ПМТФ, № 2, 1968

ТЕРМОУПРУГИЕ ПОСТОЯННЫЕ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

В. В. Болотин, В. Н. Москаленко

(Москва)

Выводятся точные формулы для термоупругих постоянных макроскопически однородных поликристаллов. В основу кладется метод из статьи [1]. Предполагается, что локальные параметры образуют эргодическое однородное случайное поле. Ограничение на степень анизотропии кристаллов не накладывается.

1. Поле термоупругих перемещений $u_j(\mathbf{r})$ в неоднородной упругой среде, находящейся в равновесии при отсутствии объемных сил, определяется из системы уравнений термоупругости [2]

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\lambda_{jklm}\frac{\partial u_l}{\partial x_m}\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}(\beta_{jk}\theta)=0 \qquad (1.1)$$

Здесь $\theta(\mathbf{r})$ — приращение температуры относительно некоторого начального состояния; $\lambda_{jklm}(\mathbf{r})$ — тензор упругих постоянных; $\beta_{jk}(\mathbf{r})$ — тензор термоупругих постоянных, связанный с тензором коэффициентов температурного расширения α_{jk} зависимостью $\beta_{jk}=\lambda_{jklm}\alpha_{lm}$. В уравнении (1.1) и в дальнейшем используется соглашение о суммировании по «немым» индексам; $\mathbf{r}=x_1, x_2, x_3$. В случае поликристалла

$$\lambda_{jklm}=c_{j\alpha}c_{k\beta}c_{l\gamma}c_{m\delta}\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad \beta_{jk}=c_{j\delta}c_{k\varepsilon}\gamma_{\delta\varepsilon} \qquad (1.2)$$

где $\mu_{\alpha\beta\gamma\delta}$ и $\gamma_{\delta\varepsilon}$ — компоненты соответствующих тензоров в кристаллографических осях, $c_{j\alpha}$ — матрица преобразования к лабораторной системе координат. На границах зерен компоненты тензоров, а также перемещения, напряжения и т. п. терпят разрывы. Поэтому в дальнейшем будем трактовать параметры, входящие в уравнения (1.1) и последующие формулы, как обобщенные функции. Окончательные формулы не будут содержать операций над обобщенными функциями.

Пусть масштабы неоднородности и корреляции малы по сравнению с размером поликристалла, а его свойства статистически однородны. Тогда поликристалл можно считать неограниченным, а упругие постоянные $\lambda_{jklm}(\mathbf{r})$ и термоупругие постоянные $\beta_{jk}(\mathbf{r})$ — образующими однородное случайное поле. При макроскопически однородном напряженно-деформированном состоянии поля температуры, напряжений и деформаций тоже будут однородными (перемещения будут образовывать поле с однородными приращениями). В этом случае уравнениям (1.1) можно привести в соответствие стохастические граничные условия, требуя, например, чтобы математические ожидания деформаций были равны заданным постоянным значениям. Поставим эти условия для компонент градиента перемещений

$$\langle \partial u_j / \partial x_k \rangle = p_{jk} \qquad (1.3)$$

(угловыми скобками обозначается операция осреднения). Макроскопические упругие и термоупругие постоянные, обозначаемые через λ_{jklm}^* и β_{jk}^*, найдем из условия равенства математических ожиданий термоупругих напряжений в поликристалле и эквивалентной однородной среде

$$\left\langle \lambda_{jklm}\frac{\partial u_l}{\partial x_m}-\beta_{jk}\theta\right\rangle=\lambda_{jklm}^*\left\langle\frac{\partial u_l}{\partial x_m}\right\rangle-\beta_{jk}^*\langle\theta\rangle \qquad (1.4)$$

Задача состоит в отыскании градиента du_j/dx_k), удовлетворяющего уравнениям (1.1) и дополнительным условиям (1.3), и вычислении из (1.4) макроскопических постоянных $\overset{*}{\lambda}_{jklm}$ и $\overset{*}{\beta}_{jk}$.

Будем обозначать математические ожидания параметров одним штрихом, их флуктуационные составляющие — двумя штрихами. Например,

$$\lambda_{ijlm} = \lambda'_{jklm} + \lambda''_{jklm}, \quad \beta_{jk} = \beta'_{jk} + \beta''_{jk} \tag{1.5}$$

$$\lambda'_{jklm} = \langle \lambda_{jklm} \rangle, \quad \beta'_{jk} = \langle \beta_{jk} \rangle$$

Введем тензор Грина $G_{jk}(\mathbf{r},\mathbf{r}_1)$ для однородной упругой среды с постоянными λ'_{jklm}. Этот тензор удовлетворяет уравнению

$$\lambda'_{jklm} \frac{\partial^2 G_{ln}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}_1)}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta_{jn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$$

где δ_{jn} — символ Кронекера, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ — трехмерная дельта-функция. Уравнениям (1.1) и условиям (1.3) соответствует система уравнений

$$u_j(\mathbf{r}) - \int G_{jl}(\mathbf{r},\, \mathbf{r}_1) \frac{\partial}{\partial x_m} \left[\lambda''_{lmnp}(\mathbf{r}_1) \frac{\partial u_n(\mathbf{r}_1)}{\partial x_p} - \beta''_{lm}(\mathbf{r}_1)\, \theta(\mathbf{r}_1) \right] d\mathbf{r}_1 = p_{jk} x_k \tag{1.6}$$

($d\mathbf{r}_1 = dx_1\, dx_2\, dx_3$; интегрирование производится по всему пространству). Дифференцируя (1.6) почленно и преобразуя интеграл при помощи формулы Гаусса — Остроградского, придем к системе линейных интегральных уравнений относительно градиента du_j/dx_k (1.7)

$$\frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial x_k} - \int \frac{\partial^2 G_{jl}(\rho)}{\partial \xi_k \partial \xi_m} \left[\lambda''_{lmnp}(\mathbf{r} + \rho) \frac{\partial u_n(\mathbf{r} + \rho)}{\partial \xi_p} - \beta''_{lm}(\mathbf{r} + \rho)\, \theta(\mathbf{r} + \rho) \right] d\rho = p_{jk}$$

$$\rho = \xi_1, \xi_2, \xi_3, \quad d\rho = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3$$

Макроскопические упругие постоянные определялись в статье [1]. Поэтому ограничимся определением макроскопических термоупругих постоянных, положив, что все $p_{jk} = 0$. Решение уравнений (1.7) ищем по методу итераций

$$\frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial x_k} = -\sum_{N=1}^{\infty} \int \cdots \int \frac{\partial^2 G_{jc_1}(\rho_1)}{\partial \xi_k \partial \xi_{d_1}} \cdots \frac{\partial^2 G_{a_N c_N}(\rho_N)}{\partial \xi_{b_N} \partial \xi_{d_N}} \lambda''_{c_1 d_1 a_2 b_2}(\mathbf{r} + \rho_1) \ldots$$

$$\ldots \lambda''_{c_{N-1} d_{N-1} a_N b_N}(\mathbf{r} + \rho_1 + \ldots + \rho_{N-1})\, \beta''_{c_N d_N}(\mathbf{r} + \rho_1 + \ldots + \rho_N) \times$$

$$\times\, \theta(\mathbf{r} + \rho_1 + \ldots + \rho_N)\, d\rho_1 \ldots d\rho_N$$

Подставим результат в левую часть соотношения (1.4)

$$\left\langle \lambda_{jklm} \frac{\partial u_l}{\partial x_m} - \beta_{jk} \theta \right\rangle = -\beta'_{jk} \langle \theta \rangle - \langle \beta''_{jk} \theta'' \rangle -$$

$$-\sum_{N=1}^{\infty} \int \cdots \int \frac{\partial^2 G_{a_1 c_1}(\rho_1)}{\partial \xi_{b_1} \partial \xi_{d_1}} \cdots \frac{\partial^2 G_{a_N c_N}(\rho_N)}{\partial \xi_{b_N} \partial \xi_{d_N}} \langle \lambda''_{jk a_1 b_1}(0) \ldots \lambda''_{c_{N-1} d_{N-1} a_N b_N}(\rho_1 + \ldots +$$

$$+ \rho_{N-1})\, \beta''_{c_N d_N}(\rho_1 + \ldots + \rho_N)\, \theta(\rho_1 + \ldots + \rho_N) \rangle\, d\rho_1 \ldots d\rho_N \tag{1.8}$$

Макроскопические термоупругие постоянные β_{jk}^* равны взятым с обратным знаком правым частям формул (1.8), деленным на $\langle \theta \rangle$. Отсюда

$$\beta_{jk}^* = \beta'_{jk} + \frac{1}{\langle \theta \rangle} \sum_{N=1}^{\infty} \int \cdots \int \frac{\partial^2 G_{a_1 c_1}(\rho_1)}{\partial \xi_{b_1} \partial \xi_{d_1}} \cdots \frac{\partial^2 G_{a_N c_N}(\rho_N)}{\partial \xi_{b_N} \partial \xi_{d_N}} \langle \lambda''_{jk a_1 b_1}(0) \ldots$$

$$\ldots \lambda''_{c_{N-1} d_{N-1} a_N b_N}(\rho_1 + \ldots + \rho_{N-1})\, \beta''_{c_N d_N}(\rho_1 + \ldots + \rho_N)\, \theta(\rho_1 + \ldots$$

$$\ldots + \rho_N) \rangle\, d\rho_1 \ldots d\rho_N + \frac{\langle \beta''_{jk} \theta'' \rangle}{\langle \theta \rangle} \tag{1.9}$$

2. Таким образом, макроскопические термоупругие постоянные выражаются через смешанные моменты локальных упругих и термоупругих постоянных, а также флуктуаций температурного поля (последние зависят от флуктуаций коэффициентов теплопроводности). Для термодинамически равновесного состояния $\theta = \text{const}$. Формулу (1.9) можно записать в виде

$$\beta_{jk}^{*} = \beta_{jk}' + \langle \beta_{jk}^{**} \rangle \tag{2.1}$$

где $\beta_{jk}^{**}(\mathbf{r})$ — решение системы линейных интегральных уравнений

$$\beta_{jk}^{**}(\mathbf{r}) = \lambda_{jkab}''(\mathbf{r}) \int \frac{\partial^2 G_{ac}(\rho)}{\partial \xi_b \partial \xi_d} [\beta_{cd}^{**}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) + \beta_{cd}''(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})]\, d\boldsymbol{\rho} \tag{2.2}$$

Найдем решение системы (2.2) для случая сильно изотропных поликристаллов (в смысле определения, введенного в [1]). Для этого случая

$$\lambda_{jklm}' = \lambda_0 \delta_{jk} \delta_{lm} + \mu_0 (\delta_{jl} \delta_{km} + \delta_{jm} \delta_{kl}), \qquad \beta_{jk}' = \beta_0 \delta_{jk} \tag{2.3}$$

где λ_0 и μ_0 — постоянные Ламе, а β_0 — коэффициент температурного расширения, найденные без учета корреляционных поправок. Выражение для тензора Грина имеет вид

$$G_{jk}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{4\pi\mu_0} \left(\frac{\delta_{jk}}{\rho} - \frac{5}{2} g \frac{\partial^2 \rho}{\partial \xi_j \partial \xi_k} \right) \tag{2.4}$$

$$\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| = (\xi_j \xi_j)^{1/2}, \qquad g = \frac{1}{5} \frac{\lambda_0 + \mu_0}{\lambda_0 + 2\mu_0} = \frac{1}{10(1 - \nu_0)}$$

Здесь g — постоянная материала.

Совместные корреляционные функции для упругих и термоупругих постоянных, а также вспомогательных величин β_{jk}^{**} сильно изотропной среды зависят только от модулей расстояний между точками. Обозначим

$$\begin{gathered} \langle \lambda_{jka_1b_1}''(\mathbf{r}) \ldots \lambda_{c_{N-1}d_{N-1}a_N b_N}''(\mathbf{r})\, \beta_{c_N d_N}''(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \rangle = \varphi_{jka_1b_1 \ldots c_N d_N}(\rho) \\ \langle \lambda_{jka_1b_1}''(\mathbf{r}) \ldots \lambda_{c_{N-1}d_{N-1}a_N b_N}''(\mathbf{r})\, \beta_{c_N d_N}^{**}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \rangle = \psi_{jka_1b_1 \ldots c_N d_N}(\rho) \end{gathered} \tag{2.5}$$

В новых обозначениях уравнения (2.2) после осреднения принимают вид

$$\langle \beta_{jk}^{**} \rangle = \int \frac{\partial^2 G_{ac}(\rho)}{\partial \xi_b \partial \xi_d} [\varphi_{jkabcd}(\rho) + \psi_{jkabcd}(\rho)]\, d\boldsymbol{\rho} \tag{2.6}$$

Метод решения уравнений (2.2), основанный на использовании рекуррентных соотношений, подробно изложен в статье [1]. Окончательный результат имеет вид

$$\beta_{jk}^{*} = \beta_0 \delta_{jk} + \sum_{N=1}^{\infty} I_{jk}^{(N)} \tag{2.7}$$

Общий член ряда (2.7) выражается через одноточечные смешанные корреляционные тензоры упругих и термоупругих постоянных следующим образом: (2.8)

$$I_{jk}^{(N)} = \left(-\frac{1}{3\mu_0} \right)^N \langle \lambda_{jka_1b_1}'' \zeta_{a_1b_1a_2b_2} \lambda_{a_2b_2a_3b_3}'' \ldots \zeta_{a_{2N-1}b_{2N-1}a_{2N}b_{2N}} \beta_{a_{2N}b_{2N}}'' \rangle$$

$$\zeta_{abcd} = (1 - 2g)\, \delta_{ac} \delta_{bd} - g \delta_{ab} \delta_{cd}$$

Здесь ζ_{abcd} — изотропный тензор четвертого ранга, зависящий от g, согласно формулы (2.4).

3. В случае сильно изотропного поликристалла тензоры λ_{jklm} и β_{jk} связаны с компонентами μ_{jklm} и γ_{jk} в кристаллографических координатах формулами (1.2). Введем обозначения

$$\mu''_{jklm} = \mu_{jklm} - \lambda'_{jklm}, \qquad \gamma''_{jk} = \gamma_{jk} - \beta'_{jk} \tag{3.1}$$

Тогда флуктуационные составляющие тензоров λ_{jklm} и β_{jk} определяются по формулам типа (1.2)

$$\lambda''_{jklm} = c_{j\alpha}c_{k\beta}c_{l\gamma}c_{m\delta}\mu''_{\alpha\beta\gamma\delta}, \qquad \beta''_{jk} = c_{j\delta}c_{k\varepsilon}\gamma''_{\delta\varepsilon} \tag{3.2}$$

Используя выражения (3.2), вычислим смешанные корреляционные тензоры, входящие в формулу (2.8)

$$\langle\lambda''_{jka_1b_1}\zeta_{a_1b_1a_2b_2}\lambda''_{a_2b_2a_3b_3}\ldots\zeta_{a_{2N-1}b_{2N-1}a_{2N}b_{2N}}\beta''_{a_{2N}b_{2N}}\rangle =$$
$$= \langle c_{j\alpha_1}c_{k\alpha_2}c_{a_1\alpha_3}c_{b_1\alpha_4}\zeta_{a_1b_1a_2b_2}c_{a_2\alpha_5}c_{b_2\alpha_6}c_{a_3\alpha_7}c_{b_2\alpha_8}\ldots$$
$$\ldots\zeta_{a_{2N-1}b_{2N-1}a_{2N}b_{2N}}c_{a_{2N}\alpha_{4N+1}}c_{b_{2N}\alpha_{4N+2}}\rangle\,\mu''_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4}\mu''_{\alpha_5\alpha_6\alpha_7\alpha_8}\ldots\gamma''_{\alpha_{4N+1}\alpha_{4N+2}}$$

Замечая, что

$$c_{a_1\alpha_3}c_{b_1\alpha_4}\zeta_{a_1b_1a_2b_2}c_{a_2\alpha_5}c_{b_2\alpha_6} = \zeta_{\alpha_3\alpha_4\alpha_5\alpha_6}, \quad \langle c_{j\alpha_1}c_{k\alpha_2}\rangle = {}^1/_3\delta_{jk}\delta_{\alpha_1\alpha_2}$$

приведем формулу (2.8) к виду

$$I_{jk}^{(N)} = {}^1/_3\delta_{jk}(-{}^1/_3\mu_0^{-1})^N\mu''_{\alpha_1\alpha_1\alpha_3\alpha_4}\zeta_{\alpha_3\alpha_4\alpha_5\alpha_6}\mu''_{\alpha_5\alpha_6\alpha_7\alpha_8}\ldots\zeta_{\alpha_{4N-1}\alpha_{4N}\alpha_{4N+1}\alpha_{4N+2}}\gamma''_{\alpha_{4N+1}\alpha_{4N+2}}$$

Подставляя формулу (3.3) в (2.7), получим, что $\beta_{jk}{}^* = \beta_*\delta_{jk}$. Макроскопический термоупругий коэффициент β_* определяется по формуле (3.3)

$$\beta_* = \beta_0 + \frac{1}{3}\sum_{N=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{3\mu_0}\right)^N\mu''_{\alpha_1\alpha_1\alpha_3\alpha_4}\zeta_{\alpha_3\alpha_4\alpha_5\alpha_6}\mu''_{\alpha_5\alpha_6\alpha_7\alpha_8}\ldots\zeta_{\alpha_{4N-1}\alpha_{4N}\alpha_{4N+1}\alpha_{4N+2}}\gamma''_{\alpha_{4N+1}\alpha_{4N+2}}$$

(3.4

Вычислим сумму ряда в правой части. Введем для этого оператор **A**, переводящий тензор второго ранга $\mathbf{a} = a_{jk}$ в тензор $\mathbf{b} = b_{jk}$ таким образом, что равенство $\mathbf{b} = \mathbf{Aa}$ эквивалентно соотношениям

$$b_{jk} = \mu_0^{-1}\mu''_{jkab}\zeta_{abcd}a_{cd} \tag{3.5}$$

При помощи этого оператора формулу (3.4) можно представить в виде

$$\beta_* = \beta_0 - {}^1/_3\,\psi_{\alpha\alpha} \tag{3.6}$$

где тензор $\psi = \psi_{\alpha\beta}$ равен сумме ряда

$$\psi = \sum_{N=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{3}\right)^{N+1}\mathbf{A}^N\boldsymbol{\gamma}'' \tag{3.7}$$

($\boldsymbol{\gamma}''$ — тензор с компонентами $\gamma_{\alpha\beta}''$). Правая часть формулы (3.7) есть решение операторного уравнения

$$\psi + {}^1/_3\mathbf{A}\psi = {}^1/_3\mathbf{A}\boldsymbol{\gamma}'' \tag{3.8}$$

которое представляет собой систему линейных алгебраических уравнений относительно компонентов $\psi_{\alpha\beta}$. Число уравнений зависит от класса структуры (но не превышает трех). В случае кристаллов кубической структуры все $\gamma_{\alpha\beta}'' = 0$, и, следовательно, все $\psi_{\alpha\beta} = 0$. В этом случае корреляционные поправки к осредненным термоупругим постоянным обращаются в нуль.

Поступила 22 VI 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. Болотин В. В., Москаленко В. Н., Задача об определении упругих постоянных микронеоднородной среды. ПМТФ, 1968, № 1.
2. Болей Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений. Изд-во «Мир», 1964.