

具有六方晶系结构的多晶体材料弹性常数 ——Y 弹性常数*

林 政^{1)†} 刘 2)

1) 中国航空学会, 北京 100012)

2) 北京惠利尔知识产权信息咨询有限责任公司, 北京 100028)

(2009 年 2 月 17 日收到, 2009 年 4 月 22 日收到修改稿)

利用最近提出的新的物理参量——Y 弹性常数, 将其应用于具有六方晶系结构的多晶体材料, 推导了六方晶系结构的多晶体材料之 Y 弹性常数, 通过算例与具有六方晶系结构的多晶体材料之 X 射线弹性常数进行了比较. 运用这个 Y 弹性常数进一步推导出的多晶体材料整体之机械弹性常数的表达式与 Kneer 的研究结果中的表达式虽然形式不同, 但针对具体材料所计算的结果却完全符合.

关键词: Y 弹性常数, 六方晶系, 多晶体材料

PACC: 6220D

1. 引 言

在弹性力学的研究中, 材料弹性常数的确定是研究者们关注的课题^[1-4]. 有学者推导出利用嵌入原子法(EAM)势表达的力学稳定性判据, 提出了确定势函数的适用范围的理论判据, 给出了相应的数值计算方法, 并计算了 Ni 单晶体的弹性常数^[5]. 进一步, 有学者在研究立方结构 Fe 基磁性材料的弹性常数中提出晶格常数是决定弹性常数计算准确度的关键因素, 势函数的选择也会影响其计算的准确度^[6]. 这些研究均局限于单晶体材料的弹性常数. 而由单晶体材料的弹性常数出发, 研究由其构成的多晶体材料的弹性常数方面, 我们最近提出了一个新的物理参量——Y 弹性常数, 并阐述了其物理含义^[7]. 同时将其应用于具有立方晶系结构的多晶体材料, 推导了立方晶系结构的多晶体材料的 Y 弹性常数, 通过算例与具有立方晶系结构的多晶体材料之 X 射线弹性常数进行了比较. 运用这个 Y 弹性常数进一步推导出的多晶体材料整体机械弹性常数的表达式与 Kröner 的研究结果^[2]完全符合.

本文将 Y 弹性常数这一新的物理参量拓展至具有六方晶系的多晶体材料领域中, 分别根据应力一定的

Reuss 模型^[3]、应变一定的 Voigt 模型^[4]以及分别建立在上述两个模型之上并考虑到晶体之间相互作用的 Kröner-Reuss 模型和 Kröner-Voigt 模型^[7], 就由六方晶系结构的单晶体所构成的多晶体材料的 Y 弹性常数及其机械弹性常数的理论计算进行论述. 本文采用与文献 [7] 类似的形式, 并尽量采用矩阵表示.

2. Y 弹性常数的导出和材料整体的弹性常数

2.1. 宏观分析

图 1 示出了材料整体坐标系 [S] 与试验坐标系 [L] 中的方向 L_3 之间的方位关系. 不妨设方向 L_3 相对于材料整体坐标系 [S] 的方向余弦为 $L_3(l, m, n)$, 则由图 1 可得

$$\begin{aligned} l &= \sin\psi \cos\phi, \\ m &= \sin\psi \sin\phi, \\ n &= \cos\psi. \end{aligned} \quad (1)$$

因此, 方向 L_3 的宏观应变 $\epsilon_{\phi\psi}$ 为^[8,9]

$$\epsilon_{\phi\psi} = l^2 \epsilon_{11} + m^2 \epsilon_{22} + n^2 \epsilon_{33} + mn\gamma_{23} + nl\gamma_{31} + lm\gamma_{12}. \quad (2)$$

当材料整体为各向同性时, 其应力与应变为

† E-mail: zheng9207@yahoo.com.cn

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \\ \gamma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/E & -\nu/E & -\nu/E & 0 & 0 & 0 \\ -\nu/E & 1/E & -\nu/E & 0 & 0 & 0 \\ -\nu/E & -\nu/E & 1/E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \\ \tau_{12} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

这里 E , ν 和 μ 分别为多晶体材料的 Young 模量、Poisson 比和剪切模量。

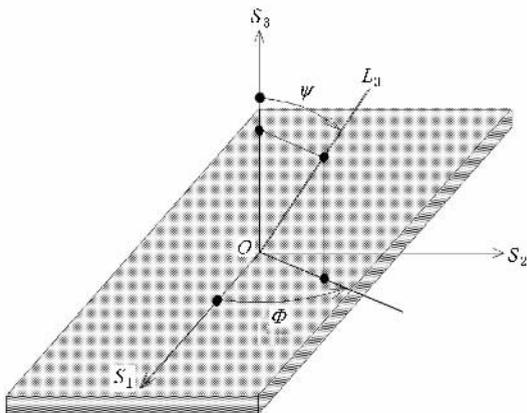


图 1 宏观分析示意图

当材料整体仅受单轴应力作用(即 $\sigma_{11} \neq 0$, 其

他的应力分量均为零)且 $\phi = 0^\circ$ 的条件下,宏观应变与应力 σ_{11} 之比由(3)式最终可得

$$\frac{\epsilon_{\phi\phi}}{\sigma_{11}} = \left(\frac{1+\nu}{E} \right) \sin^2 \psi - \left(\frac{\nu}{E} \right). \quad (4)$$

2.2. 微观分析

2.2.1. 根据 Reuss 模型进行的分析

现着眼于图 1 中 L_3 方向上的应变,令 L_3 方向相对于六方晶体坐标系 $[K]$ 的方向余弦为 $L_3(u, v, w)$,则 L_3 方向上的宏观应变 ϵ^{L_3} (与 $\epsilon_{\phi\phi}$ 等同)与坐标系 $[K]$ 中的应变成分 $(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}, \gamma_{xy})$ 的关系为^[8,9]

$$\epsilon^{L_3} = u^2 \epsilon_x + v^2 \epsilon_y + w^2 \epsilon_z + vw \gamma_{yz} + wu \gamma_{zx} + uv \gamma_{xy}. \quad (5)$$

相对于坐标系 $[K]$,六方晶系结构单晶体的应变与应力的关系为^[9]

$$\begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(s_{11} - s_{12}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

将(6)式代入(5)式并整理后可得

$$\begin{aligned} \epsilon^{L_3} = & s_{11} (u^2 \sigma_x + v^2 \sigma_y + 2uv\tau_{xy}) \\ & + s_{12} (u^2 \sigma_y + v^2 \sigma_x - 2uv\tau_{xy}) \\ & + s_{13} [(u^2 + v^2) \sigma_z + w^2 (\sigma_x + \sigma_y)] \\ & + s_{33} w^2 \sigma_z + s_{44} w (v\tau_{yz} + u\tau_{zx}). \end{aligned} \quad (7)$$

另一方面,在坐标系 $[S]$ 中的坐标轴 S_1, S_2, S_3 轴相对于坐标系 $[K]$ 的方向余弦不妨设为 $S_1(l_1, m_1, n_1), S_2(l_2, m_2, n_2), S_3(l_3, m_3, n_3)$. 则坐标系 $[K]$ 中的应力成分与坐标系 $[S]$ 中的应力成分 σ_{ij} 之间的关系为^[10]

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \sum l_i l_j \sigma_{ij}, \\ \sigma_y &= \sum m_i m_j \sigma_{ij}, \\ \sigma_z &= \sum n_i n_j \sigma_{ij}, \\ \tau_{yz} &= \sum m_i n_j \sigma_{ij}, \\ \tau_{zx} &= \sum n_i l_j \sigma_{ij}, \\ \tau_{xy} &= \sum l_i m_j \sigma_{ij}. \end{aligned} \quad (8)$$

此时,当材料整体仅受到单轴应力的作用(即 $\sigma_{11} \neq 0$, 而其他的应力成分均为零)时,将此条件代入(8)

式后再代入(7)式并整理可得

$$\begin{aligned} \epsilon^{L_3} = & \{ s_{11}(u^2 l_1^2 + v^2 m_1^2 + 2uvl_1 m_1) \\ & + s_{12}(u^2 m_1^2 + v^2 l_1^2 - 2uvl_1 m_1) \\ & + s_{13}[(u^2 + v^2)n_1^2 + w^2(l_1^2 + m_1^2)] \\ & + s_{33}w^2 n_1^2 + s_{44}w(vm_1 n_1 + ul_1 n_1) \} \sigma_{11}. \end{aligned} \quad (9)$$

这里,因六方晶系的单晶体为杂乱无章地分布,且在三维空间中各方向上的分布概率几乎相同,所以就三维空间的所有方向进行平均,通过求解其平均应变 $\overline{\epsilon^{L_3}}$ 能够最终确定其宏观应变.在此不妨令 $\phi = 0^\circ$ 并首先在其晶面内进行取向平均,求出其平均应变 $\overline{\epsilon^{L_3}}$ 为

$$\overline{\epsilon^{L_3}} = \frac{\int_0^{2\pi} \epsilon^{L_3} d\theta}{\int_0^{2\pi} d\theta}. \quad (10)$$

在此我们应用应力为一不变量的 Reuss 模型^[3],就多晶体材料在某一晶面内进行平均,将不变的参量提到平均的积分外面来,利用(9)式以及 $u^2 + v^2 + w^2 = 1$ (u, v, w) 为六方晶系之晶面法向余弦^[9] 关系整理可得

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\epsilon^{L_3}}}{\sigma_{11}} = & \left[\frac{1}{2}(2s_{11} - s_{12} - s_{13}) \right. \\ & \left. - \frac{w^2}{2}(5s_{11} - s_{12} - 5s_{13} + s_{33} - 3s_{44}) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{3w^4}{2}(s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44}) \\ & \times \sin^2 \psi + \frac{1}{2}(s_{12} + s_{13}) \\ & + \frac{w^2}{2}(s_{11} - s_{12} - s_{13} + s_{33} - s_{44}) \\ & - \frac{w^4}{2}(s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44}). \end{aligned} \quad (11)$$

比较(11)和(4)式,含有晶面法线方向余弦($n = (u, v, w)$)的 Y 弹性常数可由下式决定:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1+\nu}{E} \right)_Y = & \frac{1}{2}(2s_{11} - s_{12} - s_{13}) \\ & - \frac{w^2}{2}(5s_{11} - s_{12} - 5s_{13} + s_{33} - 3s_{44}) \\ & + \frac{3w^4}{2}(s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44}), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\nu}{E} \right)_Y = & \frac{1}{2}(s_{12} + s_{13}) \\ & + \frac{w^2}{2}(s_{11} - s_{12} - s_{13} + s_{33} - s_{44}) \\ & - \frac{w^4}{2}(s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44}). \end{aligned} \quad (13)$$

(12)和(13)式的结果与 Kneer^[1]的研究结果中的 X 射线弹性常数完全符合.因 $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$,则由(12)和(13)式可得

$$E_Y(u, v, w) = \frac{1}{s_{11} - [2(s_{11} - s_{13}) - s_{44}]w^2 + (s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44})w^4}, \quad (14)$$

$$\nu_Y(u, v, w) = - \frac{s_{12} + s_{13} + (s_{11} - s_{12} - s_{13} + s_{33} - s_{44})w^2 - (s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44})w^4}{2\{s_{11} - [2(s_{11} - s_{13}) - s_{44}]w^2 + (s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44})w^4\}}, \quad (15)$$

$$\mu_Y(u, v, w) = \frac{1}{(2s_{11} - s_{12} - s_{13}) - (5s_{11} - s_{12} - 5s_{13} + s_{33} - 3s_{44})w^2 + 3(s_{11} - 2s_{13} + s_{33} - s_{44})w^4}. \quad (16)$$

多晶体材料的机械弹性常数应将 Y 弹性常数进一步就(u, v, w)在整个三维空间进行取向平均而得到,是与晶面指数无关的弹性参量.通过计算可得 $\overline{w^2} = 1/3$, $\overline{w^4} = 1/5$ ^[11],则多晶体材料的 Young 模量 E 、Poisson 比 ν 及其剪切模量 μ 分别为

$$\left(\frac{1+\nu}{E} \right)_M = \frac{7s_{11} - 5s_{12} - 4s_{13} + 2s_{33} + 3s_{44}}{15}, \quad (17)$$

$$- \left(\frac{\nu}{E} \right)_M = \frac{s_{11} + 5s_{12} + 8s_{13} + s_{33} - s_{44}}{15}, \quad (18)$$

$$E = \frac{15}{2(4s_{11} + 2s_{13} + s_{44}) + 3s_{33}},$$

$$\begin{aligned} \nu = & \frac{s_{11} + 5s_{12} + 8s_{13} + s_{33} - s_{44}}{2(4s_{11} + 2s_{13} + s_{44}) + 3s_{33}}, \\ \mu = & \frac{15}{2(7s_{11} - 5s_{12} - 4s_{13} + 2s_{33} + 3s_{44})}. \end{aligned} \quad (19)$$

以上就是根据 Reuss 模型得到的由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的 Y 弹性常数及其机械弹性常数的理论计算公式.通过比较可知,其与 Kneer 的研究结果^[1]中的 X 射线弹性常数和机械弹性常数完全符合.这再次表明文献^[7]中所提到两次取向平均的结果与由晶体坐标系就整个三维空间所

进行一次平均的结果完全相同.

2.2.2. 根据 Kröner-Reuss 模型进行的分析

我们首先根据 Eshelby 模型^[11]来考虑多晶体材料内部单晶体之间的相互作用,从而导出弹性常数的相互作用因子,然后给出求解其弹性常数的相互作用因子的一般式.进一步以 Reuss 模型为基础导出 Kröner 模型之自协调方程,通过求解自协调方程得出由六方晶系结构的单晶体所构成的多晶体材料的机械弹性常数,并最终得到其 γ 弹性常数.

1) 由 Eshelby 模型所得到的材料弹性常数的相互作用因子,与文献 7 类似,考虑在多晶体材料的基体中含有各向异性的球状单晶体的情况.此时,当材料整体受到一个载荷应力 $\bar{\sigma}^0$ 的作用时,球状单晶体内部的应力 $\bar{\sigma}^T$ 利用 Eshelby 的等价异弹性体方法^[12]可得

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}^T &= \bar{\sigma}^0 + \bar{\sigma} = \bar{C}^L(\bar{\epsilon}^0 + \bar{\epsilon}) \\ &= \bar{C}^a(\bar{\epsilon}^0 + \bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^*),\end{aligned}\quad (20)$$

这里, $\bar{\epsilon}^0$ 为无球状单晶体存在时材料整体所产生的应变场, \bar{C}^L 为球状单晶体的弹性常数, \bar{C}^a 为多晶体材料的弹性常数.另外, $\bar{\sigma}$ 和 $\bar{\epsilon}$ 为球状单晶体与其外部多晶体材料的弹性常数不同而导致的应力和应变的附加项, $\bar{\epsilon}^*$ 为固有应变.由(20)式可知有如下关系式成立:

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^a(\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^*),\quad (21)$$

将 Eshelby 张量 S_{ijkl}^E 用矩阵的形式 \bar{S}^E 表示,则由 Eshelby 的等价异弹性体方法^[12]可知,

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon} &= \bar{S}^E \bar{\epsilon}^*, \\ \bar{\epsilon}^* &= \bar{S}^{E-1} \bar{\epsilon}.\end{aligned}\quad (22)$$

将(22)式代入(20)式整理后可得

$$(\bar{C}^a - \bar{C}^L)\bar{\epsilon}^0 = (\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E-1})\bar{\epsilon}.\quad (23)$$

另外,多晶体材料的负荷应变与负荷应力有如下

关系:

$$\bar{\epsilon}^0 = \bar{S}^a \bar{\sigma}^0 = \bar{C}^{a-1} \bar{\sigma}^0.\quad (24)$$

这里 \bar{S}^a 为多晶体材料的弹性柔量.将(24)式代入(23)式等号左边可得

$$\begin{aligned}(\bar{I} - \bar{C}^L \bar{S}^a)\bar{\sigma}^0 &= (\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E-1})\bar{\epsilon}, \\ \bar{\epsilon} &= (\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E-1})^{-1}(\bar{I} - \bar{C}^L \bar{S}^a)\bar{\sigma}^0.\end{aligned}\quad (25)$$

这里, \bar{I} 为单位矩阵.另外,因(25)式第二式等号右边 $\bar{\sigma}^0$ 的系数为考虑到单晶体与其外部的多晶体相互作用后而得到的参量,并注意到(25)式为应变与应力的关系式,且该参量与材料的弹性柔量相当,所以我们将 $\bar{\sigma}^0$ 的系数称之为材料弹性柔量的相互作用因子,并表示为 \bar{T} .为此(25)式便成为,

$$\bar{\epsilon} = \bar{T} \bar{\sigma}^0,\quad (26)$$

这里,

$$\bar{T} = (\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E-1})^{-1}(\bar{I} - \bar{C}^L \bar{S}^a).\quad (27)$$

在(27)式中,因 \bar{C}^a 和 \bar{S}^a 以及 \bar{S}^{E-1} 任何时候均为多晶体材料的 Young 模量 E 和 Poisson 比 ν 的函数,则只要给定单晶体的弹性常数 \bar{C}^L 就能够求出材料弹性柔量的相互作用因子 \bar{T} .

2) 相互作用因子 \bar{T} 的确定.对于球状单晶体领域,利用文献 7 的(34)式,并将(27)式中的 $\bar{S}^E, \bar{C}^L, \bar{C}^a$ 以及 \bar{T} 分别用矩阵 $\{S_{ij}^E\}, \{C_{ij}^L\}, \{C_{ij}^a\}$ 以及 $\{t_{ij}\}$ 来替换,则相互作用因子 \bar{T} 可表述为

$$\begin{aligned}\{t_{ij}\} &= (\{C_{ij}^L\} - \{C_{ij}^a\} + \{C_{ij}^a\} \{S_{ij}^E\}^{-1})^{-1} \\ &\times (\{I\} - \{C_{ij}^L\} \{C_{ij}^a\}^{-1}).\end{aligned}\quad (28)$$

这里 $\{I\}$ 为单位矩阵.进一步推导及化简后,可得由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的弹性柔量的相互作用因子 t_{ij} 的非零项为

$$t_{11} = t_{22} = \frac{5(2x - \mu)}{12\mu(2\mu - 3x)} + \frac{x + \mu}{2\mu(a_{11} - a_{12})} + \frac{(x + \mu)[2\mu a_{13} - x(2a_{13} + a_{33})]}{2\mu(2\mu - 3x)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]},\quad (29)$$

$$t_{12} = t_{21} = \frac{7\mu - 8x}{12\mu(2\mu - 3x)} - \frac{x + \mu}{2\mu(a_{11} - a_{12})} + \frac{(x + \mu)[2\mu a_{13} - x(2a_{13} + a_{33})]}{2\mu(2\mu - 3x)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]},\quad (30)$$

$$t_{13} = t_{23} = \frac{7\mu - 8x}{12\mu(2\mu - 3x)} - \frac{(x + \mu)[\mu(a_{13} + a_{33}) - x(2a_{13} + a_{33})]}{\mu(2\mu - 3x)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]},\quad (31)$$

$$t_{31} = t_{32} = \frac{7\mu - 8x}{12\mu(2\mu - 3x)} - \frac{(x + \mu)[\mu(a_{11} + a_{12}) - x(a_{11} + a_{12} + a_{13})]}{\mu(2\mu - 3x)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]},\quad (32)$$

$$t_{33} = \frac{5(2x - \mu)}{12\mu(2\mu - 3x)} + \frac{(x + \mu)[\mu(a_{11} + a_{12} + 2a_{13}) - 2x(a_{11} + a_{12} + a_{13})]}{\mu(2\mu - 3x)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]},\quad (33)$$

$$\begin{aligned} t_{44} &= t_{55} = \frac{\mu + x - a_{44}}{\mu a_{44}}, \\ t_{66} &= 2(t_{11} - t_{12}), \end{aligned} \quad (34)$$

其中

$$\begin{aligned} x &= \frac{\mu(9k + 8\mu)}{6(k + 2\mu)}, \\ a_{11} &= c_{11} + \frac{4(\mu + x)}{3}, \\ a_{33} &= c_{33} + \frac{4(\mu + x)}{3}, \\ a_{12} &= c_{12} + \frac{2(2\mu - x)}{3}, \\ a_{13} &= c_{13} + \frac{2(2\mu - x)}{3}, \\ a_{44} &= c_{44} + x. \end{aligned}$$

这里 c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} 和 c_{44} 均为六方晶系结构单晶体的弹性常数, k 和 μ 分别为多晶体材料的体积弹性常数和剪切弹性常数.

3) Y 弹性常数的推导. 根据 Kröner 模型^[2]可知, 多晶体材料中一个球形单晶体内的应变 $\bar{\epsilon}^T$ 由两部分组成, 因而由(24)和(26)式可得

$$E_Y(u, \nu, w) = \frac{1}{\left(\frac{1}{E}\right)_M + t_{11} - (2t_{11} - t_{13} - t_{31} - t_{44})w^2 + (t_{11} - t_{13} - t_{31} + t_{33} - t_{44})w^4}, \quad (38)$$

$$\nu_Y(u, \nu, w) = -\frac{-2\left(\frac{\nu}{E}\right)_M + t_{12} + t_{13} + (t_{11} - t_{12} - 2t_{13} + t_{31} + t_{33} - t_{44})w^2 - (t_{11} - t_{13} - t_{31} + t_{33} - t_{44})w^4}{2\left[\left(\frac{1}{E}\right)_M + t_{11} - (2t_{11} - t_{13} - t_{31} - t_{44})w^2 + (t_{11} - t_{13} - t_{31} + t_{33} - t_{44})w^4\right]}, \quad (39)$$

$$\mu_Y(u, \nu, w) = \frac{1}{A}, \quad (40)$$

式中

$$\begin{aligned} A &= 2\left(\frac{1 + \nu}{E}\right)_M + (2t_{11} - t_{12} - t_{13}) \\ &\quad - (5t_{11} - t_{12} - 4t_{13} - t_{31} + t_{33} - 3t_{44})w^2 \\ &\quad + 3(t_{11} - t_{13} - t_{31} + t_{33} - t_{44})w^4. \end{aligned}$$

4) 机械弹性常数. 为求解多晶体材料的机械弹性常数, 我们参照文献 2 的方法对(36)和(37)式表示的 Y 弹性常数进行三维空间取向平均, 并使其含有 t_{ij} 项的部分总和为零, 自协调关系式如下:

$$7t_{11} - 5t_{12} - 2t_{13} - 2t_{31} + 2t_{33} + 3t_{44} = 0, \quad (41)$$

$$t_{11} + 5t_{12} + 4t_{13} + 4t_{31} + t_{33} - t_{44} = 0. \quad (42)$$

$$\bar{\epsilon}^T = \bar{\epsilon}^0 + \bar{\epsilon} = (\bar{S}^a + \bar{T})\bar{\sigma}^0. \quad (35)$$

利用上述 Reuss 模型的推导方法, 由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的含有晶面指数的 Y 弹性常数最终可得

$$\begin{aligned} \left(\frac{1 + \nu}{E}\right)_Y &= \left(\frac{1 + \nu}{E}\right)_M + \frac{1}{2}(2t_{11} - t_{12} - t_{13}) \\ &\quad - \frac{w^2}{2}(5t_{11} - t_{12} - 4t_{13} - t_{31} + t_{33} - 3t_{44}) \\ &\quad + \frac{3w^4}{2}(t_{11} - t_{13} - t_{31} + t_{33} - t_{44}), \quad (36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\nu}{E}\right)_Y &= -\left(\frac{\nu}{E}\right)_M + \frac{1}{2}(t_{12} + t_{13}) + \frac{w^2}{2} \\ &\quad \times (t_{11} - t_{12} - 2t_{13} + t_{31} + t_{33} - t_{44}) \\ &\quad - \frac{w^4}{2}(t_{11} - t_{13} - t_{31} + t_{33} - t_{44}), \quad (37) \end{aligned}$$

其中 $\left(\frac{1 + \nu}{E}\right)_M$ 和 $-\left(\frac{\nu}{E}\right)_M$ 为多晶体材料的机械弹性常数, 其值将在后面给予确定. 经比较(36)和(37)式的结果与文献 1 中 X 射线弹性常数完全符合. 进一步可得

整理后可得

$$4(18\mu + b_1)x^2 - 2[24\mu^2 + 3(b_1 - 2b_2)\mu - b_3]x - (8b_2\mu + 3b_3)\mu = 0, \quad (43)$$

$$\begin{aligned} &(x^2 + b_4x + b_5)[2(42\mu + b_1)x \\ &\quad - (3b_1 - 10b_2)\mu - 36\mu^2] \\ &\quad - 4\mu(6x + b_2)(x + \mu)(2x + b_4) = 0, \quad (44) \end{aligned}$$

其中

$$b_1 = 2(c_{11} + c_{12} + 2c_{13}) + c_{33},$$

$$b_2 = c_{11} + c_{12} + 2c_{33} - 4c_{13},$$

$$b_3 = 3[(c_{11} + c_{12})c_{33} - 2c_{13}^2],$$

$$b_4 = c_{44} + \frac{(c_{11} - c_{12})}{2},$$

$$b_5 = c_{44} \frac{(c_{11} - c_{12})}{2}.$$

(43) 和 (44) 式为含有未知数 x 和 μ 的一组方程式, 求解该方程组并将其解代入

$$k = \frac{4\mu(2\mu - 3x)}{3(2x - 3\mu)},$$

$$E = \frac{12\mu(2\mu - 3x)}{5(\mu - 2x)},$$

$$\nu = \frac{7\mu - 8x}{5(\mu - 2x)}$$

即可求得由六方晶系结构的单晶体所构成的多晶体材料的机械弹性常数.

2.2.3. 根据 Voigt 模型进行的分析

相对于坐标系 $[K]$, 六方晶系结构的单晶体其应力与应变的关系为

$$\begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{(c_{11} - c_{12})}{2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix}. \quad (45)$$

将 (45) 式代入文献 7 的 (7) 式并整理后得到

$$\left(\frac{1+\nu}{E}\right)_Y = \frac{2}{2c_{11} - c_{12} - c_{13} - w^2(5c_{11} - c_{12} - 5c_{13} + c_{33} - 12c_{44}) + 3w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})}, \quad (50)$$

$$-\left(\frac{\nu}{E}\right)_Y = -\{c_{12} + c_{13} + w^2(c_{11} - c_{12} - c_{13} + c_{33} - 4c_{44}) - w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})\} / \{[c_{11} + c_{12} + c_{13} - w^2 \times (c_{11} + c_{12} - c_{13} - c_{33})][2c_{11} - c_{12} - c_{13} - w^2 \times (5c_{11} - c_{12} - 5c_{13} + c_{33} - 12c_{44}) + 3w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})]\}, \quad (51)$$

$$E_Y(u, v, w) = \{[c_{11} + c_{12} + c_{13} - w^2(c_{11} + c_{12} - c_{13} - c_{33})][2c_{11} - c_{12} - c_{13} - w^2 \times (5c_{11} - c_{12} - 5c_{13} + c_{33} - 12c_{44}) + 3w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})]\} / \{2c_{11} + c_{12} + c_{13} - w^2(3c_{11} + c_{12} - 3c_{13} - c_{33} - 4c_{44}) + w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})\} \quad (52)$$

$$\sigma_{L^3} = c_{11}(u^2\epsilon_x + v^2\epsilon_y + w^2\epsilon_z) + c_{12}(u^2\epsilon_y + v^2\epsilon_x - w^2\epsilon_z) + c_{33}w^2\epsilon_z + c_{13}[(u^2 + v^2)\epsilon_z + w^2(\epsilon_x + \epsilon_y)] + 2c_{44}(vw\gamma_{yz} + uw\gamma_{zx}). \quad (46)$$

与文献 7 类似, 依据 Voigt 模型^[4], 就多晶体材料在某一晶面内进行取向平均后可得

$$\overline{\sigma_{L^3}} = \frac{1}{2}[2c_{11} - c_{12} - c_{13} - w^2(5c_{11} - c_{12} - 5c_{13} + c_{33} - 12c_{44}) + 3w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})] \times (\epsilon_{11} - \epsilon_{33}) \sin^2\psi + \frac{1}{2}[2c_{11} - c_{12} - c_{13} - w^2 \times (5c_{11} - c_{12} - 5c_{13} + c_{33} - 12c_{44}) + 3w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})] \epsilon_{33} + \frac{1}{2}[c_{12} + c_{13} + w^2(c_{11} - c_{12} - c_{13} + c_{33} - 4c_{44}) - w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})](\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}). \quad (47)$$

将 (47) 式和文献 7 的 (6) 式比较, 可得含有晶面法线 $\mathbf{n} = (u, v, w)$ 的 Y 弹性常数为

$$\mu_Y(u, v, w) = \frac{1}{4}[2c_{11} - c_{12} - c_{13} - w^2 \times (5c_{11} - c_{12} - 5c_{13} + c_{33} - 12c_{44}) + 3w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})], \quad (48)$$

$$\lambda_Y(u, v, w) = \frac{1}{2}[c_{12} + c_{13} + w^2 \times (c_{11} - c_{12} - c_{13} + c_{33} - 4c_{44}) - w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})]. \quad (49)$$

又因 $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$, $\lambda = \frac{2\mu\nu}{1-2\nu}$, 则进一步可得

$$\nu_Y(u, v, w) = \frac{c_{12} + c_{13} + w^2(c_{11} - c_{12} - c_{13} + c_{33} - 4c_{44}) - w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})}{2c_{11} + c_{12} + c_{13} - w^2(3c_{11} + c_{12} - 3c_{13} - c_{33} - 4c_{44}) + w^4(c_{11} - 2c_{13} + c_{33} - 4c_{44})}. \quad (53)$$

多晶体材料的机械弹性常数应将 Y 弹性常数进一步就 (u, v, w) 在整个三维空间进行取向平均而得到,是与晶面指数无关的弹性参量.通过计算可

得 $[\overline{w^2}] = 1/3$ 及 $\overline{w^4} = 1/5$,则多晶体材料的机械弹性常数中的 Young 模量 E 、Poisson 比 ν 以及剪切模量 μ 分别为

$$\mu_M = \frac{7c_{11} - 5c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33} + 12c_{44}}{30}, \quad (54)$$

$$\lambda_M = \frac{c_{11} + 5c_{12} + 8c_{13} + c_{33} - 4c_{44}}{15}, \quad (55)$$

$$\left(\frac{1 + \nu}{E}\right)_M = \frac{15}{7c_{11} - 5c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33} + 12c_{44}}, \quad (56)$$

$$-\left(\frac{\nu}{E}\right)_M = -\frac{3(c_{11} + 5c_{12} + 8c_{13} + c_{33} - 4c_{44})}{[2(c_{11} + c_{12} + 2c_{13}) + c_{33}] \times (7c_{11} - 5c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33} + 12c_{44})}, \quad (57)$$

$$E = \frac{[2(c_{11} + c_{12} + 2c_{13}) + c_{33}](7c_{11} - 5c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33} + 12c_{44})}{3[9c_{11} + 5c_{12} + 4(3c_{13} + c_{33} + c_{44})]},$$

$$\nu = \frac{c_{11} + 5c_{12} + 8c_{13} + c_{33} - 4c_{44}}{9c_{11} + 5c_{12} + 4(3c_{13} + c_{33} + c_{44})}. \quad (58)$$

以上就是根据应变一定的 Voigt 模型得到的由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的 Y 弹性常数及其机械弹性常数的理论计算式.

2.2.4. 根据 Kröner-Voigt 模型进行的分析

1) 相互作用因子 \bar{R} 的确定.

与文献[7]类似,将相关参数代入文献[7]的(34)式并作进一步推导及化简,可得由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的弹性常数的相互作用因子 r_{ij} 之非零项为

$$r_{11} = r_{22} = \frac{4(x + \mu)}{3} - \frac{2x(x + \mu)}{a_{11} - a_{12}} - \frac{2(x + \mu) \{2x^2[2(a_{11} + a_{12} + 2a_{13}) + a_{33}] - \mu x[10(a_{11} + a_{12}) + 8a_{13} - a_{33}] + 4\mu^2(a_{11} + a_{12} + 5a_{13} - 7a_{33})\}}{9(2x - 3\mu)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]}, \quad (59)$$

$$r_{12} = r_{21} = \frac{2(2\mu - x)}{3} + \frac{2x(x + \mu)}{a_{11} - a_{12}} - \frac{2(x + \mu) \{2x^2[2(a_{11} + a_{12} + 2a_{13}) + a_{33}] - \mu x[10(a_{11} + a_{12}) + 8a_{13} - a_{33}] + 4\mu^2(a_{11} + a_{12} + 5a_{13} - 7a_{33})\}}{9(2x - 3\mu)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]}, \quad (60)$$

$$r_{13} = r_{23} = \frac{2(2\mu - x)}{3} + \frac{4(x + \mu) \{2x^2[2(a_{11} + a_{12} + 2a_{13}) + a_{33}] - \mu x[16(a_{11} + a_{12}) + 2a_{13} - 7a_{33}] + 4\mu^2[4(a_{11} + a_{12}) - 7a_{13} - a_{33}]\}}{9(2x - 3\mu)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]}, \quad (61)$$

$$r_{31} = r_{32} = \frac{2(2\mu - x)}{3} + \frac{4(x + \mu) \{2x^2[2(a_{11} + a_{12} + 2a_{13}) + a_{33}] + \mu x[2(a_{11} + a_{12}) - 20a_{13} - 11a_{33}] - 2\mu^2(a_{11} + a_{12} + 5a_{13} - 7a_{33})\}}{9(2x - 3\mu)[(a_{11} + a_{12})a_{33} - 2a_{13}^2]}, \quad (62)$$

$$r_{33} = \frac{4(x + \mu)}{3} - \frac{8(x + \mu) \{ 2x^2 [2(a_{11} + a_{12} + 2a_{13}) + a_{33}] - \mu x [4(a_{11} + a_{12}) + 14a_{13} + 5a_{33}] - 2\mu^2 [4(a_{11} + a_{12}) - 7a_{13} - a_{33}] \}}{9(2x - 3\mu) [(a_{11} + a_{12}) a_{33} - 2a_{13}^2]}, \quad (63)$$

$$r_{44} = r_{55} = \frac{x(a_{44} - x - \mu)}{a_{44}},$$

$$r_{66} = \frac{r_{11} - r_{12}}{2}, \quad (64)$$

其中

$$\begin{aligned} x &= \frac{\mu(9k + 8\mu)}{6(k + 2\mu)}, \\ a_{11} &= c_{11} + \frac{4(\mu + x)}{3}, \\ a_{33} &= c_{33} + \frac{4(\mu + x)}{3}, \\ a_{12} &= c_{12} + \frac{2(2\mu - x)}{3}, \\ a_{13} &= c_{13} + \frac{2(2\mu - x)}{3}, \\ a_{44} &= c_{44} + x. \end{aligned}$$

这里 c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} 和 c_{44} 均为六方晶系结构单晶体的弹性常数, k 和 μ 分别为多晶体材料的体积弹性常数和剪切弹性常数.

2) Y 弹性常数的推导.

与文献 7 类似, 利用上述 Voigt 模型的推导方

法, 由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的含有晶面指数的 Y 弹性常数最终可得

$$\begin{aligned} \mu_Y(u, \nu, w) &= \mu_M + \frac{1}{4} [2r_{11} - r_{12} - r_{13} - w^2 \\ &\quad \times (5r_{11} - r_{12} - 4r_{13} - r_{31} + r_{33} - 12r_{44}) \\ &\quad + 3w^4 (r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})], \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \lambda_Y(u, \nu, w) &= \lambda_M + \frac{1}{2} [r_{12} + r_{13} + w^2 \\ &\quad \times (r_{11} - r_{12} - 2r_{13} + r_{31} + r_{33} - 4r_{44}) \\ &\quad - w^4 (r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})]. \end{aligned} \quad (66)$$

这里, μ_M 为多晶体材料的剪切模量, λ_M 为多晶体材料的 Lamé 常数. 其值将随后给予确定. 进一步可以得到

$$\left(\frac{1 + \nu}{E} \right)_Y = \frac{2}{4\mu_M + 2r_{11} - r_{12} - r_{13} - w^2(5r_{11} - r_{12} - 4r_{13} - r_{31} + r_{33} - 12r_{44}) + 3w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})}, \quad (67)$$

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\nu}{E} \right)_Y &= - \frac{2\lambda_M + r_{12} + r_{13} + w^2(r_{11} - r_{12} - 2r_{13} + r_{31} + r_{33} - 4r_{44}) - w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})}{4\mu_M + 2r_{11} - r_{12} - r_{13} - w^2(5r_{11} - r_{12} - 4r_{13} - r_{31} + r_{33} - 12r_{44}) + 3w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})} \\ &\quad \times \frac{1}{3\lambda_M + 2\mu_M + r_{11} + r_{12} + r_{13} - w^2(r_{11} + r_{12} + r_{13} - 2r_{31} - r_{33})}, \end{aligned} \quad (68)$$

$$\begin{aligned} E_Y(u, \nu, w) &= [3\lambda_M + 2\mu_M + r_{11} + r_{12} + r_{13} - w^2(r_{11} + r_{12} + r_{13} - 2r_{31} - r_{33})] \\ &\quad \times \frac{4\mu_M + 2r_{11} - r_{12} - r_{13} - w^2(5r_{11} - r_{12} - 4r_{13} - r_{31} + r_{33} - 12r_{44}) + 3w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})}{4(\lambda_M + \mu_M) + 2r_{11} + r_{12} + r_{13} - w^2(3r_{11} + r_{12} - 3r_{31} - r_{33} - 4r_{44}) + w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})}. \end{aligned} \quad (69)$$

$$\nu_Y(u, \nu, w) = \frac{2\lambda_M + r_{12} + r_{13} + w^2(r_{11} - r_{12} - 2r_{13} + r_{31} + r_{33} - 4r_{44}) - w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})}{4(\lambda_M + \mu_M) + 2r_{11} + r_{12} + r_{13} - w^2(3r_{11} + r_{12} - 3r_{31} - r_{33} - 4r_{44}) + w^4(r_{11} - r_{13} - r_{31} + r_{33} - 4r_{44})}. \quad (70)$$

3) 机械弹性常数.

为求解多晶体材料的机械弹性常数, 对(65)和

(66) 式进行三维空间取向平均, 并使其含有 r_{ij} 的部分总和为零, 得到自协调关系式为

$$7r_{11} - 5r_{12} - 2r_{13} - 2r_{31} + 2r_{33} + 12r_{44} = 0, \quad (71)$$

$$r_{11} + 5r_{12} + 4r_{13} + 4r_{31} + r_{33} - 4r_{44} = 0. \quad (72)$$

整理后可得

$$4(18\mu + b_1)x^2 - 2[24\mu^2 + 3(b_1 - 2b_2)\mu - b_3]x - (8b_2\mu + 3b_3)\mu = 0, \quad (73)$$

$$(x^2 + b_4x + b_5)[2(42\mu + b_1)x - (3b_1 - 10b_2)\mu - 36\mu^2] - 4\mu(6x + b_2)(x + \mu)(2x + b_4) = 0, \quad (74)$$

其中

$$b_1 = 2(c_{11} + c_{12} + 2c_{13}) + c_{33},$$

$$b_2 = c_{11} + c_{12} + 2c_{33} - 4c_{13},$$

$$b_3 = 3[(c_{11} + c_{12})c_{33} - 2c_{13}^2],$$

$$b_4 = c_{44} + \frac{(c_{11} - c_{12})}{2},$$

$$b_5 = c_{44} \frac{(c_{11} - c_{12})}{2}.$$

(73) 和 (74) 式为含有未知数 x 和 μ 的一组方程式, 求解该方程组并将其解代入

$$k = \frac{4\mu(2\mu - 3x)}{3(2x - 3\mu)},$$

$$E = \frac{12\mu(2\mu - 3x)}{5(\mu - 2x)},$$

$$\nu = \frac{7\mu - 8x}{5(\mu - 2x)}$$

即可求得由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料的机械弹性常数.

通过比较可知 (73) 和 (74) 式与 (43) 和 (44) 式所得结果完全符合. 因此, 对于由六方晶系结构单晶体所构成的多晶体材料, 由 Kröner-Voigt 模型所得到的机械弹性常数的计算结果与由 Kröner-Reuss 模型所得到的机械弹性常数的计算结果⁹⁾完全相同.

3. 数值算例

下面将根据上述结果, 以 ZnO 单晶体以及由其所构成的多晶体材料为例进行具体的计算, 以显示本方法的适用性. 在此, 给出 ZnO 单晶体的弹性常数如下^[13]: $c_{11} = 209$ GPa, $c_{12} = 120$ GPa, $c_{13} = 104$ GPa, $c_{33} = 218$ GPa, $c_{44} = 44.1$ GPa. 依据本文的方法所计算的结果列于表 1. 由表 1 的数据可知, 用 Kröner-Reuss 模型或 Kröner-Voigt 模型所得到的结果恰好位于用 Voigt 模型和 Reuss 模型所得结果之间, 该结果与 Mura^[14]的研究结果一致, 因 Mura 指出该类研究中 Voigt 近似与 Reuss 近似将给出研究结果的上限值与下限值. Shein 等^[15]的研究结果也列于表 1 中, 其结果与用本文所得到的结果相近, 差别的产生是由于所采用的 ZnO 单晶体的弹性常数不同. 文献 15 采用 ZnO 单晶体的弹性常数为 $c_{11} = 195.4$ GPa, $c_{12} = 111.2$ GPa, $c_{13} = 92.5$ GPa, $c_{33} = 199.8$ GPa, $c_{44} = 39.6$ GPa, 利用该值计算所得结果列于表 2. 利用本文方法计算得到的 ZnO 多晶体材料的 Y 弹性常数与 w^2 的关系示于图 2—5 之中.

表 1 ZnO 多晶体材料的机械弹性常数

模 型	$\frac{\nu}{E}/\text{TPa}^{-1}$	$\frac{(1+\nu)}{E}/\text{TPa}^{-1}$	E/GPa	ν	μ/GPa	k/GPa	λ/GPa
Voigt	2.76660	10.6220	127.305	0.35220	47.0730	143.556	112.173
Reuss	2.80890	10.7490	125.941	0.35380	46.5160	143.524	112.514
Kröner-Reuss 或 Kröner-Voigt	2.78775	10.6855	126.618	0.35298	46.7924	143.539	112.345
文献 15]	—	—	116.5	0.338	43.5	—	91.0

表 2 利用文献 15 的数据计算得到的 ZnO 多晶体材料的机械弹性常数

模 型	$\frac{\nu}{E}/\text{TPa}^{-1}$	$\frac{(1+\nu)}{E}/\text{TPa}^{-1}$	E/GPa	ν	μ/GPa	k/GPa	λ/GPa
Voigt	2.9524	11.393	118.475	0.3498	43.887	131.444	102.187
Reuss	3.0164	11.588	116.669	0.3519	43.150	131.309	102.543
Kröner-Reuss 或 Kröner-Voigt	2.9847	11.491	117.554	0.3509	43.511	131.374	102.366

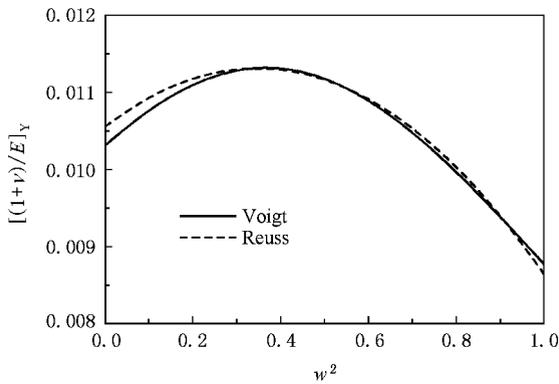


图 2 $\left[\frac{(1+\nu)}{E}\right]_Y$ 与 w^2 之关系曲线(根据 Reuss 模型和 Voigt 模型)

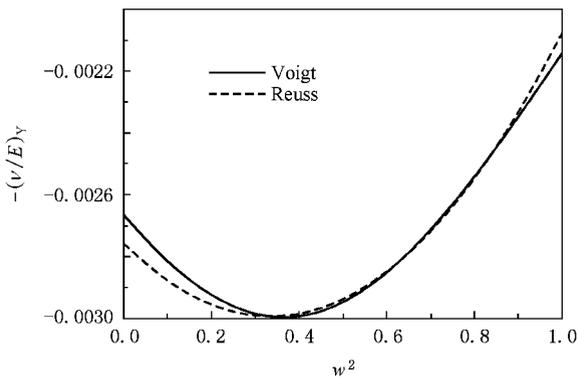


图 3 $-\left(\frac{\nu}{E}\right)_Y$ 与 w^2 之关系曲线(根据 Reuss 模型和 Voigt 模型)

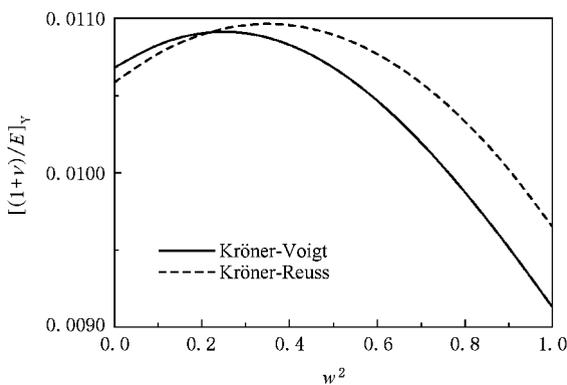


图 4 $\left[\frac{(1+\nu)}{E}\right]_Y$ 与 w^2 之关系曲线(根据 Kröner-Reuss 模型和 Kröner-Voigt 模型)

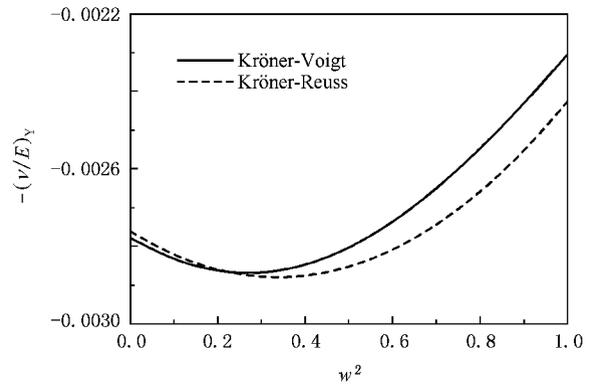


图 5 $-\left(\frac{\nu}{E}\right)_Y$ 与 w^2 之关系曲线(根据 Kröner-Reuss 模型和 Kröner-Voigt 模型)

4. 结 论

本文利用文献[7]所提出的 γ 弹性常数,将其应用于具有六方晶系结构的多晶体材料,推导了六方晶系结构多晶体材料的 γ 弹性常数.通过 ZnO 单晶体以及由其所构成的多晶体材料为例与具有六方晶系结构多晶体材料的 χ 射线弹性常数进行了比较.(1)通过应力一定的 Reuss 模型和建立在其上并考虑到物体中不同领域之间相互作用的 Kröner-Reuss 模型所求出的 γ 弹性常数与由 Reuss 模型和 Kröner^[6]模型而得到的 χ 射线弹性常数是相同的.(2)运用 γ 弹性常数这一参量,由 Kröner-Voigt 模型所得到的机械弹性常数的计算结果与由 Kröner-Reuss 模型所得到的机械弹性常数的计算结果完全相同.(3)本文中首先以某一晶面的面法线为轴,在该晶面内进行 360° 取向平均得到 γ 弹性常数,然后再将该晶面法线就整个三维空间进行取向平均得到两次平均的结果,此结果与由晶体坐标系就整个三维空间所进行的一次平均的结果完全相同.(4)运用 γ 弹性常数进一步推导出的多晶体材料整体的机械弹性常数的表达式与 Kneer 的研究结果^[1]中的表达式虽然形式不同,但对具体材料进行计算的结果却完全符合.

- [1] Kneer G 1963 *Phys. Stat. Sol.* **3**—9 331
- [2] Kröner E 1958 *Z. Physik* **151** 504
- [3] Reuss A 1929 *Z. Ang. Math. Mech.* **9** 49
- [4] Voigt W 1910 *Lehrbuch der Kristalphysik* (Leipzig : Teubner)
- [5] Cai J , Chen G L , Fang Z Z 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 977 (in Chinese) [蔡 军、陈国良、方正知 1995 物理学报 **44** 977]
- [6] Zheng L , Jiang C B , Shang J X , Zhu X X , Xu H B *Acta Phys. Sin.* **56** 1532 (in Chinese) [郑 蕾、蒋成保、尚家香、朱小溪、徐惠彬 2007 物理学报 **56** 1532]
- [7] Lin Z , Liu M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4096 (in Chinese) [林 政、刘 2009 物理学报 **58** 4096]
- [8] Sokolnikoff I S 1956 *Mathematical Theory of Elasticity* (2nd Ed.) (New York : McGraw-Hill) 16 48
- [9] The Society of Materials Science of Japan 1990 *X-ray Stress Measurement* pp4—20 (Tokyo : Yokendo) (in Japanese) [日本材料学会 1990 X 力測定法 (東京 : 養賢堂)] 第 4—20 页
- [10] Tanaka K S , Matsui E J , Kurimura T Y , Akiniwa Y A 1987 *Materials* **36** 792 (in Japanese) [田中啓介、松井英治、栗村隆之、秋庭 明 1987 材料 **36** 792]
- [11] Ominami 1980 *Introduction to Micromechanics* p10 (Tokyo : Ohmsha) (in Japanese) [大南 1980 マイクロメカニクス入門 (東京 : オーム社)] 第 10 页
- [12] Eshelby J D 1975 *Proc. Roy. Soc. (London) A* **241** 379
- [13] Landolt-Börnstein 1979 *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* (Volume 11) (Berlin , Heidelberg , New York : Springer-Verlag) p216
- [14] Mura T 1991 *Micromechanics of Defects in Solids* (Dordrecht , Boston , London : Kluwer Academic Publishers) p421
- [15] Shein I R , Kirko V S , Makurin Y N , Gorbunova M A , Ivanovskii A L 2007 *Phys. Solid State* **49** 1067

Y elastic constants of polycrystalline materials with hexagonal system structure *

Lin Zheng^{1)†} Liu Min²⁾

1) *Chinese Society of Aeronautics , Beijing 100012 , China*

2) *Beijing HLE Consulting Limited Liability Company , Beijing 100028 China*

(Received 17 February 2009 ; revised manuscript received 22 April 2009)

Abstract

In this paper , the physical parameters Y elastic constants newly proposed in our previous paper are applied to polycrystalline materials with hexagonal structure to deduce Y elastic constants thereof and to compare with the x-ray elastic constants of polycrystalline materials of hexagonal structure through calculation of examples. Though the expressions of mechanical elastic constants of polycrystalline materials deduced from the application of Y elastic constants are different from the conclusions of Kneer , the calculated results for concrete materials are in full compliance.

Keywords : Y elastic constants , hexagonal system , polycrystalline materials

PACC : 6220D