // Phys. stat. sol. − 1971. − № 4. − P. K23-K26.
6. Александров К.С., Айзенберг Л.А. Способ вычисления физических констант поликристаллических материалов // ДАН СССР. − 1966. − Т. 167. − № 5. − С. 1028-1031.
7. Александров К.С., Талашкевич И.П. Упругие константы аксиальных текстур в приближении Фойгта – Ройсса – Хилла // ПМТФ. − 1968. − № 2. − С. 48-53.
8. Kneer G. Űber die Berechnung der Elastizitätsmoden vielkristalliner Aggregate mit Textur // Phys. Stat. Sol. − 1965. − Vol. 3. − № 9. − P. K825-838.
9. Morawiec A. Calculation of polycrystal elastic constants // J. Appl. Cryst. − 1995. − Vol.28. − P. 254-266.
10. Matthies S., Humbert M. The Realization of the Concept of a Geometric Mean for Calculating Physical Constants of Polycrystalline materials // Phys. stat. sol. (b). − 1993. − Vol. 177. − P. K47-K50.
11. Рыхлевский Я. О законе Гука // ПММ. − 1984. − Т. 48. − Вып. 3. − С. 420-435.
12. Mehrabadi M., Cowin C. Eigentensors of linear anisotropic elastic materials // Mech. Appl. Math. − 1990. − Vol. 43. − Pt. 1. − P. 15-41.
13. Митюшов Е.А., Гельд П.В., Адамеску Р.А. Обобщенная проводимость и упругость макрооднородных гетерогенных материалов. − М.: Металлургия, 1992. − 145 с.
14. Митюшова Л.Л. Упругая и пластическая анизотропия текстурированных поликристаллов кубической сингонии: Дис. … канд. физ.-мат. наук / УПИ им. С.М. Кирова. Свердловск, 1983.
15. Берестова С.А. Упругость и пластичность микронеоднородных сред с однородным модулем всестороннего сжатия: Дис. … канд. физ.-мат. наук / УГТУ. Екатеринбург, 1998.
16. Берестова С.А., Митюшов Е.А. Об одном точном решении // ПММ. − 1999. − Т. 63. − Вып. 1. − С. 524-527.

Получено 27.06.2003