

文章编号: 1004- 0609(2000) 02- 0221- 04

六方结构金属板材弹性的计算方法^①

王超群, 商顺利, 王 宁

(北京有色金属研究总院, 北京 100088)

摘 要: 具有六方结构的金属板材呈现较强的物理和力学性能各向异性, 尤其是钛及其合金呈现的弹性各向异性, 其轧向与横向的弹性模量差异较大。根据 Bunge 等人的三维取向分布函数(ODF), 由单晶弹性系数和少量的织构系数如直至四阶的 C 系数, 简便地计算了低对称六方结构的板材的弹性。钛及其合金板材弹性的理论计算结果与实测数值相吻合, 钛合金板材的弹性各向异性是由织构产生的, 具有 $\{12\bar{1}5\} \langle 10\bar{1}0 \rangle$ 织构的钛板材的横向弹性模量为 116 GPa, 大于轧向的弹性模量(108 GPa)。

关键词: 六方金属板材; 弹性; 织构; 极图; ODF

中图分类号: TG386.3

文献标识码: A

具有低对称六方结构的金属晶体, 其物理和力学性能呈强的各向异性, 如弹性模量绕 C 轴呈对称分布, C 轴方向的弹性模量(143.3 GPa) 远大于底面各方向的弹性模量(104.4 GPa)。因此只要建立弹性模量 E 的方向分布与 C 轴织构的方向分布之间的关系, 通过板材的织构测定, 就可以计算合金板材的弹性模量, 并可通过合金化、加工与热处理工艺的调节, 有目的地控制织构与弹性各向异性, 以满足实际使用的要求。人们一般采用反极图或极图法, 由单晶弹性数据, 结合极密度加权平均, 计算多晶金属板材的弹性^[1], 然而反极图与极图法均为二维的, 且在织构测量时需要叠片制样, 既费时又不精确。为此, Bunge^[2], Morris^[3] 和 ZUO^[4] 等人发展了一种以三维取向分布函数(ODF) 为基础的新方法, 根据单晶弹性数据和少量的织构系数(至四阶的 C 系数), 便可简捷地计算六方织构板材的弹性向各异性。其中根据 Voigt-Reuss-Hill 等的平均法, 结合织构加权函数, 对含磷深冲钢板以及六方 Zn 板的弹性计算已取得很好的结果, 但对钛合金板材尚未见报道。为此本文将主要采用 ZUO^[4] 的方法计算织构钛合金板材的弹性模量, 并讨论了几种方法的一致性。

1 金属板材弹性各向异性的计算方法

1.1 多晶材料的弹性性质

上面已扼要介绍了在一定的假设条件下, 通过

相应的平均方法, 能够从单晶的数据计算多晶材料的弹性性质。Voigt 平均法系假设多晶体内的所有晶粒的应变增量相等, 而 Reuss 平均法则假设在整个试样中应力均匀分布。Hill^[5, 6] 认为这两种模型均不真实, 因为在恒应变模型中, 相邻晶粒之间的应力难以平衡, 而在恒应力模型中, 晶粒的畸变在晶界上不能连续。Hill 指出根据 Voigt 研究的弹性模量要大于根据 Reuss 所得的结果, 正确的数值应处于两者之间。Bunge^[7] 也指出在单轴拉伸下, Voigt 近似对于铅笔型晶粒组成的多晶体结构是正确的, 而 Reuss 近似则对于片状晶组成的多晶体是合理的。因此真实的计算模型应是 Hill 近似, 即由晶粒形状因子 m 作为加权值, 对于等轴晶的多晶体 $m = 0.5$ 。Bunge 将 Voigt-Reuss-Hill 近似法推广应用于具有立方晶系系数的织构多晶材料。Morris^[3] 则发展了一种利用织构加权函数的平均四阶张量法, 该法适用于正交晶系和更高的晶系(四方、六方和立方系) 多晶板材的弹性计算。近年来 Bunge^[2], ZUO^[4] 和 LI^[8] 等人也就六方结构金属的弹性进行了计算, 其中 ZUO, Morris 等人对多晶弹性的 Voigt-Reuss-Hill 近似法给出了普遍解^[4, 9, 10]。本文将主要介绍这种方法并将其用于钛及其合金板材的弹性测算。

1.2 六方结构金属板材的弹性计算方法原理^[4]

作为一级近似, 多晶材料弹性的平均值

$$\bar{E}_{ijkl} = \oint E_{ijkl} \cdot f(g) dg = \bar{T}_{ijklpq} \cdot E_{opqr} \quad (1)$$

式中 $\bar{T}_{ijklpq}$ 为织构因子, E_{opqr} 为四阶弹性张量分

① 收稿日期: 1999- 01- 19; 修订日期: 1999- 04- 12

作者简介: 王超群(1939-), 男, 教授级高工

量, $f(g)$ 为晶体取向分布函数, 其中 E_{ijkl} 是劲度量或顺度张量。

对于六方晶系, 考虑到晶体对称性以及应力、应变张量的对称性, E_{opqr} 只有 5 个独立分量即 E_{1111} , E_{1122} , E_{1133} , E_{2323} 和 E_{3333} , 因此

$$\begin{aligned} \overline{E}_{ijkl} = & \overline{T}_{ijkl1111} \cdot E_{1111} + \overline{T}_{ijkl1122} \cdot E_{1122} + \\ & \overline{T}_{ijkl1133} \cdot E_{1133} + \overline{T}_{ijkl3333} \cdot E_{3333} + \\ & \overline{T}_{ijkl2323} \cdot E_{2323} \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\overline{T}_{ijklopqr}$ 是对四阶弹性张量 E_{opqr} 为独立的 $T_{ijklopqr}$ 的线性组合, 只有 15 个 $\overline{T}_{ijklopqr}$ 独立, 它们的系数 $e_{ijklopqr}^{n'} = a_{L'n'}^{ijklopqr} + ib_{L'n'}^{ijklopqr}$ 列于表 1 中。为方便起见用 T_{uvst} 表示 $\overline{T}_{ijklopqr}$, 线性独立 T_{uvst} 的关系见文献[4]。

对于板材试样, 当拉伸坐标系 ($O-xyz$) 相对于试样坐标系 (通常取轧向- 横向- 板面法向) 的取向为 $\{\alpha, 0, 0\}$, 则

$$\begin{aligned} \overline{T}_{uvst}\{\alpha, 0, 0\} = & \sum_{l=0(2)}^4 \sum_{n=-L}^{+L} [4\pi(2L+1)J^{-1/2} \cdot \\ & C_L^{1n} e_L^{*n}(uvst) \cdot \exp(in\alpha)] \end{aligned} \quad (3)$$

由式(3)可见, 织构因子的计算和平均弹性张量的计算只需要测算至四阶的织构系数 C_L^{1n} , 而 e_L^{*n} 是纯数学量, $a_{L'n'}$, $b_{L'n'}$ 可查表 1。

实际计算如下:

例如, 根据 Reuss 平均法, $\bar{S}_{1111}^R$ 的计算如式

$$(4) \quad \bar{S}_{1111}^R = \frac{\overline{T}_{1111} S_{1111} + \overline{T}_{1112} S_{1122} + \overline{T}_{1113} S_{1133} + \overline{T}_{3333} S_{3333} + \overline{T}_{1144} S_{2323}}{\overline{T}_{1111} S_{1111} + \overline{T}_{1112} S_{1122} + \overline{T}_{1113} S_{1133} + \overline{T}_{3333} S_{3333} + \overline{T}_{1144} S_{2323}} \quad (4)$$

根据与 T_{uvst} 线性相关的计算关系^[4], 有

$$\left. \begin{aligned} T_{1112} &= 0, \quad T_{1113} = 2T_{1211} + 2T_{1311}, \\ T_{1133} &= 1 - T_{1111} - 2T_{1211} - 2T_{1311}, \\ T_{1144} &= 4T_{1211} + 4T_{1311} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

因此式(4)变为

$$\bar{S}_{1111}^R = \frac{\overline{T}_{1111} S_{1111} + \overline{T}_{1113} S_{1133} + \overline{T}_{1133} S_{3333} + \overline{T}_{1144} S_{2323}}{\overline{T}_{1111} S_{1111} + \overline{T}_{1113} S_{1133} + \overline{T}_{1133} S_{3333} + \overline{T}_{1144} S_{2323}} \quad (6)$$

其中只有织构因子 $\overline{T}_{1111}$, $\overline{T}_{1211}$ 及 $\overline{T}_{1311}$ 待算。它们的计算式可写成

$$\begin{aligned} \overline{T}_{uvst}\{\alpha, 0, 0\} = & a_{00} + \frac{1}{\sqrt{5}\pi} (a_{20} C_2^{10} + \\ & a_{22} C_2^{12} \cos 2\alpha) + \\ & \frac{1}{6\sqrt{\pi}} (a_{40} C_4^{10} + \\ & a_{42} C_4^{12} \cos 2\alpha + a_{44} C_4^{14} \cos 4\alpha) \end{aligned} \quad (7)$$

式中 $a_{00} = (2\sqrt{\pi})^{-1} \cdot a_{00} = 8/15$ (对于 $\overline{T}_{1111}$), 而对于其它的织构因子, T_{1211} 及 T_{1311} 的 a_{00} , a_{20} , a_{22} , a_{40} , a_{42} 和 a_{44} 可查表 1。

表 1 六方晶体对称的级数展开系数^[4]

Table 1 Series expansion coefficients $e_{L'n'}^{n'}(uvst) = a_{L'n'}^{n'}(uvst) + ib_{L'n'}^{n'}(uvst)$ for hexagonal crystal symmetry

$L'n'$ ($uvst$)	$a_{L'n'}^{n'}(uvst)$										$b_{L'n'}^{n'}(uvst)$					
	00	20	21	22	40	41	42	43	44		21	22	41	42	43	44
	$B_0 \times$	$B_1 \times$	$B_2 \times$	$B_2 \times$	$B_0 \times$	$B_1 \times$	$B_3 \times$	$B_4 \times$	$B_5 \times$		$B_2 \times$	$B_2 \times$	$B_1 \times$	$B_3 \times$	$B_4 \times$	$B_5 \times$
1111	56	16		- 8	3		- 2		1							
1211	7	- 4			1				- 1							
1212	35	28														
1311	7	2		1	- 4		2									
1411											1		- 1		1	
1511			4			3		- 1								
1611												4		1		- 1
2211	56	16		8	3		2		1							
2311	7	2		- 1	- 4		- 2									
2411											- 4		- 3		- 1	
2511			- 1			1		1								
2611												4		1		1
3411											- 4		4			
3511			4			- 4										
3611												- 1		- 2		

$$B_0 = 2(\pi)^{1/2}/105; B_1 = (5\pi)^{1/2}/105; B_2 = (30\pi)^{1/2}/105; B_3 = (10\pi)^{1/2}/105; B_4 = (35\pi)^{1/2}/105; B_5 = (70\pi)^{1/2}/105$$

对于板材平面里的弹性模量 $\overline{E}(\alpha)$ 的变化可按式计算:

$$\overline{E}(\alpha) = \frac{1}{\overline{S}_{(111)}^R(\alpha, 0, 0)} \quad (8)$$

对于 Voigt 平均法也可以进行类似的计算, 但 E_{opqr} 用劲度张量 C_{opqr} 替换。而 Hill 平均法可用下式计算:

$$\begin{aligned} \overline{C}_{ijkl}^H &= [\overline{C}_{ijkl}^V + (\overline{S}_{ijkl}^R)^{-1}] / 2 \\ \overline{S}_{ijkl}^R &= [(\overline{C}_{ijkl}^V)^{-1} + \overline{S}_{ijkl}^R] / 2 \end{aligned} \quad (9)$$

式中 $(\overline{S}_{ijkl}^R)^{-1}$, $(\overline{C}_{ijkl}^V)^{-1}$ 分别是 $\overline{S}_{ijkl}^R$, $\overline{C}_{ijkl}^V$ 的逆阵。

2 实验方法

选用纯钛和高弹钛合金板材。在 X' pert MRD 衍射仪上, 用 Cu 靶, 40 kV, 40 mA, 石墨单色器和正比计数管, 测量了 (010), (002), (110), (011) 和 (012) 极图, 步进 $\Delta\alpha = \Delta\beta = 5^\circ$, α 扫描范围 $0^\circ \sim 85^\circ$, β 范围为 $0^\circ \sim 360^\circ$, ODF 计算的展开度 $L = 22$ 。

计算弹性模量时选用 C_2^{10} , C_2^{12} , C_4^{10} , C_4^{12} 和 C_4^{14} 五个 C 系数, 而钛单晶的弹性常数用 $C_{1111} = 162.4 \text{ GPa}$, $C_{1122} = 92.0 \text{ GPa}$, $C_{1133} = 69 \text{ GPa}$, $C_{3333} = 180.7 \text{ GPa}$ 和 $C_{2323} = 46.7 \text{ GPa}$; 并由式(4), (7), (8)和(9)计算 Voigt-Reuss-Hill 平均法的 $E(\alpha)$ 值。

3 结果与讨论

图 1 是热轧钛计算的 ODF。将由 ODF 获得的 C_4^{1n} 和钛单晶的弹性常数代入式(4), (7), (8)和(9), 计算了 Voigt, Reuss 和 Hill 平均法的 $E(\alpha)$ 值, 其结果如图 2 所示。由图 2 可见, 横向的弹性模量 ($\approx 116 \text{ GPa}$) 大于轧向的弹性模量 (≈ 108

GPa), 这与图 1/图 2 的极图数据和 ODF 分析结果相吻合。由极图分析可知该板材的主要织构为 $(0001) \pm 30^\circ ND - TD \langle 10\bar{1}0 \rangle$, 而由 ODF 分析可知主要的织构类型为 $\{12\bar{1}5\} \langle 10\bar{1}0 \rangle$, 因此轧向的杨氏模量偏低是可以理解的。轧向与横向弹性模量实际测量结果分别为 107.7 GPa 和 116 GPa , 实验测试结果与理论预测相吻合。

无论是 ZUO^[4], 还是 Bunge^[2] 的方法, 其计算方法是一致的。例如 Bunge^[2] 导出的 Reuss 平均法的表达式为

$$\overline{E}^R(\alpha) = [\overline{S}^R(\alpha)]^{-1} \quad (10)$$

$$\overline{S}^R(\alpha) = S_0/15 + S_2 \cdot F_2(\alpha) + S_4 \cdot F_4(\alpha) \quad (11)$$

$$S_0 = -8S_{11} + 3S_{33} + 4S_{13} + 2S_{44} \quad (12)$$

$$S_2 = -8S_{11} + 6S_{33} + 2S_{13} + S_{44} \quad (13)$$

$$S_4 = S_{11} + S_{33} - S_{13} - S_{44} \quad (14)$$

将式(12), (13)和(14)代入式(11)可得(用 4 位数字标记)

$$\begin{aligned} \overline{S}^R(\alpha) &= \frac{8}{15}S_{1111} + \frac{3}{15}S_{3333} + \frac{4}{15}S_{1133} + \\ &\frac{8}{15}S_{1313} + (-8S_{1111} + 6S_{3333} + \\ &2S_{1133} + 4S_{1313}) \cdot F_2(\alpha) + (S_{1111} + \\ &S_{3333} - S_{1133} - 4S_{1313})F_4(\alpha) \end{aligned} \quad (15)$$

而由式(4)ZUO^[4]的结果, 即可以得到

$$\begin{aligned} \overline{S}^R(\alpha) &= \frac{8}{15}S_{1111} + \frac{3}{15}S_{3333} + \frac{4}{15}S_{1133} + \\ &\frac{8}{15}S_{1313} + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

因此两者是一致的, 而由 Bunge 的 F_2 及 F_4 计算式:

$$F_2(\alpha) = \frac{4}{525}\sqrt{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}C_2^{11}\overline{P}_2^0 + C_2^{12}\overline{P}_2^2\cos 2\alpha\right) \quad (17)$$

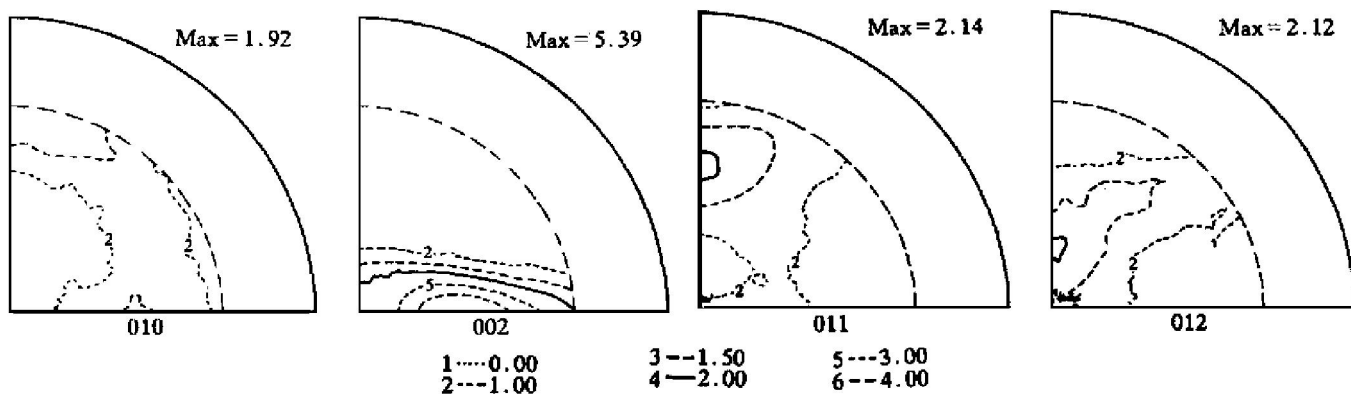


图 1 热轧工业钛板的 ODFs(φ_2 截面, $L = 22$)

Fig. 1 ODFs of hot-rolled titanium plate(φ_2 section, $L = 22$)

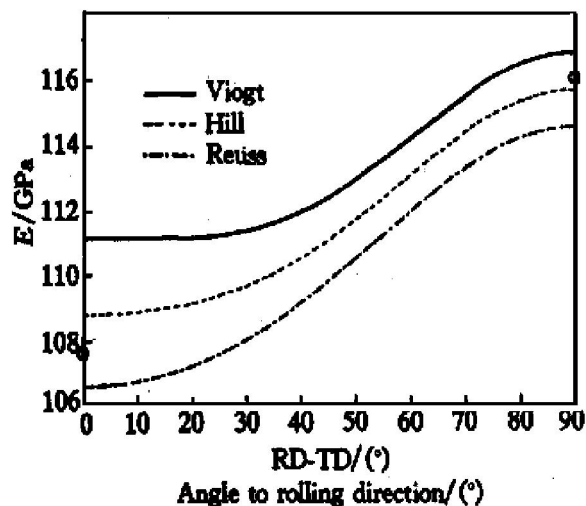


图 2 热轧工业钛板弹性模量的变化
(按照 Voigt, Reuss 和 Hill 平均法计算)

Fig. 2 Elastic modulus of
hot rolled titanium plate (calculated
according to V-R-S average)

○—Experimental values

$$F_4(\alpha) = \frac{16}{945} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} C_2^{11} \bar{P}_4^0 + C_2^{12} \bar{P}_4^2 \cos 2\alpha + C_2^{14} \bar{P}_4^4 \cos 4\alpha \right] \quad (18)$$

式中 C_4^{1n} 为 C 系数, $\bar{P}_2^n$ 为连带勒让德多项式的傅氏系数, 可以进一步同 ZUO 的方法比较, 得出:

$$\bar{P}_2^0 = -1.25, \bar{P}_2^2 = 2.1651, \bar{P}_4^0 = 0.7955, \bar{P}_4^2 = -1.1859 \text{ 和 } \bar{P}_4^4 = 1.5687.$$

此外还可以进一步比较, 证明 ZUO^[4], LI^[8] 和 Bunge 方法之间的一致性, 这里不再一一赘述。

REFERENCES

- [1] CHEN Hong-sun(陈洪荪). Elastic anisotropy of Metal Materials(金属的弹性各向异性) [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1996.
- [2] Bunge H J and Park N J. Program System for Physical Properties of Textured Materials [M]. Cuvillier Verlag, Göttingen, 1993.
- [3] Morris P R. Averaging fourth-ranks tensors with weight function [J]. J Appl Phys, 1969, 40(2): 447.
- [4] ZUO Liang(左良), Hunbert M and Esling C. Elastic properties of polycrystals in the Voigt-Reuss-Hill approximation [J]. J Appl Cryst, 1992, 25: 751.
- [5] Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate [J]. Proc Phys Soc, 1952, A65: 349.
- [6] Hu Hsun(胡鰲). 高法向塑性的各向异性冷轧和退火磷钢板材的弹性性质 [J]. Acta Metall Sinica, 1981, 17(6): 595.
- [7] Bunge H J. Partial texture analysis [J]. Textures and Microstructures, 1990, 12: 47.
- [8] LI Y and Thompson R B. Relations between elastic constants C_{ij} and texture parameters for hexagonal materials [J]. J Appl Phys, 1990, 67(5): 2663.
- [9] Morris P R. Elastic constants of polycrystals [J]. Int J Eng Sci, 1970, 8: 49.
- [10] ZUO Liang(左良), XU Jia-zen(徐家桢) and LIANG Zhi-de(梁志德). Averaging fourth-ranks elastic tensors for textured polycrystalline aggregates without physical symmetry [J]. J Appl Phys, 1989, 66(6): 2338.

Calculation of elastic properties of metals and alloys with a hexagonal structure

WANG Chao-qun, SHANG Shun-li, Wang Ning

General Research Institute for Nonferrous Metals, Beijing 100088, P. R. China

Abstract: The presence of texture was known to cause anisotropy of elastic properties of polycrystalline materials with a hexagonal structure. By using texture coefficients and elastic constant of single crystal, the elastic property of polycrystalline plate can be calculated. The present calculation method has been applied to predicting elastic modulus for a rolled titanium sheet and the results are consistent well with experimental ones.

Key words: hexagonal metallic plate; elasticity; texture; pole figure; ODFs

(编辑 何学锋)