

**О РАСПРЕДЕЛЕНИИ ПОСТОЯННЫХ УПРУГОСТИ
В ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛАХ**

В. А. Быков, С. Д. Волков, Н. А. Глинских

(Свердловск)

Свойства упругости поликристаллических металлов уже давно привлекают внимание исследователей в связи с необходимостью усовершенствования классической механики идеально однородных бесструктурных сред. В работах Фойгта [1], Рейсса [2], Бруггемана [3], Шмида, Губера, Боаса [4,5], Лифшица, Розенцвейга [6], Херши [7], Крёнера [8] и др. предпринимались попытки вычисления постоянных упругости квазиизотропного поликристалла путем усреднения кристаллографических постоянных упругости. При тех или иных частных предположениях относительно взаимодействия монокристаллами вводились поправки к средним постоянным упругости, позволяющие учитывать это взаимодействие. Моменты второго и более высоких порядков в упомянутых работах не определялись. Между тем, при самых общих условиях взаимодействия между зернами поликристалла для вычисления макроскопических постоянных упругости необходимо определить, наряду с моментами первого порядка (средними значениями), смешанные моменты второго порядка [9]. Однако моменты второго и более высоких порядков нужны не только для вычисления макроскопических постоянных упругости. Эти постоянные сравнительно легко определяются экспериментально. Поэтому задача вычисления макроскопических постоянных имеет лишь чисто теоретическое значение. Она представляет собой промежуточную ступень на пути к проблеме обобщения классической механики на микроскопически неоднородные, в том числе и поликристаллические среды.

Одна из простейших и, вместе с тем, основных задач этой проблемы может быть сформулирована как обобщенная задача теории упругости: по заданным внешним нагрузкам требуется в упругом теле найти распределение напряжений и деформаций как первого рода (макроскопических), так и второго рода (микроскопических). Приближенный метод решения этой задачи изложен в работе [9].

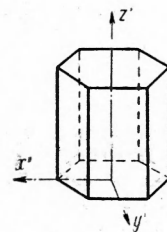
Для уточнения решения необходимы дальнейшие исследования совместных распределений напряжений, деформаций и постоянных упругости. Ниже изложены результаты вычисления плотностей частных распределений постоянных упругости в сплошной упругой квазиизотропной поликристаллической среде с гексагональной решеткой монокристаллов. В отличие от работы [9], для вычисления моментов используются переменные Эйлера, в которых плотность совместного распределения случайных величин легко находится непосредственно [11].

Постановка задачи. Пусть квазиизотропная упругая среда с гексагональной симметрией кристаллической решетки (фиг. 1) заполняет макроскопически элементарную окрестность данной точки тела. Известны кристаллографические постоянные упругости a_{ij}' , заданные матрицей

$$\begin{pmatrix} a_{11}' & a_{12}' & a_{13}' & & & \\ a_{12}' & a_{11}' & a_{13}' & & & \\ a_{13}' & a_{13}' & a_{33}' & & & \\ & & & a_{44}' & & \\ & & & & a_{44}' & \\ & & & & & 2(a_{11}' - a_{12}') \end{pmatrix}$$

Полагая, что в силу квазиизотропности среды все направления кристаллографических осей (x' , y' , z') равновероятны, требуется найти плотности распределения постоянных a_{ij} в фиксированной по отношению к поликристаллу системе отсчета (x , y , z) (фиг. 2), заданной таблицей направляющих косинусов

	x'	y'	z'
x	α_1	α_2	α_3
y	β_1	β_2	β_3
z	γ_1	γ_2	γ_3



Фиг. 1

Моменты распределения. Формулы преобразования постоянных упругости при повороте системы координат имеют вид

$$a_{ij} = \sum_{m,n=1}^6 a_{mn}' q_{mi} q_{nj} \quad (i, j = 1, \dots, 6) \quad (1)$$

где q_{mi} , q_{nj} — комбинации направляющих косинусов [10]. В рассматриваемом случае гексагональной симметрии постоянных упругости из (1) имеем

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad a_{11} &= a'_{11} + A\gamma_1^2 - B\gamma_1^4, & \text{(IV)} \quad a_{45} &= -D\gamma_1\gamma_2 - 4B\gamma_1\gamma_2\gamma_3^2 \\ \text{(II)} \quad a_{12} &= a'_{12} + C\gamma_3^2 - B\gamma_1^2\gamma_2^2, & \text{(V)} \quad a_{14} &= -2C\gamma_2\gamma_3 - 2B\gamma_1^2\gamma_2\gamma_3 \\ \text{(III)} \quad a_{44} &= a'_{44} + D\gamma_1^2 - 4B\gamma_2^2\gamma_3^2, & \text{(VI)} \quad a_{16} &= A\gamma_1\gamma_2 - 2B\gamma_1^3\gamma_2 \end{aligned} \quad (2)$$

где (I) — (VI) — группы постоянных упругости по классификации Бехтерева ¹,

$$\begin{aligned} A &= a'_{44} + 2a'_{13} - 2a'_{11}, & B &= 2a'_{13} + a'_{44} - a'_{33} - a'_{11} \\ D &= 2a'_{11} - 2a'_{12} - a'_{44}, & C &= a'_{12} - a'_{13} \end{aligned}$$

Переходим в (2) к переменным Эйлера ψ , φ , θ :

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \sin \varphi \sin \theta, \quad \gamma_2 = \cos \varphi \sin \theta, \quad \gamma_3 = \cos \theta \\ (0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad 0 \leq \psi \leq 2\pi) \end{aligned}$$

В новых переменных плотность совместного распределения углов для квазизотропной среды определяется формулой [11]

$$\rho(\theta, \varphi, \psi) = \frac{1}{8\pi^2} \sin \theta$$

Введя обозначения

$$c_{11} = a_{11} - a'_{11}, \quad c_{12} = a_{12} - a'_{12}, \quad c_{44} = a_{44} - a'_{44}$$

где c_{11} , c_{12} , c_{44} — новые случайные величины — функции углов Эйлера, находим начальные моменты c_{11}^n

$$\overline{c_{11}^n} = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (A \sin^2 \varphi \sin^2 \theta - B \sin^4 \varphi \sin^4 \theta)^n \cdot \rho(\theta, \varphi, \psi) d\varphi d\psi d\theta \quad (3)$$

В частности, при $n = 1, 2, \dots$ имеем

$$\overline{c_{11}} = \frac{1}{3} A - \frac{1}{5} B, \quad \overline{c_{11}^2} = \frac{1}{5} A^2 - \frac{2}{7} AB + \frac{1}{9} B^2, \dots \quad (4)$$

Аналогично находятся моменты других постоянных.

Для построения плотности распределения по моментам пужны сведения о кристаллографических постоянных упругости. Дальнейший расчет прогведем на примере кристаллов магния, используя опытные данные Бриджмена [12], (5)

$$a'_{11} = 20.4, \quad a'_{12} = -5.2, \quad a'_{13} = -5.2, \quad a'_{44} = 87.8, \quad a'_{33} = 20.4 \quad (\text{в } 10^{-13} \text{ см}^2/\text{дин})$$

Для этих значений упругих постоянных получаем $A = B = 36.6 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{дин}$. Следует заметить, что экспериментальные данные кристаллографических постоянных могут быть проконтролированы, так как абсолютные моменты $|\overline{c_{ij}^n}|$, в которые входят эти постоянные, должны удовлетворять теореме об абсолютных моментах [13]

$$|\overline{c_{ij}}| \leq \sqrt{|\overline{c_{ij}^2}|} \leq \sqrt[3]{|\overline{c_{ij}^3}|} \leq \sqrt[4]{|\overline{c_{ij}^4}|}$$

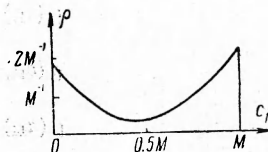
Нетрудно проверить, что данные (5) этому неравенству удовлетворяют.

Плотности распределения. Известно, что не всякая последовательность чисел является последовательностью моментов некоторой функции распределения. Иными словами, прежде чем находить плотности распределения постоянных упругости, необходимо убедиться в существовании и единственности функции распределения, соответствующие условия (в частности, критерий Хаусдорфа и условия теоремы единственности) для последовательности моментов, определенных по опытным данным (5), удовлетворяются.

¹ В каждой группе выписано по одной постоянной упругости. Формулы для других постоянных получаются циклической перестановкой индексов направляющих косинусов.

Постоянные упругости a_{ij} изменяются внутри интервалов, границы которых определяются неравенствами

$$\begin{aligned} 0 \leq c_{11} \leq \frac{1}{4} B, & \quad -\frac{1}{4} B \leq a_{14} \leq \frac{1}{4} B \\ 0 \leq c_{12} \leq \frac{1}{4} B, & \quad -\frac{9}{32} B \leq a_{45} \leq \frac{9}{32} B \\ 0 \leq c_{44} \leq B, & \quad -\frac{1}{8} B \leq a_{16} \leq \frac{1}{8} B \end{aligned} \quad (6)$$



Фиг. 3

На интервалах (6) найдем плотности распределения приближенно, пользуясь разложениями типа

$$\rho(c_{11}) = a + bc_{11} + dc_{11}^2 \quad (7)$$

где постоянные a, b, d определяются из системы уравнений

$$\int_0^M \rho(c_{11}) dc_{11} = 1, \quad \int_0^M c_{11} \rho(c_{11}) dc_{11} = \bar{c}_{11}, \quad \int_0^M c_{11}^2 \rho(c_{11}) dc_{11} = \bar{c}_{11}^2 \quad (8)$$

Здесь

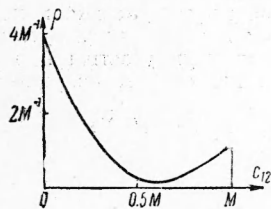
$$M = \frac{1}{4} B, \quad \bar{c}_{11} = \frac{2}{15} B, \quad \bar{c}_{11}^2 = \frac{8}{315} B^2$$

Подстановка (7) в (8) и интегрирование приводят к системе линейных неоднородных уравнений. Решая эту систему, находим

$$\rho(c_{11}) = \frac{209}{105M} - \frac{236}{35M^2} c_{11} + \frac{50}{7M^3} c_{11}^2 \quad (9)$$

Для проверки точности вычисления плотности распределения (7) найдем моменты третьего и четвертого порядка. Затем сравним их с моментами, определенными по точной формуле (3).

Имеем



Фиг. 4

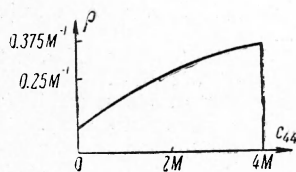
$$(\bar{c}_{11}^3)' = \int_0^M c_{11}^3 \rho(c_{11}) dc_{11} = 0.00531 B^3 \quad (10)$$

$$(\bar{c}_{11}^4)' = \int_0^M c_{11}^4 \rho(c_{11}) dc_{11} = 0.00116 B^4$$

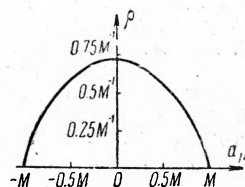
Соответствующие значения по формуле (3)

$$\bar{c}_{11}^3 = 0.00532 B^3, \quad \bar{c}_{11}^4 = 0.00117 B^4 \quad (11)$$

Величины (10) отличаются от (11) не более чем на 0,3%, что свидетельствует о наличии вполне удовлетворительного приближения.



Фиг. 5



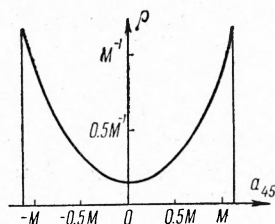
Фиг. 6

На фиг. 3 приведен график плотности распределения c_{11} , построенный по уравнению (9). Как видно из графика, распределение постоянной a_{11} является антимодальным: среднее значение постоянной менее вероятно, чем предельные значения.

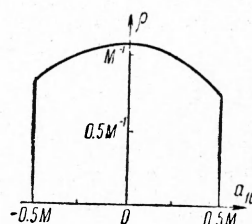
Аналогичным путем находим плотности частных распределений c_{12} , c_{44} , a_{14} , a_{45} , a_{16}

$$\begin{aligned}\rho(c_{12}) &= \frac{1}{35M} (139 - 428 M^{-1} c_{12} + 330 M^{-2} c_{12}^2) \\ \rho(c_{44}) &= \frac{1}{35B} (9 + 72B^{-1} c_{44} - 30 B^{-2} c_{44}^2) \\ \rho(a_{14}) &= \frac{1}{168M} (125 - 123 M^{-2} a_{14}^2) \\ \rho(a_{45}) &= \frac{1}{81 \cdot 567 M} (5991 + 38456 M^{-2} a_{45}^2) \\ \rho(a_{16}) &= \frac{1}{28M} (31 - 36 M^{-2} a_{16}^2)\end{aligned}\quad (12)$$

На фиг. 4—8 приведены графики плотностей частных распределений постоянных упругости, построенные по уравнениям (12) для квазиизотропного поликристалла магния.



Фиг. 7



Фиг. 8

Заключение. Основные результаты работы заключаются в следующем. Для сплошной квазиизотропной упругой поликристаллической среды с гексагональной микроструктурой при самых общих предположениях относительно взаимодействия между кристаллами по опытным данным для кристаллографических постоянных упругости магния вычислены плотности частных распределений постоянных упругости в произвольной фиксированной относительно поликристалла декартовой системе координат.

Уральский политехнический институт

Поступила 16 XI 1960

ЛИТЕРАТУРА

1. Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik. Berlin, 1910.
2. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. Z. angew. Math. und Mech., 1929, Bd. 9, H. 1.
3. Bruggeman D. A. G. Utrechter Dissert. 1930.
4. Huber A. u. Schmid E. Bestimmung der elastischen Eigenschaften quasiisotroper Vielkristalle durch Mittelung. Helv. phys. acta, 1934, Bd. 7, H. 6.
5. Voas W. u. Schmid E. Zur Berechnung physikalischen Konstanten quasiisotroper Vielkristalle durch Mittelung. Helv. phys. acta, 1934, Bd. 7, H. 6.
6. Лифшиц Е. М. и Розенцвейг Л. П. К теории упругих свойств поликристаллов. ЖЭТФ, 1948, т. XVI, вып. 6.
7. Hershey A. V. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. J. Appl. Mech., 1954, vol. 21, № 3.
8. Kröner E. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. Z. Phys., 1958, Bd. 151, № 4.
9. Волков С. Д. Статистическая теория прочности. Машгиз, 1960.
10. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела. ГИИТЛ, 1950.
11. Волков С. Д., Клиnsких Н. А. О распределении постоянных упругости в квазиизотропных поликристаллах. Доклад на I Всесоюзном съезде по теоретической и прикладной механике. М., 1960.
12. Bridgman P. W. Magnesium. Phys. Rev., 1931, vol. 37; Proc. Amer. Acad. Arts and Sci., 1932, vol. 67.
13. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. ГИИТЛ, 1950.