ПМТФ, № 1, 1968

ЗАДАЧА ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ МИКРОНЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЫ

В. В. Болотин, В. Н. Москаленко

(Москва)

Основы теории стохастически неоднородных твердых тел были заложены еще Фойхтом [1], который предложил определять макроскопические параметры поликристаллических материалов путем осреднения соответствующих параметров кристаллитов по ориентациям. И. М. Лифшиц и Л. Н. Розенцвейг [2] показали необходимость учета корреляционных свойств поля при вычислении макроскопических параметров и вычислили первые поправки к осредненным упругим постоянным поликристаллов для случая кубических и гексагональных кристаллитов. При этом авторы, полагая неоднородность малой, использовали приближение, которое соответствует борновскому приближению в теории рассеяния [3]. Этот метод и его модификации применялись в дальнейшем рядом авторов для вычисления макроскопических параметров поликристаллов [4-6] и других микронеоднородных тел [7-8].

Между тем, предположение о малой неоднородности свойств является весьма ограничительным. Оно исключает из рассмотрения макроскопически изотропные поликристаллы, образованные из существенно анизотропных кристаллитов, стохастически армированные стеклопластики и т. п. микронеоднородные среды. Представляет интерес получить результаты, пригодные в случае большой неоднородности. Эта задача связана с преодолением серьезных аналитических трудностей. Достаточно указать, что даже вычисление второго приближения (т. е. приближения, следующего за борновским) еще не было доведено до конца. Аналогичные задачи в классической и квантовой теории рассеяния также, как правило, рассматриваются лишь в борновском приближении. Более сложные методы (например метод Фейнмана) позволяют лишь частично просуммировать бесконечные последовательности, в виде которых представляется результат. Определенные перспективы открывает метод, аналогичный методу самосогласованного поля в квантовой механике [9,10]; однако этот метод является приближенным и величина его погрешности еще не оценена.

В заметке [11] была показана возможность точного определения макроскопических параметров для некоторых классов микронеоднородных сред. Был дан подробный анализ параметров, образующих тензор второго ранга и характеризующих распределение в среде некоторой скалярной величины, подчиняющейся уравнению типа уравнения стационарной теплопроводности. В случае среды с сильной изотропией, а также в случае среды с сильной трансверсальной изотропией получены точные формулы для макроскопических коэффициентов теплопроводности (диффузии). Проведено сопоставление с различными приближенными методами и оценена их погрешность. В данной статье дается точный метод вычисления макроскопических упругих постоянных для поликристаллической среды с сильной изотропией. На примере поликристаллов кубической структуры [12] оцениваются погрешность и область применения приближенных методов.

1. Рассмотрим неоднородную упругую среду, находящуюся в равновесии при отсутствии объемных сил. Вектор перемещений $u_j(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$, удовлетворяет уравнениям

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\lambda_{jklm}\frac{\partial u_l}{\partial x_m}\right) = 0 \tag{1.1}$$

(здесь и в дальнейшем используется соглашение о суммировании по «немым» индексам). Коэффициенты λ_{jklm} определяют в каждой точке поля некоторый тензор четвертого ранга — тензор упругих постоянных. Пусть тело имеет случайную микроструктуру; тогда коэффициенты $\lambda_{jklm}(\mathbf{r})$ образуют случайное тензорное поле. Размеры тела будем считать достаточно большими по сравнению с масштабами неоднородности и корреляции, чтобы можно было считать тело неограниченным. Поле же $\lambda_{jklm}(\mathbf{r})$ будем считать однородным и эргодическим. Представим поле $\lambda_{jklm}(\mathbf{r})$ в виде

$$\lambda_{jklm} = \lambda'_{jklm} + \lambda''_{jklm} \tag{1.2}$$

где $\lambda'_{jklm} = \langle \lambda_{jklm} \rangle$ — математическое ожидание тензора (угловыми скобками обозначается операция осреднения по множеству реализаций, совпадающая в данном случае с операцией осреднения по пространству). В статьях [2,5] флуктуационная составляющая λ''_{jklm} вводилась с малым параметром. В статьях [6,8], где применялся корреляционный метод, учитывались лишь парные взаимодействия, что в конечном счете эквивалентно использованию допущения о малости флуктуационных составляющих. В данной работе такое ограничение не вводится.

Поставим дополнительные стохастические условия, соответствующие уравнению (1.1). Пусть тело находится в макроскопическом однородном напряженно-деформированном состоянии. Можно потребовать, чтобы либо математические ожидания напряжений, либо математические ожидания деформаций были равны заданным значениям. Выберем второй способ задания дополнительных условий. По некоторым соображениям предпочтительно задавать математические ожидания p_{jk} градиента перемещений

$$\langle \partial u_j / \partial x_k \rangle = p_{jk} \tag{1.3}$$

Задача состоит в нахождении вероятностных характеристик поля $u_j(\mathbf{r})$, удовлетворяющего уравнению (1.1) и условиям (1.3), и вычислении тензора упругих постоянных λ^*_{jklm} для эквивалентной квазиоднородной среды. Этот тензор определим из условия равенства математических ожиданий напряжений в микронеоднородной среде и соответствующих напряжений в эквивалентной среде

$$\langle \lambda_{jklm} \, \partial u_l / \partial x_m \rangle = \lambda^*_{jklm} \, p_{lm} \tag{1.4}$$

Введем тензор Грина $G_{jk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ для однородной среды с упругими постоянными λ'_{jklm} как решение тензорного уравнения

$$\lambda'_{jklm} \, \partial^2 G_{ln}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) / \partial x_k \partial x_m = -\delta_{jn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \tag{1.5}$$

При помощи этого тензора нетрудно записать тензорное интегральное уравнение, эквивалентное уравнению (1.1) и условию (1.3)

$$\frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial x_k} - \int \frac{\partial^2 G_{jl}(\rho)}{\partial \xi_k \partial \xi_m} \lambda''_{lmnp}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \frac{\partial u_n(\mathbf{r} + \rho)}{\partial \xi_p} d\boldsymbol{\rho} = p_{jk}$$
$$\boldsymbol{\rho} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3), \qquad d\boldsymbol{\rho} = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \tag{1.6}$$

Решение уравнения (1.6) определяем по методу итераций:

$$\frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial x_k} = \bar{p}_{jk} + \bar{p}_{lm} \sum_{N=1}^{\infty} \int \ldots \int \frac{\partial^2 G_{j\gamma_1}(\rho_1)}{\partial \xi_k \partial \xi_{\delta_1}} \ldots$$
$$\ldots \frac{\partial^2 G_{\alpha_N \gamma_N}(\rho_N)}{\partial \xi_{\beta_N} \partial \xi_{\delta_N}} \lambda''_{\gamma_1 \delta_1 \alpha_2 \beta_2}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}_1) \ldots \lambda''_{\gamma_N \delta_N lm}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}_1 + \ldots + \boldsymbol{\rho}_N) \, d\boldsymbol{\rho}_1 \ldots d\boldsymbol{\rho}_N \tag{1.7}$$

Используя формулу (1.7), составим выражения для математических ожиданий напряжений

$$\left\langle \lambda_{jklm} \frac{\partial u_l}{\partial x_m} \right\rangle = \lambda'_{jklm} p_{lm} + p_{st} \sum_{N=1}^{\infty} \int \ldots \int \frac{\partial^2 G_{\alpha_1\gamma_1}(\rho_1)}{\partial \xi_{\beta_1} \partial \xi_{\delta_1}} \ldots \tag{1.8}$$

$$\ldots \frac{\partial^2 G_{\alpha_N\gamma_N}(\rho_N)}{\partial \xi_{\beta_N} \partial \xi_{\delta_N}} \langle \lambda''_{jk\alpha_1\beta_1}(0) \lambda''_{\gamma_1\delta_1\alpha_2\beta_2}(\rho_1) \ldots \lambda''_{\gamma_N\delta_N st}(\rho_1 + \ldots + \rho_N) \rangle d\rho_1 \ldots d\rho_N$$

Отсюда по определению (1.4) находим тензор макроскопических упругих постоянных

$$\overset{*}{\lambda}_{jklm} = \lambda_{jklm} + \sum_{N=1}^{\infty} \int \ldots \int \frac{\partial^2 G_{\alpha_1\gamma_1}(\rho_1)}{\partial \xi_{\beta_1} \partial \xi_{\delta_1}} \ldots$$

$$\ldots \frac{\partial^2 G_{\alpha_N\gamma_N}(\rho_N)}{\partial \xi_{\beta_N} \partial \xi_{\delta_N}} \langle \lambda''_{jk\alpha_1\beta_1}(0) \lambda''_{\gamma_1\delta_1\alpha_2\beta_2}(\rho_1) \ldots \lambda''_{\gamma_N\delta_N lm}(\rho_1 + \ldots + \rho_N) \rangle d\rho_1 \ldots d\rho_N \tag{1.9}$$

В дальнейшем формулу (1.9) будем записывать в виде

$$\overset{*}{\lambda}_{jklm} = \lambda'_{jklm} + \langle \overset{**}{\lambda}_{jklm} \rangle \tag{1.10}$$

где $\overset{**}{\lambda}_{jklm}$ — решение тензорного интегрального уравнения

$$\overset{**}{\lambda}_{jklm}(\mathbf{r}) = \lambda''_{jk\alpha\beta}(\mathbf{r}) \int \frac{\partial^2 G_{\alpha\gamma}(\rho)}{\partial \xi_\beta \partial \xi_\delta} [\overset{**}{\lambda}_{\gamma\delta lm}(\mathbf{r} + \rho) + \lambda''_{\gamma\delta lm}(\mathbf{r} + \rho)] d\rho \tag{1.11}$$

Действительно, решая уравнение (1.11) по методу итераций и применяя операцию математического ожидания, получим ряд, входящий в правую часть формулы (1.9).

2. Если в правой части формулы (1.9) удержать один член ряда ($N = 1$), то получим формулу борновского приближения [2]. Задача состоит в том, чтобы вычислить общий член ряда (1.9) и произвести фактическое суммирование. В общем случае задача, по-видимому, неразрешима. Поэтому сузим класс случайных полей, ограничившись сильно изотропными полями, определение которых было введено в [1]. Случайное поле постоянных $\lambda_{jklm}(\mathbf{r})$ будем называть сильно изотропным, если корреляционные функции соответствующего ему тензора $\overset{**}{\lambda}_{jklm}(\mathbf{r})$ образуют изотропное поле. Есть основания ожидать, что среда с сильной изотропией упругих свойств является удовлетворительной моделью для описания упругих деформаций реальных изотропных поликристаллов.

В случае изотропного поля

$$\lambda'_{jklm} = \lambda_0 \delta_{jk} \delta_{lm} + \mu_0 (\delta_{jl} \delta_{km} + \delta_{jm} \delta_{kl}) \tag{2.1}$$

где λ_0 и μ_0 — соответствующие постоянные Ламе. Тензор Грина $G_{jk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ — функция модуля расстояния между точками $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|$, причем

$$G_{jk}(\rho) = \frac{1}{4\pi\mu_0} \left(\frac{\delta_{jk}}{\rho} - \frac{5}{2} g \frac{\partial^2 \rho}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \right) \tag{2.2}$$

$$g = \frac{1}{5} \frac{\lambda_0 + \mu_0}{\lambda_0 + 2\mu_0} = \frac{1}{10(1 - \nu_0)} \tag{2.3}$$

Здесь ν_0 — коэффициент Пуассона, соответствующий тензору λ'_{jklm}.

В случае сильно изотропного поликристалла корреляционные тензоры для λ''_{jklm} тоже зависят только от модулей расстояний между точками. В частности,

$$\langle \lambda''_{jk\alpha_1\beta_1}(\mathbf{r}) \ldots \lambda''_{\gamma_{N-1}\delta_{N-1}\alpha_N\beta_N}(\mathbf{r})\, \lambda''_{\gamma_N\delta_N lm}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\rho})\rangle = \varphi_{jk\alpha_1\beta_1\ldots\gamma_N\delta_N lm}(\rho) \tag{2.4}$$

Аналогичным свойством обладает тензор λ^{**}_{jklm}. Для удобства дальнейших выкладок введем обозначение

$$\langle \lambda''_{jk\alpha_1\beta_1}(\mathbf{r}) \ldots \lambda''_{\gamma_{N-1}\delta_{N-1}\alpha_N\beta_N}(\mathbf{r})\, \lambda^{**}_{\gamma_N\delta_N lm}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\rho})\rangle = \psi_{jk\alpha_1\beta_1\ldots\gamma_N\delta_N lm}(\rho) \tag{2.5}$$

Макроскопические упругие постоянные найдем, используя формулу (1.10) и уравнение (1.11). Осредняя последнее и учитывая обозначения (2.4) и (2.5), получим уравнение для корреляционной поправки к осредненному тензору λ'_{jklm}

$$\langle \lambda^{**}_{jklm}\rangle = \int \frac{\partial^2 G_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{\rho})}{\partial\xi_\beta\partial\xi_\delta}\left[\varphi_{jk\alpha\beta\gamma\delta lm}(\rho) + \psi_{jk\alpha\beta\gamma\delta lm}(\rho)\right] d\boldsymbol{\rho} \tag{2.6}$$

Подставим выражение (2.2) в уравнение (2.6). Замечая, что

$$\frac{\partial^2 G_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{\rho})}{\partial\xi_\beta\partial\xi_\delta} = -\frac{1}{3\mu_0}\left[(1-2g)\,\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - g\,\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\right]\delta(\boldsymbol{\rho}) +$$
$$+\frac{1}{4\pi\mu_0}\left\{\delta_{\alpha\gamma}\left(\frac{3\xi_\beta\xi_\delta}{\rho^5} - \frac{\delta_{\beta\delta}}{\rho^3}\right) - \frac{5}{2}g\left[-\frac{1}{\rho^3}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} +\right.\right.$$
$$\left. + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\right) + \frac{3}{\rho^5}(\delta_{\alpha\beta}\xi_\gamma\xi_\delta + \delta_{\alpha\gamma}\xi_\beta\xi_\delta + \delta_{\alpha\delta}\xi_\beta\xi_\gamma +$$
$$\left.\left. + \delta_{\beta\gamma}\xi_\alpha\xi_\delta + \delta_{\beta\delta}\xi_\alpha\xi_\gamma + \delta_{\gamma\delta}\xi_\alpha\xi_\beta\right) - \frac{15}{\rho^7}\xi_\alpha\xi_\beta\xi_\gamma\xi_\delta\right]\right\}$$

после интегрирования по частям получим

$$\langle \lambda^{**}_{jklm}\rangle = -\frac{1}{3\mu_0}\{(1-2g)\left[\varphi_{jk\alpha\beta\alpha\beta lm}(0) + \psi_{jk\alpha\beta\alpha\beta lm}(0)\right] -$$
$$- g\left[\varphi_{jk\alpha\alpha\beta\beta lm}(0) + \psi_{jk\alpha\alpha\beta\beta lm}(0)\right]\} +$$
$$+\frac{1}{4\pi\mu_0}\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\int_0^\pi \left[\varphi_{jk\alpha\beta\gamma\delta lm}(\rho) + \psi_{jk\alpha\beta\gamma\delta lm}(\rho)\right]\left\{\delta_{\alpha\gamma}\left(\frac{3\xi_\beta\xi_\delta}{\rho^5} -\right.\right.$$
$$\left. - \frac{\delta_{\beta\delta}}{\rho^3}\right) - \frac{5}{2}g\left[-\frac{1}{\rho^3}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) + \frac{3}{\rho^5}(\delta_{\alpha\beta}\xi_\gamma\xi_\delta + \delta_{\alpha\gamma}\xi_\beta\xi_\delta +\right.$$
$$\left.\left. + \delta_{\alpha\delta}\xi_\beta\xi_\gamma + \delta_{\beta\gamma}\xi_\alpha\xi_\delta + \delta_{\beta\delta}\xi_\alpha\xi_\gamma + \delta_{\gamma\delta}\xi_\alpha\xi_\beta) - \frac{15}{\rho^7}\xi_\alpha\xi_\beta\xi_\gamma\xi_\delta\right]\right\}\rho^2 d\rho\,\sin\theta\, d\varphi\, d\theta$$

Непосредственным вычислением убеждаемся в том, что тройной интеграл тождественно обращается в нуль. Отсюда

$$\langle \lambda^{**}_{jklm}\rangle = -{}^1/_3\,\mu_0^{-1}\{(1-2g)\left[\varphi_{jk\alpha\beta\alpha\beta lm}(0) +\right.$$
$$\left. + \psi_{jk\alpha\beta\alpha\beta lm}(0)\right] - g\left[\varphi_{jk\alpha\alpha\beta\beta lm}(0) + \psi_{jk\alpha\alpha\beta\beta lm}(0)\right]\} \tag{2.7}$$

В правую часть входит смешанный корреляционный тензор типа (2.5). Для его вычисления вновь используем уравнение (1.11). Повторяя выкладки, описанные выше, получим окончательную формулу

$$\lambda^*_{jklm} = \lambda_0\delta_{jk}\delta_{lm} + \mu_0(\delta_{jl}\delta_{km} + \delta_{jm}\delta_{kl}) + \sum_{N=1}^{\infty} I^{(N)}_{jklm} \tag{2.8}$$

в которой общий член ряда $I^{(N)}_{jklm}$ выражается следующим образом:

$$I^{(N)}_{jklm} = ({}^1/{}_3\mu_0^{-1})^N \langle \lambda''_{jk\alpha_1\beta_1}\zeta_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\delta_1}\lambda''_{\gamma_1\delta_1\alpha_2\beta_2}\zeta_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\delta_2}\ldots\lambda''_{\gamma_N\delta_N lm}\rangle \tag{2.9}$$

Здесь $\zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ — изотропный тензор

$$\zeta_{\alpha\beta\gamma\delta} = (1 - 2g)\,\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - g\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \tag{2.10}$$

3. Применим формулы (2.8) и (2.9) к сильно изотропному поликристаллу. Его локальные упругие постоянные определяются по формуле

$$\lambda_{jklm} = c_{j\alpha}c_{k\beta}c_{l\gamma}c_{m\delta}\mu_{\alpha\beta\gamma\delta} \tag{3.1}$$

где μ_{jklm} — тензор упругих постоянных для кристаллита, отнесенный к кристаллографическим осям, $c_{j\alpha}$ — матрица преобразования при переходе от кристаллографических осей к лабораторной системе координат. На границах зерен компоненты λ_{jklm} терпят разрывы. Поэтому в уравнении (1.1) и последующих формулах упругие постоянные, перемещения, напряжения и т. п. должны трактоваться как обобщенные функции. Впрочем, окончательные формулы (2.8) и (2.9) выражают макроскопические упругие постоянные через одноточечные корреляционные тензоры и не содержат операций над обобщенными функциями.

Введем обозначение $\mu''_{jklm} = \mu_{jklm} - \lambda'_{jklm}$. Тогда, аналогично (3.1)

$$\lambda''_{jklm} = c_{j\alpha}c_{k\beta}c_{l\gamma}c_{m\delta}\mu''_{\alpha\beta\gamma\delta} \tag{3.2}$$

Подставим формулу (3.2) в правую часть формулы (2.9). Замечая, что

$$\langle \lambda''_{jk\alpha_1\beta_1}\zeta_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\delta_1}\lambda''_{\gamma_1\delta_1\alpha_2\beta_2}\zeta_{\alpha_2\beta_2\gamma_2\delta_2}\ldots\lambda''_{\gamma_N\delta_N lm}\rangle =$$
$$= \langle c_{j\nu_1}c_{k\nu_2}c_{\alpha_1\nu_3}c_{\beta_1\nu_4}\zeta_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\delta_1}c_{\gamma_1\nu_5}c_{\delta_1\nu_6}c_{\alpha_2\nu_7}\ldots c_{m\nu_{4N+4}}\rangle\,\mu''_{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}\ldots\mu''_{\nu_{4N+1}\nu_{4N+2}\nu_{4N+3}\nu_{4N+4}}$$
$$c_{\alpha_1\nu_3}c_{\beta_1\nu_4}\zeta_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\delta_1}c_{\gamma_1\nu_5}c_{\delta_1\nu_6} = \zeta_{\nu_3\nu_4\nu_5\nu_6}$$

приведем формулу (2.9) к виду

$$I^{(N)}_{jklm} = (-{}^1/{}_3\mu_0^{-1})^N\langle c_{j\nu_1}c_{k\nu_2}c_{l\nu_{4N+3}}c_{m\nu_{4N+4}}\rangle\,\mu''_{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}\zeta_{\nu_3\nu_4\nu_5\nu_6}\ldots$$
$$\ldots\mu''_{\nu_{4N+1}\nu_{4N+2}\nu_{4N+3}\nu_{4N+4}} \tag{3.3}$$

Вычислим моменты четвертого порядка от элементов матрицы преобразования $c_{j\alpha}$. Для случая равновероятных ориентаций кристаллитов

$$\langle c_{a\alpha}c_{a\beta}c_{a\gamma}c_{a\delta}\rangle = {}^1/{}_{15}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})$$
$$\langle c_{a\alpha}c_{a\beta}c_{b\gamma}c_{b\delta}\rangle = {}^2/{}_{15}\,\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - {}^1/{}_{30}(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})$$

(здесь $a \neq b$; по индексам a и b не суммировать). Формула (2.8) для макроскопических упругих постоянных приводится к виду

$$\lambda^*_{jklm} = \lambda_*\delta_{jk}\delta_{lm} + \mu_*(\delta_{jl}\delta_{km} + \delta_{jm}\delta_{kl})$$

где λ_* и μ_* — макроскопические коэффициенты Ламе;

$$\lambda_* = \lambda_0 + \frac{1}{30}\sum_{N=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{3\mu_0}\right)^N [4\delta_{\nu_1\nu_2}\delta_{\nu_{4N+3}\nu_{4N+4}} - (\delta_{\nu_1\nu_{4N+3}}\delta_{\nu_2\nu_{4N+4}} + \delta_{\nu_1\nu_{4N+4}}\delta_{\nu_2\nu_{4N+3}})]\, \mu''_{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}\zeta_{\nu_3\nu_4\nu_5\nu_6}\ldots\mu''_{\nu_{4N+1}\nu_{4N+2}\nu_{4N+3}\nu_{4N+4}} \tag{3.4}$$

$$\mu_* = \mu_0 + \frac{1}{60}\sum_{N=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{3\mu_0}\right)^N [-2\delta_{\nu_1\nu_2}\delta_{\nu_{4N+3}\nu_{4N+4}} + 3(\delta_{\nu_1\nu_{4N+3}}\delta_{\nu_2\nu_{4N+4}} + \delta_{\nu_1\nu_{4N+4}}\delta_{\nu_2\nu_{4N+3}})]\, \mu''_{\nu_1\nu_2\nu_3\nu_4}\zeta_{\nu_3\nu_4\nu_5\nu_6}\ldots\mu''_{\nu_{4N+1}\nu_{4N+2}\nu_{4N+3}\nu_{4N+4}}$$

Формулы (3.4) можно переписать в более компактном виде

$$\lambda_* = \lambda_0 - {}^1/_{15}(2\chi_{\alpha\alpha\beta\beta} - \chi_{\alpha\beta\alpha\beta}), \quad \mu_* = \mu_0 - {}^1/_{30}(3\chi_{\alpha\beta\alpha\beta} - \chi_{\alpha\alpha\beta\beta}) \tag{3.5}$$

Здесь $\chi = \chi_{jklm}$ — тензор четвертого ранга, связанный с тензором $\mu'' = \mu''_{jklm}$ формулой

$$\chi = -\sum_{N=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{3}\right)^N A^N \mu'' \tag{3.6}$$

При этом A — линейный оператор над тензорами четвертого ранга, определенный следующим образом: $\mathbf{a} = A\mathbf{b}$, если

$$a_{jklm} = \mu_0^{-1}\mu''_{jk\alpha\beta}\zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}b_{\gamma\delta lm} \tag{3.7}$$

Нетрудно заметить, что в правой части формулы (3.6) стоит решение операторного уравнения

$$\chi + {}^1/_3 A\chi = {}^1/_3 A\mu'' \tag{3.8}$$

Уравнение (3.8) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений относительно элементов тензора $\chi = \chi_{jklm}$. Число уравнений, образующих эту систему, зависит от кристаллографического класса кристаллита: это число равно трем в случае кубической структуры, шести — в случае гексагональной структуры и т. д. Формулы (3.5) и (3.8) дают точное решение задачи. Приближенное решение, соответствующее борновскому приближению, получим, удерживая в (3.6) первый член ряда или, что то же самое, заменяя уравнение (3.8) приближенным соотношением $\chi \approx {}^1/_3 A\mu''$. Как видно, окончательные точные формулы оказываются не на много сложнее, чем приближенные формулы.

4. В качестве простейшего примера рассмотрим поликристалл кубической структуры. Переходя, как обычно, к матричным обозначениям, произведем сокращение индексов: $11 \to 1$, $22 \to 2$, $33 \to 3$, $12 \to 4$, $23 \to 5$, $31 \to 6$. Матрица упругих постоянных для кристаллита содержит три различных не равных нулю элемента

$$\mu = \left\| \begin{matrix} M_{11} & M_{12} & M_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & M_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & M_{44} & 0 & 0 \\ & & & & M_{44} & 0 \\ & & & & & M_{44} \end{matrix} \right\| \tag{4.1}$$

Осредненные по Фойхту коэффициенты Ламе даются выражениями

$$\lambda_0 = {}^1/_5\,(M_{11} + 4M_{12} - 2M_{44}), \qquad \mu_0 = {}^1/_5\,(M_{11} - M_{12} + 3M_{44}) \tag{4.2}$$

Формулы (3.5) принимают вид

$$\lambda_* = \lambda_0 - {}^1/_5\,(\chi_{11} + 4\chi_{12} - 2\chi_{44}), \qquad \mu_* = \mu_0 - {}^1/_5\,(\chi_{11} - \chi_{12} + 3\chi_{44}) \qquad (4.3)$$

Решение уравнений (3.8) для случая матрицы упругих постоянных (4.1) будет

$$\chi_{11} = \frac{6\chi_0\gamma}{1+3\gamma}, \qquad \chi_{12} = -\frac{3\chi_0\gamma}{1+3\gamma}, \qquad \chi_{44} = \frac{2\chi_0\gamma}{1-2\gamma} \qquad (4.4)$$

$$\chi_0 = {}^1/_5\,(M_{11} - M_{12} - 2M_{44}), \quad \gamma = {}^1/_3\,\chi_0\mu_0^{-1}\,(1 - 2g)$$

где g определяется по формуле (2.3). Формула борновского приближения, полученная впервые И. М. Лифшицем и Л. Н. Розенцвейгом [2], имеет тот же вид (4.3); однако $\chi_{11} = 6\chi_0\gamma$, $\chi_{12} = -3\chi_0\gamma$, $\chi_{44} = 2\chi_0\gamma$.

Для сопоставления результатов, которые дают различные методы, в таблице, в первых трех столбцах, приводятся значения упругих постоянных (4.2) из статьи [12]; далее последовательно приводятся значения макроскопического модуля сдвига, вычисленного по точным формулам (4.3), (4.4), по методу Фойхта, по формулам борновского приближения и по методу Рейсса, дающего для упругих постоянных оценку снизу. Чтобы выразить упругие постоянные в *нм*$^{-2}$, следует приведенные в таблице значения умножить на 10^{10}. В рассмотренных примерах степень анизотропии кристаллитов не является слишком большой; поэтому борновское приближение дает хорошую точность. В случае кубической структуры макроскопический объемный модуль точно совпадает с осредненным по Фойхту (или по Рейссу) значением. Поэтому другая постоянная Ламе $\lambda = K - {}^2/_3\,\mu$ менее чувствительна к выбору метода вычисления, чем модуль сдвига.

	Упругие постоянные кристаллитов			Модуль сдвига поликристалла			
	c_{11}	c_{12}	c_{44}	(1)	(2)	(3)	(4)
Ag	12.40	9.34	4.61	3.02	3.38	3.07	2.55
Al	10.82	6.13	2.85	2.63	2.64	2.63	2.62
Au	18.60	15.70	4.20	2.81	3.10	2.84	2.41
Cu	16.84	12.14	7.54	4.83	5.47	4.91	4.00
Pb	4.66	3.92	1.44	0.87	1.01	0.89	0.67

Здесь (1) — точное решение, (2) — осреднение по Фойхту, (3) — борновское приближение, (4) — осреднение по Рейссу

Поступила 7 V 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik. Teubner-Verlag, 1910.
2. Лифшиц И. М., Розенцвейг Л. Н. К теории упругих свойств поликристаллов. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, т. 16, № 11.
3. Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики, т. 2. Изд. Иностр. лит., 1960.
4. Долгополов Д. Г., О коэффициентах диффузии в поликристаллах. Физика металлов и металловедение, 1962, т. 13, № 2.
5. Ломакин В. А. О деформировании микронеоднородных упругих тел. ПММ, 1965, т. 29, № 5.
6. Даринский Б. М., Шермергор Т. Д. Упругие модули поликристаллов кубической структуры. ПМТФ, 1965, № 4.
7. Болотин В. В. Слоистые упругие и вязкоупругие среды с малыми начальными неправильностями. Механика твердого тела, 1966, № 3.
8. Савин Г. Н., Хорошун Л. П. Статистически изотропное деформирование композиционных материалов. Докл. АН УССР, сер. А, 1967, № 9.
9. Kröner E. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. Z. Physik, 1958, B. 151, H. 4.
10. Hill R. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. J. Mech. Phys. Solids, 1965, vol. 13, No. 1.
11. Болотин В. В., Москаленко В. Н. Макроскопические коэффициенты теплопроводности и диффузии в микронеоднородных твердых телах. ПМТФ, 1967, № 6.
12. Хантингтон Г. Упругие постоянные кристаллов. Успехи физ. наук, 1961, т. 74, № 2, 3.