

УПРУГИЕ МОДУЛИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Б. М. Даринский, Т. Д. Шермергор

(Воронеж)

Усредненные упругие постоянные поликристалла могут быть найдены усреднением напряжений (метод Фойгта [1]) или деформаций (метод Ройсса [2]). Сравнение усредненных по Фойгту и Ройссу упругих модулей с их экспериментальными значениями показывает, что в первом случае усреднение дает завышенные, а во втором — заниженные значения модулей [3]. Причина этого заключается в том, что непосредственное усреднение модулей по произвольным ориентировкам кристаллитов не учитывает корреляционных эффектов между ними. Учет корреляций между зернами поликристалла может быть проведен в обоих схемах расчета.

1. В схеме Фойгта усредняются напряжения. Поэтому для расчета корреляционных эффектов используется уравнение равновесия

$$\sigma_{ik,k} + f_i \equiv 0, \quad \sigma_{ik,k} \equiv \nabla_k \sigma_{ik} \equiv \partial \sigma_{ik} / \partial x_k \quad (1.1)$$

Здесь по дважды встречающимся индексам предполагается суммирование. При помощи закона Гука

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iklm} e_{lm} \quad (1.2)$$

уравнения равновесия могут быть записаны в виде

$$\nabla_k \lambda_{iklm} u_{l,m} + f_i = 0, \quad e_{lm} = 1/2 (u_{l,m} + u_{m,l}) \quad (1.3)$$

где e_{lm} — тензор деформации, u_l — вектор смещения, а $\lambda_{iklm} = \lambda_{ikml} = \lambda_{lmik}$ — тензор упругих постоянных.

Таким образом, в схеме Фойгта задача сводится к усреднению и расчету корреляционных добавок к тензору упругих постоянных. Для усреднения по Ройссу необходимо написать дифференциальное уравнение для тензора деформаций. Таким уравнением является определение [4] тензора несовместности η_{pq}

$$\varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} e_{rs,mn} + \eta_{pq} = 0 \quad (1.4)$$

Здесь ε_{prm} — единичный антисимметричный тензор. В случае идеальной среды, в которой отсутствуют источники внутренних напряжений, $\eta_{pq} = 0$ и (1.4) вырождается в условие совместности.

При помощи закона Гука

$$e_{rs} = s_{rsik} \sigma_{ik} \quad (1.5)$$

уравнение (1.4) переписывается в виде

$$\varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} \nabla_m \nabla_n s_{rsik} \sigma_{ik} + \eta_{pq} = 0 \quad (1.6)$$

Таким образом, в схеме Ройсса задача сводится к усреднению и расчету корреляционных добавок к тензору упругих податливостей s_{rsik} .

Расчет упругих модулей поликристалла кубической структуры в схеме Фойгта с учетом парных корреляций между кристаллитами проведен в работе [5]. Следующие приближения расчета должны включать в себя учет корреляций более высокого порядка — тройных, четверных и т. д. Однако такой расчет требует проведения весьма громоздких выкладок и усложняется отсутствием достаточных экспериментальных данных для выбора тринарной и тетрарной корреляционных функций.

По-видимому, более эффективным является другой путь, состоящий во взаимном сближении усредненных по Фойгту и Ройссу значений упругих модулей путем учета корреляционных эффектов в обеих схемах расчета. Так как первые шаги приближения являются наиболее легкими, такой подход позволяет встречными шагами сократить интервал рассчитанных разными методами значений упругих модулей поликристалла.

2. Ниже рассчитывается влияние парных корреляций между зернами поликристалла кубической структуры в схеме Ройсса. Будем исходить из уравнения (1.6).

Для среды кубической структуры тензор упругих податливостей имеет вид

$$s_{rsik} = s_1 \delta_{rs} \delta_{ik} + s_2 (\delta_{ri} \delta_{sk} + \delta_{rk} \delta_{si}) + s_3 \sum_i \delta_{rj} \delta_{sj} \delta_{ij} \delta_{kj} \quad (2.1)$$

Представим тензор s_{rsik} в виде среднего по поликристаллу значения $\langle s_{rsik} \rangle$ и флуктуационной добавки $\delta s_{rsik}(\mathbf{r})$. Тогда, считая, что текстура отсутствует, получим

$$\langle s_{rsik} \rangle = s_1 \delta_{rs} \delta_{ik} + s_2 (\delta_{ri} \delta_{sk} + \delta_{rk} \delta_{si}) \quad (2.2)$$

$$\delta s_{rsik} = s_3 \sum_j \alpha_{rj} \alpha_{sj} \alpha_{ij} \alpha_{kj} - \frac{1}{5} s_3 (\delta_{rs} \delta_{ik} + \delta_{ri} \delta_{sk} + \delta_{rk} \delta_{si}) \quad (2.3)$$

где α_{ij} — направляющие косинусы между кристаллографическими осями и осями

координат. Постоянные s_i , s_i° и двухиндексные постоянные s_{ij} связаны соотношениями

$$s_1 = s_1^\circ + 1/5 s_3, \quad s_2 = s_2^\circ + 1/5 s_3 \quad (2.4)$$

$$s_{11} = s_1^\circ + 2s_2^\circ + s_3, \quad s_{12} = s_1^\circ, \quad s_{44} = 4s_2^\circ \quad (2.5)$$

Подставим значения тензора s_{rsik} в уравнение (1.6). Это дает

$$s_1 \varepsilon_{prm} \varepsilon_{qrn} \sigma_{ii, mn} + 2s_2 \varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} \sigma_{rs, mn} = f_{pq} \quad (2.6)$$

$$f_{pq} \equiv -\eta_{pq} - \varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} \nabla_m \nabla_n \delta_{rsik} \sigma_{ik} \quad (2.7)$$

Подставим в уравнение (2.6) соотношение

$$\varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} = \begin{vmatrix} \delta_{pq} & \delta_{ps} & \delta_{pn} \\ \delta_{rq} & \delta_{rs} & \delta_{rn} \\ \delta_{mq} & \delta_{ms} & \delta_{mn} \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

и используем уравнение движения (1.1). Тогда получим

$$-(s_1 + 2s_2) \sigma_{ll, pq} - 2s_2 \sigma_{pq, nn} + (s_1 + 2s_2) \delta_{pq} \sigma_{ii, nn} = \Phi_{pq}; \quad \Phi_{pq} \equiv f_{pq} - 2s_2 \delta_{pq} f_{i,i} \quad (2.9)$$

Легко видеть, что в случае $\Phi \equiv 0$ уравнение (2.9) является однородным уравнением Бельтрами. Действительно, полагая, например, $p = q = 1$ и учитывая, что

$$2s_2 / (s_1 + 2s_2) = 1 + \nu \quad (2.10)$$

где ν — коэффициент Пуассона, найдем

$$(1 + \nu) \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} + \Delta \sigma_x + \Delta \sigma = 0 \quad (\sigma \equiv \sigma_{ii}; \quad \sigma_x \equiv \sigma_{xx}) \quad (2.11)$$

Аналогично получают остальные уравнения Бельтрами. Суммируя их, убеждаемся, что $\Delta \sigma = 0$ и может быть опущено, что приводит к обычной форме уравнений Бельтрами.

Определим теперь регулярный L_{pqik} и случайный R_{pqik} операторы равенствами

$$L_{pqik} = (s_1 + 2s_2) \delta_{ik} (\nabla^2 \delta_{pq} - \nabla_p \nabla_q) - 2s_2 \nabla^2 \delta_{ip} \delta_{kq} \quad (2.12)$$

$$R_{pqik} = -\varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} \nabla_m \nabla_n \delta_{rsik} \quad (2.13)$$

Тогда уравнение (2.9) может быть записано в виде

$$L_{pqik} \sigma_{ik} = -\chi_{pq} + R_{pqik} \sigma_{ik} \quad (2.14)$$

Функция χ_{pq} является внешним источником поля и связана с η_{pq} и f_i соотношением

$$\chi_{pq} = \eta_{pq} + 2s_2 \delta_{pq} f_{i,i} \quad (2.15)$$

3. Для расчета корреляционной добавки к тензору $\langle s_{pqrs} \rangle$ необходимо предварительно рассчитать тензор Грина g_{iklm} оператора L_{pqik} . Определим его равенством

$$L_{pqik} g_{iklm} = \delta_{pl} \delta_{qm} \delta(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

Введенный таким образом тензор Грина позволяет записать решение неоднородного уравнения Бельтрами

$$L_{pqik} \sigma_{ik} = \Phi_{pq} \quad (3.2)$$

в виде свертки

$$\sigma_{ik} = g_{iklm} * \Phi_{lm} \quad (3.3)$$

В последнем можно убедиться при помощи цепочки равенств

$$L_{pqik} \sigma_{ik} = L_{pqik} g_{iklm} * \Phi_{lm} = \delta_{pq} \delta_{lm} \delta(\mathbf{r}) * \Phi_{lm} = \Phi_{pq} \quad (3.4)$$

где использовано свойство δ -функции: $\delta * f = f$.

Для вычисления g_{iklm} воспользуемся интегральным преобразованием Фурье

$$G(\mathbf{k}) = \int g(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV \quad (3.5)$$

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int G(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV_{\mathbf{k}} \quad (3.6)$$

Тогда, подставляя в (3.1) явное значение оператора L_{pqik} , согласно (2.12), получим

$$(s_1 + 2s_2) (k_p k_q - k^2 \delta_{pq}) G_{llmn} + 2s_2 k^2 G_{pqmn} = \delta_{mp} \delta_{nq} \quad (3.7)$$

Умножив обе части равенства на δ_{pq} , найдем

$$G_{llmn} = -\frac{1}{k^2} \frac{\delta_{mn}}{2(s_1 + s_2)} \quad (3.8)$$

что после подстановки в (3.7) дает

$$G_{pqmn} = \frac{1}{2s_2 k^2} \delta_{mp} \delta_{nq} - \frac{s_1 + 2s_2}{4s_2(s_1 + s_2)} \frac{\delta_{mn}}{k^2} (\delta_{pq} - n_p n_q) \left(n_p \equiv \frac{k_p}{k} \right) \quad (3.9)$$

Переход от изображения к оригиналу может быть сделан при помощи (3.6) и интеграла

$$\frac{1}{\pi^2} \int k^{-4} k_p k_q e^{ikr} dV_k = r_{,pq} \quad (3.10)$$

Это дает

$$8\pi g_{pqmn} = \frac{1}{2s_2} \delta_{mp} \delta_{nq} r_{,ii} - \frac{s_1 + 2s_2}{4s_2(s_1 + s_2)} \delta_{mn} (r_{,ii} \delta_{pq} - r_{,pq}) \quad (3.11)$$

Отсюда видно, что функция Грина, как и требуется, стремится к нулю на бесконечности.

4. Представляя напряжение σ_{ik} в поликристалле в виде регулярного значения $\langle \sigma_{ik} \rangle$ и флуктуационной добавки $\delta\sigma_{ik}$, можно показать, что в приближении учета лишь парных корреляций между кристаллитами из неоднородного уравнения (2.14) вытекает следующее уравнение для регулярной части тензора напряжений [6]:

$$[L_{pqik} - \langle R_{pqrs} M_{rsuv} R_{uvik} \rangle] \langle \sigma_{ik} \rangle = -\chi_{pq} \quad (4.1)$$

Здесь через M_{rsuv} обозначен интегральный оператор Грина, связанный с функцией Грина соотношением

$$M_{rsuv} \sigma_{uv} = g_{rsuv} * \sigma_{uv} \quad (4.2)$$

Первое слагаемое в левой части (4.1) дает обычное усреднение по Ройссу, тогда как второе учитывает корреляционные эффекты.

Используя соотношение (2.15), перейдем от оператора L_{pqik} к исходному оператору $\varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} \nabla_m \nabla_n$. Кроме того, будем считать, что регулярная часть σ_{ik} меняется слабо на расстояниях, для которых корреляционные эффекты еще имеют место. Это позволяет записать (4.1) в виде

$$\varepsilon_{prm} \varepsilon_{qsn} \nabla_m \nabla_n S_{rsik} \langle \sigma_{ik} \rangle = -\eta_{pq} \quad (4.3)$$

где эффективный тензор упругих податливостей равен

$$S_{rsik} = \langle s_{rsik} \rangle - \langle \delta s_{rsmn} g_{mnab} * \varepsilon_{aju} \varepsilon_{blv} \nabla_u \nabla_v \delta s_{jlik} \rangle. \quad (4.4)$$

Определим бинарную корреляционную функцию равенством

$$b_{jlik}^{rsmn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \delta s_{rsmn}(\mathbf{r}) \delta s_{jlik}(\mathbf{r}') \rangle \quad (4.5)$$

Тогда корреляционная добавка может быть записана в виде

$$\begin{aligned} S_{rsik} - \langle s_{rsik} \rangle &= - \int g_{mnab,uv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') b_{jlik}^{rsmn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' \varepsilon_{aju} \varepsilon_{blv} = \\ &= \frac{1}{8\pi^3} \varepsilon_{aju} \varepsilon_{blv} \int G_{mnab}(\mathbf{k}) k_u k_v B_{jlik}^{rsmn}(\mathbf{k}) dV_k \end{aligned} \quad (4.6)$$

Подставим сюда явное значение трансформанты Фурье тензорной функции Грина (3.9), и учтем, что для кубической симметрии

$$b_{jlik}^{rsmn}{}_{mn} = 0$$

Получим

$$S_{rsik} = \langle s_{rsik} \rangle - \frac{1}{6s_2} \left[1 + \frac{4}{5} \frac{2s_{12} + 3s_{11} + s_{44}}{12s_{12} + 8s_{11} + s_{44}} \right] A_{rsik} \quad (4.7)$$

Здесь через A_{rsik} обозначен автокорреляционный тензор

$$A_{rsik} = b_{mnik}^{rsmn}(0) = \frac{3}{2} s_2 s_3^2 D_{rsik}, \quad D_{rsik} \equiv \delta_{ri} \delta_{sk} + \delta_{rk} \delta_{si} - \frac{2}{3} \delta_{rs} \delta_{ik} \quad (4.8)$$

Отсюда следует, что корреляционная добавка к модулю всестороннего сжатия K равна нулю. Для эффективного модуля сдвига μ^* получаем следующее выражение:

$$\frac{1}{\mu_R^*} = \frac{1}{\mu_R} \left\{ 1 - \frac{8}{25} \mu_R^2 \left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{44} \right)^2 \left[1 + \frac{4}{5} \frac{2s_{12} + 3s_{11} + s_{44}}{12s_{12} + 8s_{11} + s_{44}} \right] \right\} \quad (4.9)$$

где $1/\mu_R$ — значение усредненного по Ройссу обратного модуля сдвига без учета корреляционных эффектов:

$$1/\mu_R = 1/5 [4(s_{11} - s_{12}) + 3s_{44}] \quad (4.10)$$

Приведем для сопоставления результаты расчета корреляционной добавки в схеме Фойгта [5]

$$\mu_V^* = \mu_V \left\{ 1 - \frac{(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})^2}{25\mu_V^2} \left[1 - \frac{2}{5} \frac{3c_{12} + 2c_{11} + c_{44}}{3c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}} \right] \right\} \quad (4.11)$$

Здесь значение усредненного модуля μ_V без учета корреляций равно

$$\mu_V = 1/5 (c_{11} - c_{12} + 3c_{44}) \quad (4.12)$$

Приведем в качестве примера численные данные усредненных модулей сдвига с учетом и без учета корреляционных добавок

| Металл | μ_V | μ_V^* | μ_R^* | $\mu_R, 10^{11} \text{ дн/см}^2$ | $\Delta\mu_V/2\mu_V$ | $\Delta\mu_R/2\mu_R, \%$ | μ (эксп) |
|--------|---------|-----------|-----------|----------------------------------|----------------------|--------------------------|--------------|
| Cu | 5.46 | 4.91 | 4.80 | 4.0 | 10 | 10 | 4.83 |
| Ag | 3.38 | 3.06 | 3.01 | 2.55 | 9.5 | 9.0 | 3.03 |
| Au | 3.10 | 2.84 | 2.83 | 2.41 | 8.4 | 8.7 | 2.78 |
| Pb | 1.01 | 0.89 | 0.83 | 0.67 | 12 | 12 | 0.56 |
| K | 0.174 | 0.14 | 0.14 | 0.085 | 20 | 18 | — |

Как видно из таблицы, корреляционные добавки в обеих схемах расчета примерно одинаковы. Их учет существенно сокращает интервал между усредненными значениями модуля сдвига, в котором находится точное значение μ .

Поступила 12 IV 1965

ЛИТЕРАТУРА

- Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik. Berlin, S. 962, 1928.
- Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. Z. Angew. Math. und Mech., В. 9, № 49, 1929.
- Флимен И., Динс Г. Дж. Механические свойства металлов. Сб. «Реология», 1962, Изд. иностр. лит., стр. 249.
- Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. Изд. иностр. лит., 1963.
- Лифшиц И. М., Розенцвейг Л. И. К теории упругих свойств поликристаллов. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, т. 16, № 11, стр. 967.
- Даринский Б. М., Шермергор Т. Д. Температурная релаксация в поликристаллах с кубической структурой. Физ. металлов и металловедение, 1964, т. 18, № 5, стр. 645.

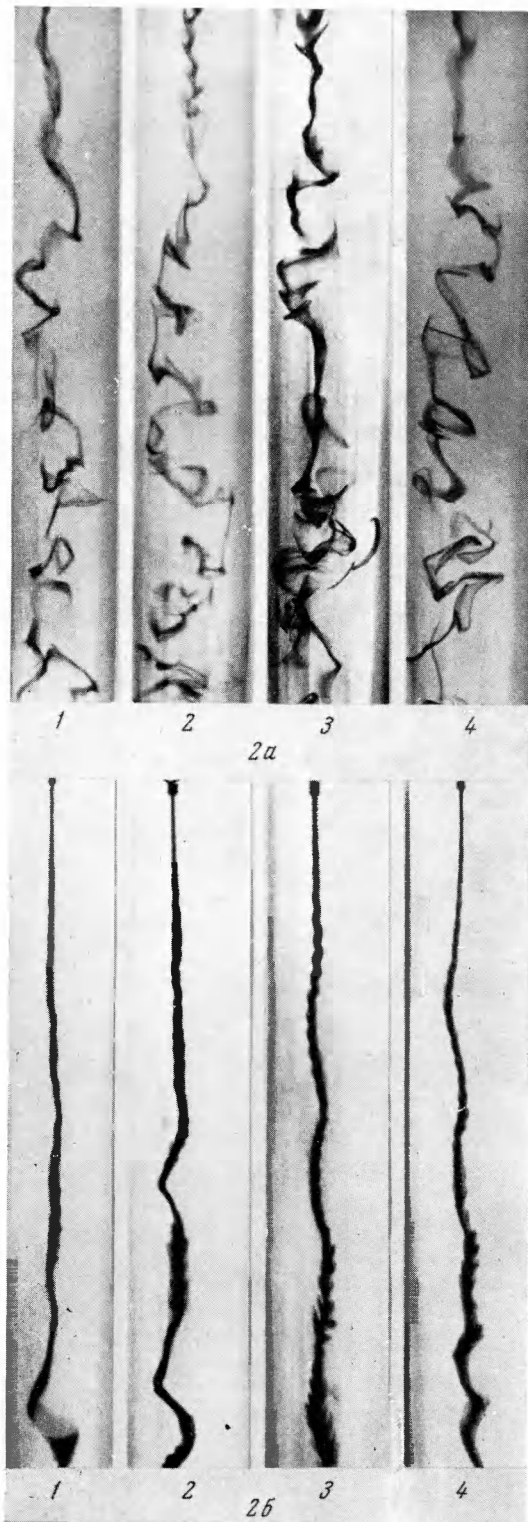
ВЛИЯНИЕ НАЧАЛЬНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ХАРАКТЕР РАЗВИТИЯ ХРУПКОЙ ТРЕЩИНЫ

И. А. Маркузон

(Москва)

Значение растягивающих начальных (остаточных) напряжений как фактора, благоприятствующего хрупкому излому, было отмечено давно. Очевидно, что начальные напряжения, суммируясь с напряжениями от внешней нагрузки, могут уменьшить значение разрушающей внешней нагрузки. Однако роль начальных напряжений при хрупком изломе не ограничивается этим. Опасность наличия начальных напряжений заключается в том, что они могут создать условия, благоприятствующие неустойчивому развитию трещины, находящейся в зоне их действия. Поэтому, в частности, наличие остаточных напряжений вблизи сварочного шва может привести при неблагоприятных условиях (низкая температура окружающей среды, наличие трещины, случайные внешние нагрузки и т. п.) к катастрофическому хрупкому излому. Описанные в литературе [1, 2] случаи внезапного разрушения корпусов судов, крупных резервуаров и других сооружений, изготовленных с применением сварки, происходили при сравнительно низких напряжениях от внешней нагрузки путем внезапного развития трещины. При этом распространение трещины начиналось вблизи сварочного шва. В ряде экспериментальных работ [3, 4], проведенных в связи с этими авариями, исследовалось влияние остаточных напряжений на величину разрушающей нагрузки при хрупком изломе.

В предлагаемой работе проводится оценка влияния начальных (в частности сварочных) напряжений на устойчивость трещины, имеющейся в зоне начальных напряжений.



Фиг. 2

