

О ВЫЧИСЛЕНИИ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

В. М. Даринский, А. Г. Фокин, Т. Д. Шермергор

(Воронеж, Москва)

Вычисление упругих модулей поликристаллов по известным упругим постоянным монокристаллов может быть проведено различными методами. Непосредственное усреднение, основывающееся на гипотезах однородных деформаций (метод Фойгта [1]) или однородных напряжений (метод Ройсса [2]), дает вилку для упругих модулей, между которыми находится его истинное значение. Различие в значениях усредненных по Фойгту и Ройссу упругих моделей обусловлено игнорированием корреляций между кристаллитами поликристалла. Сужение вилки может быть достигнуто, например, с помощью так называемого самосогласованного метода [3,4], который был применен к поликристаллам Кренером [5] и Кнером [6,7]. Недостатком этого метода является необходимость введения модельных представлений.

Более общий подход, основанный на использовании теории случайных функций, был разработан И. М. Лифшицем с сотрудниками [8,9]. Этот метод основывается на вычислении корреляционных поправок к тензору упругих модулей λ_{iklm} . Наряду с этим возможен другой подход, в основе которого лежит расчет корреляционных поправок к тензору упругих податливостей $s_{iklm} = \lambda_{iklm}^{-1}$. Для поликристаллов кубической структуры такой метод был развит в работе [10]. Ниже этот метод распространяется на поликристаллы структур более низких симметрий. Поскольку схема расчета корреляционных поправок к тензору упругих модулей несколько отличается от принятой в работе [8], для удобства сопоставления методов ниже расчет поправок к модулям податливости s_{iklm} сопровождается соответствующим расчетом для модулей упругости λ_{iklm} .

Ограничиваясь учетом лишь парных корреляций, получим следующие уравнения равновесия и несовместности [10,11]

$$\begin{aligned} (L_{il} - \langle R_{im} g_{mn} * R_{nl} \rangle) \langle u_l \rangle &= -f_i \\ (L_{iklm} - \langle R_{ikpq} g_{pqrs} * R_{rslm} \rangle) \langle \sigma_{lm} \rangle &= -\eta_{ik} \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь u_l — вектор смещения, σ_{lm} — тензор напряжений, L и R — соответственно регулярные и случайные составляющие операторов Q

$$Q_{il} = \nabla_k \lambda_{iklm} \nabla_m, \quad Q_{iklm} = \varepsilon_{irp} \varepsilon_{ksq} \nabla_p \nabla_q s_{rslm} \quad (2)$$

Через ε_{irp} обозначен единичный антисимметричный тензор, а через g — тензорные функции Грина операторов L . Последние определены равенствами

$$L_{il} g_{ln} = \delta(r) \delta_{in}, \quad L_{pqik} g_{iklm} = \delta(r) \delta_{m(p} \delta_{q)n} \quad (3)$$

причем по индексам, взятым в скобки, проводится симметризация.

Трансформанты Фурье функций Грина равны

$$\begin{aligned} k^2 G_{jn} &= -\frac{1}{c_2} \left(\delta_{jn} - \frac{c_1 + c_2}{c_1 + 2c_2} n_j n_n \right) \\ k^2 G_{pqmn} &= \frac{1}{2s_2} \varepsilon_{m(p} \varepsilon_{q)n} - \frac{s_1 + 2s_2}{4s_2 (s_1 + s_2)} \delta_{mn} (\delta_{pq} - n_p n_q) \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $n_p = k_p/k$, а коэффициенты c_i и s_i определяют усредненные без учета корреляций упругие константы в схемах Фойгта и Ройсса соответственно

$$\begin{aligned} \langle \lambda_{iklm} \rangle &= c_1 \delta_{ik} \delta_{lm} + c_2 (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) \\ \langle s_{iklm} \rangle &= s_1 \delta_{ik} \delta_{lm} + s_2 (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) \end{aligned} \quad (5)$$

Из уравнений (1) и (3) вытекают следующие выражения для эффективных тензоров Λ_{iklm} и S_{iklm} :

$$\Lambda_{iklm} = \langle \lambda_{iklm} \rangle - \int g_{jn, sp} a_{nplm}^{ikjs} dV \quad (6)$$

$$S_{rsik} = \langle s_{rsik} \rangle - \varepsilon_{aju} \varepsilon_{blv} \int g_{mnab, uv} b_{jlik}^{rsmn} dV$$

Здесь a_{nplm}^{ikjs} и b_{jlik}^{rsmn} — бинарные корреляционные тензорные функции

$$\begin{aligned} a_{nplm}^{ikjs}(\mathbf{r} - \mathbf{q}) &= \langle \lambda'_{ikjs}(\mathbf{r}) \lambda'_{nplm}(\mathbf{q}) \rangle \\ b_{jlik}^{rsmn}(\mathbf{r} - \mathbf{q}) &= \langle s'_{rsmn}(\mathbf{r}) s'_{jlik}(\mathbf{q}) \rangle \end{aligned} \quad (7)$$

В случае нетекстурированной среды

$$a_{nplm}^{ikjs}(\mathbf{r}) = \alpha_{nplm}^{ikjs} \Phi(\mathbf{r}), \quad b_{jlik}^{rsmn}(\mathbf{r}) = \beta_{jlik}^{rsmn} \Phi(\mathbf{r}) \quad (8)$$

причем $\Phi(0) = 1$

Рассмотрим вначале поликристаллы тетрагональной системы. Тогда для классов симметрии с шестью независимыми упругими константами тензоры упругих модулей и податливостей кристаллита в кристаллографической системе координат могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \lambda_{iklm}^{\circ} &= c_1^{\circ} \delta_{ik} \delta_{lm} + c_2^{\circ} (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + c_3 \delta_{i3} \delta_{j3} \delta_{l3} \delta_{m3} + \\ &+ c_4 (\delta_{ik} \delta_{l3} \delta_{m3} + \delta_{i3} \delta_{k3} \delta_{lm}) + c_5 (\delta_{il} \delta_{k3} \delta_{m3} + \delta_{i3} \delta_{l3} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{j3} \delta_{l3} + \delta_{i3} \delta_{m3} \delta_{kl}) + \\ &+ c_6 \sum_n \delta_{in} \delta_{kn} \delta_{ln} \delta_{mn} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} s_{iklm}^{\circ} &= s_1^{\circ} \delta_{ik} \delta_{lm} + s_2^{\circ} (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + s_3 \delta_{i3} \delta_{j3} \delta_{l3} \delta_{m3} + \\ &+ s_4 (\delta_{ik} \delta_{l3} \delta_{m3} + \delta_{i3} \delta_{k3} \delta_{lm}) + \\ &+ s_5 (\delta_{il} \delta_{k3} \delta_{m3} + \delta_{i3} \delta_{l3} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{j3} \delta_{l3} + \delta_{i3} \delta_{m3} \delta_{kl}) + s_6 \sum_n \delta_{in} \delta_{kn} \delta_{ln} \delta_{n,n} \end{aligned}$$

причем постоянные c_i и s_i связаны с двухиндексными упругими постоянными c_{ij} и s_{ij} соотношениями

$$\begin{aligned} c_1 &= c_1^{\circ} + 1/15 c_3 + 2/3 c_4 + 1/5 c_6, & c_2 &= c_2^{\circ} + 1/15 c_3 + 2/3 c_5 + 1/5 c_6 \\ c_1^{\circ} &= c_{12}, & c_2^{\circ} &= c_{66}, & c_3 &= c_{33} - c_{11} + 2c_{12} - 2c_{13} - 4c_{44} + 4c_{66} \\ c_4 &= c_{13} - c_{12}, & c_5 &= c_{44} - c_{66}, & c_6 &= c_{11} - c_{12} - 2c_{66} \\ s_1 &= s_1^{\circ} + 1/15 s_3 + 2/3 s_4 + 1/5 s_6, & s_2 &= s_2^{\circ} + 1/15 s_3 + 2/3 s_5 + 1/5 s_6 \\ s_1^{\circ} &= s_{12}, & 4s_2 &= s_{66}, & s_3 &= s_{33} - s_{11} - 2s_{13} + 2s_{12} - s_{44} + s_{66} \\ s_4 &= s_{13} - s_{12}, & 4s_5 &= s_{44} - s_{66}, & s_6 &= s_{11} - s_{12} - 1/2 s_{66} \end{aligned} \quad (10)$$

При помощи равенств (7) — (9) находим полные свертки автокорреляционных тензоров

$$\begin{aligned} \alpha_{ijqq}^{ijpp} &= 2/3 (c_3 + 3c_4 + 4c_5)^2 \\ \alpha_{ijpq}^{ijpp} &= 2/3 \alpha_{i3q3}^{ijpp} + 2/9 (1.6c_3^2 + 8c_3c_5 + 28c_5^2) + 2/5 c_6 (2c_3 + 3c_6) \\ \beta_{ijqq}^{ijpp} &= 2/3 (s_3 + 3s_4 + 4s_5)^2 \\ \beta_{ijpq}^{ijpp} &= 2/3 \beta_{i3q3}^{ijpp} + 2/9 (1.6s_3^2 + 8s_3s_5 + 28s_5^2) + 2/5 s_6 (2s_3 + 3s_6) \end{aligned} \quad (11)$$

через которые выражаются частичные свертки

$$\begin{aligned} \alpha_{lmpq}^{ikpq} &= 1/9 \alpha_{esppq}^{rppq} \delta_{ik} \delta_{lm} + 1/10 (\alpha_{rsppq}^{rppq} - 1/3 \alpha_{ssppq}^{rppq}) D_{i,lm} \\ \alpha_{lmqq}^{ikpp} &= 1/10 \alpha_{rsppq}^{rppq} D_{iklm}, & D_{iklm} &\equiv \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl} - 2/3 \delta_{ik} \delta_{lm} \end{aligned} \quad (12)$$

Аналогичные соотношения имеют место и для β_{jlik}^{rsmn} .

Переходя в выражениях (6) при помощи теоремы Парсеваля к интегрированию в пространстве изображений и учитывая соотношения (8) — (12), получим

$$\begin{aligned} \Lambda_{iklm} - \langle \lambda_{iklm} \rangle &= \Delta K_V \delta_{ik} \delta_{lm} + \Delta \mu_V D_{iklm} \\ S_{iklm} - \langle s_{iklm} \rangle &= 1/9 \Delta K_R^{-1} \delta_{ik} \delta_{lm} + 1/4 \Delta \mu_R^{-1} D_{iklm} \end{aligned} \quad (13)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} \Delta K_V &= -\alpha_1 \frac{3c_1 + 8c_2}{135c_2(c_1 + 2c_2)}, & \Delta \mu_V &= -\frac{5c_2\alpha_1 + (3c_1 + 8c_2)\alpha_2}{450c_2(c_1 + 2c_2)} \\ \Delta \frac{1}{K_R} &= -\beta_1 \frac{6s_1 + 7s_2}{30s_2(s_1 + s_2)}, & \Delta \frac{1}{\mu_R} &= -\frac{10s_2\beta_1 + (6s_1 + 7s_2)\beta_2}{225s_2(s_1 + s_2)} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \alpha_1 &\equiv \alpha_{ijnn}^{ijmm}, & \alpha_2 &\equiv 3\alpha_{ijmn}^{ijmn} - 2\alpha_1 \\ \beta_1 &\equiv \beta_{ijnn}^{ijmm}, & \beta_2 &\equiv 3\beta_{ijmn}^{ijmn} - 2\beta_1 \end{aligned} \quad (15)$$

причем усредненные без учета корреляций значения упругих модулей равны

$$K_V = c_1 + \frac{2}{3}c_2, \quad \mu_V \rightarrow c_2, \quad K_R^{-1} = 9s_1 + 6s_2, \quad \mu_R^{-1} = 4s_2 \quad (16)$$

Выражения (14) имеют место для поликристаллов произвольной кристаллографической симметрии. В случае тетрагональной симметрии свертки тензоров α_{ijkl} и β_{pqrs} , которые определяют коэффициенты α и β , входящие в формулы (14), даются соотношениями (11) и (12). Для более высоких симметрий — гексагональной и кубической — выражения (11) упрощаются. В первом случае следует положить $c_6 = s_6 = 0$, а во втором $c_3 = c_4 = c_5 = s_3 = s_4 = s_5 = 0$. Нетрудно убедиться, что когда эффективные модули сдвига и всестороннего сжатия для кубической системы совпадут с полученными ранее [10], а для гексагональной системы первые из формул (14) приведут к корреляционным поправкам, выведенным иным путем И. М. Лифшицем и Л. Н. Розенцвейгом [8].

Аналогичные расчеты для поликристаллов классов 32 , $3m$ и $3m$ тригональной системы приводят к упругим модулям, которые по-прежнему определяются формулами (11) — (15). Однако свертки теперь для свертки будем иметь

$$\begin{aligned} \alpha_{ijpq}^{ijpq} &= \frac{2}{3} \alpha_{ijpq}^{ijpp} + \frac{2}{9} (1.6c_3^2 + 8c_3c_5 + 28c_5^2) + 16c_7^2 \\ \beta_{ijpq}^{ijpq} &= \frac{2}{3} \beta_{ijpq}^{ijpp} + \frac{2}{9} (1.6s_3^2 + 8s_3s_5 + 28s_5^2) - 16s_7^2 \end{aligned} \quad (17)$$

Упругие модули λ_{ijkl}° и $s_{ij..l}^{\circ}$ тригональных кристаллов отличаются от выражений (9) обращением в нуль слагаемых, включающих множителями c_6 и s_6 (что означает переход к гексагональной симметрии), и добавлением выражения

$$\begin{aligned} c_7 \{ &(\delta_{i1}\delta_{j1} - \delta_{i2}\delta_{j2})(\delta_{..2}\delta_{i3} + \delta_{..3}\delta_{i2}) + (\delta_{i2}\delta_{j3} + \delta_{i3}\delta_{j2})(\delta_{..1}\delta_{i1} - \delta_{..2}\delta_{i2}) + \\ &+ (\delta_{i1}\delta_{j3} + \delta_{i3}\delta_{j1})(\delta_{..1}\delta_{i2} + \delta_{..2}\delta_{i1}) + (\delta_{i1}\delta_{j2} + \delta_{i2}\delta_{j1})(\delta_{..1}\delta_{i3} + \delta_{..3}\delta_{i1}) \} \end{aligned} \quad (18)$$

к λ_{ijkl}° и аналогичного слагаемого к $s_{ij..l}^{\circ}$. Связь одноиндексных и двухиндексных упругих постоянных описывается выражениями (10), в которых следует положить $c_6 = s_6 = 0$, $c_7 = c_{14}$ и $s_7 = \frac{1}{2}s_{14}$.

Таблица 1

Кубическая система

	Ag	Al	Au	K	Li	Na
μ_V	3.38	3.22	3.11	0.1747	0.694	0.380
μ_V^*	3.07	2.94	2.86	0.1428	0.539	0.296
μ_R^*	3.06	2.93	2.85	0.1373	0.495	0.274
μ_R	2.55	2.49	2.41	0.0346	0.248	0.152
Δ_V^{μ}	0.377	0.379	0.363	0.353	0.348	0.335
Δ_R^{μ}	0.609	0.608	0.632	0.586	0.553	0.537

	Ni	Pb	Cu	Ge	Th	Pa
μ_V	9.47	1.012	5.46	5.64	3.40	5.32
μ_V^*	8.78	0.890	4.91	5.49	2.98	4.89
μ_R^*	8.75	0.883	4.88	5.48	2.95	4.88
μ_R	7.77	0.638	4.00	5.30	2.33	4.16
Δ_V^{μ}	0.406	0.354	0.380	0.452	0.339	0.375
Δ_R^{μ}	0.579	0.525	0.600	0.541	0.578	0.615

Таблица 2

Система гексагональная

	Cd	Co	Zn	Zr	Ti	Be
K_V	6.28	19.05	7.30	9.54	10.73	11.45
K_V^*	5.91	19.04	7.05	9.53	10.73	11.44
K_R	6.08	19.04	7.35	9.53	10.73	11.44
K_R^*	5.03	19.04	6.20	9.52	10.73	11.43
Δ_V^K	0.295	0.729	0.228	0.609	0.607	0.550
Δ_R^K	0.837	0.326	1.046	0.401	0.400	0.450
μ_V	2.51	8.44	4.56	3.64	4.41	14.93
μ_V^*	2.31	8.15	4.25	3.60	4.34	14.86
μ_R^*	2.31	8.17	4.41	3.60	4.33	14.86
μ_R	2.06	8.01	3.64	3.56	4.26	14.80
Δ_V^μ	0.449	0.660	0.343	0.562	0.469	0.507
Δ_R^μ	0.562	0.369	0.838	0.444	0.505	0.490

Система тетрагональная тригональная

	Sn	In	Sb	Bi	Hg	Te
K_V	5.27	4.16	3.94	3.60	3.35	3.36
K_V^*	5.26	4.16	3.86	3.46	3.30	3.08
K_R	5.26	4.16	3.94	3.57	3.49	3.69
K_R^*	5.26	4.16	3.62	3.37	3.23	2.49
Δ_V^K	0.865	0.132	0.277	0.593	0.415	0.324
Δ_R^K	0.230	0.198	0.989	0.843	2.09	1.372
μ_V	1.914	0.592	2.51	1.326	0.806	2.34
μ_V^*	1.711	0.491	2.26	1.243	0.606	1.301
μ_R^*	1.777	0.502	2.26	1.242	0.573	0.943
μ_R	1.497	0.372	2.04	1.145	0.326	0.366
Δ_V^μ	0.487	0.458	0.527	0.460	0.417	0.526
Δ_R^μ	0.671	0.592	0.465	0.537	0.514	0.293

Средние и эффективные значения упругих модулей для металлов кубической системы приведены в табл. 1, а для поликристаллов более низких симметрий — в табл. 2. Некоторые из элементов кубической системы с меньшей точностью были рассчитаны в работе [10]. Двухиндексные упругие постоянные брались для Zr, Ti и Be из [12], для Zn из [7], а для остальных — из [13]. Если в [13] приводилось несколько значений упругих постоянных, то брались всегда первые из них.

В двух последних строчках таблиц после значений μ и K приведены относительные значения интервалов

$$\Delta_V^\mu = (\mu_V - \mu_V^*)/(\mu_V - \mu_R), \quad \Delta_R^\mu \equiv (\mu_R^* - \mu_R)/(\mu_V - \mu_R)$$

и аналогично для модуля всестороннего сжатия. Каждый из относительных интервалов характеризует величину шага, к которому приводит рассматриваемый метод.

Приведенные Хантингтоном [13] данные для обратных матриц упругих постоянных содержат значительное количество ошибок, поэтому в качестве исходных бра-

лись экспериментальные данные, а обратные матрицы (c_{ij} или s_{ij}) просчитывались на электронно-вычислительной машине «Наири». Учитывая, что в некоторых случаях корреляционные добавки малы, вычисления формально проводились с точностью до девяти значащих цифр. Окончательные результаты для абсолютных значений упругих модулей и их разностей, приведенные в таблице, округлялись до трех значащих цифр, что соответствует точности экспериментальных данных. Из таблиц видно, что хотя в большинстве случаев величина шага в схеме Ройсса превышает шаг в схеме Фойгта, оба метода дают близкие значения эффективных упругих модулей, если анизотропия материала не слишком велика.

Для иллюстрации влияния анизотропии на величину корреляционной добавки на фигуре приведены кривые, характеризующие величину относительного отклонения h от среднеарифметического в обеих схемах в функции параметра анизотропии $A_1 = c_{13}/c_{12}$, причем упругие константы выбирались следующими $c_{11} = c_{33} = 3c_{12} = 3c_{44} = 3$. Отклонение h связано с относительными корреляционными добавками соотношениями $h_V^K = 0.5 - \Delta_V^K$, $h_R^K = -0.5 + \Delta_R^K$. Значение $h = 0$ соответствует среднеарифметическому от модулей, усредненных по Фойгту и Ройссу без учета корреляций, а $h_V^K = 0.5$ и $h_R^K = -0.5$ определяют границы интервала $K_V - K_R$, который принят за единицу при любом значении A_1 .

Как видно из фигуры, h_V^K и $h_R^K > 0$, если $A_1 > 1$. При $A_1 < 1$ обе кривые пересекают ось абсцисс и лежат в области отрицательных значений. Таким образом, в случае $A_1 > 1$ величина шага в схеме Фойгта больше, чем в схеме Ройсса, а при $A_1 < 1$ — наоборот. Как и следовало ожидать, при $A_1 \rightarrow 1$, когда вклад корреляций высших порядков пренебрежимо мал, оба метода расчета дают совпадающие значения. Отметим, что в пределе $A_1 \rightarrow 1$ эффективное значение модуля K^* несколько отличается от среднеарифметического $1/2 (K_V + K_R)$. Аналогичные результаты имеют место и для h_V^μ и h_R^μ в функции A_1 , а также при изменении других параметров анизотропии $A_2 = c_{33}/c_{11}$ и $A_3 = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12})$.

В предельном переходе к изотропной точке $A_2 = A_3 = 1$, $A_1 \rightarrow 1$ найдем $h_V^K = h_R^K = 1/90$. При этих же значениях параметров для сдвиговых деформаций получим $h_V^\mu = h_R^\mu = 1/139$. Аналогичный расчет в случае $A_1 = A_3 = 1$, $A_2 \rightarrow 1$ дает $h_V^K = h_R^K = 1/90$ и $h_V^\mu = h_R^\mu = -1/490$. Если $A_1 = A_2 = 1$, а $A_3 \neq 1$, то гексагональный материал вырождается в кубический. Поэтому при $A_3 \rightarrow 1$ получаем $h_V^K = h_R^K = 0$, а $h_V^\mu = h_R^\mu = 1/90$.

По-видимому, если выбрана другая изотропная точка, предельные переходы $A \rightarrow 1$ приведут к другим численным значениям h_V и h_R . Однако по порядку величины отступления истинного упругого модуля от среднеарифметического не будут велики. Поскольку при $A \rightarrow 1$ корреляционные функции выше второго порядка могут быть опущены, приведенные численные оценки показывают, что истинные значения упругих модулей с точностью $\sim 1\%$ совпадают со среднеарифметическими от модулей, найденных усреднением по Фойгту и Ройссу без учета корреляций.

С ростом параметра анизотропии значения h_V и h_R возрастают, что свидетельствует о необходимости учета корреляций более высокого порядка. В тех случаях, когда эффективное значение упругого модуля выходит за пределы вилки $\mu_V - \mu_R$ или $K_V - K_R$, анизотропия материала настолько велика, что ограничение учетом корреляций лишь второго порядка уже не является правомерным.



