

具有立方晶系结构的多晶体材料的 弹性常数—— γ 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)

(2008 年 5 月 27 日收到, 2008 年 11 月 12 日收到修改稿)

提出了一个新的物理参量“ γ 弹性常数”, 并阐述了其物理含义, 并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 γ 弹性常数, 通过算例与具有立方晶系结构的多晶体材料的 X 射线弹性常数进行了比较, 运用这个 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 Kröner 的研究结果完全符合.

关键词: γ 弹性常数, 立方晶系, 多晶体材料

PACC: 6220D

1. 引 言

众所周知, 单晶体材料一般来说均显示出力学的各向异性, 但由单晶体所组成的多晶体材料, 由于其中单晶体为杂乱无章地分布, 且在三维空间中各取向上的分布几率几乎相同, 从而导致其组成的多晶体材料的宏观力学特性显示为各向同性. 另一方面, 因 X 射线测定法是与材料的衍射面相关联的方法^[1], 所以 X 射线弹性常数则为含有衍射面法向 $(n = (u, v, w))$ 的函数, 而进一步将 X 射线的弹性常数就其衍射面法向 (u, v, w) 进行全空间的平均即可得到该多晶体材料的机械弹性常数^[2-4]. 即多晶体材料的机械弹性常数是与材料的衍射面无关的参量. 但是, X 射线的测试方法仅是物理学中的物性测试方法之一, 其应力测定法实际上就是通过应变来确定应力, 而不能通过应力来确定应变. 为此, 我们寄希望于物理学上出现新的与 X 射线的应力测试方法相对应的由应力测试得出应变的新测试方法.

为了其物理学上研究的完整性, 在此我们提出“ γ 弹性常数”的概念. 之所以称之为“ γ 弹性常数”是因为我们在该领域的研究过程中发现了这一新的物理参量而至今又找不到一个合适的名称, 故暂且称之为“ γ 弹性常数”. 所谓“ γ 弹性常数”, 在晶体材

料中是指与结晶面相关的物理参量, 即不同晶面的 γ 弹性常数具有不同的值, 其是晶面指数的函数. 通过应力一定的 Reuss 模型^[5]和建立在其基础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 弹性常数就是目前被公认且广泛地应用于通过 X 射线来测试材料应力的研究领域中的由 Reuss 模型^[5]和 Kröner 模型^[6]而得到的 X 射线弹性常数^[7], 由于篇幅所限就不在此赘述. 另一方面, 我们试图在本文中通过立方晶系单晶体所构成的多晶体材料的弹性常数之论述, 给出 γ 弹性常数的严密物理解释, 并完善物理学上应变一定的 Voigt 模型^[8]和建立在其基础上的并考虑到物体中不同领域之间相互作用的 Kröner-Voigt 模型. 本文中我们将不再采用通常所用的张量表示法, 而是尽量采用矩阵表示. 这是因为四阶张量将会出现 81 个参量, 而 6×6 的矩阵则仅有 36 个参量, 虽然矩阵的表示没有张量表示简洁, 且要占用大量的篇幅, 但矩阵的表示却为随后的具体计算带来极大的方便, 并可尽量减少计算的工作量. 另外, 在以后的六方晶系、正方晶系、斜方晶系以至于任意晶系等结构所构成的多晶体材料的研究中可以看到, 在某些参量的推导过程中需要进行求逆的运算, 而对于矩阵的求逆我们可比较容易地进行, 但要对一个四阶的张量求逆则将是一个相当繁杂的运算.

† E-mail: zheng9207@yahoo.com.cn

2. Y弹性常数的导出和多晶体材料的弹性常数

2.1. 宏观分析

图1给出了材料整体坐标系[S]与实验坐标系[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 $L_3(l, m, n)$,则由图示可得

$$l = \sin\psi \cos\phi, m = \sin\psi \sin\phi, n = \cos\psi. \quad (1)$$

因此,方向 L_3 的宏观应力 $\sigma_{\phi\psi}$ 为^[9,10]

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

当多晶体材料整体为各向同性时,则其应力与应变为

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \\ \tau_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \\ \gamma_{12} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

这里 λ 为多晶体材料的拉梅(Lamé)常数,且满足关系式 $\lambda = 2\mu\nu/(1-2\nu)$, $\mu = E[\chi(1+\nu)]$,而 E, ν, μ 则分别为多晶体材料的杨氏模量、泊松比和剪切模量。

当我们着眼于多晶体材料整体只受主应力作用时,即 $\tau_{12} = \tau_{23} = \tau_{31} = 0$,则由(3)式可知 $\gamma_{12} = \gamma_{23} = \gamma_{31} = 0$.因此(2)式可进一步简化为

$$\sigma_{\phi\psi} = l^2 \sigma_{11} + m^2 \sigma_{22} + n^2 \sigma_{33}. \quad (4)$$

将(3)式代入(4)式后整理可得

$$\sigma_{\phi\psi} = \lambda(\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}) + 2\mu(l^2 \epsilon_{11} + m^2 \epsilon_{22} + n^2 \epsilon_{33}). \quad (5)$$

在此为了使所论述的问题得以简化,不妨令 $\phi = 0^\circ$.将此条件代入(1)式后再代入(5)式,从而使应力 $\sigma_{\phi\psi}$ 进一步简化表述为

$$\sigma_{\phi\psi} = 2\mu(\epsilon_{11} - \epsilon_{33})\sin^2\psi + 2\mu\epsilon_{33} + \lambda(\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}). \quad (6)$$

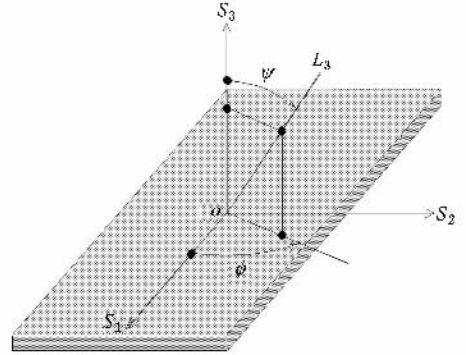


图1 宏观分析示意图

2.2. 微观分析

2.2.1. 根据 Voigt 模型进行的分析

现着眼于图1中 L_3 方向上的应力,令 L_3 方向相对于立方晶体坐标系[K]的方向余弦为 $L_3(u, v, w)$,则 L_3 方向上的宏观应力 σ^{L_3} (与第一节中的 $\sigma_{\phi\psi}$ 等同)与坐标系[K]中的应力分量($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{xy}$)的关系为^[9,10]

$$\sigma^{L_3} = u^2 \sigma_x + v^2 \sigma_y + w^2 \sigma_z + \chi(vw\tau_{yz} + uw\tau_{zx} + uv\tau_{xy}). \quad (7)$$

此时,相对于坐标系[K],立方晶系结构的单晶体其应力与应变的关系为

$$\begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

将(8)式代入(7)式并整理后得到

$$\sigma^{L_3} = c_{11}(u^2 \epsilon_x + v^2 \epsilon_y + w^2 \epsilon_z) + c_{12}[(v^2 + w^2) \epsilon_x + (u^2 + w^2) \epsilon_y + (u^2 + v^2) \epsilon_z] + 2c_{44}(vw\gamma_{yz} + uw\gamma_{zx} + uv\gamma_{xy}). \quad (9)$$

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 $S_1(l_1, m_1, n_1), S_2(l_2, m_2, n_2), S_3(l_3, m_3, n_3)$.将其归纳整理如表1所示.然后让我们来考虑坐标系[K]中的应变分量与坐标系[S]中应变分量之间的关系,

在着眼于多晶体材料整体仅受主应力的情况下,即 $\tau_{12} = \tau_{23} = \tau_{31} = 0$, 则由(3)式可知 $\gamma_{12} = \gamma_{23} = \gamma_{31} = 0$. 因此,下式所示之关系式成立^[9]:

$$\begin{aligned} \epsilon_x &= l_1^2 \epsilon_{11} + l_2^2 \epsilon_{22} + l_3^2 \epsilon_{33}, \\ \epsilon_y &= m_1^2 \epsilon_{11} + m_2^2 \epsilon_{22} + m_3^2 \epsilon_{33}, \\ \epsilon_z &= n_1^2 \epsilon_{11} + n_2^2 \epsilon_{22} + n_3^2 \epsilon_{33}, \\ \gamma_{yz} &= \mathfrak{X} (m_1 n_1 \epsilon_{11} + m_2 n_2 \epsilon_{22} + m_3 n_3 \epsilon_{33}), \\ \gamma_{xz} &= \mathfrak{X} (l_1 n_1 \epsilon_{11} + l_2 n_2 \epsilon_{22} + l_3 n_3 \epsilon_{33}), \\ \gamma_{xy} &= \mathfrak{X} (l_1 m_1 \epsilon_{11} + l_2 m_2 \epsilon_{22} + l_3 m_3 \epsilon_{33}). \end{aligned} \quad (10)$$

将(10)式代入(9)式后整理可得

$$\begin{aligned} \sigma^{L_3} &= c_{11} [u^2 (l_1^2 \epsilon_{11} + l_2^2 \epsilon_{22} + l_3^2 \epsilon_{33}) + v^2 (m_1^2 \epsilon_{11} \\ &+ m_2^2 \epsilon_{22} + m_3^2 \epsilon_{33}) + w^2 (n_1^2 \epsilon_{11} + n_2^2 \epsilon_{22} + n_3^2 \epsilon_{33})] \\ &+ c_{12} [(v^2 + w^2) \mathfrak{X} (l_1^2 \epsilon_{11} + l_2^2 \epsilon_{22} + l_3^2 \epsilon_{33}) \\ &+ (u^2 + w^2) \mathfrak{X} (m_1^2 \epsilon_{11} + m_2^2 \epsilon_{22} + m_3^2 \epsilon_{33}) \\ &+ (u^2 + v^2) \mathfrak{X} (n_1^2 \epsilon_{11} + n_2^2 \epsilon_{22} + n_3^2 \epsilon_{33})] \\ &+ 4c_{44} [vu (m_1 n_1 \epsilon_{11} + m_2 n_2 \epsilon_{22} + m_3 n_3 \epsilon_{33}) \\ &+ uv (l_1 n_1 \epsilon_{11} + l_2 n_2 \epsilon_{22} + l_3 n_3 \epsilon_{33}) \\ &+ uw (l_1 m_1 \epsilon_{11} + l_2 m_2 \epsilon_{22} + l_3 m_3 \epsilon_{33})]. \end{aligned} \quad (11)$$

表 1 坐标系 S 与 K 的方向余弦

坐标轴	S_1	S_2	S_3
x	l_1	l_2	l_3
y	m_1	m_2	m_3
z	n_1	n_2	n_3

这里,因立方晶系的单晶体为杂乱无章地分布,

且在三维空间中各取向上的分布几率几乎相同,所以应就三维空间的所有方向进行平均,通过求解其平均应力 $\overline{\sigma^{L_3}}$ 能够最终确定其宏观应力.在此,与第一节相同,不妨令 $\phi = 0^\circ$, 并首先在其晶面内进行取向平均,求出其平均应力 $\overline{\sigma_Y^{L_3}}$ 为

$$\overline{\sigma_Y^{L_3}} = \frac{\int_0^{2\pi} \sigma^{L_3} d\theta}{\int_0^{2\pi} d\theta}. \quad (12)$$

在此我们应用应变一定(即应变 ϵ_{11} 和 ϵ_{22} 以及 ϵ_{33} 为一不变的量)的 Voigt 模型^[8],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,利用(11)式积分可得

$$\begin{aligned} \overline{\sigma_Y^{L_3}} &= [c_{11} - c_{12} - \mathfrak{X} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma] \mathfrak{I} (\epsilon_{11} \\ &- \epsilon_{33}) \sin^2 \phi + [c_{11} - c_{12} - \mathfrak{X} (c_{11} - c_{12} \\ &- 2c_{44}) \Gamma] \mathfrak{I} \epsilon_{33} + [c_{12} + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma] \\ &\times (\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}), \end{aligned} \quad (13)$$

其中, $\Gamma = u^2 v^2 + v^2 w^2 + w^2 u^2$ (u, v, w) 为立方晶系之晶面法向余弦.

比较(13)和(6)式可得含有晶面法线 ($\mathbf{n} = (u, v, w)$) 的 Y 弹性常数可由下式决定:

$$\mu_Y(u, v, w) = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} - \frac{3}{2} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma, \quad (14)$$

$$\lambda_Y(u, v, w) = c_{12} + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma. \quad (15)$$

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

$$\left(\frac{1+\nu}{E}\right)_Y = \frac{1}{c_{11} - c_{12} - \mathfrak{X} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma}, \quad (16)$$

$$-\left(\frac{\nu}{E}\right)_Y = \frac{c_{12} + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma}{(c_{11} + 2c_{12}) \mathfrak{I} [c_{12} - c_{11} + \mathfrak{X} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma]}, \quad (17)$$

$$E_Y(u, v, w) = \frac{(c_{11} + 2c_{12}) \mathfrak{I} [c_{11} - c_{12} - \mathfrak{X} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma]}{c_{11} + c_{12} - (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma}, \quad (18)$$

$$\nu_Y(u, v, w) = \frac{c_{12} + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma}{c_{11} + c_{12} - (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \Gamma}. \quad (19)$$

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,即是与晶面指数无关的弹性参量.通过计算可得 $\bar{\Gamma} = 1/5$ ^[11], 则多晶体材料的机械弹性常数中的杨氏模量 E 、泊松比 ν 以及剪切模量 μ 分别为

$$\mu_M = \frac{c_{11} - c_{12} + 3c_{44}}{5}, \quad (20)$$

$$\lambda_M = \frac{c_{11} + 4c_{12} - 2c_{44}}{5},$$

$$\left(\frac{1+\nu}{E}\right)_M = \frac{5}{\mathfrak{X} (c_{11} - c_{12} + 3c_{44})}, \quad (21)$$

$$-\left(\frac{\nu}{E}\right)_M = -\frac{(c_{11} + 4c_{12} - 2c_{44})}{\chi(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12} + 3c_{44})}, \quad (22)$$

$$E_M = \frac{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12} + 3c_{44})}{2c_{11} + 3c_{12} + c_{44}},$$

$$\nu_M = \frac{c_{11} + 4c_{12} - 2c_{44}}{\chi(2c_{11} + 3c_{12} + c_{44})}. \quad (23)$$

以上就是根据应变一定的 Voigt 模型而得到的由立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式. 通过比较可知, 其与 Noyan 的研究结果完全符合^[12]. 即可得结论, 本节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 Y 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所得到的两次平均的结果, 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.

2.2.2. 根据 Kröner-Voigt 模型进行的分析

在本节中我们首先根据 Eshelby 模型^[13]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 2.2.1 节中的 Voigt 模型为基础导出 Kröner 模型的自协调方程, 通过求解自协调方程得出由立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 Y 弹性常数.

(a) 由 Eshelby 模型所得到的材料弹性常数的相互作用因子

在此, 我们将与材料的基体具有不同弹性系数的区域称为异弹性体 (inhomogeneity). 考虑在多晶体材料的基体中含有具有各向异性的球形单晶体的情况. 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^[13]可得

$$\bar{\sigma}^T = \bar{\sigma}^0 + \bar{\sigma} = \bar{C}^L(\bar{\varepsilon}^0 + \bar{\varepsilon}) = \bar{C}^a(\bar{\varepsilon}^0 + \bar{\varepsilon} - \bar{\varepsilon}^*), \quad (24)$$

其中, $\bar{\varepsilon}^0$ 为无球状单晶体存在时材料整体所产生的应变, \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 $\bar{\varepsilon}$ 为球状单晶体与其外部的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, $\bar{\varepsilon}^*$ 为固有 (eigen) 应变. 则由 (24) 式可知如下关系式成立:

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^a(\bar{\varepsilon} - \bar{\varepsilon}^*). \quad (25)$$

将 Eshelby 张量 S_{ijkl}^E 用矩阵的形式 \bar{S}^E 来表示, 则由 Eshelby 的等价异弹性体方法^[13]可知下述关系式

成立:

$$\bar{\varepsilon} = \bar{S}^E \bar{\varepsilon}^*, \quad (26)$$

$$\bar{\varepsilon}^* = \bar{S}^{E^{-1}} \bar{\varepsilon}. \quad (27)$$

将 (27) 式代入 (25) 式整理可得

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^a(\bar{\varepsilon} - \bar{S}^{E^{-1}} \bar{\varepsilon}) = \bar{C}^a(\bar{I} - \bar{S}^{E^{-1}}) \bar{\varepsilon}, \quad (28)$$

式中, \bar{I} 为单位矩阵. 进一步将 (27) 式代入 (24) 式并整理可得

$$\bar{C}^L(\bar{\varepsilon}^0 + \bar{\varepsilon}) = \bar{C}^a(\bar{\varepsilon}^0 + \bar{\varepsilon} - \bar{S}^{E^{-1}} \bar{\varepsilon}),$$

$$\bar{\varepsilon} = (\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E^{-1}})^{-1}(\bar{C}^a - \bar{C}^L) \bar{\varepsilon}^0 \quad (29)$$

再将 (29) 式代入 (28) 式可得

$$\bar{\sigma} = \bar{C}^a(\bar{I} - \bar{S}^{E^{-1}})(\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E^{-1}})^{-1}(\bar{C}^a - \bar{C}^L) \bar{\varepsilon}^0. \quad (30)$$

另外, 因 (30) 式右边 $\bar{\varepsilon}^0$ 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 (30) 式为应力与应变的关系式, 且该参量与材料的弹性常数相当. 所以, 我们将这个参量称为材料弹性常数的相互作用因子 \bar{R} . 为此, 进一步整理可得

$$\bar{\sigma} = \bar{R} \bar{\varepsilon}^0, \quad (31)$$

其中,

$$\bar{R} = \bar{C}^a(\bar{I} - \bar{S}^{E^{-1}})(\bar{C}^L - \bar{C}^a + \bar{C}^a \bar{S}^{E^{-1}})^{-1}(\bar{C}^a - \bar{C}^L). \quad (32)$$

在上式中, 因 \bar{C}^a 和 $\bar{S}^{E^{-1}}$ 任何时候均为多晶体材料的杨氏模量 E 和泊松比 ν 的函数, 则只要给出单晶体的弹性常数 \bar{C}^L 就能够求出材料弹性常数的相互作用因子 \bar{R} .

(b) 相互作用因子 \bar{R} 的确定

对于球状单晶体之领域, Eshelby 张量 S_{ijkl}^E 的非零项为^[13]

$$S_{1111}^E = S_{2222}^E = S_{3333}^E = \frac{7 - 5\nu}{15(1 - \nu)} = \frac{9k + 8\mu}{5(3k + 4\mu)},$$

$$S_{1212}^E = S_{2323}^E = S_{3131}^E = \frac{4 - 5\nu}{15(1 - \nu)} = \frac{3(k + 2\mu)}{5(3k + 4\mu)},$$

$$S_{1122}^E = S_{2211}^E = S_{1133}^E = S_{3311}^E = S_{2233}^E = S_{3322}^E = \frac{5\nu - 1}{15(1 - \nu)} = \frac{3k - 4\mu}{5(3k + 4\mu)}, \quad (33)$$

式中, ν , k , μ 分别为多晶体材料的泊松比、体积弹性常数和剪切弹性常数. 多晶体材料的拉梅 (Lamé) 常数 λ 和其体积弹性常数 k 与 μ 和 ν 的关系满足

$$\lambda = 2\mu\nu/(1 - 2\nu) \text{ 与 } k = \lambda + 2\mu/3.$$

将 (33) 式中的 \bar{S}^E , \bar{C}^L , \bar{C}^a 以及 \bar{R} 分别用矩阵 $\{S_{ij}^E\}$, $\{C_{ij}^L\}$, $\{C_{ij}^a\}$ 以及 $\{r_{ij}\}$ 来替换, 可表示为

$$\{r_{ij}\} = \{C_{ij}^a\} \{I\} - \{S_{ij}^E\}^{-1} \{C_{ij}^L\} - \{C_{ij}^a\}$$

$$+ \{C_{ij}^a\} \{S_{ij}^E\}^{-1})^{-1} (\{C_{ij}^a\} - \{C_{ij}^L\}), \quad (34)$$

其中, $\{I\}$ 为单位矩阵. 进一步推导及化简后, 可得由

$$\begin{aligned} r_{11} = r_{22} = r_{33} &= \{ (a_{11} - a_{12}) [3k - (c_{11} + 2c_{12})] \mathbf{I} (c_{11} + 2c_{12}) - (a_{11} + 2a_{12}) \} + \{ (a_{11} + 2a_{12}) \\ & [2\mu - (c_{11} - c_{12})] \mathbf{I} (c_{11} - c_{12}) - (a_{11} - a_{12}) \} \{ (a_{11} - a_{12}) \} \{ (a_{11} + 2a_{12}) \}, \\ r_{44} = r_{55} = r_{66} &= (\mu - c_{44}) \{ (c_{44} - a_{44}) \} a_{44}, \\ r_{12} = r_{13} = r_{21} = r_{23} = r_{31} = r_{32} &= \{ (a_{11} - a_{12}) [3k - (c_{11} + 2c_{12})] \mathbf{I} (c_{11} + 2c_{12}) - (a_{11} + 2a_{12}) \} \\ & - (a_{11} + 2a_{12}) [2\mu - (c_{11} - c_{12})] \mathbf{I} (c_{11} - c_{12}) - (a_{11} - a_{12}) \} \{ (a_{11} - a_{12}) \} \{ (a_{11} + 2a_{12}) \}, \end{aligned} \quad (35)$$

式中, c_{11} , c_{12} 和 c_{44} 为立方晶系结构单晶体的弹性常数,

$$\begin{aligned} a_{11} &= c_{11} + \frac{10\mu(3k + 4\mu)}{9(k + 2\mu)}, \\ a_{12} &= c_{12} + \frac{\mu(3k + 16\mu)}{9(k + 2\mu)}, \\ a_{44} &= c_{44} + \frac{\mu(9k + 8\mu)}{6(k + 2\mu)}. \end{aligned} \quad (36)$$

(c) Y 弹性常数的推导

根据 Kröner 模型^[6]所得到的多晶体材料中一个球形单晶体内的应力 $\{\sigma_{ij}^T\}$ 由 (24) 和 (31) 式可得出

$$\bar{\sigma}^T = \bar{\sigma}^0 + \bar{\sigma} = (\bar{C}^a + \bar{R}) \bar{\epsilon}^0. \quad (37)$$

立方晶系结构的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} 的非零项为

则由立方晶系结构之单晶体所构成的多晶体材料的含有晶面指数的 Y 弹性常数可由与 2.2.1 节的 Voigt 模型同样的推导最终可得

$$\begin{aligned} \mu_Y(u, v, w) &= \mu_M + \frac{r_{11} - r_{12}}{2} \\ & - \frac{3}{2}(r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma, \end{aligned} \quad (38)$$

$$\lambda_Y(u, v, w) = \lambda_M + r_{12} + (r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma, \quad (39)$$

其中, μ_M 为多晶体材料的剪切模量, λ_M 为多晶体材料的拉梅 (Lamé) 常数. 其值将在下节中给予确定. 进一步可以得到

$$\left(\frac{1+\nu}{E}\right)_Y = \frac{1}{2\mu_M + r_{11} - r_{12} - 3(r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma}, \quad (40)$$

$$-\left(\frac{\nu}{E}\right)_Y = \frac{\lambda_M + r_{12} + (r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma}{(2\mu_M + 3\lambda_M + r_{11} + 2r_{12}) [2\mu_M + r_{11} - r_{12} - 3(r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma]}, \quad (41)$$

$$E_Y(u, v, w) = \frac{(2\mu_M + 3\lambda_M + r_{11} + 2r_{12}) [2\mu_M + r_{11} - r_{12} - 3(r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma]}{2(\mu_M + \lambda_M) + r_{11} + r_{12} - (r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma}, \quad (42)$$

$$\nu_Y(u, v, w) = \frac{\lambda_M + r_{12} + (r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma}{2(\mu_M + \lambda_M) + r_{11} + r_{12} - (r_{11} - r_{12} - 2r_{44})\Gamma}. \quad (43)$$

(d) 机械弹性常数

为求解多晶体材料的机械弹性常数, 如 Kröner^[6]所提出的, 我们对 (38) 和 (39) 式进行三维空间取向平均, 并使其含有 r_{ij} 项的部分总和为零, 自协调关系式如下:

$$r_{11} - r_{12} + 3r_{44} = 0, \quad (44)$$

$$r_{11} + 4r_{12} - 2r_{44} = 0. \quad (45)$$

进一步整理可得

$$k = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}, \quad (46)$$

$$\begin{aligned} 8\mu^3 + [9k + 3(c_{11} - c_{12})]\mu^2 - 3c_{44} \\ [k + 3(c_{11} - c_{12})]\mu - 3k(c_{11} - c_{12})c_{44} = 0 \end{aligned} \quad (47)$$

因此 (47) 式是仅含有未知数 μ 的方程式. 将求解该方程式所得的 μ 和由 (46) 式所确定的 k 代入下式即可得到由立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

$$E = \frac{9k\mu}{3k + \mu}, \quad \nu = \frac{3k - 2\mu}{2(3k + \mu)}. \quad (48)$$

通过比较可知 (46) 和 (47) 式与 Kröner^[6]研究所得结果完全符合. 并且对于由立方晶系结构的单晶体所构成的多晶体材料来说, 其由 Kröner-Voigt 模型所得到的机械弹性常数的理论计算结果与由 Kröner-Reuss 模型所得到的机械弹性常数的理论计算结果^[7]完全相同.

3. 数值计算例

本节将根据上述所得的结果,以铝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,用以显示本方法的适用性.在此,铝单晶体的弹性常数为 $c_{11} = 108 \text{ GPa}$, $c_{12} = 62 \text{ GPa}$, $c_{44} = 28.3 \text{ GPa}$ ^[14]. 依据本文方法所计算的结果及日本理科年表所记载的值^[15]列于表 2. 用本方法所计算得到的铝多晶体材料的 Y 弹性常数与 3Γ 的关系曲线如图 2—图 5 所示.

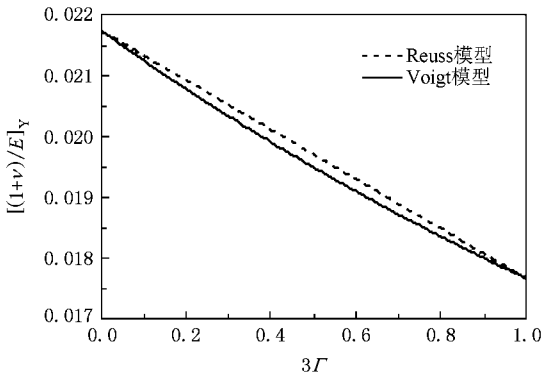


图 2 根据 Reuss 模型和 Voigt 模型得到的 $[(1 + \nu) E]_{\gamma}$ 与 3Γ 的关系曲线

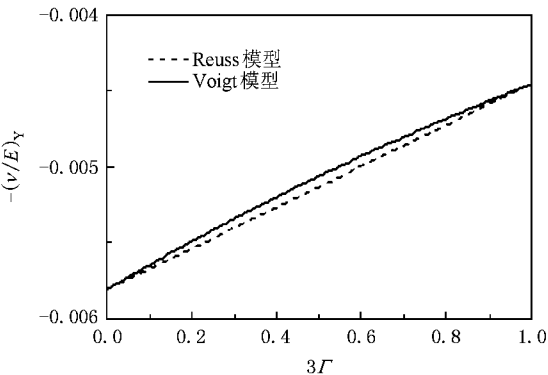


图 3 根据 Reuss 模型和 Voigt 模型得到的 $-(\nu / E)_{\gamma}$ 与 3Γ 的关系曲线

表 2 不同模型计算得到的铝多晶体材料的机械弹性常数

	$\nu \cdot E^{-1}$	$(1 + \nu)$	E	ν	μ	K	λ
	/TPa ⁻¹	$\cdot E^{-1}$ /TPa ⁻¹	/GPa		/GPa	/GPa	/GPa
Voigt 模型	4.930	19.10	70.60	0.3480	26.180	77.3	59.880
Reuss 模型	5.000	19.30	69.90	0.3490	25.910	77.3	60.060
1/2Voigt + 1/2 Reuss 模型	4.965	19.20	70.25	0.3485	26.045	77.3	59.970
Kröner Reuss 或 Kröner Voigt 模型	4.959	19.19	70.28	0.3485	26.058	77.3	59.961
日本理 科年表 ^[15]			70.30	0.345	26.100		

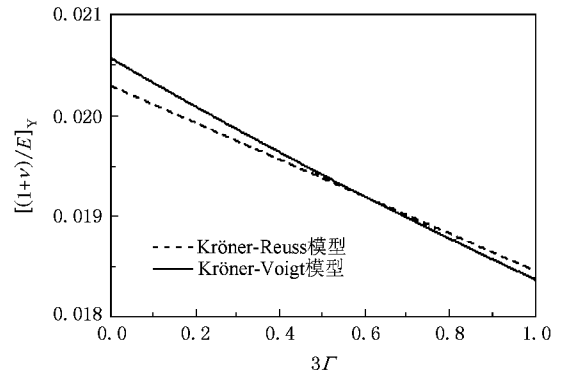


图 4 根据 Kröner-Reuss 模型和 Kröner-Voigt 模型得到的 $[(1 + \nu) E]_{\gamma}$ 与 3Γ 的关系曲线

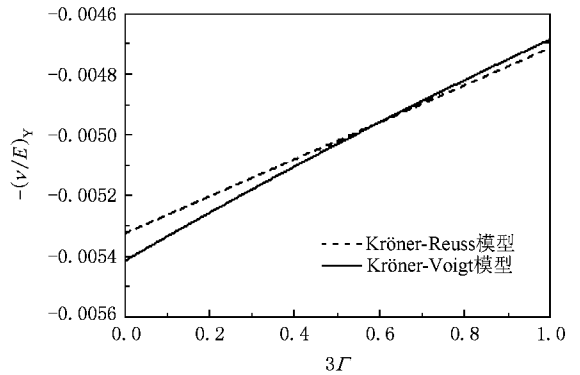


图 5 根据 Kröner-Reuss 模型和 Kröner-Voigt 模型得到的 $-(\nu / E)_{\gamma}$ 与 3Γ 的关系曲线

4. 结 论

本文首次提出一个新的物理参量“Y 弹性常数”,并阐述了其物理含义.并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.运用这个 Y 弹性常数的参量,根据 Kröner-Voigt 模型推导出了多晶体材料整体的机械弹性常数的表达式,所得的结果与 Kröner 的研究结果^[6]完全符合.以铝单晶体以及由其所构成的多晶体材料为例与具有立方晶系结构的多晶体材料的 X 射线弹性常数进行了比较,所得结论如下:

1) 由应力一定的 Reuss 模型和建立在其基础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“Y 弹性常数”与由 Reuss 模型和 Kröner 模型^[7]得到的 X 射线弹性常数是相同的.

2) 运用 Y 弹性常数这一参量,由 Kröner-Voigt 模型所得到的机械弹性常数之理论计算结果与由 Kröner-Reuss 模型所得到的机械弹性常数的理论计

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 Y 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.

- [1] The Society of Materials Science , Japan 1981 *X-ray Stress Measurement* (Tokyo :Yokendo) p54 (in Japanese)
- [2] Tanaka K S , Matsui E J , Kurimura T Y , Akiniwa Y A 1987 *Materials* **36-40** 79X in Japanese)
- [3] Glocker R 1938 *Z. Tech. Phys.* **19** 289
- [4] Behnken H , Hauk V 1986 *Z. Metallked.* **77** 620
- [5] Reuss A 1929 *Z. Ang. Math. Mech.* **9** 49
- [6] Kröner E 1958 *Z. Physik* **151** 504
- [7] Kneer G 1963 *Phys. Stat. Sol.* **3-9** 331
- [8] Voigt W 1910 *Lehrbuch der Kristalphysik* (Leipzig :Teubner)
- [9] Sokolnikoff I S 1956 *Mathematical Theory of Elasticity* (2nd ed.) (New York McGraw-Hill) p16 , p48
- [10] The Society of Materials Science , Japan 1990 *X-ray Stress Measurement* (Tokyo :Yokendo) p4-20 (in Japanese)
- [11] Ominami 1980 *Introduction to Micromechanics* (Tokyo :Ohmsha) p10 (in Japanese)
- [12] Noyan I C 1983 *Met. Trans. A* **14** 1907
- [13] Eshelby J D 1975 *Proc. Roy. Soc. London A* **241** 379
- [14] Nye J F 1957 *Physical Properties of Crystals* (Oxford : Oxford University Press)
- [15] National Astronomical Observatory of Japan 1997 *Chronological Scientific Tables* 26 (Tokyo :Maruzen Co. Ltd.) p446 (in Japanese)

The elastic constants of polycrystalline materials with cubic system structural single crystals

Lin Zheng^{1)†} Liu Min²⁾

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

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

(Received 27 May 2008 ; revised manuscript received 12 November 2008)

Abstract

New physical parameters “ Y elastic constants” and their physical meanings are proposed at the first time. The Y elastic constants are applied to the polycrystalline materials with cubic system structural single crystals , and they are deduced and compared with the “ X -ray elastic constants” of polycrystalline materials with cubic system structural single crystals. The expressions of mechanical elastic constants of polycrystalline materials based on Y elastic constants are in good agreement with that proposed by Kröner.

Keywords : Y elastic constants , cubic system structural single crystals , polycrystalline materials

PACC : 6220D