Bestimmung der elastischen Eigenschaften quasiisotroper Vielkristalle durch Mittelung

Bestimmung der elastischen Eigenschaften quasiisotroper Vielkristalle durch Mittelung

von **A. Huber** und **E. Schmid.**

(13. VII. 34.)

Zusammenfassung. Aus der Orientierungsabhängigkeit des Elastizitäts- und Torsionsmoduls kubischer und hexagonaler Kristalle werden durch Mittelwertsbildung über den gesamten Orientierungsbereich die Moduln des regellosen, quasiisotropen Vielkristalls berechnet.

Die Eigenschaften eines Vielkristalls stehen, sofern es sich nicht ausschliesslich um Wirkungen der Korngrenzen handelt, in engem Zusammenhang mit den Eigenschaften der ihn aufbauenden Einzelkörner. Für die elastischen Eigenschaften ist eine Mittelung zur Berechnung der Vielkristalleigenschaften aus denen des Einkristalls erstmals von Voigt[1]) angegeben worden zu einer Zeit, als experimentelles Material zur Prüfung seiner Formeln nur spärlich zur Verfügung stand. Neuerdings haben sich Bruggeman[2]) und Reuss[3]) wieder mit diesem Problem befasst.

Alle Mittelungen gehen von den Voraussetzungen aus, dass die Kristallkörner 1. klein sind gegenüber den Abmessungen der untersuchten Proben, jedoch gross gegenüber den Reichweiten der Gitterkräfte, und 2. dass sie den Raum lückenlos erfüllen. Dem Zusammenhalt der Körner während der elastischen Beanspruchung wird bei Voigt durch die Grenzbedingung stetigen Übergangs der Verrückungen und ihrer Ableitungen, der Deformationen, an den Korngrenzen Rechnung getragen. Die Mittelung für den quasiisotropen Vielkristall ist dadurch auf die Mittelwertsbildung der elastischen Parameter c_{ik} zurückgeführt. Integration der betreffenden Ausdrücke über den gesamten Orientierungsbereich liefert sodann die elastischen Parameter und daraus weiter die gewohnten Grössen Elastizitäts- und Torsionsmodul des Vielkristalls.

---

[1]) W. Voigt, Lehrb. d. Kristallphysik, Teubner, 1910.

[2]) D. A. G. Bruggeman, Utrechter Dissertation 1930 (J. B. Wolters, Groningen-Den Haag).

[3]) A. Reuss, Zeitschr. angew. Math. u. Mech. **9**, 49, 1929.

Bruggeman zeigte zunächst durch Prüfung an einer Reihe von Metallen, dass die Voigt'sche Theorie nur bei schwach anisotropem Kristallmaterial ziemlich richtige Werte liefert, dass sie dagegen mit zunehmender Anisotropie immer schlechter stimmt. Er führt dies auf die verwendeten Grenzbedingungen für die Korngrenzen zurück. Da nach dem Reaktionsprinzip zweifellos die drei senkrecht zur Grenzfläche stehenden Spannungskomponenten in Nachbarkristallen einander gleich sein müssen, können im allgemeinen nicht alle sechs elastischen Deformationen, sondern nur deren drei je einander gleich sein. Der Durchführung der Mittelung unter den neuen Grenzbedingungen erwachsen sehr erhebliche Schwierigkeiten. Die Annahme eines besonderen lamellenartigen Aufbaus des Vielkristalls erweist sich als notwendig. Als Ergebnis der reichlich verwickelten Rechnungen folgen deutliche Abweichungen von der Voigt'schen Mittelung, die sich jedoch als erste Annäherung für geringe Anisotropie ergibt.

Reuss führt die Berechnung der elastischen Konstanten des quasiisotropen Körpers auf zwei verschiedene Arten durch. Entweder werden wie bei Voigt die Deformationen für die einzelnen Körner gleichgesetzt und die Mittelwerte der Spannungen berechnet, oder es wird von gleichen Spannungen ausgegangen und die Dehnungen werden gemittelt. Der erste Fall deckt sich mit der Voigtschen Theorie. Ähnlich einfache Formeln für die Moduln des quasiisotropen Aggregats liefert auch Fall zwei.

Mit Rücksicht darauf, dass die Mittelungen nach Voigt und Reuss nur in sehr roher Übereinstimmung mit der Erfahrung sind[1]) und dass die Mittelung nach Bruggeman ein sehr spezielles Bauprinzip des vielkristallinen Aggregats voraussetzen muss, haben wir eine neuerliche Behandlung des Problems versucht. Spezielle Grenzbedingungen an den Korngrenzen haben wir dabei völlig ausser acht gelassen, ausgehend von der Erwägung, dass der Zusammenhalt der Körner gegebenenfalls durch Verzerrungen in den äussersten Randschichten gewahrt bleibt, wie man dies ja bei den viel stärkeren, zu plastischen Verformungen führenden Beanspruchungen unmittelbar beobachtet. Die Mittelung wurde in der Weise ausgeführt, dass die von der Theorie der Kristallelastizität gelieferten Ausdrücke für den Elastizitäts- und Torsionsmodul einer in beliebiger Richtung zu den kristallographischen Achsen entnommenen, kreiszylindrischen Probe über den gesamten Orientierungsbereich integriert wurden.

[1]) Vgl. hierzu die folgende Mitteilung.

I. Quasiisotropes Aggregat hexagonaler Kristalle.

Für die Orientierungsabhängigkeit des Elastizitätsmoduls (E) und Torsionsmoduls (G) gelten die beiden Ausdrücke[1])

$$\frac{1}{E} = s_{11}(1-x^2)^2 + s_{33}x^4 + (2 s_{13} + s_{44}) x^2 (1-x^2)$$
$$= A_E x^4 + B_E x^2 + C_E = \frac{1}{F(x)} \qquad \text{(I)}$$

$$\frac{1}{G} = s_{44} + \left[(s_{11} - s_{12}) - \tfrac{1}{2} s_{44}\right](1-x^2) + 2 (s_{11} + s_{33} - 2 s_{13} - s_{44}) x^2 (1-x^2)$$
$$= A_G x^4 + B_G x^2 + C_G = \frac{1}{F(x)} \qquad \text{(II)}$$

worin s_{ik} die elastischen Koeffizienten, x den Richtungscos des Winkels ζ zwischen der betrachteten Richtung und der hexagonalen Achse bedeuten. Die Koeffizienten $A_E, \ldots C_G$ ergeben sich zu:

$$A_E = s_{11} + s_{33} - 2 s_{13} - s_{44};\; B_E = -2 s_{11} + 2 s_{13} + s_{44};\; C_E = s_{11};$$
$$A_G = -2 s_{11} - 2 s_{33} + 4 s_{13} + 2 s_{44};\; B_G = s_{11} + s_{12} - 4 s_{13} + 2 s_{33} - \tfrac{3}{2} s_{44};\; C_G = s_{11} - s_{12} + \tfrac{1}{2} s_{44}.$$

Die gesuchten Mittelwerte für den quasiisotropen Vielkristall sind durch einen Ausdruck von der Form:

$$J = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2}\int_0^{\pi/2} F(\cos\zeta) \sin\zeta \, d\zeta \, d\varphi = \int_0^1 F(x)\, dx \qquad \text{gegeben.}$$

Die Auswertung dieser bestimmten Integrale erfolgt verschieden, je nach dem Vorzeichen des Koeffizienten von x^4. Beide Fälle treten sowohl für den E- als auch für den G-Modul ein.

1. A positiv.

Es zeigt sich, dass bei den in Frage kommenden Werten der s_{ik} die Nullstellen des im Nenner des Integrals stehenden Polynoms $Ax^4 + Bx^2 + C$ sämtlich komplex ausfallen, da $B^2 - 4AC$ negativ wird. Da ferner A und C stets gleiches Zeichen haben, so werden

$$\varrho = \sqrt{\frac{C}{A}} \quad \text{und} \quad \operatorname{tg}\alpha = -\frac{1}{B} \cdot \sqrt{4AC - B^2} \qquad (1)$$

reell, und man findet, wenn noch

$$\sigma = \sqrt{\varrho} \cdot \cos\frac{\alpha}{2} \qquad (2)$$

[1]) W. Voigt, l. c.

gesetzt wird, die folgende reelle Zerlegung:

$$\frac{1}{F(x)} = Ax^4 + Bx^2 + C = A(x^2 - 2\sigma x + \varrho)(x^2 + 2\sigma x + \varrho).$$

Nach Durchführung der Partialbruchzerlegung erhält man damit folgende Darstellung des gesuchten Integrales (J):

$$J = \int_0^1 \frac{dx}{Ax^4 + Bx^2 + C}$$

$$= \frac{1}{8A\varrho\sigma}\int_0^1 \left\{\frac{2x + 2\sigma + 2\sigma}{x^2 + 2\sigma x + \varrho} - \frac{2x - 2\sigma - 2\sigma}{x^2 - 2\sigma x + \varrho}\right\} dx$$

oder nach Auswertung der einzelnen einfachen Integrale wegen (2)

$$AJ = \frac{1}{8\varrho^{3/2}\cos\frac{\alpha}{2}} \cdot \lg\left(1 + \frac{4\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2}}{1 - 2\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2} + \varrho}\right)$$
$$+ \frac{1}{4\varrho^{3/2}\sin\frac{\alpha}{2}}\left\{\operatorname{arctg}\frac{1+\sigma}{\sqrt{\varrho - \sigma^2}} + \operatorname{arctg}\frac{1-\sigma}{\sqrt{\varrho-\sigma^2}}\right\}.$$

Indem man den in $\{\}$ stehenden Ausdruck nach der bekannten Formel $\operatorname{arctg} x + \operatorname{arctg} y = \operatorname{arctg}\frac{x+y}{1-xy}$ noch weiter vereinfacht, erhält man schliesslich für das gesuchte Integral die folgende Darstellung:

$$AJ = \frac{1}{8\varrho^{3/2}\cos\frac{\alpha}{2}} \lg\left(1 + \frac{4\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2}}{1 - 2\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2} + \varrho}\right)$$
$$+ \frac{1}{4\varrho^{3/2}\sin\frac{\alpha}{2}}\operatorname{arctg}\frac{2\sqrt{\varrho}\sin\frac{\alpha}{2}}{\varrho - 1}, \tag{3}$$

wobei ϱ und α nach (1) zu berechnen sind.

2. *A negativ.*

Hier setzt man zweckmässig $-A = A'$, und es handelt sich nun um die Auswertung des folgenden Integrals,

$$J = \int_0^1 \frac{dx}{-A'x^4 + Bx^2 + C}.$$

Es zeigt sich, dass von den Nullstellen des Nenners nur ein Paar komplex wird, so dass man die reelle Zerlegung hat:

$$-A'x^4 + Bx^2 + C = -A'(x^2 - \alpha^2)(x^2 + \beta^2),$$

wobei:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sqrt{B^2 + 4A'C} + B}{2A'}} \quad \text{und} \quad \beta = \sqrt{\frac{\sqrt{B^2 + 4A'C} - B}{2A'}}. \tag{4}$$

Nach der nun einfachen Partialbruchzerlegung folgt

$$J = \frac{1}{2A'\alpha(\alpha^2 + \beta^2)} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{x + \alpha} - \frac{1}{x - \alpha} + \frac{2\alpha}{x^2 + \beta^2} \right\} dx$$

oder wegen (4)

$$J = \frac{1}{\sqrt{B^2 + 4A'C}} \left\{ \frac{1}{2\alpha} \lg \frac{\alpha + 1}{\alpha - 1} + \frac{1}{\beta} \operatorname{arctg} \frac{1}{\beta} \right\}. \tag{5}$$

II. Quasiisotropes Aggregat kubischer Kristalle.

Elastizitäts- und Torsionsmodul parallel einer Richtung, deren Winkel zu den Würfelachsen durch die Richtungscos γ_1, γ_2 und γ_3 gegeben sind, sind hier durch die Ausdrücke

$$\frac{1}{E} = s'_{33} = s_{11} - 2\left[(s_{11} - s_{12}) - \tfrac{1}{2} s_{44}\right](\gamma_1^2\gamma_2^2 + \gamma_2^2\gamma_3^2 + \gamma_3^2\gamma_1^2) \tag{III}$$

$$\frac{1}{G} = \tfrac{1}{2}(s'_{44} + s'_{55}) = s_{44} + 4\left[(s_{11} - s_{12}) - \tfrac{1}{2} s_{44}\right] (\gamma_1^2\gamma_2^2 + \gamma_2^2\gamma_3^2 + \gamma_3^2\gamma_1^2) \tag{IV}$$

dargestellt.

Setzt man hier, je nachdem es sich um den E- oder um den G-Modul handelt,

$$A = \begin{cases} s_{11} \\ s_{44} \end{cases} \quad \text{und} \quad B = \begin{cases} -2(s_{11} - s_{12} - \tfrac{1}{2} s_{44}) \\ 4(s_{11} - s_{12} - \tfrac{1}{2} s_{44}), \end{cases}$$

so erfordert die analoge Mittelung zu I die Auswertung von Integralen der folgenden Form:

$$J = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^1 \frac{d\varphi\, d\varrho}{\left[A + B\varrho\,(1 - \varrho\,(1 - \cos^2\varphi \sin^2\varphi))\right] \sqrt{1 - \varrho}}, \tag{6}$$

oder wenn der Kürze wegen

$$\frac{B}{A} = a \quad \text{und} \quad \varrho\,(1 - \varrho\,(1 - \cos^2\varphi\,\sin^2\varphi)) = f\,(\varrho, \varphi) \tag{7}$$

gesetzt wird,

$$A\,\pi\,J = \int_0^{\pi/2}\int_0^1 \frac{d\,\varphi\,d\,\varrho}{\sqrt{1-\varrho}\cdot[1 + a\cdot f\,(\varrho, \varphi)]}. \tag{8}$$

Hier liesse sich zwar eine Integration in geschlossener Form durchführen, jedoch erfordert dann die zweite Integration eine recht komplizierte Reihenentwicklung, so dass es vorteilhafter sein dürfte, den Integranden gleich von vorneherein in eine Reihe zu entwickeln, deren Glieder Produkte von je zwei Funktionen von nur je einer der beiden Integrationsvariabeln ϱ bzw. φ sind. Zur Erzielung einer rascheren Konvergenz dieser Reihe formen wir unter Einführung eines vorläufig unbestimmt bleibenden Parameters λ den zweiten Faktor des Integranden in (8) folgendermassen um:

$$\frac{1}{1 + a\cdot f\,(\varrho, \varphi)} = \frac{1}{1 + \frac{a}{\lambda} - a\left(\frac{1}{\lambda} - f\right)} = \frac{\lambda}{a + \lambda}\,\frac{1}{1 - \frac{a}{a+\lambda}\,(1 - \lambda f)}.$$

Unter der Annahme, dass im ganzen Integrationsgebiete

$$\left|\frac{a}{a + \lambda}\,(1 - \lambda f)\right| < 1$$

bleibt, kann man setzen:

$$\frac{1}{1 + a\cdot f} = \frac{\lambda}{a + \lambda}\cdot\left\{1 + \frac{a}{a + \lambda}\,(1 - \lambda f) + \left(\frac{a}{a + \lambda}\right)^2\cdot(1 - \lambda f)^2 + \cdots\right\}$$

und hat für (8):

$$A\,\pi\,J = \frac{\lambda}{a + \lambda}\int_0^{\pi/2}\int_0^1 \left\{\sum_{i=0}^{\infty}\left(\frac{a}{a + \lambda}\right)^i \frac{(1 - \lambda f)^i}{\sqrt{1 - \varrho}}\right\} d\,\varphi\,d\,\varrho$$

$$= \frac{\lambda}{a + \lambda}\sum_{i=0}^{\infty}\left(\frac{a}{a + \lambda}\right)^i K_i \tag{9}$$

wobei:

$$K_i = \int_0^{\pi/2}\int_0^1 \frac{(1 - \lambda f)^i}{\sqrt{1 - \varrho}}\,d\,\varphi\,d\,\varrho \quad (i = 0, 1, 2, \ldots) \tag{10}$$

Es zeigt sich nun, dass für die in Frage kommenden Werte der s_{ik} stets $a > -3$ wird. Wenn also die K_i geschränkt bleiben, dann wird die Reihe (9) konvergent für alle $a > -3$, wenn $\lambda \geqq 6$ gewählt wird. Damit aber die noch von λ, aber nicht mehr von a abhängigen K_i geschränkt bleiben für wachsendes i, muss im Integrationsgebiet: $0 \leqq \varphi \leqq \pi/2$ und $0 \leq \varrho \leqq 1$ stets $|1-\lambda f| \leqq 1$ sein. Nun ist aus (7) sofort zu sehen, dass in jenem Gebiet $f(\varrho, \varphi)$ positiv und kleiner als $1/3$ bleibt; es muss also, damit stets $|1-\lambda f| \leqq 1$ wird: $0 \leqq \lambda \leqq 6$, somit $\lambda = 6$ gewählt werden. Wir können daher für (10) setzen:

$$K_i = \sum_{j=0}^{i} (-6)^j \binom{i}{j} \cdot L_j, \tag{10'}$$

wobei nach (7):

$$L_j = \int_0^{\pi/2}\int_0^1 \frac{\varrho^j [1-\varrho(1-\cos^2\varphi \sin^2\varphi)]^j}{\sqrt{1-\varrho}}\, d\varphi\, d\varrho$$

$$= \sum_{k=0}^{j} (-1)^k \binom{j}{k} \cdot \int_0^1 \frac{\varrho^{j+k}\, d\varrho}{\sqrt{1-\varrho}} \int_0^{\pi/2} (1-\cos^2\varphi \sin^2\varphi)\, d\varphi. \tag{11}$$

Hier kann man nun leicht jedes der beiden Integrale auswerten, und zwar findet man zunächst

$$M_{j+k} = \int_0^1 \frac{\varrho^{j+k}}{\sqrt{1-\varrho}}\, d\varrho = 2(j+k) \int_0^1 \varrho^{j+k-1} \cdot \sqrt{1-\varrho}\, d\varrho$$

$$= 2(j+k) \cdot (M_{j+k-1} - M_{j+k})$$

also:

$$M_{j+k} = \frac{2(j+k)}{2(j+k)+1} \cdot M_{j+k-1}$$

und da

$$M_0 = \int_0^1 \frac{d\varrho}{\sqrt{1-\varrho}} = 2,$$

so folgt schliesslich

$$M_{j+k} = 2 \cdot \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots 2(j+k)}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2j+2k+1)}. \tag{12}$$

Ferner wird

$$N_k = \int_0^{\pi/2} (1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi)^k \, d\varphi = \int_0^{\pi/2} \left(1 - \frac{1 - \cos 4\varphi}{8}\right)^k d\varphi$$

$$= \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} \left(\frac{7 + \cos \psi}{8}\right)^k d\psi = \frac{1}{4} \sum_{l=0}^{[k/2]} \binom{k}{2l} \cdot \frac{7^{k-2l}}{8^k} \cdot \int_0^{2\pi} \cos^{2l} \psi \, d\psi$$

$$= \frac{\pi}{2 \cdot 8^k} \sum_{l=0}^{[k/2]} 7^{k-2l} \binom{k}{2l} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots 2l},$$

da ja bekanntlich

$$\int_0^{2\pi} \cos^{2l} \psi \cdot d\psi = 2\pi \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots 2l}.$$

Der Ausdruck für N_k lässt sich noch vereinfachen, da

$$\binom{k}{2l} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)}{2 \cdot 4 \cdots 2l} = \frac{k(k-1)\cdots(k-2l+1)}{2^{2l} \cdot (l!)^2},$$

so dass:

$$N_k = \frac{\pi}{2 \cdot 8^k} \sum_{l=0}^{[k/2]} 7^{k-2l} \frac{k(k-1)\cdots(k-2l+1)}{4^l \cdot (l!)^2}. \tag{13}$$

Hat man also eine genügend grosse Anzahl der M_{j+k} und der N_k berechnet, so hat man nach (11):

$$\frac{1}{\pi} L_j = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{j} (-1)^k \binom{j}{k} M_{j+k} N_k,$$

womit man nach (1) die $\frac{1}{\pi} K_i$ findet. Den gesuchten Mittelwert (J) findet man schliesslich nach (9), wobei $\lambda = 6$ zu setzen ist.

Da in unserm Fall stets $\left|\frac{a}{a+6}\right| < \frac{1}{2}$, so genügen die folgenden Werte der $\frac{1}{\pi} K_i$:

i	0	1	2	3	4	5	6
$\frac{1}{\pi} K_i$	+1,000	−0,200	0,314	−0,090	0,175	−0,05	0,09

Eine Prüfung der hier beschriebenen Mittelbildung an der Erfahrung wird im Vergleich mit den anderen Mittelungen im nachfolgenden Artikel durchgeführt.

Physikal. Institut der Universität Freiburg.