

6. Dyfrakcyjne wyznaczanie naprężeń wewnętrznych

W świecie współczesnej technologii wytrzymałość i niezawodność wielu części mechanicznych mają podstawowe znaczenie. Wspomnijmy tylko o częściach silników lotniczych, skrzydeł samolotów, rozmaitych częściach promów kosmicznych czy chociażby statków lub mostów. Jedną z najważniejszych charakterystyk materiału użytego do takich konstrukcji jest stan jego naprężeń wewnętrznych. Naprężenia te możemy określić najkrócej jako odkształcenia sprężyste, które pozostały w materiale po zakończeniu obróbki technologicznej materiału. Naprężenia wewnętrzne mogą pozostać w materiale po zwolnieniu sił zewnętrznych, przyłożonych wcześniej do materiału (np. w trakcie obróbki plastycznej); pozostają one w materiale, gdy, na przykład, powierzchnia uległa nieco innej deformacji plastycznej (a więc trwałej) niż wewnątrz próbki. Mogą też powstać w materiale dwufazowym (np. w kompozycie) wskutek różnych współczynników rozszerzalności termicznej obu faz materiału. Inną, często dziś badaną przyczyną powstania naprężeń wewnętrznych, jest obróbka powierzchni materiału wiązką laserową.

W zależności od szybkości zmian (w funkcji odległości w próbce) naprężeń wewnętrznych, wyróżniamy trzy ich składowe:

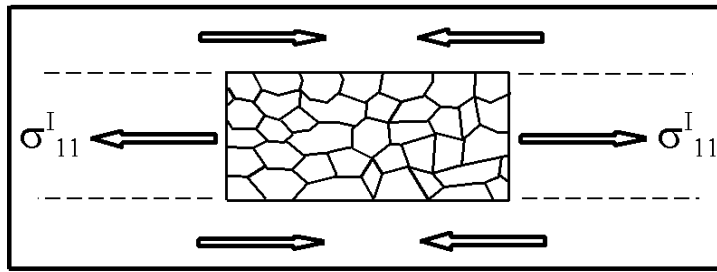
$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^I + \sigma_{ij}^{II} + \sigma_{ij}^{III} \quad (6.1)$$

Człony po prawej stronie noszą nazwy odpowiednio naprężeń I, II i III rzędu. Naprężenia I rzędu reprezentują człon stały w badanej, dużej części próbki, a często w całej próbce (ich wartość nie zależy od położenia). Naprężenia II rzędu to człon zmieniający się od ziarna do ziarna, natomiast naprężenia III rzędu to człon zmieniający się wewnątrz poszczególnych ziaren.

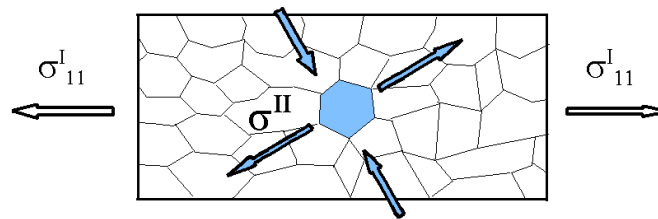
Naprężenia wewnętrzne I rzędu występują na przykład w próbkach po walcowaniu; utrzymują się w nich na ogół składowe normalne naprężenia w kierunku walcowania i w kierunku poprzecznym (kierunki te są zgodne z osiami symetrii próbki).

Naprężenia wewnętrzne II rzędu także występują, przykładowo, w walcowanych próbkach; są to zmienne (od ziarna do ziarna) naprężenia pochodzące od nieco różnych deformacji plastycznych poszczególnych ziaren. Ich średnia po objętości próbki wynosi zero.

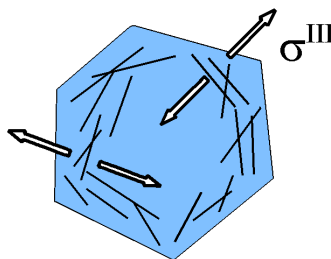
Naprężenia wewnętrzne III rzędu to bardzo szybkozmienny człon naprężeń wewnętrznych w obrębie pojedynczego ziarna; charakteryzuje on pola naprężeń od spięrzeń dyslokacji, granic podziaren czy od struktury mozaikowej. Średnia po objętości ziarna tych naprężeń wynosi zero.



I rzędu



II rzędu



III rzędu

Rys. 6.1. Definicja makro i mikro naprężeń:

Naprężenia I rzędu są średnią w pewnej makroskopowej objętości próbki (np. w objętości do której dociera promieniowanie użyte w dyfrakcji),

Naprężenia II rzędu charakteryzują średnią w objętości ziarna polikryształu (ich średnia po objętości próbki wynosi zero),

Naprężenia III rzędu opisują bardzo lokalną średnią na poziomie podziarna czy małego fragmentu ziarna (np. wskutek spiętrzeń dyslokacji); ich średnia po objętości ziarna wynosi zero.

Omówione powyżej typy naprężeń wewnętrznych przedstawiono schematycznie na Rys. 6.1.

Średnia z całkowitych naprężeń wewnętrznych po dużym obszarze próbki daje naprężenia I rzędu:

$$\overline{\tilde{\sigma}}_{ij} = \sigma_{ij}^I \quad (6.2)$$

Natomiast średnia po całej próbce z całkowitych naprężeń daje oczywiście zero:

$$\overline{\sigma}_{ij} = 0 \quad (6.2a)$$

Najczęściej stosowaną obecnie metodą pomiaru naprężeń wewnętrznych jest technika dyfrakcji (rentgenowskiej, neutronowej czy elektronowej). Trzeba tu nadmienić, że istnieje kilka innych metod wyznaczania naprężeń wewnętrznych, jak np.: mechaniczna, magnetyczna, ultradźwiękowa czy też oparta na rozpraszaniu Ramanna. Niemniej, w powszechnym przekonaniu, to właśnie metody dyfrakcyjne zapewniają najpełniejszy i najbardziej precyzyjny pomiar naprężeń wewnętrznych. Istnieje bardzo obszerna literatura poświęcona tematyce dyfrakcyjnego badania naprężeń wewnętrznych. Wymieńmy przykładowo dwie prace przeglądowe: Dolle (1979) oraz Noyan, Cohen (1987).

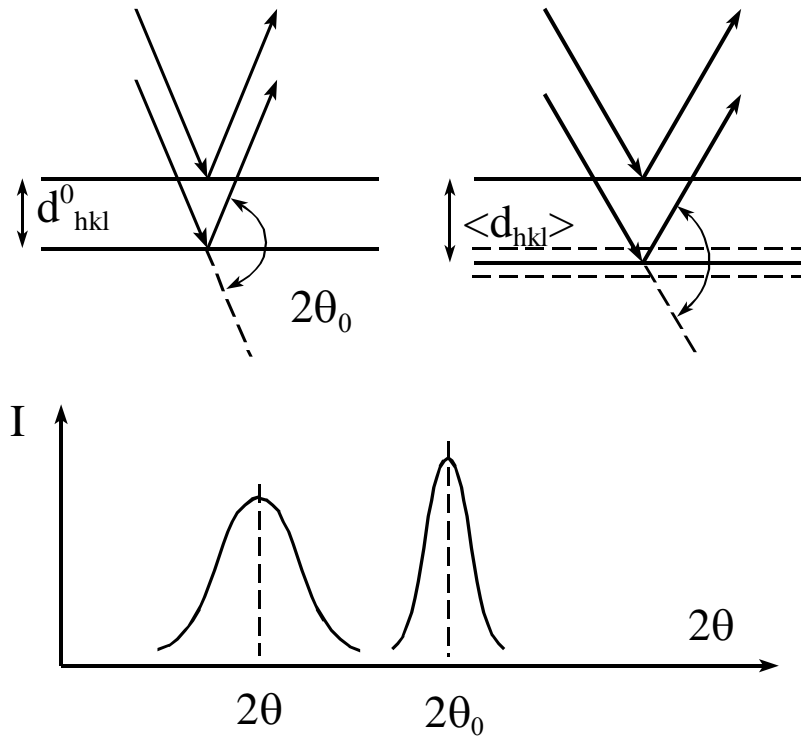
6.1. Istota dyfrakcyjnego pomiaru naprężeń wewnętrznych

W materiale, który poddany jest deformacji plastycznej, zachodzi zdecydowana zmiana mikrostruktury wewnętrznej. Wskutek uruchomienia mechanizmów poślizgu, ziarna doznają deformacji plastycznej. Na ogół jest ona nieco różna dla sąsiednich ziaren, co prowadzi do ściśnięcia lub rozciągnięcia pojedynczych ziaren; mechanizm ten jest podstawowym źródłem naprężeń wewnętrznych II rzędu. Ponadto, podczas deformacji plastycznej generowane są duże ilości defektów punktowych oraz sieci dyslokacji. Te ostatnie wytwarzają pola naprężeń wewnętrznych. Spiętrzenia dyslokacji wewnątrz ziaren wytwarzają naprężenia III rzędu. Naprężenia wewnętrzne pozostają w materiale po odjęciu sił zewnętrznych.

Obecność naprężeń wewnętrznych w materiale objawia się na ogół systematycznymi zmianami wartości stałych sieciowych w poszczególnych ziarnach. Z prawa Bragg'ów:

$$2d_{hkl} \sin \Theta = n\lambda \quad (6.3)$$

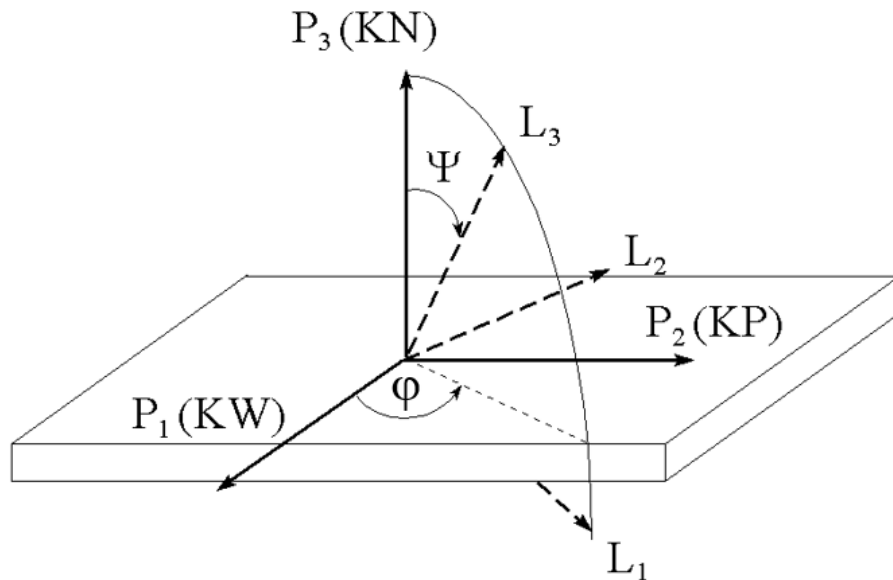
wynika, że np. przy zwiększeniu odległości międzyplaszczynowej d_{hkl} zmaleje kąt Θ (przy tym samym rzędzie ugięcia n). W typowych przypadkach to przesunięcie pików dyfrakcyjnych jest od kilku tysięcznych do jednej setnej stopnia. Wydaje się to małą wartością, niemniej dobre procedury dopasowania pików dyfrakcyjnych, np. funkcjami Gaussa lub Lorentza, umożliwiają precyzyjne uchwycenie tego efektu. Wskutek obecności naprężeń wewnętrznych pik dyfrakcyjny ulega nie tylko przesunięciu ($\Delta(2\theta) = 2\theta - 2\theta_0$), ale również rozmyciu (poszerzeniu i zmniejszeniu wysokości) –



Rys. 6.2. Zmiana położenia i kształtu pików dyfrakcyjnych wskutek zmiany odległości międzyplaszczynowej, spowodowanej naprężeniami wewnętrznymi. Na ogół naprężenia wewnętrzne w próbce nie są jednorodne, a zatem zmieniona odległość międzyplaszczynowa przedstawiona jest jako wartość średnia $\langle d \rangle$. Stałą sieci dla materiału bez naprężeń oznaczono jako d_0 .

Opiszmy teraz geometrię pomiaru, stosowaną przy wyznaczaniu naprężeń wewnętrznych. Podobnie, jak przy pomiarze tekstury krystalograficznej, eksperyment dyfrakcyjny prowadzony jest w ten sposób, że przy ustalonym kącie 2Θ próbka obracana jest względem wektora rozpraszania S . Rozważmy dwa układy współrzędnych: układ próbki (P) oraz układ związany z pomiarem (L). Definicja tych układów przedstawiona jest na Rys. 6.3. Oś L_3 ma podstawowe znaczenie, gdyż jej kierunek pokrywa się z kierunkiem

wektora rozpraszania S . Wskutek obracania próbką, wektor $L_3 \parallel S$ będzie przyjmował różne orientacje względem układu P , określone kątami φ i ψ .



Rys. 6.3. Układy odniesienia P i L .

Osie układu P są równoległe do osi symetrii próbki (w przypadku próbki walcowanej są to: kierunek walcowania KW, kierunek poprzeczny KP oraz kierunek normalny KN).

Układ L zdefiniowany jest następująco: oś L_3 jest równoległa do wektora rozpraszania S , zaś oś L_2 (będąc prostopadła do L_3) leży w płaszczyźnie $P_1 P_2$.

Prawo Bragg'ów umożliwia nam pomiar aktualnej wartości stałej sieciowej ($d=d_{hkl}$). Zatem dla każdej orientacji wektora $L_3=S$ wyznaczyć można (np. dla monokryształu), wartość odległości międzypłaszczyznowej $d(\psi, \varphi)_{hkl}$ dla płaszczyzn krystalograficznych $\{hkl\}$ prostopadłych do wektora S .

Przyjmijmy konwencję, że wszystkie wielkości wyrażane w układzie L będą oznaczane przez prim ($'$); natomiast te same wielkości wyrażone w układzie P nie mają dodatkowego oznaczenia. A zatem składowa deformacji ϵ_{33}' jest względnym odkształceniem odcinka równoległego do L_3 . Badając próbkę polikrystaliczną wyznaczamy wartość średnią $\langle \epsilon_{33}' \rangle$; średnia $\langle \dots \rangle$ dotyczy tylko grupy ziaren „dyfraktujących” (tzn. spełniających prawo Bragg'ów dla danej orientacji wektora S). Jest ona funkcją ψ i φ :

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = \frac{\langle d(\psi, \phi) \rangle_{hkl} - d_{hkl}^0}{d_{hkl}^0} \quad (6.4)$$

Omawianą składową deformacji oznaczyliśmy jako $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$, aby unaocznić, że pomiar odbywa się w kierunku L_3 przez dyfrakcję na płaszczyznach $\{hkl\}$.

6.2. Wyprowadzenie wyrażenia na mierzoną wielkość ($\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$ oraz $\langle d(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$)

Wyliczmy $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$, które mierzymy. Przetransformujemy tensor naprężeń σ_{ij} panujących w próbce (i wyrażonych w układzie P) do układu L . Macierz orientacji, czyli macierz zawierająca kosinusy kierunkowe, łącząca układy L i P ma postać:

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\varphi\cos\psi & \sin\varphi\cos\psi & -\sin\psi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ \cos\varphi\sin\psi & \sin\varphi\sin\psi & \cos\psi \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

W powyższych kosinusach kierunkowych a_{ij} pierwszy wskaźnik (i) dotyczy układu L , zaś drugi (j) – układu P . Interesująca nas transformacja ma zatem postać:

$$\sigma_{ij}' = a_{ik} a_{jl} \sigma_{kl} \quad (6.6)$$

(jak pamiętamy, wielkości wyrażone w układzie L oznaczamy primem).

Z uogólnionego prawa Hooke'a wyliczmy składową normalną $\varepsilon_{33}'(\psi, \phi)_{hkl}$ odkształcenia wzdłuż kierunku $L_3 // S$, dla pojedynczego krystalitu spełniającego prawo Bragg'ów dla jednej z płaszczyzn $\{hkl\}$:

$$\varepsilon_{33}'(\psi, \phi)_{hkl} = s'_{33ij} \sigma_{ij}^c \quad (6.7)$$

gdzie s'_{33ij} są składowymi tensora podatności sprężystej tego krystalitu, natomiast σ_{ij}^c jest tensorem naprężeń w krystalicie (powyższe wielkości wyrażone są w układzie L).

Zwróćmy uwagę na podstawową cechę pomiaru naprężeń wewnętrznych metodą dyfrakcyjną. Przy ustalonej orientacji wektora rozpraszania (S) oraz przy ustalonym kącie Bragg'ów (2θ) w sygnale dyfrakcyjnym partycypują wyłącznie te krystality, których jedna z płaszczyzn $\{hkl\}$ jest prostopadła do $S=L_3$. Tą grupę krystalitów nazywamy *grupą dyfraktującą*. Ta właśnie grupa ziaren jest w danej chwili „sondą” za pomocą której

badamy stan naprężeń w próbce. Wraz ze zmianą kątów ψ i ϕ w skład grupy dyfraktującej wchodzi coraz to inne krystality z próbki. Odształcenie, które wyznaczamy metodą dyfrakcyjną jest wartością średnią dla krystalitów biorących w danej chwili udział w dyfrakcji, czyli dla krystalitów z grupy dyfraktującej; średnią tą oznaczamy jako $\langle \dots \rangle$:

$$\langle \varepsilon'_{33}(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = \langle S'_{33ij} \sigma_{ij}^c \rangle \quad (6.8)$$

Postulujemy, że istnieje taki efektywny tensor S'_{nmop} dla dyfraktującej grupy ziaren, że powyższe równanie przyjmie postać:

$\langle \varepsilon'_{33}(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = S'_{33ij}(\psi, \phi, hkl) \sigma_{ij}'$	(6.9)
---	-------

gdzie σ_{ij}' jest średnim tensorem naprężeń w obszarze próbki, w którym wyznaczamy naprężenia (czyli są to naprężenia I-go rzędu wyrażone w układzie L).

Składową S'_{33ij} podatności sprężystej grupy dyfraktującej oznaczamy dla prostoty jako R'_{ij} i powyższe równanie możemy przepisać jako:

$$\langle \varepsilon'_{33}(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = R'_{ij}(\psi, \phi, hkl) \sigma_{ij}' \quad (6.10)$$

lub w skrócie:

$\langle \varepsilon'_{33}(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = R'_{ij} \sigma_{ij}'$	(6.10 a)
--	----------

gdzie:

$R'_{ij} = S'_{33ij}$	(6.10 b)
-----------------------	----------

Stałe R'_{ij} nazywamy dyfrakcyjnymi stałymi sprężystymi; zależą one nie tylko od kątów ψ i ϕ , ale również od wskaźników płaszczyzny dyfraktującej (hkl) (gdyż spełnienie warunku Bragga definiuje już częściowo orientacje krystalitów). Są to bardzo ważne stałe, których znajomość jest niezbędna przy interpretacji dyfrakcyjnych pomiarów naprężeń wewnętrznych. Stałe te można wyliczyć (Baczmański et al., 1993), można je również wyznaczyć dla danej próbki doświadczalnie.

Wspomnijmy tu tylko, że prosty wynik na $R'_{ij} = S'_{33ij}$ można uzyskać przy założeniu, że σ_{ij} oraz σ_{ij}^c są takie same we wszystkich ziarnach ($\sigma_{ij}^c = \sigma_{ij}'$), co odpowiada założeniu o jednorodności naprężeń w próbce i jest zgodne z tzw. modelem Reussa - patrz paragraf 6.3. Wtedy σ_{ij}' można wyłączyć za znak średniowania w Równ. 6.8:

$$\langle \varepsilon'_{33}(\psi, \phi) \rangle_{\text{hkl}} = \langle s'_{33ij} \rangle \sigma'_{ij} = S_{33ij}' \sigma'_{ij} \quad (6.11)$$

a zatem wtedy:

$$S_{33ij}' = \langle s'_{33ij} \rangle = R_{ij}' \quad (6.12)$$

czyli R_{ij}' jest średnią wartością stałej sprężystej s'_{33ij} dla grupy ziaren dyfraktujących.

Ciało quasi-izotropowe i płaski stan naprężenia

Szczególnie prosty w rozważaniach jest przypadek ciała izotropowego. Omawiana technika badań może być stosowana wyłącznie do materiałów krystalicznych, a w tej kategorii najlepszym przybliżeniem ciała izotropowego jest albo próbka proszkowa albo też polikryształ bez tekstury (z przypadkowym rozkładem orientacji ziaren). Rozważymy tutaj oczywiście ten drugi przypadek. Zauważmy, że polikryształ bez tekstury posiada izotropię własności fizycznych wyłącznie w skali makroskopowej; natomiast wewnątrz każdego ziarna (czy też dla wybranej grupy ziaren) zaobserwujemy już anizotropię. Ciało o takich własnościach nazywamy ciałem quasi-izotropowym.

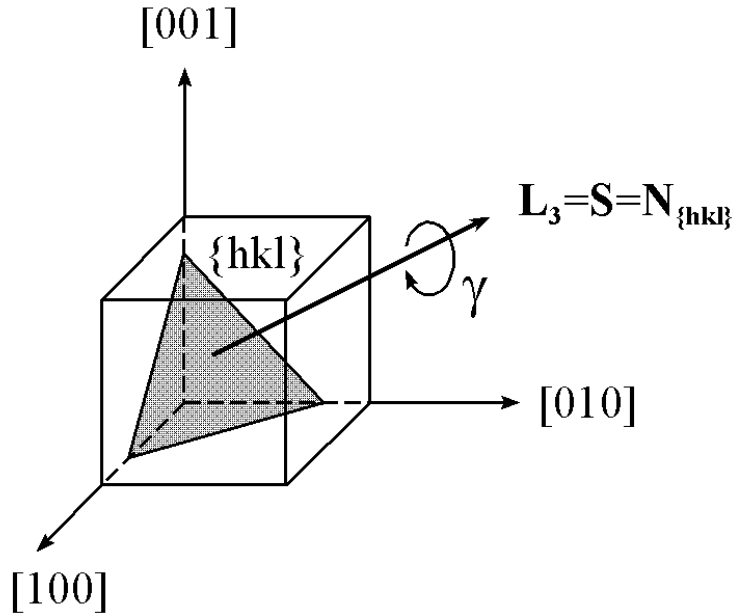
Chociaż próbka jako całość ma własności ciała quasi-izotropowego, to grupa dyfraktująca ma niższą symetrię. Orientacje krystalitów spełniających w danej chwili warunek dyfrakcji różnią się tylko obrotem γ wokół $L_3 = S = N_{\text{hkl}}$ – Rys. 6.4. Spodziewamy się, że dla ciała quasi-izotropowego, rozkład orientacji ziaren ze względu na kąt γ będzie izotropowy w grupie dyfraktującej. Tak więc uśredniona macierz stałych sprężystych S_{mn} dla grupy dyfraktującej będzie miała strukturę typową dla ciała o symetrii cylindrycznej (osiowej). Można wykazać (patrz np., Reid, 1974), że macierz tą można zbudować tylko z pięciu niezależnych parametrów i jest ona następująca:

$$S_{mn}' = \begin{bmatrix} S'_{11} & S'_{12} & S'_{13} & & & \\ S'_{12} & S'_{11} & S'_{13} & & & \\ S'_{13} & S'_{13} & S'_{33} & & & \\ & & & S'_{44} & & \\ & & & & S'_{44} & \\ & & & & & S'_{66} \end{bmatrix} \quad (6.13)$$

Oczywiście osią symetrii dla grupy ziaren dyfraktujących jest $S=L_3$. Rozpiszmy Równ. 6.9, używając zapisu macierzowego tensorów:

$$\langle \varepsilon_3'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = S_{31}'\sigma_1' + S_{32}'\sigma_2' + S_{33}'\sigma_3' \quad (6.14)$$

Po prawej stronie wystąpiły tylko trzy składniki, gdyż $S'_{34}=S'_{35}=S'_{36}=0$ (por. Równ. 6.13).



Rys. 6.4. Orientacje ziaren z grupy dyfraktującej różnią się między sobą obrotem o kąt γ wokół wektora $L_3 = S = N_{\{hkl\}}$

Ponadto, korzystając z postaci macierzy S'_{mn} (Równ. 6.13), równanie powyższe można przepisać:

$$\langle \varepsilon_3'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = S_{13}'\sigma_1' + S_{13}'\sigma_2' + S_{33}'\sigma_3' \quad (6.15)$$

Przepiszmy powyższe równanie używając skróconego zapisu tylko w odniesieniu do S'_{ijkl} , a zachowując pełny zapis dla σ'_{ij} i ε'_{ij} :

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = S_{13}'\sigma_{11}' + S_{13}'\sigma_{22}' + S_{33}'\sigma_{33}' \quad (6.16)$$

O wartości $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$ decydują tylko składowe główne z układu L: σ_{11}' , σ_{22}' i σ_{33}' . Trzeba jednak pamiętać, że każda z wymienionych składowych w układzie L zależy na ogół od wszystkich składowych tensora σ_{ij} wyrażonego w układzie P. Duże uproszczenie w prowadzonych obliczeniach uzyskamy, gdy założymy, że w próbce istnieje na płaszczyźnie x_1x_2 tzw. płaski stan naprężeń i ponadto występują tylko składowe normalne:

$$\sigma_{11} \neq 0, \quad \sigma_{22} \neq 0, \quad \sigma_{33} = \sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0 \quad (6.17)$$

Sytuacja taka występuje przy powierzchni w próbkach walcowanych. Próbki takie posiadają symetrię rombowa, a zatem powinny wystąpić w nich tylko składowe główne naprężeń σ_{ii} (osie symetrii wyznaczone są przez krawędzie próbki). Ponadto, warunek równowagi statycznej narzuca na powierzchni: $\sigma_{33}=0$. Zauważmy, że tylko cienka warstwa przypowierzchniowa jest badana w dyfrakcji rentgenowskiej, a więc występowanie płaskiego stanu naprężeń jest bardzo realistycznym założeniem przy użyciu tej techniki.

Wyliczmy trzy główne składowe σ_{ii} ' tensora naprężeń w układzie L dla płaskiego stanu naprężeń w próbce, korzystając z równania transformacyjnego (Równ. 6.6) oraz z macierzy kosinusów kierunkowych (Równ. 6.5):

$$\begin{aligned} \sigma_{11}' &= \sigma_{11} \cos^2 \varphi \cos^2 \psi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi \cos^2 \psi \\ \sigma_{22}' &= \sigma_{11} \sin^2 \varphi + \sigma_{22} \cos^2 \varphi \\ \sigma_{33}' &= \sigma_{11} \cos^2 \varphi \sin^2 \psi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi \sin^2 \psi \end{aligned} \quad (6.18)$$

A zatem:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} &= S_{13}'(\sigma_{11} \cos^2 \varphi \cos^2 \psi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi \cos^2 \psi + \\ &+ \sigma_{11} \sin^2 \varphi + \sigma_{22} \cos^2 \varphi) + \\ &+ S_{33}'(\sigma_{11} \cos^2 \varphi \sin^2 \psi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi \sin^2 \psi) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Stosując tożsamość: $\cos^2 \psi = 1 - \sin^2 \psi$ oraz grupując odpowiednie wyrazy zawierające „jedynekę trygonometryczną” ze względu na φ otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} &= S_{13}'(\sigma_{11} + \sigma_{22} - \sigma_{11} \cos^2 \varphi \sin^2 \psi + \\ &- \sigma_{22} \sin^2 \varphi \sin^2 \psi) + \\ &+ S_{33}'(\sigma_{11} \cos^2 \varphi \sin^2 \psi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi \sin^2 \psi) \end{aligned} \quad (6.20)$$

Grupując wyrazy zawierające $\sin^2 \psi$ otrzymamy:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} &= (S_{33}' - S_{13}')(\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi + \\ &+ S_{13}'(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \end{aligned} \quad (6.21)$$

Wprowadzając powszechnie przyjęte w literaturze przedmiotu oznaczenia:

$$\frac{1}{2}s_2 = (S'_{33} - S'_{13}), \quad s_1 = S'_{13} \quad (6.22)$$

przepiszmy nasz rezultat dla ciała quasi-izotropowego w ostatecznej postaci:

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = \frac{1}{2}s_2(\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi + s_1(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \quad (6.23)$$

Korzystając z Równ. 6.4, powyższy wynik możemy również zapisać następująco:

$$\langle d(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = \left[\frac{1}{2}s_2(\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi + s_1(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \right] d_{hkl}^0 + d_{hkl}^0 \quad (6.24)$$

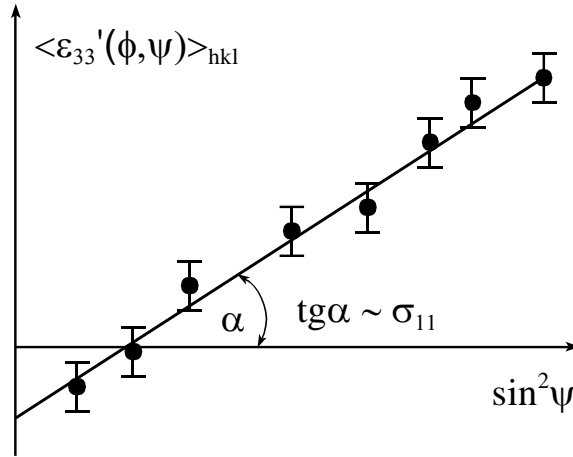
Ostatnie równanie wyraża bezpośrednio mierzoną stałą sieciową d_{hkl} w funkcji orientacji wektora $\mathbf{S}=\mathbf{L}_3$, czyli w funkcji ψ i φ .

Pamiętając, że $R_{ij}'=S_{33ij}'$ oraz biorąc pod uwagę strukturę macierzy S_{mn}' (Równ. 6.13) współczynniki $\frac{1}{2}s_2$ oraz s_1 zdefiniowane w Równ. 6.22 można wyrazić także jako:

$$\frac{1}{2}s_2 = R_{33}' - R_{11}' \quad \text{oraz} \quad s_1 = R_{11}' \quad (6.25)$$

Stałe R_{11}' i R_{33}' dla ciała quasi-izotropowego nie zależą od kątów ψ i φ , zależą natomiast od refleksu hkl przy pomocy którego wyznaczamy ε_{33}' (ustawienie wszystkich podziaren grupy dyfraktującej w ten sposób, że jedna z płaszczyzn $\{hkl\}$ jest prostopadła do wektora \mathbf{S} determinuje anizotropię sprężystą całej tej grupy).

Omówiony przypadek ciała quasi-izotropowego ma podstawowe znaczenie w dziedzinie badań naprężeń wewnętrznych. Jest to bowiem w pewnym sensie przypadek wzorcowy, bowiem wiele ciał powszechnie występujących posiada izotropowe lub prawie izotropowe własności. Zauważmy, że jeśli wykreślimy zależność $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}$ w funkcji $\sin^2 \psi$, to dla ciała quasi-izotropowego otrzymamy linię prostą - Rys. 6.5.



Rys. 6.5. Zależność $\langle \varepsilon_{33}' \rangle$ od $\sin^2 \psi$ dla ciała izotropowego. Jeśli wykres sporządzono dla $\varphi=0$, to nachylenie prostej wynosi $\frac{1}{2} s_2 \sigma_{11}$.

Informacja o szukanych składowych naprężeniach zawarta jest w nachyleniu tej prostej (Równ. 6.23). Przykładowo, z nachylenia prostej dla $\varphi=0^0$ możemy znaleźć wartość σ_{11} . Jeśli wyznaczymy również prostą dla $\varphi=90^0$, to z uzyskanych nachyleń możemy znaleźć obie szukane składowe naprężeniach: σ_{11} i σ_{22} .

Na ogół, w celu podniesienia precyzji wyznaczenia σ_{11} i σ_{22} , wyznacza się doświadczalnie kilka takich prostych dla różnych wartości kąta φ i uzyskane zbiory punktów doświadczalnych dopasowuje się do prostych teoretycznych metodą regresji liniowej.

Ciało quasi-izotropowe i dowolny stan naprężeniach

Badając stan naprężeniach we wnętrzu próbki (np. przy użyciu dyfrakcji neutronów), nie możemy już założyć istnienia płaskiego stanu naprężeniach. W takim przypadku, celem naszym jest oczywiście wyznaczenie pełnego tensora naprężeniach wewnętrznych. Jeśli badany materiał jest ciałem quasi-izotropowym, to wyrażenie na $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}$ jest tylko trochę bardziej rozbudowane niż w poprzednim paragrafie. Wyliczając σ'_{ij} , musimy wziąć teraz wszystkie składowe σ_{kl} z Równ. 6.6; po analogicznych przekształceniach jak powyżej, otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = & \frac{1}{2} s_2 (\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi + \\ & + \frac{1}{2} s_2 \sigma_{33} \cos^2 \psi + s_1 (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) + \\ & + \frac{1}{2} s_2 (\sigma_{13} \cos \varphi + \sigma_{23} \sin \varphi) \sin 2\psi \end{aligned} \quad (6.26)$$

Odpowiadające powyższej relacji wyrażenie na stałą sieciową przyjmie postać:

$$\begin{aligned} \langle d(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = & \left[\frac{1}{2} s_2 (\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi + \frac{1}{2} s_2 \sigma_{33} \cos^2 \psi + \right. \\ & \left. + s_1 (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) + \frac{1}{2} s_2 (\sigma_{13} \cos \varphi + \sigma_{23} \sin \varphi) \sin 2\psi \right] d_{hkl}^0 + d_{hkl}^0 \end{aligned} \quad (6.27)$$

W tym ogólniejszym przypadku, zależności $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}$ oraz $\langle d(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}$ od $\sin^2 \psi$ nie są już liniowe (obecność $\sin 2\psi$). Procedura doświadczalnego wyznaczania składowych tensora naprężeń jest podobna jak wspomniano powyżej. Wartości te znajduje się dopasowując zbiór punktów doświadczalnych ($\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}$ w funkcji $\sin^2 \psi$ przy ustalonych wartościach φ) do zależności teoretycznych. Z powyższego równania widać niemniej, że jeśli tylko $\sigma_{13} = \sigma_{23} = 0$, to uzyskujemy z powrotem zależność liniową (taki warunek spełniony jest na powierzchni, gdyż tam znikają siły prostopadłe do powierzchni: $\sigma_{i3} = 0$).

Ciało o dowolnej symetrii i dowolny stan naprężeń

W tym przypadku musimy wrócić do ogólnej zależności 6.10. A zatem:

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = R_{ij}'(\psi, \varphi, hkl) \sigma_{ij}' \quad (\text{Równ. 6.10})$$

Przypomnijmy, że R_{ij}' są dyfrakcyjnymi stałymi sprężystymi; wiążą one mierzone odkształcenie (czyli $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}$) z szukanymi naprężeniami (σ_{ij}') wyrażonymi w układzie L. Wyznaczenie lub wyliczenie dyfrakcyjnych stałych sprężystych jest „kluczem do sukcesu” całej rozważanej analizy. Trzeba wyraźnie zaznaczyć, że w przypadku ciała *anizotropowego* dyfrakcyjne stałe sprężyste R'_{ij} zależą od kierunku pomiaru (\mathbf{L}_3) – czyli od ψ i φ .

Jednakże celem badań jest znalezienie naprężeń wyrażonych w układzie próbki P (σ_{ij}), a nie w układzie L (σ_{ij}'). Transformując w równaniu powyższym naprężenia z układu L do układu P otrzymamy:

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = R_{mn}'(\psi, \varphi, hkl) a_{mi} a_{nj} \sigma_{ij}$$

(gdzie a_{ij} są elementami macierzy transformacji) lub krócej:

$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl} = F_{ij}(R'_{ij}, \psi, \varphi) \sigma_{ij}$	(6.28)
---	--------

gdzie:

$F_{ij} = R_{mn}'(\psi, \phi, hkl)a_{mi}a_{nj}$ są ogólnymi stałymi dyfrakcyjnymi. Otrzymana zależność łączy mierzoną wielkość $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$ z poszukiwanymi naprężeniami (σ_{ij}) wyrażonymi w układzie próbki. Równ. 6.28 możemy (podobnie jak robiliśmy to wcześniej) przepisać w równoważnej postaci, wyrażając mierzoną stałą sieciową $\langle d(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$:

$$\langle d(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = [F_{ij}(R'_{ij}, \psi, \phi)\sigma_{ij}] d_{hkl}^0 + d_{hkl}^0 \quad (6.29)$$

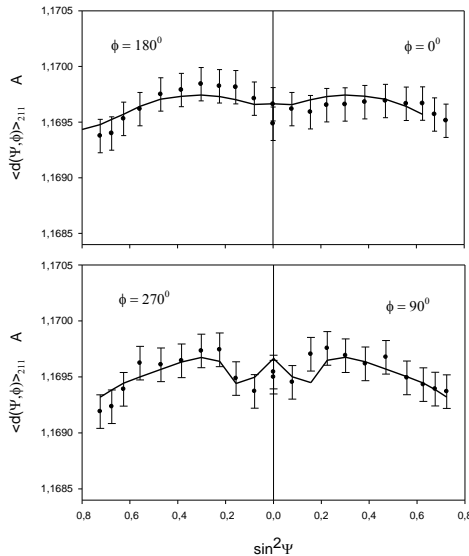
Przypomnijmy, że Równ. 6.28 tym się zasadniczo różni się od Równ. 6.10, że występują w nim σ_{ij} a nie σ_{ij}' . Stałe F_{ij} wyrażają się przez R_{ij}' oraz przez ψ i ϕ .

Łatwo można np. przeliczyć (por. Równ. 6.23), że dla ciała quasi-izotropowego:

$$F_{11} = s_1 + \frac{1}{2}s_2 \cos^2 \phi \sin^2 \psi \text{ lub równoważnie: } F_{11} = R_{11}' + (R_{33}' - R_{11}') \cos^2 \phi \sin^2 \psi.$$

W materiałach anizotropowych (np. w polikryształach posiadających teksturę) stałe R_{ij}' i F_{ij} wyliczane są w oparciu o funkcję tekstury. Zależą one również od wskaźników hkl płaszczyzny krystalograficznej, użytej do pomiaru odkształcenia $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$.

Przykładem wyniku interpretacji danych doświadczalnych w ogólnym przypadku materiału polikrystalicznego o silnej teksturze (Równ. 6.29) pokazuje Rys. 6.6.



Rys. 6.6. Stała sieciowa $\langle d_{211} \rangle$ w funkcji $\sin^2 \psi$ dla walcowanej stali o silnej teksturze. Punkty pomiarowe zestawiono z wynikiem obliczeń wg. Równ. 6.29 (krzywa ciągła)

6.3. Przykład wyliczania dyfrakcyjnych stałych sprężystych R_{ij}'

Przypomnijmy definicję dyfrakcyjnych stałych sprężystych R_{ij}' (Równ. 6.10):

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = R_{ij}'(\psi, \phi) \sigma_{ij}'.$$

Z drugiej strony z Równ. 6.8: $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = \langle s_{33ij}'(\psi, \phi) \sigma_{ij}' \rangle$. Mamy więc:

$$R_{ij}'(\psi, \phi) \sigma_{ij}' = \langle s_{33ij}'(\psi, \phi) \sigma_{ij}' \rangle \quad (6.30)$$

Tak więc, licząc R_{ij}' musimy dokonać przejścia ze średniej $\langle s_{33ij}' \sigma_{ij}' \rangle$ do iloczynu wielkości $R_{ij}'(\psi, \phi) \sigma_{ij}'$. Na ogół nie da się znaleźć stałych $R_{ij}'(\psi, \phi)$ w sposób w pełni analityczny, gdyż zbyt skomplikowany jest charakter oddziaływań sprężystych między ziarnami w próbce polikrystalicznej. Jak zawsze w takich sytuacjach, “podpieramy się” modelami. Najprostszym modelem, który może być do tego celu użyty – to model Reuss’a (Reuss, 1929). Model ten wprowadza bardzo silne, upraszczające założenie: $\sigma_{ij} = \text{const}$ lub: $\sigma_{ij}' = \text{const}$. Jest to równoważne założeniu, że naprężenia w próbce są jednorodne (mają stałą wartość w każdym punkcie próbki). Przy takim założeniu σ_{ij}' można wyłączyć za znak średniej w ostatnim równaniu i w efekcie otrzymujemy:

$$R_{ij}'(\psi, \phi) = \langle s_{33ij}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} \quad (6.31)$$

czyli: dyfrakcyjne stałe sprężyste są średnimi ze stałych sprężystych monokryształu s_{33ij}' wyliczonymi dla *zbioru ziaren dyfraktujących*. Przypomnijmy, że jest to zbiór takich kryształitów, dla których wektor rozpraszania $\mathbf{S} = \mathbf{L}_3$ jest prostopadły do jednej z płaszczyzn $\{hkl\}$. Już z tego widać, że w ogólności R_{ij}' zależą od hkl , a także od ψ i ϕ .

Ziarna z grupy dyfraktującej mają następującą podstawową cechę: orientacja dowolnego ziarna tej grupy związana jest z orientacją każdego innego przez obrót wokół wektora $\mathbf{S} = \mathbf{L}_3$. W konsekwencji średniowanie $\langle \dots \rangle_{hkl}$, które prowadzi do wyliczenia R_{ij}' , trzeba wykonać względem tego obrotu (po kącie γ , w zakresie od 0 do 2π):

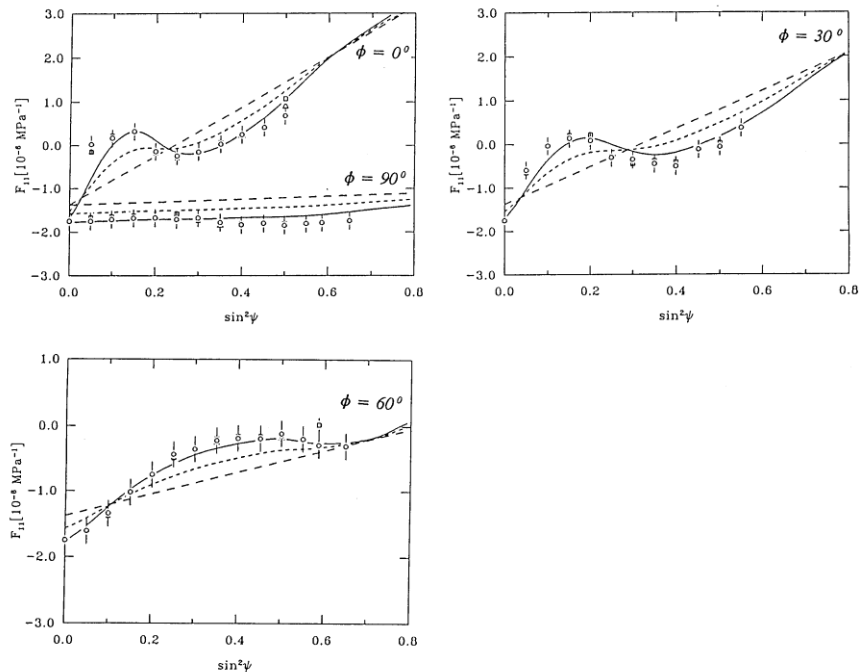
$$R_{ij}'(\psi, \phi) = \frac{\int_0^{2\pi} s_{33ij}'(g) f(g) d\gamma}{\int_0^{2\pi} f(g) d\gamma} \quad (6.32)$$

W równaniu tym $f(g)$ jest funkcją rozkładu orientacji (funkcją tekstury), która spełnia rolę funkcji wagowej; istnieje oczywiście związek między g i γ .

Do wyliczania dyfrakcyjnych stałych sprężystych używa się też innych modeli, np.:

- modelu Voigt’a (Voigt, 1928; w modelu tym zakłada się jednorodność odkształcenia sprężystego w całej objętości próbki),
- modelu Hill’a (Hill, 1952; “model” ten polega na wzięciu średniej arytmetycznej wyników z modeli Reussa i Voigta),
- modelu Krönera (Kröner, 1958; w modelu tym bierze się pod uwagę oddziaływania sprężyste pomiędzy ziarnami).

Poprawność obliczeń stałych sprężystych F_{ij} (por. Równ. 6.28), które wyrażają się przez R_{ij} , możemy zweryfikować doświadczalnie. W tym celu przykładamy do próbki znany zewnętrzny stan naprężeń i dokonujemy dyfrakcyjnego pomiaru odkształcenia $\langle \varepsilon_{33}(\psi, \phi) \rangle_{hkl}$ (w obecności przyłożonych sił). Ponieważ naprężenia znamy, więc z Równ. 6.28 wyznaczamy dyfrakcyjne stałe sprężyste F_{ij} . Przykład takiej weryfikacji obliczeń z pomiarem pokazany jest na poniższym rysunku.



Rys. 6.7. Dyfrakcyjne stałe sprężyste F_{ij} w funkcji $\sin^2 \psi$ dla walcowanej stali z silną teksturą. Punkty doświadczalne pokazano na tle krzywych teoretycznych uzyskanych w oparciu o modele: Reussa (____), Voigta (- - -) i Hilla (-----). Przedstawiono wyniki dla czterech wartości kąta ϕ : 0° , 90° , 30° i 60° .

6.4. Przykładowe wyniki

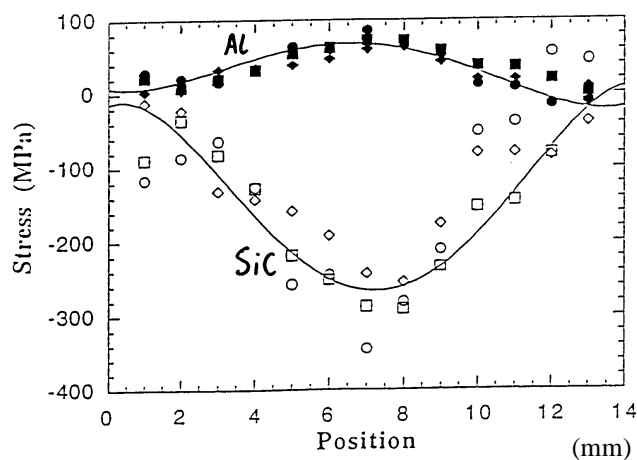
Przeprowadzono następujący test poprawności dyfrakcyjnej metody wyznaczania naprężeń wewnętrznych (Baczmanski et al., 1993). Do stalowej walcowanej próbki przyłożono dwa kolejne stany (A i B) makroskopowych naprężeń: σ_{ij}^A i σ_{ij}^B .

Następnie wyznaczono je metodą opisaną powyżej. Rozważmy różnicę między nimi: $\Delta\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^A - \sigma_{ij}^B$. W ten sposób uniezależniamy się od innych naprężeń obecnych ewentualnie od początku w próbce, których nie znamy. W poniższej tabeli przedstawiono porównanie przyłożonych i wyznaczonych doświadczalnie wartości $\Delta\sigma_{ij}$. Jak widać, zgodność jest znakomita.

Tabela 6.1. Przyłożone i wyznaczone doświadczalnie wartości $\Delta\sigma_{ij}$. Użyto walcowanej próbki stalowej, o silnej teksturze oraz dyfrakcji rentgenowskiej.

Składowa naprężeń	Wartość przyłożona	Wartość wyznaczona metodą dyfrakcyjną	χ^2
$\Delta\sigma_{11} = \sigma_{11}^{A''} - \sigma_{11}^{B'}$	200	200.1 +/- 8.2	0.49
$\Delta\sigma_{22} = \sigma_{22}^{A''} - \sigma_{22}^{B'}$	0	-3.5 +/- 8.0	
$\Delta\sigma_{33} = \sigma_{33}^{A''} - \sigma_{33}^{B'}$	0	3.2 +/- 5.3	
$\Delta\sigma_{11} = \sigma_{11}^{A''} - \sigma_{11}^{B'}$	300	294.9 +/- 9.8	0.79
$\Delta\sigma_{22} = \sigma_{22}^{A''} - \sigma_{22}^{B'}$	0	-7.1 +/- 8.0	
$\Delta\sigma_{33} = \sigma_{33}^{A''} - \sigma_{33}^{B'}$	0	-1.1 +/- 5.2	

Innym przykładem, tym razem uzyskanym przy użyciu dyfrakcji neutronowej, jest pomiar zmienności naprężeń wewnętrznych w funkcji położenia w próbce (Rys. 6.8). Badany był kompozyt Al/SiC o grubości 14 mm, który najpierw schłodzono z wysokiej temperatury, a następnie zgęto. Łatwo sobie uzmysłwić, że żadna inna metoda nie umożliwiłaby precyzyjnego pomiaru naprężeń wewnętrznych w głębi masywnej próbki i co więcej, niezależnie w każdej z faz materiału.



Rys. 6.8. Zależność głównej składowej naprężeń w funkcji odległości od powierzchni

w kompozycie Al/SiC po jego schłodzeniu i zgięciu. Metoda dyfrakcyjna umożliwia niezależny pomiar naprężenia w każdej z faz.

6.5. Inne efekty

Interpretacja dyfrakcyjnych pomiarów naprężeń wewnętrznych, która była omawiana do tego miejsca, wynika wyłącznie z anizotropowych własności sprężystych krystalitów oraz z ich wzajemnego oddziaływania sprężystego. Okazuje się jednak, że istnieją także inne przyczyny powstawania naprężeń wewnętrznych. Jedną z nich jest różna rozszerzalność termiczna składników ciała (np. w materiale dwufazowym); efekt ten generuje naprężenia pochodzenia termicznego. Drugim często spotykanym powodem powstawania naprężeń jest anizotropowa natura deformacji *plastycznej*. Jak pamiętamy, podstawowym zjawiskiem elementarnym w plastyczności jest poślizg krystalograficzny, który odbywa się na wybranej płaszczyźnie i w wybranym kierunku krystalograficznym. Co więcej, w sąsiadujących ziarnach (o innych orientacjach sieci), aktywne są na ogół inne kombinacje systemów poślizgu. Wszystko to razem prowadzi do różnych deformacji plastycznych w różnych ziarnach. Ta niezgodność (ang.: incompatibility) deformacji plastycznej pomiędzy sąsiednimi ziarnami jest właśnie źródłem dodatkowych naprężeń, które powstają w materiale. Całkowite odkształcenie sprężyste, mierzona metodą dyfrakcyjną, może być w takim przypadku opisana jako:

$$\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = F_{ij}(R'_{ij}, \psi, \phi) \sigma_{ij}^I + \langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}^{NP} \quad (6.33)$$

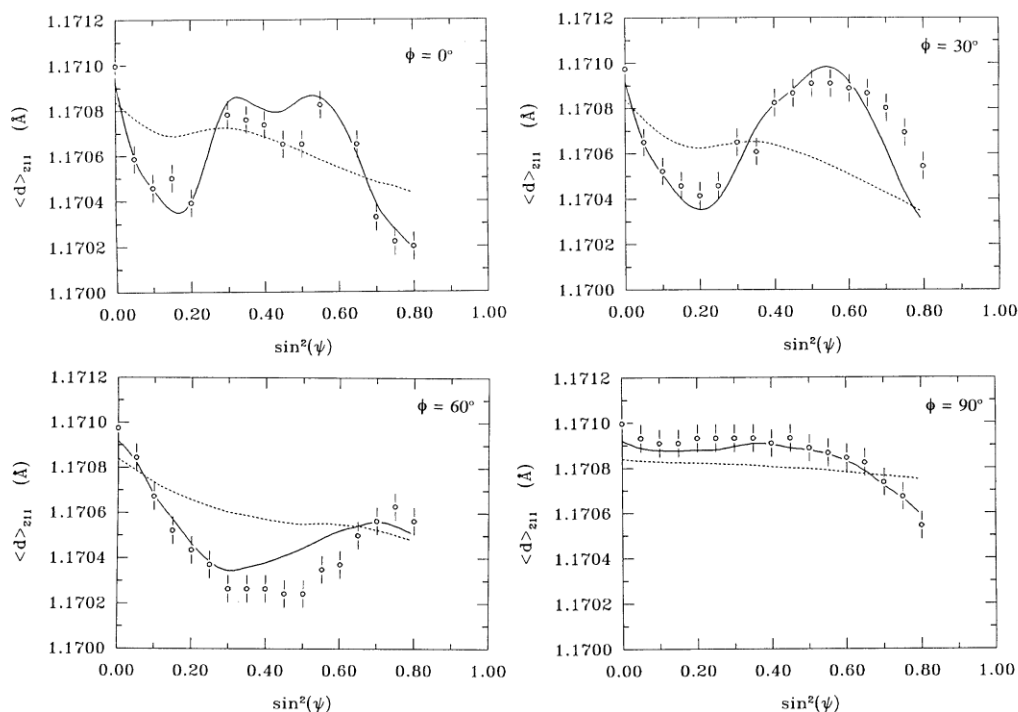
lub:

$$\langle d(\psi, \phi) \rangle_{hkl} = [F_{ij}(R'_{ij}, \psi, \phi) \sigma_{ij}^I + \langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}^{NP}] d_{hkl}^0 + d_{hkl}^0 \quad (6.34)$$

gdzie: σ_{ij}^I jest średnim stanem naprężeń panującym w rozważanym obszarze próbki (naprężenia I rzędu), zaś $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \phi) \rangle_{hkl}^{NP}$ jest dodatkowym odkształceniem sprężystym spowodowanym niezgodnością odkształceń plastycznych w sąsiednich ziarnach; indeks NP oznacza niezgodność plastyczną (Baczmanski et. al., 1994). Wspomniany człon może być oszacowany przez modele odkształcenia sprężysto-plastycznego i użyty do interpretacji wyników doświadczalnych. Dodajmy jeszcze, że człon ten opisuje część naprężeń wewnętrznych zmieniających się od ziarna do ziarna, a więc naprężenia II rzędu.

Zmierzoną zależność odległości międzypłaszczyznowej $\langle d_{211} \rangle$ od $\sin^2\psi$ dla stalowej walcowanej próbki pokazano na Rys. 6.9, przy ustalonych wartościach kąta $\phi = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ i 90° . Porównano tam także wyniki obliczeń uzyskane przy uwzględnieniu tylko

anizotropii sprężystej (nieobecny człon $\langle \varepsilon_{33}'(\psi, \varphi) \rangle_{hkl}^{NP}$ w Równ. 6.34) z wynikami uzyskanymi przy uwzględnieniu zarówno anizotropii sprężystej jak i niezgodności odkształcenia plastycznego (obecne wszystkie człony Równ. 6.34). Widać, że uwzględnienie członu naprężeń pochodzącego od niezgodności odkształcenia plastycznego pomiędzy sąsiednimi ziarnami wybitnie poprawia zgodność wartości wyliczonych ze zmierzonymi.



Rys. 6.9. Zależność $\langle d_{211} \rangle$ od $\sin^2 \psi$ (przy $\varphi = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ i 90°) dla silnie stekstwowanej próbki stalowej po walcowaniu. Liniją przerywaną pokazano zależność teoretyczną uzyskaną przy uwzględnieniu jedynie anizotropii sprężystej; linia ciągła pokazuje wyniki obliczeń przy uwzględnieniu zarówno anizotropii sprężystej jak i niezgodności odkształcenia plastycznego.

6.5 Podsumowanie

Dyfrakcyjna metoda pomiaru naprężeń wewnętrznych jest praktyczną i precyzyjną techniką badania naprężeń wewnętrznych. Używając klasycznej metody rentgenowskiej znajdujemy stan naprężeń z okolic powierzchni próbki. Natomiast używając promieniowania synchrotronowego bądź dyfrakcji neutronów znajdujemy stan naprężeń w punktach leżących wewnątrz próbki; możliwość ta wynika z bardzo dużej penetracji (wskutek niskiej absorpcji) wymienionych wiązek promieniowania.

Technika dyfrakcyjna jest jedyną, która umożliwia wyznaczenie pełnego tensora naprężeń (przypadek dyfrakcji neutronowej i promieniowania synchrotronowego). Poza tym jest techniką nieniszczącą, stąd jej wielka popularność w tej dziedzinie. Bywając w ośrodkach badań przy użyciu promieniowania synchrotronowego bądź neutronów, łatwo zauważyć, że duża część całkowitego czasu pomiarów dotyczy właśnie naprężeń wewnętrznych.

LITERATURA:

Baczymański, A., Wierzbanowski, K., Haije, W.G., Helmholtz, R.B., Ekambaranathan, G., Pathiraj, B., *Cryst. Res. & Technol.*, **28**, 229 (1993)

Baczymański, A., Wierzbanowski, K., Lipiński, P., Helmholtz, R.B., Ekambaranathan, G., Pathiraj, B., *Phil. Mag. A*, **69**, 437 (1994)

Dolle, H., *J. Appl. Cryst.*, **12**, 489 (1979)

Hill, R., *Proc. Phys. Soc.*, **A65**, 349 (1952)

Kröner, E., *Zeit. Phys.*, **151**, 504 (1958)

Noyan, I.C., Cohen, J.B., *Residual Stress – measurement by Diffraction and Interpretation*, Springer-Verlag, Berlin (1987)

Reid, C. N., *Deformation Geometry for Material Scientists*, Pergamon Press, Oxford (1973)

Reuss, A., *Z. Angew. Math. Mech.*, **9**, 49 (1929)

Voigt, W., *Lehrbuch der Kristallphysik*, Teubner-Verlag, Leipzig-Berlin (1928)