Dominik SENCZYK

DYFRAKCYJNE STAŁE SPRĘŻYSTOŚCI MATERIAŁÓW POLIKRYSTALICZNYCH

Streszczenie. W pomiarach makronaprężeń metodami rentgenograficznymi stosuje się tzw. dyfrakcyjne stałe sprężystości, które można obliczyć według różnych modeli ciał sprężystych lub zmierzyć metodami rentgenograficznymi. Stosowane są różne modele ciał sprężystych:Voigta, Reussa, Hilla, Hubera i Schmida, Boasa, Bruggemana, Shibuya, Kneera i Krönera, Hashina i Shtrikmana, Krönera i Kocha, Laurenta i Eudiera, Aleksandrova, Ledbettera i Naimona. W pracy opisano zasady i warunki pomiarów stałych sprężystości materiałów polikrystalicznych i uzyskane rezultaty pomiarów.

X-RAY ELASTIC CONSTANTS OF POLYCRYSTALLINE MATERIALS

Summary. X-ray elastic constants are used in macrostress measurement by X-ray methods. They can be calculated according to various models or measured by X-ray methods. There are presented possibilities to calculate X-ray elastic constants for various polycrystalline models of solid state with use of computer software. The models that were elaborated by Voigt, Reuss, Hill, Huber and Schmid, Boas, Bruggeman, Shibuya, Kneer and Kröner, Hashin and Shtrikman, Kröner and Koch, Laurent and Eudier, Kasprzak, Aleksandrov, Ledbetter and Naimon are taken into account. Calculation of shear modulus for copper is presented as an example. X-ray elastic constants for polycrystalline materials can be also measured by X-ray methods. There are described measurement method and original devices for bending or stretching of flat probes in co-unter goniometer. The special attention is paid to computer-aided calculations. Measured values of elastic constants for some polycrystalline materials are given.

1. Wprowadzenie

W pomiarach makronaprężeń metodami rentgenograficznymi stosuje się tzw. dyfrakcyjne stałe sprężystości. Można je obliczyć według różnych modeli polikrystalicznych ciał sprężystych lub też zmierzyć metodami rentgenograficznymi. W związku z tym rozpatrzono obie możliwości.

Metody dyfraktometrii rentgenowskiej mogą być wykorzystane do pomiaru stałych sprężystości faz występujących w materiałach polikrystalicznych. Należy przy tym pamiętać, że:

1) w przypadku wielofazowych materiałów polikrystalicznych często dla wartości stałej sprężystości całego materiału przyjmuje się wartość stałej sprężystości danej fazy; postępowanie takie może być uzasadnione tylko wówczas, gdy faza ta występuje w ilości co najmniej 80-90%, a wartości stałych sprężystości pozostałych faz nie różnią się istotnie od wartości tych stałych dla fazy dominującej w badanym wielofazowym materiale polikrystalicznym,

2) wartości stałych sprężystości dowolnych faz są w określony sposób uśrednione po zbiorze krystalitów nawet w przypadku materiałów polikrystalicznych, które pod względem własności mechanicznych są w skali makroskopowej izotropowe.

2. Obliczanie stałych sprężystości według różnych modeli ciał sprężystych

Zagadnienie obliczenia stałych sprężystości ciał polikrystalicznych na podstawie własności sprężystych monokryształów jest złożone pod względem eksperymentalnym i teoretycznym. Trudno otrzymać rzeczywiście izotropowe próbki, ponieważ większość sposobów ich przygotowania pozostawia pewną teksturę, która może być tylko częściowo usunięta. Należy również liczyć się z dużymi zniekształceniami sieci krystalicznej przynajmniej w obrębie tzw. warstwy wierzchniej materiału.

Stosowane są różne sposoby uśredniania wielkości fizycznych lub ich odwrotności, wszystkie one przyjmują jednak następujące założenia:

- ziarna są zorientowane przypadkowo i małe w stosunku do wielkości próbki, lecz na tyle duże, że przestrzenie między nimi są nieistotne,

 spójność krystalitów istnieje poprzez bardzo cienkie granice ziarn, które odkształcają się podobnie jak wnętrze kryształu.

Stosowane są różne modele ciał sprężystych [1, 2]: Voigta, Reussa, Hilla, Hubera i Schmida, Boasa, Bruggemana, Shibuya, Kneera i Krönera, Hashina i Shtrikmana, Krönera i Kocha, Laurenta i Eudiera, Kasprzaka, Aleksandrova, Ledbettera i Naimona.

Voigt przyjął założenie stałego odkształcenia w ciele polikrystalicznym. Jest ono spełnione dla próbki składającej się z monokrystalicznych warstw ułożonych równolegle do kierunku działania naprężenia, gdy wszystkie warstwy podlegają temu samemu odkształceniu.

Stałe sprężystości s1 i s2 są według modelu Voigta wyrażone wzorami:

a) dla układu regularnego:

$$s_{1} = \frac{s_{11}(2s_{11} + s_{12}) + s_{12}(s_{11} - 2s_{12}) - s_{44}(s_{11} + 3s_{12})}{2s_{44} + 6(s_{11} - s_{12})},$$
$$\frac{1}{2}s_{2} = \frac{5s_{44}(s_{11} - s_{12})}{2s_{44} + 6(s_{11} - s_{12})},$$

b) dla układu heksagonalnego:

$$s_{1} = \frac{3(c_{44} - c_{11} - c_{33} - 5c_{12} - 8c_{13})}{(2c_{11} + c_{33} + 2c_{12} + 4c_{13})(7c_{11} + 2c_{33} - 5c_{12} - 4c_{13} + 2c_{44})},$$
$$\frac{1}{2}s_{2} = \frac{15}{7c_{11} + 2c_{33} - 5c_{12} - 4c_{13} + 12c_{44}}.$$

Stałe s_1 i s_2 nie zależą więc od kierunku, co jest mało prawdopodobne dla rzeczywistych ciał polikrystalicznych.

Reuss przyjął założenie ciągłości wszystkich składowych naprężenia na granicy ziarn o różnej orientacji. Jest ono jednak słuszne tylko dla składowych naprężeń normalnych do granicy styku ziarn. Model Reussa jest słuszny dla jednoosiowego rozciągania próbki składającej się z monokrystalicznych warstw prostopadłych do działającego naprężenia, ponieważ w tym przypadku naprężenie będzie stałe.

Stałe sprężystości s1 i s2 są według modelu Reussa wyrażone wzorami:

a) dla układu regularnego:

$$s_1 = s_{12} + \frac{1}{2}\Gamma(2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}),$$

$$\frac{1}{2}s_2 = s_{11} - s_{12} - \frac{3}{2}\Gamma(2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}),$$

gdzie:

$$\Gamma = \frac{h^2 k^2 + k^2 l^2 + l^2 h^2}{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)^2},$$

b) dla układu heksagonalnego:

$$s_{1} = \frac{1}{2} \left[(s_{11} + s_{13}) + (s_{11} - s_{33} - s_{13} - s_{12} - s_{44}) \cos^{2} \phi - (s_{11} - s_{33} - s_{44} - 2s_{13}) \cos^{4} \phi \right]$$

$$\frac{1}{2} s_{2} = \frac{1}{2} \left[(2s_{11} - s_{12} - s_{13}) - (5s_{11} + s_{33} - 3s_{44} - 5s_{13}) \cos^{2} \phi + 3(s_{11} + s_{33} - s_{44} - 2s_{13}) \cos^{4} \phi \right]$$

gdzie φ jest kątem zawartym między osią sześciokrotną i normalną do danej płaszczyzny sieciowej.

Hill przyjmuje, że stałe sprężystości s₁ i s₂ dla realnych ciał są związane ze stałymi wyznaczonymi według modelu Voigta i Reussa następującymi zależnościami:

$$s_1 = k^R s_1^R + k^V s_1^V, \qquad \frac{1}{2} s_2 = k^R \left(\frac{1}{2} s_2^R\right) + k^V \left(\frac{1}{2} s_2^V\right),$$

Tablica 1

przy czym: $k^{R} + k^{V} = 1$, gdzie indeks odnosi daną wielkość do określonego modelu (Reussa lub Voigta). Niektórzy dla czynników k przyjmują wartości: $k^{R} = k^{V} = 1/2$, a inni: $k^{R} = 1/3$, $k^{V} = 2/3$. Stałe sprężystości według modelu Eshelby'ego-Krönera mają wartości bliskie wartościom dla przypadku $k^{R} = k^{V} = 1/2$.

Inne wyżej wymienione modele ciał sprężystych prowadzą do bardzo skomplikowanych wyrażeń i zapewniają tylko nieco lepszą zgodność z doświadczeniem.

W charakterze przykładu obliczono moduł G dla miedzi (tablica 1). Jest to typowy metal, dla którego czynnik anizotropii wynosi 3,19 i znane są wartości stałych sprężystości.

Wartości modułu sprężystości poprzecznej dla miedzi

Metoda	G [GPa]
Voigta	54,68
Hashina-Shtrikmana (górna granica)	49,51
Krönera (górna granica)	48,62
Hersheya-Krönera-Eshelby'ego	48,25
Krönera (dolna granica)	47,70
Hilla (średnia arytmetyczna)	47,41
Hilla (średnia geometryczna)	47,38
Aleksandrova	46,82
Hashina-Shtrikmana (dolna granica)	46,06
Hubera-Schmida-Boasa	44,13
Reussa	40,15
Doświadczenie	47,90

Z danych tych wynika, że do dobrej zgodności z wynikami pomiarów prowadzi metoda Hersheya-Krönera-Eshelby'ego oraz dolne oszacowanie metodą Krönera. Do jeszcze lepszej zgodności z wynikami pomiarów prowadzi średnia arytmetyczna dolnego i górnego oszacowania metodą Hashina-Shtrikmana. Nieco gorszą zgodność z doświadczeniem daje średnia arytmetyczna dolnego i górnego oszacowania metodą Krönera. Niezłą zgodność daje również oszacowanie metodą Hilla.

3. Zasada pomiaru stałych sprężystości materiałów polikrystalicznych metodami dyfraktometrii rentgenowskiej

Podstawowe równanie metody $\sin^2 \psi$ pomiaru naprężeń ma postać [1-3]:

$$\varepsilon_{\varphi,\psi} = \frac{1}{2} s_2 \sigma_{\varphi} \sin^2 \psi + s_1 (\sigma_1 + \sigma_2), \qquad (1)$$

gdzie:

- $\epsilon_{\phi,\psi}$ odkształcenie sieci krystalicznej badanego materiału zmierzone w kierunku wyznaczonym przez kąty ϕ i ψ ,
- s₁, s₂ stałe sprężystości materiału, które można wyrazić przez moduł Younga E i współczynnik Poissona v: s₁ = $-\nu/E$, s₂/2 = $(1 + \nu)/E$,
- φ kąt zawarty w płaszczyźnie ε₁0ε₂ między kierunkami ε₁ i ε_{0.000},

 Ψ - kąt zawarty między kierunkiem osi ε_3 i kierunkiem pomiaru odkształcenia ε_{ow} ,

 ε_i - odkształcenia główne, $\varepsilon_i = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)$,

 σ_1 - naprężenia główne, $\sigma_1 = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$,

 $σ_{\phi}$ - naprężenie działające w płaszczyźnie ε₁0ε₂ w kierunku wyznaczonym przez rzut kierunku pomiaru na tę płaszczyznę, $σ_{\phi} = σ_1 \sin^2 \phi + σ_2 \cos^2 \phi$.

Jeżeli równanie to napiszemy dla liniowego stanu naprężenia i kolejno zróżniczkujemy względem σ_1 , σ_2 i sin² ψ , to otrzymujemy:

$$s_{1} = \frac{\partial \varepsilon_{\varphi, \psi=0^{0}}}{\partial \sigma_{1}}, \qquad \frac{1}{2} s_{2} = \frac{\partial^{2} \varepsilon_{\varphi, \psi}}{\partial \sin^{2} \psi \partial \sigma_{1}}.$$
 (2)

Równania te zawierają zasadę pomiaru stałych s_1 i s_2 . Wyznaczenie tych stałych składa się z następujących czynności:

1) Dla kilku różnych wartości jednoosiowego naprężenia $\sigma_{1,i}$ (i = 1, 2, 3..., n) dokonuje się pomiaru odkształcenia sieci krystalicznej dla ustalonych wartości kąta ψ , co prowadzi do zależności $\varepsilon = f(\sin^2 \psi)_{\sigma_1 = cons}$; zależności tych będzie tyle, ile jest różnych wartości naprężenia σ_1 , czyli n. Nachylenie prostej, będącej obrazem graficznym tej zależności, można zapisać w postaci:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sin^2 \psi} = \frac{1}{2} s_2 \sigma_1. \tag{3}$$

2) Nachylenia prostych (5) przedstawiamy jako funkcję σ_1 , co prowadzi do równania:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sin^2 \psi} = g(\sigma_1); \tag{4}$$

skąd nachylenie tej prostej

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_1} \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sin^2 \psi} \right] = \frac{1}{2} s_2.$$
(5)

3) Wartości $\varepsilon_{\psi,\psi=0} = \sigma_1 s_1$ dla zależności $\varepsilon = f(\sin^2 \psi)_{\sigma_1 = const}$ przedstawiamy z kolei jako funkcję σ_1 : $\varepsilon_{\psi,\psi=0} = h(\sigma_1)$, przy czym nachylenie tej prostej

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_{1}} \left[\varepsilon_{\varphi, \psi=0} \right] = s_{1}. \tag{6}$$

W badaniach tych wygodne jest stosowanie urządzeń umożliwiających odkształcanie płaskich próbek materiałów polikrystalicznych bezpośrednio w goniometrze licznikowym, lecz urządzenia takie nie stanowią wyposażenia dyfraktometrów rentgenowskich. W związku z tym opracowano specjalne urządzenia do zginania i do rozciągania takich próbek.

4. Warunki pomiaru stałych sprężystości materiałów polikrystalicznych metodą dyfraktometryczną

Pomiar stałych sprężystości materiałów polikrystalicznych lub ich faz może być zrealizowany z wykorzystaniem metody $\sin^2\psi$ [1-3]. Program, opracowany w języku C⁺⁺, wymaga wprowadzenia następujących danych wejściowych:

- liczby r naprężeń σ_i i ich wartości, przy czym i = 1, 2, 3,...,r dla r ≤ 10 ,

- liczby N kątów ψ_i i ich wartości, przy czym j = 1, 2, 3,...,N dla N \leq 10,

- położenia kątowego Θ_0 ustalonej linii dyfrakcyjnej badanego materiału polikrystalicznego lub fazy w stanie pozbawionym naprężeń.

Po podaniu tych danych na ekranie monitora pokazuje się tablica, do której wpisuje się wartości położeń kątowych $\Theta_{\psi_j,\sigma_i=\text{const}}$ tej samej linii dyfrakcyjnej badanego materiału lub fazy dla ustalonych wartości kątów ψ_j i ustalonych wartości naprężenia σ_i . Na podstawie tych danych oblicza się wartości odkształcenia sieci krystalicznej:

$$\varepsilon_{\psi_j,\sigma_i=\text{const}} = \frac{\sin\Theta_{\alpha}}{\sin\Theta_{\psi_i,\sigma_i=\text{const}}} - 1.$$
(7)

Stosując do obliczonych wartości odkształcenia sieci metodę najmniejszej sumy kwadratów uzyskuje się równania normalne w postaci:

$$\varepsilon_{\psi_{j},\sigma_{i}=\text{const}} = \Lambda_{\psi,\sigma_{i}=\text{const}} \sin^{2}\psi + B_{\psi,\sigma_{i}=\text{const}}, \qquad (8)$$

gdzie:

$$A_{_{\psi,\sigma_1 + \text{zense}}} = \frac{W_A}{W}, \quad B_{_{\psi,\sigma_1 + \text{zense}}} = \frac{W_B}{W}, \quad (9)$$

$$W_{A} = N \sum_{j=1}^{N} \left[\epsilon_{\psi_{j}, \pi_{1} \text{-const}} \sin^{2} \psi \right] - \sum_{j=1}^{N} \epsilon_{\psi_{j}, \pi_{1} \text{-const}} \sum_{j=1}^{N} \sin^{2} \psi_{j}, \qquad (10)$$

$$W_{B} = \sum_{j=1}^{N} \sin^{4} \psi_{j} \sum_{j=1}^{N} \epsilon_{\psi_{j},\sigma_{1} = const} - \sum_{j=1}^{N} \sin^{2} \psi_{j} \sum_{j=1}^{N} \left[\epsilon_{\psi_{j},\sigma_{1} - const} \sin^{2} \psi_{j} \right],$$
(11)

$$W = N \sum_{j=1}^{N} \sin^4 \psi_j - \left[\sum_{j=1}^{N} \sin^2 \psi_j \right]^2.$$
(12)

Obliczenia według wzorów (7) \div (12) wykonuje się dla wszystkich wartości σ_i . Na podstawie tych współczynników A i B wyznacza się stałe sprężystości. Stosuje się metodę najmniejszej sumy kwadratów odpowiednio do wielkości A i do B

$$s_1 = \frac{\sum_{i=1}^{r} \left[\mathbf{B}_{\psi,\sigma_i} \sigma_i \right]}{\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2},$$
(13)

$$\frac{1}{2}\mathbf{s}_{2} = \frac{\sum_{i=1}^{r} \left[A_{\psi,\sigma_{i}}\sigma_{i}\right]}{\sum_{i=1}^{r} \sigma_{i}^{2}}.$$
(14)

Na podstawie wyznaczonych wartości stałych sprężystości można obliczyć moduł Younga:

$$E = \frac{1}{s_1 + \frac{1}{2}s_2}$$
(15)

oraz współczynnik Poissona:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{s}_1}{\mathbf{s}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{s}_2} \,. \tag{16}$$

5. Przykład zastosowania opracowanego programu i uzyskane rezultaty pomiarów

Opracowany program komputerowy do pomiaru stałych sprężystości materiałów polikrystalicznych metodą rentgenograficzną na wstępie poddano testowaniu, które wykazało poprawność jego działania, a następnie zastosowano do wyznaczenia stałych sprężystości różnych materiałów i faz polikrystalicznych.

Do badań wybrano następujące materiały:

- stale konstrukcyjne wyższej jakości: 15, 25, 35, 45, 55, 65,

- stale konstrukcyjne do ulepszania cieplnego: chromową 45H, chromowo-molibdenową 35HM,

- stal łożyskową ŁH15,

- stal narzędziową chromowo-wanadowo-molibdenową NC7VL,

- mosiądz CuZn30.

Dokonano również pomiaru stałych sprężystości niektórych faz w stalach lub staliwie: austenitu w staliwie LH17N36S w stanie surowym i nawęglonym oraz węglika $Me_{23}C_6$ i węglika Me_7C_3 .

Sposób postępowania zostanie pokazany przykładowo dla pomiaru stałych sprężystości ferrytu stali 55 wyżarzonej normalizująco w temperaturze 1073 K. Płaskie próbki tej stali o wymiarach 110 x 15 x 0,4 mm zamocowane były w specjalnym przyrządzie własnej kon-

strukcji do ich rozciągania. Za pomocą tego urządzenia wytwarzano w nich jednoosiowy stan naprężenia zdefiniowany przez naprężenie σ_1 o kolejnych wartościach: 100, 200, 300, 400, 500 MPa. Do określania położenia kątowego linii dyfrakcyjnej 211 ferrytu w stali 55 stosowano dyfraktometr rentgenowski typu PSF-1M firmy Rigaku-Japonia, wyposażony w lampę rentgenowską o anodzie chromowej (napięcie pracy 30 kV, natężenie prądu anodowego 10 mA, filtr V). Korzystano więc z promieniowania CrKa. Położenia tej linii dyfrakcyjnej określano dla różnych, wyżej podanych, wartości naprężeń, przy czym dla każdej z tych wartości kąt ψ wynosił: 0°, ±15°, ±30°, ±45°. Doświadczalnie wyznaczone położenia ustalonej linii dyfrakcyjnej zestawiono w tablicy 2.

Tablica 2

or [MPa]	ψ[⁰]				
	0	15	30	45	
100	78,194	78,184	78,155	78,115	
200	78,228	78,207	78,149	78,071	
300	78,262	78,231	78,144	78,026	
400	78,297	78,254	78,139	77,981	
500	78,331	78,278	78,134	77,937	

Położenia kątowe linii dyfrakcyjnej 211 ferrytu w stali 55 wyznaczone dla różnych wartości naprężeń rozciągających

Na podstawie danych zestawionych w tablicy 2, za pomocą opracowanego programu komputerowego obliczono wartości stałych sprężystości ferrytu w stali 55 oraz wartości jego modułu Younga i współczynnika Poissona (tablica 3). Eksperymentalne wartości zmierzonych stałych sprężystości różnych materiałów polikrystalicznych i faz w wielofazowych materiałach polikrystalicznych podano w tablicy 4.

Tablica 3

Wartości stałych sprężystości oraz modułu Younga i współczynnika Poissona dla ferrytu w stali 55, wyliczone za pomocą opracowanego programu komputerowego

$-s_1 \cdot 10^6$ [MPa ⁻¹]	1,25
$\frac{1}{2}s_2 \cdot 10^6 \left[MPa^{-1}\right]$	5,77
E [MPa]	221 238,9
ν	0,276

Wartości wielkości podanych w tablicy 3 bardzo dobrze się zgadzają z wartościami tych wielkości dla ferrytu w stali 55 otrzymanymi z obliczeń bez zastosowania omawianego programu komputerowego. W sposób pośredni wskazuje to również na poprawność działania tego programu. Dane w tablicy 4 umożliwiają zastosowania rentgenograficznych metod pomiaru naprężeń w podanych materiałach polikrystalicznych lub fazach.

Material	s [TPa -1]	$\frac{1}{-r} \left[TP_2^{-1} \right]$	
Iviater lai	Silira	2 2	
Stal 15	$1,38 \pm 0,05$	$6,31 \pm 0,22$	
Stal 25	$1,39 \pm 0,05$	6,35 ± 0,22	
Stal 35	$1,38 \pm 0,05$	6,37 ± 0,22	
Stal 45	$1,39 \pm 0,06$	$6,37 \pm 0,22$	
Stal 55	$1,40 \pm 0,06$	$6,40 \pm 0,23$	
Stal 65	$1,42 \pm 0,06$	$6,45 \pm 0,23$	
Stal 45H	$1,25 \pm 0,06$	$5,85 \pm 0,29$	
Stal 35HM	$1,15 \pm 0,07$	$5,62 \pm 0,33$	
Stal ŁH15	$1,35 \pm 0,07$	$6,04 \pm 0,26$	
Stal NC7VL	$1,07 \pm 0,09$	$5,30 \pm 0,40$	
Węglik Me ₂₃ C ₆	$1,84 \pm 0,05$	$6,84 \pm 0,21$	
Węglik Me7C3	$1,21 \pm 0,07$	$4,67 \pm 0,30$	
Austenit w staliwie LH17N36S	$1,47 \pm 0,07$	$6,74 \pm 0,33$	
Austenit w nawęglonym	1 19 + 0 09	574 1 0 24	
staliwie LH17N36S	1,10 ± 0,08	$5,74 \pm 0,34$	
Mosiądz CuZn30	$3,72 \pm 0,05$	$14,82 \pm 0,19$	

Stałe sprężystości s₁ i s₂ badanych materiałów i faz

6. Wnioski

Opracowany program komputerowy do pomiaru stałych sprężystości materiałów lub faz polikrystalicznych może być stosowany dla metody $\sin^2 \psi$ i dowolnego dyfraktometru rentgenowskiego, a jego zastosowanie zwiększa efektywność pomiarów naprężeń metodami rentgenograficznymi.

Literatura

- Senczyk D.: Pomiary makronaprężeń metodami rentgenograficznymi w materiałach polikrystalicznych, Politechnika Poznańska, Rozprawy, nr 194, Wyd. Politechniki Poznańskiej, Poznań 1988.
- Senczyk D.: Dyfraktometria rentgenowska w badaniach stanów naprężenia i własności sprężystych materiałów polikrystalicznych, Wyd. Politechniki Poznańskiej, Poznań 1995, ISBN 83-7143-113-9.
- Senczyk D.: Rentgenowskie pomiary tensora naprężenia, Wyd. Politechniki Poznańskiej, Poznań 1998, ISBN 83-7143-070-1.

Politechnika Poznańska Instytut Inżynierii Materiałowej Pl. M. Skłodowskiej-Curie 5 60-965 Poznań Tablica 4

Abstract

X-ray elastic constants are used in macrostress measurement by X-ray methods. They can be calculated according to various models or measured by X-ray methods. The evaluation of the elastic constants of polycrystals and multi-phase materials is one of the important problems in micromechanics. Various approaches to the problem have been suggested over the years. In all of these, various models have been used to account for the partitioning os stress and/or strain between the constituent grains of the multi-phase body. The models that were elaborated by Voigt, Reuss, Hill, Huber and Schmid, Boas, Bruggeman, Shibuya, Kneer and Kröner, Hashin and Shtrikman, Kröner and Koch, Laurent and Eudier, Kasprzak, Aleksandroy. Ledbetter and Naimon are taken into account. In the earliest work on the subject, Voigt assumes a constant strain distribution in all the grains of the material. Reuss treats the case where it was assumed that all grains have a constant stress. Hill shows that the Voigt and Reuss limits are, respectively, upper and lower bounds for the average elastic constants and suggests the use of the mean of these bounds as an average elastic constants, which, indeed yields values close to the measured elastic moduli. The methods of Hashin and Shtrikman which are based on a variational principle, generally yield better upper and lower bounds for the elastic moduli than the Voigt and Reuss limits. These calculations are complicated however, and are beyond the scope of this work. More recent analyses with various, more sophisticated, models (Eshelby, Kröner) have also been proposed. These, in general, yield values close to the mean of the Voigt and Reuss limits.

Since in polycrystalline materials, diffraction methods obtain information from a large number of grains, the strains measured by X-rays are average values. In order to determine the average stress from these strain values, average elastic constants are required. However, since diffraction can occur only when the normal of theses grains bisect the incident and diffracted beams when monochromatic radiation is used, the averaging is not over all of the grains in the material volume, but over the particular set of diffracting grains, all of which have a specific form of lattice directions [hkl] in a particular orientation. Tjus, in addition to the assumptions required as to the stress and/or strain distribution, an added constraint is required for the theoretical calculation of the averages from the single crystal elastic constants. The pioneering work in this field has been done by Glocker and Möller and Martin in the Voigt and Reuss models. The extension of the self-consistent method was given by Bollenrath et al.

There are presented possibilities to calculate X-ray elastic constants for various polycrystalline models of solid state with use of computer software. Calculation of shear modulus for copper is presented as an example. X-ray elastic constants for polycrystalline materials can be also measured by X-ray methods. There are described measurement method and original devices for bending or stretching of flat probes in counter goniometer. The special attention is paid to computer-aided calculations. Measured values of elastic constants for some polycrystalline materials are given.