ПМТФ, № 4, 1968

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ГРАНИЦ ЭФФЕКТИВНЫХ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ НЕОДНОРОДНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

А. Г. Фокин, Т. Д. Шермергор

(Москва)

Вычисление эффективных упругих модулей неоднородных твердых тел, связывающих усредненные по материалу напряжения и деформации, сопряжено с известными математическими трудностями вследствие необходимости учета корреляционных связей произвольных порядков. Игнорирование корреляционных связей приводит к средним упругим модулям, причем усреднение по Фойгту и Ройссу устанавливает границы, внутри которых находятся эффективные упругие модули [1]. Приближенные значения последних могут быть найдены с помощью учета корреляционных связей второго порядка в обеих схемах расчета [2,3]. Другой метод оценки истинных модулей состоит в сужении границ Фойгта и Ройсса на основе модельных представлений [4-6]. Приближенные значения эффективных упругих модулей для ряда поликристаллов различных сингоний приводится в работе [7]. Анализ влияния корреляционных связей между зернами механической смеси изотропных компонентов на эффективные упругие модули проведен в [8], однако во всех отмеченных работах вопрос об использовании корреляционных поправок для сужения вилки упругих модулей не исследовался [1]. Ниже показывается, что вычисление корреляционных поправок во втором приближении позволяет сузить вилку для эффективных упругих модулей.

1. Рассмотрим неоднородное твердое тело, которое может быть как поликристаллом, так и твердой механической смесью изотропных компонентов. Будем считать, что границы раздела между компонентами исключают проскальзывание зерен одного относительно другого. Тогда упругое поле деформированного материала может быть описано системой уравнений, включающей уравнения равновесия, несовместности и закон Гука. Явный вид этих уравнений при наличии внутренних и внешних напряжений приведен, например, в работе [9]. Ниже для уравнений равновесия и несовместности используется единая матричная запись

$$LZ + F = 0 \tag{1.1}$$

где оператор и функции в случае уравнения равновесия имеют вид

$$L_{il} = \nabla_k \lambda_{iklm} \nabla_m, \quad Z_i = u_i, \quad F_i = f_i \tag{1.2}$$

В случае уравнения несовместности, соответственно, будем иметь

$$L_{iklm} = e_{ipq} e_{krs} \nabla_p \nabla_r s_{qslm}, \quad Z_{lm} = \sigma_{lm}, \quad F_{ik} = \eta_{ik} \tag{1.3}$$

Здесь λ_{iklm} и s_{sqlm} — соответственно, тензоры упругих модулей и податливостей, u_i и f_i — векторы смещений и плотности объемных сил, σ_{lm} и η_{ik} — тензоры напряжений и несовместности, e_{ipq} — единичный антисимметричный тензор.

---

[1] В работе [3] было предложено использовать схему Ройсса для вычисления корреляционных поправок. Хотя выведенные в этой работе формулы правильные, утверждение о том, что второе приближение схем Фойгта и Ройсса (учет бинарных корреляций) образует вилку, будет неверным. В действительности вилку образует первое и, как показывается ниже, третье приближение метода, тогда как эффективные модули, вычисленные во втором приближении схем Фойгта и Ройсса, лежат по одну сторону от его истинного значения.

Разбивая операторы и функции на регулярную и случайную составляющие, из уравнения (1.1) найдем

$$\langle L\rangle\langle Z\rangle + \langle L'Z'\rangle + F = 0 \tag{1.4}$$

где угловые скобки используются для обозначения усреднения, причем последнее проводится по области, размеры которой малы по сравнению с расстояниями, на которых существенно меняется регулярная часть функций, но велики по сравнению с пространственным масштабом корреляций. Выражая случайную составляющую Z' через регулярную $\langle Z\rangle$ при помощи некоторого интегрального оператора Q

$$Z' = Q'\langle Z\rangle \tag{1.5}$$

перепишем уравнение (1.4) в виде

$$L^*\langle Z\rangle + F = 0, \qquad L^* = \langle L\rangle + \langle L'Q'\rangle \tag{1.6}$$

Явное выражение оператора Q' имеет вид [10]

$$Q' = X + (X^2 - \langle X^2\rangle) + (X^3 - X\langle X^2\rangle - \langle X^3\rangle) + \tag{1.7}$$
$$+(X^4 - X^2\langle X^2\rangle - X\langle X^3\rangle - \langle X^4\rangle + \langle X^2\rangle^2) + \ldots$$

Здесь через X обозначен оператор M^*L', причем M^* определяется равенством

$$\langle L\rangle M^* + I = 0 \tag{1.8}$$

Здесь единичная матрица I в случае второго ранга имеет составляющими δ_{ij}, а четвертого — $\delta_{i(p}\delta_{q)j}$, причем по индексам, заключенным в круглые скобки, проводится симметризация. Ядром интегрального оператора M^* будет функция Грина G оператора $\langle L\rangle$:

$$M^*\delta(\mathbf{r}) = G(\mathbf{r}) \tag{1.9}$$

Явный вид функций Грина уравнений равновесия и несовместности определяется выражениями [11, 12]

$$G_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}(\delta_{ij}r_{,pp} - \varkappa r_{,ij}), \qquad \varkappa \equiv \frac{\lambda+\mu}{\lambda+2\mu} \tag{1.10}$$

$$G_{iklm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{32\pi q}\left\{\left[-\frac{s}{s+q}(\delta_{ik}\delta_{lm}\nabla^2 - \delta_{ik}\nabla_l\nabla_m - \delta_{lm}\nabla_i\nabla_k) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + 2e_{lp(i}e_{k)mq}\nabla_p\nabla_q\right]r - \frac{s}{12(s+q)}\nabla_i\nabla_k\nabla_l\nabla_m r^3\right\} \tag{1.11}$$

где через λ, μ, s и q обозначены усредненные по агрегату упругие постоянные

$$\langle\lambda_{iklm}\rangle = \lambda\delta_{ik}\delta_{lm} + 2\mu\delta_{i(l}\delta_{m)k} \tag{1.12}$$

$$\langle s_{iklm}\rangle = s\delta_{ik}\delta_{lm} + 2q\delta_{i(l}\delta_{m)k} \tag{1.13}$$

Оператор L^* определяет перенормированные уравнения равновесия и несовместности. Сопоставляя выражение (1.6) с определениями исходного оператора L, находим

$$\overset{*}{L}_{il} = \nabla_k\overset{*}{\lambda}_{iklm}\nabla_m, \qquad \overset{*}{L}_{iklm} = e_{ipq}e_{krs}\nabla_p\nabla_r\overset{*}{s}_{qslm} \tag{1.14}$$

где $\overset{*}{\lambda}_{iklm}$ и $\overset{*}{s}_{qslm}$ — эффективные тензоры упругих постоянных и податливостей, определяющие связь между средними тензорами напряжений и деформаций согласно закону Гука

$$\langle\sigma_{ik}\rangle = \overset{*}{\lambda}_{iklm}\langle\varepsilon_{lm}\rangle, \qquad \langle\varepsilon_{ik}\rangle = \overset{*}{s}_{iklm}\langle\sigma_{lm}\rangle \tag{1.15}$$

В работах [7] были рассчитаны эффективные тензоры упругих модулей и податливостей во втором приближении, которое получается из выражений (1.6). (1.7) и (1.14) при условии, что $Q' = X$

$$\overset{*}{\lambda}_{iklm} \approx \langle\lambda_{iklm}\rangle + \langle\lambda'_{ikpq}\overset{*}{M}_{pr,qs}\lambda'_{rslm}\rangle \tag{1.16}$$

$$\overset{*}{s}_{iklm} \approx \langle s_{iklm}\rangle + \langle s'_{ikpq}e_{vur}e_{njs}\overset{*}{M}_{pqvn,uj}s'_{rslm}\rangle \tag{1.17}$$

2. Покажем, что выражения (1.16) и (1.17) не дают вилку, внутри которой находится точное значение эффективных упругих модулей или податливостей. Для этого рассмотрим модель неоднородной среды, составленной из смеси изотропных компонентов, у которых модули сдвига совпадают. Для такой среды ряд (1.7) удается просуммировать [8], что дает

$$K^* = \langle K \rangle - \frac{D_K}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + {}^4/_3\mu}, \qquad \mu^* = \mu, \qquad D_K \equiv \langle K'^2 \rangle \tag{2.1}$$

Выражения (2.1) получаются при использовании как схемы Фойгта, так и схемы Ройсса. Совпадение результатов будет следствием того, что обе схемы приводят к точному значению эффективных упругих модулей.

Для установления] соотношений между точным значением эффективных упругих модулей и их приближенными значениями в схемах Фойгта и Ройсса обратим внимание на то, что один из рядов разложения эффективных упругих модулей или податливостей будет знакопостоянным, а другой — знакопеременным. Действительно, для рассматриваемой модели неоднородной среды оператор Q' может быть представлен в схемах Фойгта и Ройсса, соответственно, следующими выражениями:

$$Q_{ij}' = \frac{1}{4\pi} \nabla_i \frac{1}{r} * \alpha' \nabla_j, \qquad \alpha' \equiv x' \sum_0^\infty \xi^n \tag{2.2}$$

$$Q_{ijkl}' = \frac{1}{2}\left(\delta_{ij} + \frac{1}{4\pi} \nabla_i \nabla_j \frac{1}{r} *\right) \beta' \delta_{kl}, \qquad \beta' \equiv -y' \sum_0^\infty \eta^n \tag{2.3}$$

$$x \equiv \frac{K}{\langle K + {}^4/_3\mu \rangle}, \qquad y \equiv \frac{1}{K} \left\langle \frac{1}{K} + \frac{3}{4\mu} \right\rangle^{-1} \tag{2.4}$$

$$\xi \equiv (c_1 - c_2)(x_1 - x_2), \qquad \eta \equiv (c_1 - c_2)(y_1 - y_2)$$

Здесь знаком звездочка обозначена операция интегральной свертки, а индексы в выражениях (2.4) указывают номер компонента смеси. Поскольку ξ и η имеют разный знак, один из рядов (2.2) или (2.3) будет знакопостоянным, а другой — знакопеременным. Поэтому, обозначая эффективные модули всестороннего сжатия, рассчитанные в n-м приближении в схемах Фойгта и Ройсса через $K_V^{(n)}$ и $K_R^{(n)}$, найдем

$$K^* = K_V^{(n)} + \Delta K_V^{(n)} = K_R^{(n)} + \Delta K_R^{(n)} \tag{2.5}$$

$$K_V^{(n)} = \langle K \rangle - \frac{D_K}{\langle K + {}^4/_3\mu \rangle} \sum_0^{n-2} \xi^k \tag{2.6}$$

$$\frac{1}{K_R^{(n)}} = \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle - D_{1/K} \left\langle \frac{1}{K} + \frac{3}{4\mu} \right\rangle^{-1} \sum_0^{n-2} \eta^k \tag{2.7}$$

Сопоставляя выражения (2.1) с равенствами (2.6) и (2.7), получим

$$\Delta K_V^{(n)} = -\frac{D_K}{\langle K + {}^4/_3\mu \rangle} \frac{\xi^{n-1}}{1 - \xi} \tag{2.8}$$

$$\Delta K_R^{(n)} = K_R^{(n)} K^* D_{1/K} \left\langle \frac{1}{K} + \frac{3}{4\mu} \right\rangle^{-1} \frac{\eta^{n-1}}{1 - \eta} \tag{2.9}$$

Отсюда видно, что при четных n поправки $\Delta K_V^{(n)}$ и $\Delta K_R^{(n)}$ имеют одинаковый знак, а при нечетных — их знаки противоположны. Таким образом, четные приближения дают для $K_V^{(n)}$ и $K_R^{(n)}$ значения, лежащие по одну сторону от K^*. Напротив, нечетные приближения образуют вилку, внутри которой находится точное значение эффективного модуля K^*.

3. Рассмотрим теперь более общий случай смеси двух изотропных компонентов, отличающихся не только объемным, но и сдвиговым модулем. В этом случае точных значений эффективных упругих модулей найти не удается. Во втором приближении получаются следующие результаты:

$$K_V^{(2)} = \langle K\rangle - \frac{D_K}{\langle K + {}^4/_3\mu\rangle}, \qquad \mu_V^{(2)} = \langle\mu\rangle - \frac{2D_\mu\langle K+2\mu\rangle}{5\langle\mu\rangle\langle K+{}^4/_3\mu\rangle} \tag{3.1}$$

$$\frac{1}{K_R^{(2)}} = \left\langle\frac{1}{K}\right\rangle - D_{1/K}\left\langle\frac{1}{K}+\frac{3}{4\mu}\right\rangle^{-1}$$

$$\frac{1}{\mu_R^{(2)}} = \left\langle\frac{1}{\mu}\right\rangle - \frac{2}{5}D_{1/\mu}\left\langle\frac{1}{K}+\frac{9}{8\mu}\right\rangle\left[\left\langle\frac{1}{\mu}\right\rangle\left\langle\frac{1}{K}+\frac{3}{4\mu}\right\rangle\right]^{-1} \tag{3.2}$$

В третьем приближении схемы Фойгта эффективный тензор упругих модулей определяется выражением

$$\lambda_{iklm}^{(3)} = \lambda_{iklm}^{(2)} + \langle\lambda'_{ikpq}G_{pr,\,qs}*\lambda'_{rstv}G_{tj,\,vn}*\lambda'_{jnlm}\rangle \tag{3.3}$$

Отсюда

$$K_V^{(3)} = K_V^{(2)} + [D_K^{(3)}\delta_{pq}\delta_{rs} + \langle K'^2\mu'\rangle D_{pqrs}]\, I_{krls}^{ipjq}\delta_{ij}\delta_{kl}$$

$$\mu_V^{(3)} = \mu_V^{(2)} + {}^1/_5\,[\langle K'\mu'^2\rangle\,\delta_{pq}\delta_{rs} + D_\mu^{(3)}D_{pqrs}]\, I_{krls}^{ipjq}D_{ijkl} \tag{3.4}$$

где

$$I_{krls}^{ipjq} \equiv \frac{1}{(8\pi^3)^3}\int \overline{G}_{ip,\,jq}(\mathbf{k}_1)\,\overline{G}_{kr,\,ls}(\mathbf{k}_2)\,\overline{\varphi}(\mathbf{k},\,|\mathbf{k}-\mathbf{k}_1|,\,|\mathbf{k}-\mathbf{k}_2|) \tag{3.5}$$

$$d\mathbf{k}d\mathbf{k}_1d\mathbf{k}_2, \qquad D_K^{(3)} \equiv \langle K'^3\rangle, \qquad D_\mu^{(3)} \equiv \langle\mu'^3\rangle$$

Здесь черта принята для обозначения интегрального преобразования Фурье, а через φ обозначена функция, описывающая координатную зависимость тринарной корреляционной функции тензора упругих модулей

$$\langle\lambda'_{ijkl}(\mathbf{r})\,\lambda'_{pqrs}(\mathbf{r}_1)\,\lambda'_{nmuv}(\mathbf{r}_2)\rangle = \langle\lambda'_{ijkl}(\mathbf{r}) \tag{3.6}$$

$$\lambda'_{pqrs}(\mathbf{r})\,\lambda'_{nmuv}(\mathbf{r})\rangle\,\varphi(\mathbf{r},\,\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2)$$

В выражении (3.5) учтено, что вследствие квазиоднородности и изотропности пространства имеет место соотношение

$$\varphi(\mathbf{r},\,\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2) = \varphi(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|,\,|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|,\,|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}|)$$

Для оценки знака корреляционной добавки третьего порядка рассмотрим для определенности полную девиаторную свертку интеграла (3.5). Девиаторные свертки Фурье-образов производных от функций Грина дают

$$D_{pqrs}D_{ijkl}\overline{G}_{ip,\,jq}\overline{G}_{kr,\,ls} = \frac{16}{9}(1-\varkappa)^2 + 2t^2 +$$

$$+\frac{1}{3}(1-t^2)(8\varkappa - 1 - 4\varkappa^2 - 12\varkappa^2t^2) \tag{3.7}$$

где $t \equiv \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 / k_1k_2$, Фурье-образ функции $\varphi(\mathbf{r},\,\mathbf{r}_1,\,\mathbf{r}_2)$ для изотропной среды с детерминированными границами между участками неоднородностей может быть представлен в виде [8]

$$\overline{\varphi}(\mathbf{k}',\,\mathbf{k}'',\,\mathbf{k}''') = \overline{\varphi}_0(\mathbf{k}')\,\overline{\varphi}_0(\mathbf{k}'')\,\overline{\varphi}_0(\mathbf{k}'''),\quad \overline{\varphi}_0(\mathbf{k}) = \frac{8\pi}{(1+k^2)^2} \tag{3.8}$$

Отсюда видно, что подынтегральное выражение величины $D_{pqrs}D_{ijkl}$ I_{krls}^{ipjq} будет положительно определенной функцией своих аргументов. Тем самым показано, что константа $D_{pqrs}\, D_{ijkl}\, I^{ipjq}_{krls} > 0$. Аналогично может быть показано, что тензорные свертки $\delta_{pq}\ \delta_{rs}\ D_{ijkl}\ I^{ipjq}_{krls}$ и $\delta_{pq}\ \delta_{rs}\ \delta_{ij}\ \delta_{kl}\ I^{ipjq}_{krls}$ будут положительными. Таким образом, знак корреляционных поправок третьего приближения определяется знаком центральных моментов третьего порядка упругих модулей K и μ.

Пусть теперь одновременно выполняются неравенства $(c_1 - c_2)(K_1 - K_2) > 0$ и $(c_1 - c_2)\ (\mu_1 - \mu_2) > 0$. Тогда, учитывая, что центральные моменты третьего порядка могут быть представлены в виде

$$< K'^2\ \mu' > = c_1 c_2\, (c_2 - c_1)\, (K_1 - K_2)^2\, (\mu_1 - \mu_2) \tag{3.9}$$

найдем, что корреляционные добавки третьего порядка к средним модулям K и μ отрицательны, т. е. знаки корреляционных поправок во втором и третьем приближениях совпадают. Аналогично можно рассмотреть высшие приближения метода и показать, что корреляционные поправки в случае $(c_1 - c_2)(K_1 - K_2) > 0$ и $(c_1 - c_2)(\mu_1 - \mu_2) > 0$ отрицательны.

Таким же методом может быть показано, что при указанных выше соотношениях между концентрациями и упругими модулями разложения K^* и μ^* по корреляционным функциям в схеме Ройсса описываются знакопеременным рядом.

Другой подход к определению вилки, внутри которой лежит истинное значение упругих модулей, основан на использовании вариационных принципов [4]. Такой подход позволил Хашину установить следующие границы для механических смесей:

$$\begin{gathered}
K_+ = \langle K \rangle - \frac{D_K}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + {}^4/_3 \mu_1}, \qquad K_- = \langle K \rangle - \frac{D_K}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + {}^4/_3 \mu_2} \\
\mu_+ = \langle \mu \rangle - \frac{D_\mu}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + b_1 \mu_1}, \qquad \mu_- = \langle \mu \rangle - \frac{D_\mu}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + b_2 \mu_2} \\
b_i \equiv \frac{9K_i + 8\mu_i}{6\,(K_i + 2\mu_i)}, \qquad K_1 > K_2, \quad \mu_1 > \mu_2
\end{gathered} \tag{3.10}$$

Здесь знаками плюс и минус обозначены соответственно верхняя и нижняя границы упругих модулей. Сопоставляя выражения (3.1) и (3.2) с границами Хашина (3.10), находим, что при $c_1 > c_2$ значения $K_V^{(2)}$ и $\mu_V^{(2)}$ будут находиться внутри вилки Хашина при концентрации первого компонента $c_1 = 1 - c_V$, а $K_R^{(2)}$ и $\mu_R^{(2)}$ — при $c_1 < 1 - c_R$. Здесь c_V и c_R определяются выражениями

$$\begin{gathered}
c_V = \frac{1}{2\,(1 + y_V)}, \qquad c_R = \frac{1}{2\,(1 + y_R)} \\
y_V = \frac{2}{3}\,\frac{\mu_1 - \mu_2}{K_1 - K_2}, \qquad y_R = y_V\,\frac{9}{16}\,\frac{K_1 K_2}{\mu_1 \mu_2}
\end{gathered} \tag{3.11}$$

Поскольку в рассматриваемом случае $K_1 > K_2$, $\mu_1 > \mu_2$ и $c_1 > c_2$ усреднение во втором приближении теории случайных функций дает $K_V^{(2)} > K^*$ и $K_R^{(2)} > K^*$ и аналогично для μ, упругие модули $K^{(2)}$ и $\mu^{(2)}$ будут находиться справа от точного значения K^* и μ^*. Поэтому, если $K_-^{(2)} < K_-$, его значением можно заменить правую границу вилки, где $K_-^{(2)}$ — меньшее из значений $K_V^{(2)}$ и $K_R^{(V)}$. При $c_1 < 1 - c_+$ оба значения $K_V^{(2)}$ и $K_R^{(2)}$ лежат внутри вилки Хашина, а при $c_1 < 1 - c_-$ лишь $K_-^{(2)}$. Здесь c_+ и c_- соответственно большее и меньшее значения из величин c_V и c_R. Аналогичные выводы имеют место и для модуля сдвига, причем концентрации c_V и c_R по-прежнему определяются соотношениями (3.11).

Если $K_1 > K_2$, $\mu_1 > \mu_2$, а $c_1 < c_2$, величины $K^{(2)}$ и $\mu^{(2)}$ лежат слева от точных значений эффективных упругих модулей K^* и μ^*. Это позволяет улучшить левую границу Хашина. В этом случае при $c_1 > c_+$ как $K_V^{(2)}$, так и $K_R^{(2)}$ лежат внутри вилки Хашина, а при $c_1 > c_-$ — лишь большее из них $K_+^{(2)}$.

В качестве иллюстрации рассмотрим случай, когда $K = {}^4/_3\,\mu$, $K_1 = 2$, $K_2 = 1$, $c_1 = 0.6$. Тогда $c_+ = c_- = {}^1/_3$. Отсюда находим, что $K_V = 1.6$, вилка без учета корреляций $K_V - K_R = 0.171$, вилка Хашина $K_+ - K_- = 0.029$ и улучшенная вилка с учетом второго приближения теории случайных функций $K_-^{(2)} - K_- = 0.022$.

4. Перейдем к рассмотрению упругих модулей поликристаллов. Ограничимся случаем кубической системы. Тогда тензоры упругих модулей и податливостей кристаллита в кристаллографической системе координат могут быть записаны в виде

$$\lambda_{iklm} = \lambda_1{}^\circ\delta_{ik}\delta_{lm} + 2\lambda_2{}^\circ\delta_{i(l}\delta_{m)k} + \lambda_3\Sigma\delta_{in}\delta_{kn}\delta_{ln}\delta_{mn} \qquad (4.1)$$

$$s_{iklm} = s_1{}^\circ\delta_{ik}\delta_{lm} + 2s_2{}^\circ\delta_{i(l}\delta_{m)k} + s_3\Sigma\delta_{in}\delta_{kn}\delta_{ln}\delta_{mn} \qquad (4.2)$$

Здесь одноиндексные упругие постоянные связаны с двухиндексными соотношениями

$$\lambda_1{}^0 = c_{12}, \quad \lambda_2{}^0 = c_{44}, \quad \lambda_3 = c_{11} - c_{12} - 2\,c_{44} \qquad (4.3)$$
$$s_1{}^0 = s_{12}, \qquad 4s_2{}^0 = s_{44}, \qquad s_3 = s_{11} - s_{12} - {}^1/_2 s_{44}$$

Во втором приближении теория случайных функций приводит к следующим выражениям эффективных модулей всестороннего сжатия и сдвига [2,3,7]:

$$\lambda_{iklm}^{(2)} = \lambda_1\delta_{ik}\delta_{lm} + 2\lambda_2\delta_{i(l}\delta_{m)k} - \frac{(3\lambda_1 + 8\lambda_2)\,\lambda_3{}^2}{125\lambda_2\,(\lambda_1 + 2\lambda_2)}\,D_{iklm} \qquad (4.4)$$

$$s_{iklm}^{(2)} = s_1\delta_{ik}\delta_{lm} + 2s_2\delta_{i(l}\delta_{m)k} - \frac{(6s_1 + 7s_2)\,s_3{}^2}{250s_2\,(s_1 + s_2)}\,D_{iklm} \qquad (4.5)$$

$$(\lambda_1 = \lambda_1{}^\circ + {}^1/_5\lambda_3,\ \lambda_2 = \lambda_2{}^\circ + {}^1/_5\lambda_3,\ s_1 = s_1{}^\circ + {}^1/_5 s_3,\ s_2 = s_2{}^\circ + {}^1/_5 s_3)$$

Из выражений (4.4) и (4.5) видно, что

$$\mu_V{}^{(2)} = \lambda_2 - \frac{(3\lambda_1 + 8\lambda_2)\,\lambda_3{}^2}{125\lambda_2\,(\lambda_1 + 2\lambda_2)}, \qquad \frac{1}{\mu_R{}^{(2)}} = 4s_2 - \frac{2\,(6s_1 + 7s_2)\,s_3{}^2}{125s_2\,(s_1 + s_2)} \qquad (4.6)$$

тогда как эффективный объемный модуль совпадает со средним [13]. В третьем приближении для схемы Фойгта из (3.3) найдем

$$\mu_V{}^{(3)} = \mu_V{}^{(2)} + {}^1/_{50}\lambda_3 A_{pqkl}^{ijrs} I_{krls}^{ipjq} \qquad (4.7)$$

Здесь автокорреляционный тензор определяется выражением [14]

$$A_{pqkl}^{ijrs} = \frac{\lambda_3{}^2}{60\cdot 7!!}\,(35\delta_{pqkl}^{ijrs} + 63\delta_{ijrs}\delta_{pqkl} - 45\beta_{pqkl}^{ijrs}) \qquad (4.8)$$

причем $\delta_{ij\ldots l}$ есть сумма произведений δ-символов Кронекера со всевозможными перестановками из всех 2 n индексов. Количество слагаемых такой суммы равно $(2n-1)!!$. Через β_{pqkl}^{ijrs} в выражении (4.8) обозначено

$$\beta_{pqkl}^{ijrs} \equiv \delta_{ij}\delta_{rspqkl} + \delta_{ir}\delta_{jspqkl} + \delta_{is}\delta_{jrpqkl} + \delta_{jr}\delta_{ispqkl} + \delta_{js}\delta_{irpqkl} + \delta_{rs}\delta_{ijpqkl} \qquad (4.9)$$

Для оценки знака корреляционной добавки в выражении (4.7) рассмотрим свертку автокорреляционного тензора с Фурье-образами производных функций Грина. Проводя вычисления, аналогично тому как это было сделано при выводе соотношения (3.7), получим

$$A_{pqkl}^{ijrs}\overline{G}_{ip,\,jq}\overline{G}_{rk,\,sl} = \frac{1}{5!!\,7!!}\frac{\lambda_3^2}{\lambda_2^2}[(190 - 155\varkappa + 12\varkappa^2) + + (1 - t^2)(72\varkappa - 1 - 24\varkappa^2) + 3(1 - t^2)^2\varkappa^2] \tag{4.10}$$

Так как $1/4 < \varkappa \leqslant 1$, выражение (4.10) будет положительно определенным. Отсюда следует, что величина $A_{pqkl}^{ijrs} I_{rksl}^{ipjq} > 0$. Таким образом, знак корреляционной добавки третьего порядка в схеме Фойгта определяется знаком упругой постоянной λ_3.

Из выражений (4.3) следует, что $\lambda_3 s_3 < 0$. Поэтому знаки корреляционных добавок к модулям упругости и податливости в третьем приближении противоположны, т. е. модули сдвига с учетом корреляций третьего порядка образуют, как и в случае механических смесей, вилку, внутри которой лежит точное значение эффективного модуля сдвига.

Из рассмотренного следует, что в случае $\lambda_3 < 0$ эффективные модули сдвига во втором приближении $\mu_V^{(2)}$ и $\mu_R^{(2)}$ больше точного значения μ^*, а в случае $\lambda_3 > 0$ оба значения $\mu_V^{(2)}$ и $\mu_R^{(2)}$ меньше μ^*.

Полученные результаты могут быть использованы для установления границ, внутри которых лежит точное значение эффективного модуля сдвига. Ограничимся для определенности случаем $\lambda_3 < 0$. Тогда будем иметь следующие неравенства:

$$\mu_R < \mu^* < \mu^{(2)} < \mu_V, \qquad \mu_R = \frac{1}{4s_2}, \qquad \mu_V = \lambda_2 \tag{4.11}$$

Так как в рассматриваемом случае $\lambda_3 < 0$ имеет место неравенство $\mu_R^{(2)} < \mu_V^{(2)}$, правая граница μ_V может быть заменена на $\mu_R^{(2)}$.

Другой метод сужения вилки был разработан Хашиным [5]. Им были получены следующие неравенства:

$$\mu_R < G_1^* < \mu^* < G_2^* < \mu_V \tag{4.12}$$

Здесь обозначено

$$G_1^* = G_1 + 3\left(\frac{5}{G_2 - G_1} - 4\beta_1\right)^{-1}, \qquad G_2^* = G_2 - 2\left(\frac{5}{G_2 - G_1} + 6\beta_2\right)^{-1} \tag{4.13}$$

$$\beta_i = -\frac{3(K + 2G_i)}{5G_i(3K + 4G_i)}, \qquad G_1 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$$

$$G_2 = c_{44}, \ K = c_{11} + 2c_{12}$$

Непосредственным расчетом можно показать, что имеют место следующие неравенства; $\mu_R^{(2)} < \mu_V^{(2)} < G_2^*$. Поэтому в качестве правой границы следует брать значение $\mu_R^{(2)}$, а левой G_1^*

$$G_1^* < \mu^* < \mu_R^{(2)} \tag{4.14}$$

Выражение (4.14) определяет улучшенную вилку для эффективного модуля сдвига поликристаллов кубической структуры. В противоположном случае $\lambda_3 > 0$ вместо неравенства (4.14) будем иметь

$$\mu_V^{(2)} < \mu^* < G_1 \tag{4.15}$$

Для иллюстрации в таблице приводятся значения модулей сдвига поликристаллов кубической структуры. В таблице значения упругих постоянных взяты с точностью до трех значащих цифр. Значения средних и эффективных упругих модулей приведены с точностью до пяти значащих цифр, три из которых соответствуют исходной точности экспериментальных данных, а две последние позволяют рассчитать с точностью до двух значащих цифр абсолютные величины разностей модулей.

	Ag	Au	Cu	K	Li	Mo
c_{11}	12.40	18.63	16.84	0.458	1.480	45.5
c_{12}	9.34	15.68	12.14	0.374	1.250	17.57
c_{44}	4.61	4.20	7.54	0.263	1.080	10.99
μ_R	2.5537	2.4131	4.0034	0.0846	0.2479	12.0135
G_1^*	2.9017	2.7206	4.5964	0.1119	0.3614	12.0954
$\mu_R^{(2)}$	3.0558	2.8534	4.8792	0.1373	0.4945	12.0963
$\mu_V^{(2)}$	3.0676	2.8573	4.9086	0.1428	0.5387	12.0970
G_2^*	3.0886	2.8780	4.9445	0.1453	0.5820	12.1034
μ_V	3.3780	3.1101	5.4640	0.1747	0.6940	12.1300
z	21	18	23	32	66	25

В случае $\lambda_3 < 0$ разность $G^*_2 - G^*_1$ определяет вилку Хашина, а $\mu_R^{(2)} - G_1^*$ — улучшенную вилку. В последней колонке таблицы приведена величина z, характеризующая сужение вилки Хашина за счет замены $G_2^* \to \mu_R^{(2)}$. Величина z определяется выражениями

$$z = \left(\frac{G_2^* - G_1^*}{\mu_R^{(2)} - G_1^*} - 1 \right) 100\%, \qquad z = \left(\frac{G_1^* - G_2^*}{\mu_V^{(2)} - G_2^*} - 1 \right) 100\% \tag{4.16}$$

первое из которых относится к условию $\lambda_3 < 0$, а второе к $\lambda_3 > 0$. Во всех случаях за исключением молибдена $\lambda_3 < 0$ и поэтому $G_2^* > G_1^*$. Для молибдена $G^*_2 < G^*_1$, однако для удобства значения G^*_1 и G^*_2 записаны в таблице по-прежнему в возрастающем порядке. Из таблицы видно, что рассмотренный метод позволяет сузить хашинские границы на несколько десятков процентов.

Поступила 23 XI 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. Proc. Phys. Soc., 1952 65 A, No. 389.
2. Лифшиц И. М., Розенцвейг Л. Н. К теории упругих свойств поликристаллов. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, т. 16, № 11.
3. Даринский Б. М., Шермергор Т. Д. Упругие модули поликристаллов кубической структуры. ПМТФ, 1965, № 4.
4. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach of the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. J. Mech. Phys. Solids, 1963, vol. 11, No. 2.
5. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. J. Mech. Phys. Solids, 1962, vol. 10, No. 4.
6. Gene S. Hashin bounds for aggregates of cubic crystals. J. Grad. Res. Center, 1967, vol. 36, No. 1.
7. Даринский Б. М., Фокин А. Г., Шермергор Т. Д. К расчету упругих модулей поликристаллов. ПМТФ, 1967, № 5.
8. Фокин А. Г., Шермергор Т. Д. К вычислению упругих модулей гетерогенных сред. ПМТФ, 1968, № 3.
9. Кунин И. А. Тензор Грина для анизотропной упругой среды с источниками внутренних напряжений. Докл. АН СССР, 1964, т. 157, № 6.
10. Татарский В. И. Распространение волн в турбулентной атмосфере. «Наука», 1967.
11. Кунин И. А. Теория дислокаций. Приложение к книге Схоутена Я. А. Тензорный анализ для физиков. «Наука», 1965.
12. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. Изд-во иностр. лит., 1963.
13. Флимен И., Динс Г. Дж. Механические свойства металлов. Сб. Реология под редакцией Эйриха Ф. Изд-во иностр. лит., 1962.
14. Фокин А. Г., Шермергор Т. Д. Корреляционные функции упругого поля квазиизотропных твердых тел. ПММ, 1968, т. 32, вып. 4.