

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

14-2002-76

На правах рукописи  
УДК 548.735.6 + 539.32

**ЛЫЧАГИНА**  
Татьяна Анатольевна

**НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКОЕ И МОДЕЛЬНОЕ  
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕКСТУРЫ  
ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ УПРУГИХ СВОЙСТВ  
КОНСТРУКЦИОННЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ  
МАТЕРИАЛОВ**

Специальность: 01.04.07 — физика  
конденсированного состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна 2002

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка  
Объединенного института ядерных исследований

Научные руководители кандидат технических наук, доцент  
Пирогов Евгений Николаевич  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
Николаев Дмитрий Игоревич

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук,  
профессор  
Савелова Татьяна Ивановна  
доктор физико-математических наук,  
профессор  
Яковлев Виктор Борисович

Ведущая организация ОАО "Всероссийский институт  
легких сплавов", г. Москва

Защита состоится “ \_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2002 года в \_\_\_\_\_ часов на заседании  
диссертационного совета Д.720.001.06 при Лаборатории нейтронной физики и  
Лаборатории ядерных реакций Объединенного института ядерных  
исследований по адресу: 141980, Московская область, Дубна, ОИЯИ.

С диссертацией можно ознакомиться в Научно-технической библиотеке ОИЯИ

Автореферат разослан “ \_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2002 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета



Попоко А.Г.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Большинство конструкционных материалов являются поликристаллическими. Многие технологические операции (прокатка, волочение, экструзия) приводят к возникновению кристаллографической текстуры в материале, т.е. преимущественных ориентировок кристаллитов, слагающих поликристалл. Возникновение таких преимущественных ориентировок является одной из причин анизотропии физических свойств поликристаллических материалов. Поэтому при оценке свойств конструкционного материала большое значение среди других факторов имеет учет текстуры. Экспериментальную информацию о текстуре получают из полюсных фигур (ПФ), которые измеряются главным образом методами, основанными на дифракции рентгеновских лучей или тепловых нейтронов. Наиболее полно, однако, текстура описывается функцией распределения зерен по ориентациям (ФРО). Задача восстановления ФРО из ПФ (основная задача количественного текстурного анализа) не имеет единственного решения (является некорректной), поскольку ПФ содержат неполную информацию о ФРО. Для решения этой задачи разработан ряд математических методов. В настоящей работе исследуется до настоящего времени невыясненный вопрос о влиянии метода восстановления ФРО из ПФ на определение упругих свойств материалов кубической и гексагональной симметрий, а также устанавливаются количественные связи между упругими свойствами кубических материалов и параметрами ФРО.

В последнее время возрастают требования к методам контроля прочностных характеристик конструкций. В связи с этим особый интерес приобретает неразрушающий метод исследования напряженного состояния в объеме материала, основанный на дифракции нейтронов. Однако поскольку текстура влияет на упругие постоянные материала, ее необходимо учитывать при определении напряженного состояния в материале из дифракционных спектров.

В связи с совершенствованием экспериментальных методик, а также с развитием технологий изготовления приборов, использующих поликристаллические микросистемы, требования, предъявляемые к точности расчетов свойств текстурованных материалов, постоянно растут. Поэтому особую важность приобретают исследования факторов, оказывающих влияние на точность получаемых результатов. В данной работе рассматриваются вопросы, связанные с обоснованием применения усреднения свойств отдельных кристаллитов с ФРО для расчета свойств поликристаллических материалов.

**Целью** диссертационной работы являлось исследование влияния текстуры при определении упругих свойств конструкционных поликристаллических материалов, обладающих кубической и гексагональной симметриями. Достижение поставленной цели потребовало решения следующих основных задач:

1. Исследование влияния методов восстановления ФРО из ПФ на определение упругих свойств материалов с кубической и гексагональной

симметриями. Реализация метода расчета упругих свойств с ФРО, представленной суммой гауссовских распределений.

2. Изучение методов расчета упругих постоянных текстурованных материалов, используемых для определения напряженного состояния в дифракционном эксперименте.
3. Оценка величины погрешности при вычислении упругих свойств материалов с кубической и гексагональной симметриями в зависимости от количества зерен в образце. Исследование влияния распределения зерен по объемам (площадям) на точность определения упругих свойств поликристаллических материалов.

**Научная новизна.** Впервые исследовано влияние наиболее используемых методов решения основной задачи количественного текстурного анализа на определение упругих свойств кубических и гексагональных материалов. Реализован метод расчета упругих свойств кубических материалов, позволяющий явным образом представить упругие свойства через параметры текстуры.

Впервые проведено исследование методов расчета упругих постоянных текстурованных материалов (в том числе методов геометрического усреднения), используемых для определения напряженного состояния в дифракционном эксперименте и экспериментально с помощью нейтронной дифракции продемонстрирован вывод о преимуществах метода “bulkpathgeo”.

Впервые на основе модели твердого тела, построенной путем применения разбиения Вороного и генерирования трехмерных вращений, распределенных в соответствии с известным законом, получена количественная информация о зависимости погрешности вычисления упругих свойств текстурованных материалов с кубической и гексагональной симметриями от количества зерен в материале. Приведена оценка ошибки вычисления упругих свойств с учетом распределения зерен по площадям.

**Научная и практическая ценность.** Полученная в работе информация о количественном влиянии метода восстановления ФРО из экспериментальных ПФ на определение упругих свойств некоторых кубических и гексагональных материалов представляет практический интерес для материаловедов. Кроме того, написанное программное обеспечение может быть использовано для вычисления упругих свойств текстурованных материалов с ФРО, полученной разными методами. Для специалистов, работающих в области дифракционного “стресс”-анализа, практический интерес представляет вывод о преимуществах метода “bulkpathgeo” для расчета упругих постоянных текстурованных материалов, используемых для определения напряженного состояния в дифракционном эксперименте. Исследование погрешностей вычисления упругих свойств дало возможность оценить точность получаемых результатов, выявить природу возникающих ошибок, а также оценить влияние распределения зерен по площадям на величину этих ошибок. Научный интерес представляет возможность моделирования трехмерной зеренной структуры твердого тела на основе разработанных программ и исследования влияния распределения зерен по

объемам на величину ошибок вычисления упругих свойств. Кроме того, реализованный метод исследования влияния количества зерен на результат расчета упругих свойств текстурованных материалов является полезным при определении напряжений дифракционными методами, которые имеют дело с ограниченным объемом материала.

**Автор защищает:**

1. Выводы о количественном влиянии метода восстановления ФРО из ПФ на определение упругих свойств текстурованных материалов.
2. Результаты исследования методов расчета упругих постоянных, используемых при определении напряженного состояния текстурованных материалов с помощью дифракции.
3. Модель твердого тела для количественного исследования влияния числа зерен в образце и распределения зерен по площадям на точность расчета упругих свойств поликристаллических материалов.

**Апробация диссертации.** Основные результаты диссертации были доложены на конференциях “Neutron Texture and Stress Analysis” (Дубна, 1997), “Twelfth International Conference on Textures of Materials” (ICOTOM-12, Монреаль, Канада, 1999), III открытой конференции молодых ученых и специалистов (ОИЯИ, Дубна, 1999), на конференции “Научная сессия МИФИ-99” (Москва, 1999).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1-8].

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитированной литературы. Работа содержит 120 страниц, включая 36 рисунков, 24 таблицы, 153 наименования литературы.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснованы актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи исследований, перечислены основные положения, выносимые на защиту. Показана научная новизна и практическая значимость полученных результатов, даны сведения об объеме и структуре диссертации, публикациях, апробации основных результатов диссертации на конференциях.

**В первой главе** дается обзор основных методов математического описания и экспериментального исследования текстур, их особенностей и возможностей.

**В параграфе 1.1** даны определения ориентации, ФРО, ПФ, приведено соотношение между ними, сформулирована основная задача количественного текстурного анализа.

Одним из важнейших понятий количественного текстурного анализа является понятие ориентации или вращений зерна (кристаллита). Ориентация кристаллита в поликристаллическом образце задается вращением  $g$ , посредством которого система координат образца  $K_A$  совмещается с системой координат кристаллита  $K_B$ . Как правило, ориентация математически описывается с помощью

углов Эйлера  $g \equiv \{\alpha, \beta, \gamma\}$ . Множество всех вращений трехмерного евклидова пространства (множество линейных преобразований евклидова пространства  $R^3$ , сохраняющих расстояние между точками пространства и не меняющее ориентацию этого пространства) является группой вращений, обозначаемой  $SO(3)$ . Текстура поликристаллического материала количественно описывается функцией распределения зерен по ориентациям (ФРО), которая представляет собой плотность вероятности обнаружить в образце кристаллит с ориентацией в окрестности  $dg$  некоторого элемента группы вращения  $g$  [1]:

$$f(g)dg = \frac{dV(g)}{V},$$

где  $dV(g)$  – совокупность объемов всех кристаллитов образца, имеющих ориентацию  $g$  в пределах элементарной области  $dg$ ,  $V$  – объем образца. ФРО как плотность вероятности должна быть неотрицательной. Условие нормировки для ФРО имеет вид:

$$\int_{SO(3)} f(g)dg = \frac{1}{8\pi^2} \int_{SO(3)} f(g) \sin \beta d\alpha d\beta d\gamma = 1.$$

Одним из методов нахождения ФРО является ее вычисление из экспериментально измеренных полюсных фигур (ПФ). Пусть  $\vec{y}$  – единичный вектор, описывающий некоторое направление в системе координат образца, а  $\vec{h}_i$  – единичный вектор, описывающий некоторое направление в системе координат кристаллита,  $dV(\vec{h}_i \parallel \vec{y})$  – объем зерен, у которых кристаллографическое направление  $\vec{h}_i$  параллельно направлению  $\vec{y}$  образца в пределах области  $[\vec{y}, \vec{y} + d\vec{y}]$ . Тогда полюсной фигурой называется функция  $P_{h_i}(\vec{y})$ , заданная на единичной сфере ( $\vec{y} \in S^2$ ) и удовлетворяющая условию [1]:

$$\frac{1}{4\pi} P_{h_i}(\vec{y}) = \frac{dV(\vec{h}_i \parallel \vec{y})}{V}.$$

Из определения следует неотрицательность ПФ, а также условие нормировки:

$$\int_{S^2} P_{h_i}(\vec{y}) d\vec{y} = 4\pi,$$

где  $d\vec{y} = \sin \chi d\chi d\eta$ ,  $(\chi, \eta)$  – сферические координаты  $\vec{y}$ . Математическая связь между ПФ  $P_{h_i}(\vec{y})$  и ФРО  $f(g)$  задается соотношением [2]:

$$P_{h_i}(\vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\{\vec{h}_i, \varphi\}^{-1} \{\vec{y}, 0\}) d\varphi, \quad (1)$$

при выводе которого использовалось следующее представление вращения  $g(\varphi) = \{\vec{h}_i, \varphi\}^{-1} \{\vec{y}, 0\}$ . При наличии кристаллической симметрии выражение (1) преобразовывается к следующему виду:

$$P_{h_i}^s(\vec{y}) = \frac{1}{M_B} \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{M_B} \int_0^{2\pi} f(\{g_{b_j} \cdot \vec{h}_i, \varphi\}^{-1} \{\vec{y}, 0\}) d\varphi = \frac{1}{M_B} \sum_{j=1}^{M_B} P_{h_j \cdot h_i}(\vec{y}), \quad (2)$$

где  $r_{b_j} \in R_B$ ,  $g_{b_j} \in G_B$ ,  $R_B = \{r_{b_j}, j=1, \dots, M_B\}$  - точечная группа симметрии кристаллита,  $G_B = \{g_{b_j}, j=1, \dots, N_B\}$  - ее подгруппа вращения. Уравнение (2) представляет собой математическую формулировку основной задачи количественного текстурного анализа, которая заключается в восстановлении ФРО  $f(g)$  из измеренных в эксперименте ПФ  $P_{h_j}(\bar{y})$ . Эта задача является некорректно поставленной, поскольку не имеет единственного решения. Неединственность решения возникает вследствие того, что ПФ, которые измеряются в дифракционном эксперименте (редуцированные ПФ) [2]:

$$\tilde{P}_{h_j}(\bar{y}) = \frac{1}{2} [P_{h_j}(\bar{y}) + P_{-h_j}(\bar{y})], \quad (3)$$

содержат неполную информацию о ФРО. Для решения задачи восстановления ФРО из ПФ разработан ряд методов. В работе рассматриваются некоторые методы решения основной задачи количественного текстурного анализа: метод Бунге-Роу, прямые методы (метод Имхофа, метод WIMV (Wenk, Imhof, Matthies, Vinel), ADC (Arbitrary Defined Cells) метод) и метод текстурных компонент. Приведены некоторые модельные распределения.

**В параграфе 1.2** приведено описание основных принципов и особенностей экспериментальных методов исследования текстур с использованием дифракции электронов, рентгеновских лучей и тепловых нейтронов. Также приведено описание текстурных спектрометров TEX-2 (GKSS, Geesthacht, Германия) [3] и HCBP (ОИЯИ, Дубна, Россия) [4], на которых был получен экспериментальный материал диссертации.

**Во второй главе** рассматриваются вопросы, связанные с исследованием влияния методов восстановления ФРО из ПФ на определение упругих свойств текстурованных материалов.

**В параграфе 2.1** рассмотрены основные способы описания упругих свойств монокристаллов, приведены результаты расчетов указательных поверхностей модуля Юнга для монокристаллов разных материалов с кубическими и гексагональными симметриями.

**В параграфе 2.2** даны основные определения и обзор методов усреднения свойств монокристалла с учетом текстуры, используемых в дальнейшем исследовании.

Под эффективным свойством материала  $\langle E \rangle$  понимается взаимосвязь между средним значением внешнего воздействия  $\bar{X}$  и реакцией на это воздействие со стороны поликристалла  $\bar{Y}$  [1]:

$$\langle E \rangle = \bar{E} + \frac{1}{V} \int_V \Delta E(\bar{r}) U(\bar{r}) dV, \quad (4)$$

где  $\bar{E}$  - среднее значение свойства,  $\Delta E(\bar{r})$  - его флуктуация в образце, а  $U(\bar{r})$  определяется флуктуацией воздействия в образце  $U(\bar{r}) = \frac{\Delta X(\bar{r})}{\bar{X}}$ . Среднее свойство  $\bar{E}$  поликристалла определяется арифметическим усреднением свойств

монокристаллов, слагающих поликристалл, с ФРО:  $f(g)dg = \frac{dV(g)}{V}$  в качестве весовой функции [1]:

$$\bar{E}_{i_1^0 j_1^0 j_2^0}^a = \frac{1}{V} \int E_{i_1^0 j_1^0 j_2^0}(\vec{r}) dV = \frac{1}{V} \oint E_{i_1^0 j_1^0 j_2^0}^0(g) \int_{V(g)} dV = \frac{1}{8\pi^2} \int E_{i_1^0 j_1^0 j_2^0}^0(g) f(g) dg, \quad (5)$$

где  $E_{i_1^0 j_1^0 j_2^0}^0(g)$  - свойство монокристалла, имеющего ориентацию  $g$ ,  $f(g)$  – ФРО.

Если добавочный член в выражении (4) мал по сравнению с  $\bar{E}$ , то справедливо следующее приближение  $\langle E \rangle \approx \bar{E}^a$ . Эта аппроксимация известна в теории упругости как аппроксимация Фойгта [5] и справедлива при условии однородности деформаций. Другое приближение, полученное в предположении однородности реакции на воздействие ( $Y=const$ )  $\langle E \rangle \approx (\bar{E}^{-1a})^{-1}$ , в теории упругости называется аппроксимацией Ройсса [6] и справедливо при условии однородности напряжений. Хиллом [7] предложено для улучшения совпадения с экспериментом искать величину  $\langle E \rangle$  как полусумму средних  $\bar{E}^a$  и  $(\bar{E}^{-1a})^{-1}$ .

**В параграфе 2.3** приводится описание и результаты исследования влияния метода восстановления ФРО на определение упругих свойств поликристаллов с кубической и гексагональной симметриями.

Это исследование проведено на примере двух образцов с кубической структурой, а также на примере образца с гексагональной структурой, вырезанного из листа цинка, подвергнутого прокатке. Текстура кубических образцов сформировалась в результате разных технологических операций: медный стержень был подвергнут экструзии, а образец, вырезанный из листа сплава АМГ6, подвергнут прокатке при комнатной температуре. Информация о текстуре была получена для всех образцов методом дифракции нейтронов. Для расчета полной ФРО использовались три метода: модификация гармонического метода *iterative series expansion method* (ISEM) [8], WIMV [2] и метод текстурных компонент [9]. Качество восстановления ФРО из экспериментальных полюсных фигур оценено с помощью *RP*-фактора:

$$RP_i = \sum_{j=1}^J 100\% \Theta[\varepsilon, P_{\bar{h}_i}(\bar{y}_j)] r_{ij} / \sum_{j=1}^J \Theta[\varepsilon, P_{\bar{h}_i}(\bar{y}_j)], \quad (6)$$

где

$$r_{ij} = \left| \frac{P_{\bar{h}_i}(\bar{y}_j) - P_{\bar{h}_i}^M(\bar{y}_j)}{P_{\bar{h}_i}(\bar{y}_j)} \right|,$$

$$\Theta(\varepsilon, x) = \begin{cases} 0, & x \leq \varepsilon \\ 1, & x > \varepsilon \end{cases}.$$

$P_{\bar{h}_i}^M(\bar{y}_j)$  в (6) – полюсная фигура, вычисленная по ФРО, восстановленной в соответствии с некоторым методом,  $P_{\bar{h}_i}(\bar{y}_j)$  – экспериментальные ПФ. Наименьшие *RP* факторы получены при восстановлении ФРО методом WIMV и методом ISEM. Однако ФРО, описывающая текстуру всех трех образцов, также может быть удовлетворительно восстановлена методом текстурных компонент (*RP* не превышает 22%). Несмотря на отрицательные значения на ФРО,



полученной методом ISEM для меди и сплава АМГ6, максимумы на полюсной фигуре, рассчитанной этим методом, находятся в хорошем соответствии с максимумами на экспериментальных полюсных фигурах. Появление отрицательных значений в минимуме на ФРО, восстановленной этим методом, можно объяснить эффектами, связанными с усечением ряда:

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l C_l^{mn} T_l^{mn}(g),$$

а также экспериментальными ошибками на полюсных фигурах. Обсуждая вопрос о разнице в значениях минимумов на ФРО, полученных разными методами, следует заметить, что согласно методу текстурных компонент фоновая компонента - это интенсивность, которая остается после выявления всех компонент текстуры. В методе WIMV концепция расчета с учетом фона реализована через "внешний" фоновый итерационный цикл (для случая фон  $\neq 0$ ) с выполнением основного требования положительности ФРО и принципа максимальности фона. Таким образом, процедура расчета с фоном в методе WIMV представляется более реалистичной, поскольку является свободной от субъективного фактора.

Средние упругие свойства  $E$  текстурованных материалов рассчитывались с помощью арифметического усреднения (5) свойств монокристаллов, слагающих поликристалл, с ФРО в качестве весовой функции. Расчеты были проведены в соответствии с аппроксимациями Ройсса, Фойгта и Хилла. Кроме того, была рассмотрена схема геометрического усреднения, которая обеспечивает равенство обратных свойств (жесткость  $C$ , упругая податливость  $S$ ) на макроскопическом уровне ( $\bar{S} = (\bar{C})^{-1}$ ) [10, 11]:

$$E^* = \exp(\overline{\ln E^a}) = \exp(\overline{WW^a} : \ln E^0), \quad (7)$$

$$\overline{WW^a}_{I,J,I',J'} = \int_G W(I, I', g) W(J, J', g) f(g) dg, \quad (8)$$

где  $W(I, I', g) = g_{i_1} g_{i_2}$ .

Рассчитаны указательные поверхности модуля Юнга для трех рассмотренных образцов в приближениях Ройсса, Фогта и Хилла с учетом ФРО, восстановленной разными способами. Кроме того, вычислены сечения указательных поверхностей в плоскости "направление прокатки - перпендикулярное направление" для образцов из цинка и сплава АМГ6, подвергнутых прокатке, и в плоскости перпендикулярной к направлению экструзии для медного образца. В случае образца из сплава АМГ6 результат расчета упругих свойств определяется в основном выбранным методом восстановления ФРО (рис.1). Аппроксимации Ройсса, Фогта и Хилла дают практически одинаковые результаты в случае усреднения с ФРО, рассчитанной методами ISEM и текстурных компонент. Разница между соответствующими компонентами тензора упругой податливости, вычисленного с тремя различными ФРО в аппроксимации Хилла, не превышает 2% для образца из сплава АМГ6. В этом случае мы рассматриваем материал, состоящий из монокристаллов со слабой анизотропией упругих свойств (для модуля Юнга  $E_{\max}/E_{\min} = 1.2$ ).

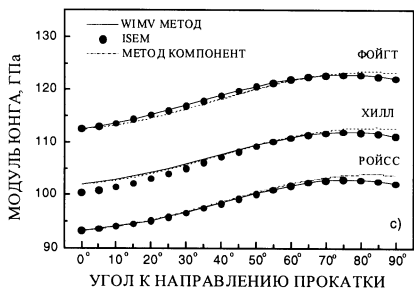
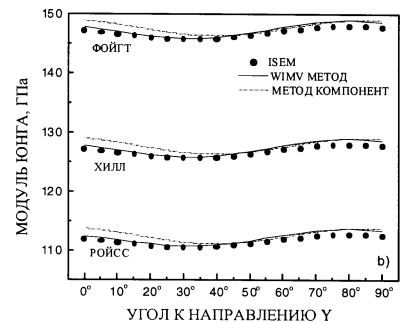
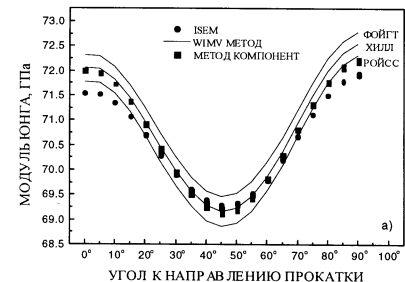


Рис.1. Модули Юнга, вычисленные в аппроксимациях Фойгта, Ройсса и Хилла с ФРО, восстановленной методами ISEM, WIMV и текстурных компонент для а) листа из сплава АМГ6, б) для медного стержня в плоскости перпендикулярной направлению экструзии, в) для цинкового

Малость погрешностей вычисления коэффициентов податливости (“вилка”

$$\text{Фойгта-Ройсса } \delta S_{ij}^{\text{ФР}} = \frac{S_{ij}^{\text{Ф}} - S_{ij}^{\text{Р}}}{\min(|S_{ij}^{\text{Ф}}|, |S_{ij}^{\text{Р}}|)}$$

не превышает 1.3%) позволяет сделать вывод о правомерности использования для таких материалов приближений, основывающихся на арифметическом усреднении.

Результаты расчетов упругих свойств, полученные для медного и цинкового образцов с ФРО, восстановленной тремя методами, очень близки и зависят главным образом от использованной модели усреднения (рис. 1). Разница между соответствующими компонентами тензора упругой податливости, вычисленного с тремя различными ФРО в аппроксимации Хилла для медного образца, не превышает 6%, а для цинкового образца - 2%. Таким образом, анизотропия модуля Юнга может быть удовлетворительно описана любым из трех методов расчета ФРО в случае материала, состоящего из монокристаллов с сильной анизотропией упругих свойств (для модуля Юнга меди  $E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 2.87$ , цинка -  $E_{\text{max}}/E_{\text{min}} = 3.31$ ). Поскольку результаты расчетов, проведенных в соответствии с аппроксимациями Ройсса и Фойгта сильно отличаются друг от друга - “вилка” Фойгта-Ройсса достигает 48% - для вычисления упругих свойств рассмотренных медного и цинкового образцов необходимо использовать модели геометрического среднего и Хилла, более строго отражающие реальность,

чем аппроксимации Фойгта и Ройсса. В проведенном исследовании рассчитывались полные тензоры упругих свойств, зная которые вычислялся модуль Юнга. Однако часто в задачах требуется знать только модуль Юнга материала.

**В параграфе 2.4** реализован метод расчета модуля Юнга для кубических материалов, использующий представление ФРО в виде суммы гауссовских распределений. Одним из преимуществ этого метода восстановления ФРО перед другими методами является возможность описания текстуры небольшим количеством параметров (амплитуда, положение максимумов, полуширина распределения), имеющих физический смысл.

Для расчета модуля Юнга поликристаллического материала достаточно усреднить свойства монокристаллов не с ФРО, а с функцией  $A(\vec{h}, \vec{y})$ , которая представляет собой обратную ПФ:

$$\langle E(\vec{y}) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} E(\vec{h}) A(\vec{h}, \vec{y}) d\vec{h}, \quad (9)$$

где  $A(\vec{h}, \vec{y})$  - функция распределения осей:

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}|\vec{y}} f(g) dg. \quad (10)$$

В этом случае не требуется решать сложную задачу восстановления ФРО из ПФ. Для вывода выражения для обратного значения модуля Юнга кубического поликристалла использовано представление модуля Юнга монокристалла указательной поверхностью и представление тензора упругой податливости кубического монокристалла в следующей форме:

$$S_{ijkl} = (S_i^4 + 2S_i^{22})\delta_{ij}\delta_{kl}/3 + (S_i^4 - S_i^{22})(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})/3 + S_N^4 N_{ijkl}^0, \quad (11)$$

где  $N_{ijkl}$  – единичный тензор кубической симметрии, который имеет в кристаллофизической системе координат компоненты:

$$\begin{aligned} & 1, \quad \text{при } i=j=k=l \\ N_{ijkl} &= -1/2, \quad \text{при двух парах равных индексов} \\ & 0, \quad \text{в остальных случаях.} \end{aligned}$$

Коэффициенты разложения (10) рассчитываются по формулам:

$$\begin{aligned} S_i^4 &= (3S_{11} + 2S_{12} + S_{44})/5, & S_i^{22} &= S_{12} - S_{44}/4, \\ S_N^4 &= (2S_{11} - 2S_{12} - S_{44})/5. \end{aligned} \quad (12)$$

Если ФРО задана в виде суммы гауссовских распределений:

$$f(g) = \sum_{k=1}^N M_k f(g, g_{ok}, \varepsilon_k) = \sum_{k=1}^N M_k \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-l(l+1)\varepsilon_k^2) \frac{\sin((l+\frac{1}{2})t_k)}{\sin(t_k/2)}, \quad (13)$$

где  $N$  – число компонент текстуры,  $M_k$  – вес  $k$ -ой компоненты,  $g_{ok}$  – “центр”  $k$ -ой компоненты,  $\varepsilon_k$  – параметр, характеризующий степень рассеяния ориентаций вокруг центра компоненты,  $t_k$  – угловое расстояние между ориентациями  $g$  и  $g_{ok}$ , определяемое выражением  $\cos t_k = [Tr(g_0 \cdot g^{-1}) - 1]/2$ , имеем следующее выражение для обратного значения модуля Юнга кубического поликристалла:

$$\langle E^{-1}(\vec{y}) \rangle = S_i^4 + n S_N^4 \sum_{k=1}^N M_k \exp(-20\varepsilon_k^2) k_4^1(g_{ok}, \vec{y}), \quad (14)$$

где  $k_4^1$  - кубическая сферическая функция,  $n = \sqrt{16\pi/21}$  - нормировочный множитель.

Проведено сравнение указательных поверхностей модуля Юнга и их сечений в плоскости прокатки, вычисленных для образца из прокатанного листа сплава АМГ6 в соответствии с методиками, использованной в параграфе 2.3 (определение указательной поверхности модуля Юнга из полного тензора упругих податливостей поликристалла) и описанной в данном параграфе. Разница в полученных результатах не превышает 0.4%, при этом последний метод требует гораздо меньшего количества вычислений.

**В главе 3** исследуются методы расчета упругих постоянных, используемых при определении напряженного состояния текстурованных материалов с помощью дифракции, т.е. констант, в расчетах которых учитываются ориентации только тех кристаллитов, которые удовлетворяют условию дифракции:

$$n\lambda = 2d_h \sin \theta ,$$

где  $d_h$  – межплоскостные расстояния отражающих плоскостей,  $\theta$  - угол между падающим пучком и отражающей плоскостью,  $n$  – порядок отражения,  $\lambda$  - длина волны нейтрона или рентгеновского излучения.

**В параграфе 3.1** дается краткое описание основных принципов дифракционного эксперимента по определению деформаций, а также вводится понятие “дифракционных” упругих постоянных изотропного материала как некоторых комбинаций модуля Юнга  $E$  и коэффициента Пуассона  $\nu$ , входящих в основное уравнение дифракционного “стресс”- анализа [12]:

$${}^L \varepsilon_{\varphi\psi} = \frac{1}{2} S_2 (\sigma_{xx} \cos^2 \varphi \sin^2 \psi + \sigma_{yy} \sin^2 \varphi \sin^2 \psi + \sigma_{zz} \cos^2 \psi + \sigma_{xy} \sin 2\varphi \sin^2 \psi + \sigma_{xz} \cos \varphi \sin 2\psi + \sigma_{yz} \sin \varphi \sin 2\psi) + S_1 (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \quad (15)$$

В (19)  $\frac{1}{2} S_2$ ,  $S_1$  – “дифракционные” упругие постоянные:

$$\frac{1}{2} S_2 = \frac{1+\nu}{E}, \quad S_1 = -\frac{\nu}{E}. \quad (16)$$

Далее дано описание некоторых методов расчета этих постоянных для изотропных материалов, а также метод Фойгта для текстурованных материалов.

**В параграфе 3.2** рассматривается метод Ройсса расчета “дифракционных” упругих постоянных текстурованных материалов. Пусть  $y$  задает ориентацию образца в системе координат  $K_A$  и совпадает с вектором рассеяния  $\vec{Q}$  частиц, используемых для облучения образца,  $\vec{h}_i$  - нормали к рассеивающим плоскостям, заданные в кристаллической системе координат  $K_B$ . Тогда ориентации зерен, удовлетворяющих условию дифракции ( $\vec{h}_i \parallel \vec{y}$ ), принадлежат одномерному пути  $g_p$  в трехмерном ориентационном пространстве:

$$g_p(\varphi) = \{\vec{h}_i, \varphi\}^{-1} \{\vec{y}, 0\} \in g_p, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \quad (17)$$

Деформация, измеренная в лабораторной системе координат  $K_L$ , зависит от деформаций зерен с ориентациями, которые принадлежат  $g_p$ , усредненных с частотой появления этих ориентаций в образце (с ФРО) в качестве весовой функции. Выражение для тензора “дифракционных” упругих постоянных

поликристалла  ${}^L S_{33mn}(\vec{h}_i, \vec{y})$  в аппроксимации Ройсса (напряжения в каждом зерне одинаковы и равны напряжению, приложенному к поликристаллу, т.е.  $\sigma$  не зависит от  $g_p$ ) имеет вид [13]:

$${}^L S_{33mn}(\vec{h}_i, \vec{y}) = \frac{1}{4\pi\tilde{P}} \int_0^{2\pi} \left[ \begin{matrix} \{+\}_{3r} \{+\}_{3u} \{+\}_{mv} \{+\}_{nw} f(\{+\}^{-1} \cdot \{\vec{y}, 0\}) \\ + \{-\}_{3r} \{-\}_{3u} \{-\}_{mv} \{-\}_{nw} f(\{-\}^{-1} \cdot \{\vec{y}, 0\}) \end{matrix} \right] d\varphi S_{ruvw}^0, \quad (18)$$

где  $\tilde{P}$  - редуцированная полюсная фигура [2],  $g_p^{BL}(\varphi) = \{+\vec{h}_i, \varphi\} \equiv \{+\}$ ,  $g_p^{BL}(\varphi) = \{-\vec{h}_i, \varphi\} \equiv \{-\}$ ,  $S^0$  - тензор упругой податливости монокристалла. Запись (22) с помощью введенных Маттизом “моментов полюсных фигур” [13]:

$$J_q = \int_0^{2\pi} M_q(\varphi) f(\{\vec{h}_i, \varphi\}^{-1} \cdot \{\vec{y}, 0\}) d\varphi / (2\pi\tilde{P}), \quad (19)$$

где  $M_0 = 1, M_1 = \cos \varphi, M_2 = \sin \varphi, M_3 = \cos 2\varphi, M_4 = \sin 2\varphi$ ;  $\tilde{P}$  - редуцированная полюсная фигура - позволяет упростить выражение (22) и выявить некоторые свойства  ${}^L S_{33mn}(\vec{h}_i, \vec{y})$ . Например, оказывается, что  ${}^L S_{33mn}(\vec{h}_i, \vec{y})$  для  $\vec{h}_i = (001)$  и  $\vec{h}_i = (111)$  не зависит от текстуры в приближении Ройсса для материалов с кубической симметрией [13]. Кроме того,  ${}^L S_{3333}(\vec{h}_i, \vec{y})$  не зависит от текстуры в приближении Ройсса для материалов всех симметрий и для любых  $\vec{h}_i$ .

Представляя ФРО рядом по обобщенным сферическим функциям, имеем следующее выражение для “моментов полюсных фигур”:

$$J_q(\vec{h}_i, \vec{y}) = \frac{1}{\tilde{P}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(l)N(l)} \sum_{\nu=1}^l C_l^{\mu,\nu} \bar{D}_l^{\mu,\nu}(\{\vec{h}_i, 0\}) \bar{D}_l^{\nu,p}(\{\vec{y}, 0\}) T_q(s, p), \quad (20)$$

где  $T_0 = \delta_{s,p} \delta_{p,0}$ ,  $T_1 = \delta_{s,p} [\delta_{p,1} + \delta_{p,-1}]$ ,  $T_2 = \delta_{s,-p} [\delta_{p,1} - \delta_{p,-1}]$ ,  $T_3 = \delta_{s,p} [\delta_{p,2} + \delta_{p,-2}]$ ,  $T_4 = \delta_{s,-p} [\delta_{p,2} - \delta_{p,-2}]$ . Из последнего соотношения видно, что для расчета “моментов полюсных фигур”, а следовательно и “дифракционных упругих постоянных” требуется полная ФРО (т.е. и “четная”, и “нечетная” части), причем необходимы все коэффициенты разложения ФРО по обобщенным сферическим функциям, а не только с  $l \leq 4$ , как в случае “bulk” свойств, т.е. свойств, при расчете которых учитываются ориентации всех кристаллитов, присутствующих в материале.

**В параграфе 3.3** рассматриваются преимущества и недостатки моделей геометрического усреднения для расчета “дифракционных” упругих постоянных текстурованных материалов [14]:

“pathgeo”:

$${}^L S^{p, GEO} = \exp\{\overline{WW}^p : LnS^0\}, \text{ где} \quad (21)$$

$$\overline{WW}^p(i_1 i_2, j_1 j_2; i_1' i_2', j_1' j_2') = \int_0^{2\pi} W(i_1 i_2, i_1' i_2'; g_p(\varphi)) W(j_1 j_2, j_1' j_2'; g_p(\varphi)) f(g_p(\varphi)) d\varphi / \int_0^{2\pi} f(g_p(\varphi)) d\varphi. \quad (22)$$

“*bulkpathgeo*”:

$$L \bar{S}^p = L S^{GEO} [L \bar{S}^p]^{-1} L S^{p,GEO}, \quad (23)$$

где  $L S^{GEO}$  это тензор упругих податливостей, рассчитанный путем геометрического усреднения свойств кристаллитов всех ориентаций (“*bulk*” свойства - (см. (7)), заданный в  $K_L$ .

В параграфе 3.4 дается описание эксперимента на одноосное растяжение, в результате которого была измерена в упругой области кривая деформирования медного образца с сильной текстурой, сформировавшейся в результате экструзии.

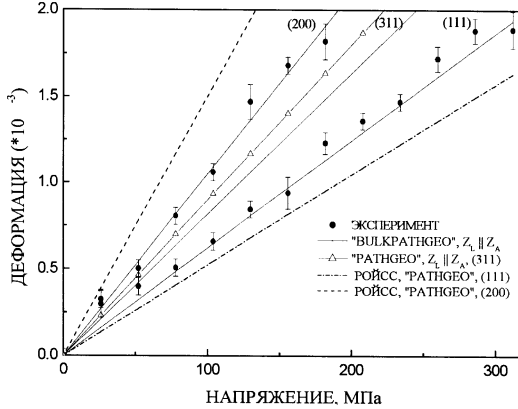


Рис. 2. Кривые деформирования медного образца, измеренные в упругой области методом дифракции нейтронов и вычисленные в аппроксимации Ройсса для плоскостей (111) и (200) и в рамках моделей “*pathgeo*” и “*bulkpathgeo*” для плоскостей (111), (200), (311).

Нагрузка задавалась с помощью нагружающего устройства, установленного на пучке нейтронов текстурного спектрометра TEX-2, а деформация измерялась методом дифракции нейтронов на этом спектрометре. Эта же кривая была рассчитана с учетом “дифракционных” упругих постоянных, вычисленных в приближении Ройсса, а также с использованием моделей геометрического усреднения “*pathgeo*” и “*bulkpathgeo*”. Модель “*bulkpathgeo*”, учитывающая влияние всех зерен на деформацию определенного их набора, удовлетворяющего условию дифракции, дает результаты наиболее близкие к экспериментальным (рис. 2). Разница между результатами расчета в рамках этой модели и экспериментом не превышает 3%, в то время как для наиболее используемого в настоящее время метода Ройсса она составляет 30%.

В четвертой главе исследуется влияние количества зерен, а также распределения зерен по объемам (площадям) на точность расчета упругих свойств поликристаллических материалов.

В параграфе 4.1 описываются основные принципы моделирования двумерной зеренной структуры с использованием подхода Вороного [15]. Согласно этому подходу сначала случайным образом в пространстве выбирается

набор точек (генераторов)  $S: P_1, P_2, \dots, P_N$ . Далее пространство разбивается на ячейки (зерна)  $C_1, C_2, \dots, C_N$  в соответствии с правилом: для каждой точки  $P_i$  ячейка  $C_i$  представляет собой набор всех точек пространства более близких к точке  $P_i$ , чем к другим  $N-1$  точкам  $P_j$  ( $j \neq i$ ) (рис.3). Применение подхода Вороного для моделирования микроструктуры твердого тела требует введения следующих предположений относительно процесса кристаллизации:

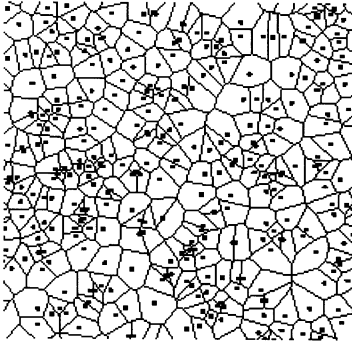


Рис. 3. Пример двумерной диаграммы Вороного.

1. Все зерна начинают расти из центров роста одновременно;

2. Скорость роста зерен во всех направлениях одинакова;

3. Положение центров роста зерен фиксировано в пространстве и не изменяется при достижении контакта между границами соседних зерен.

Вводится связанное с разбиением Вороного понятие триангуляции Делоне. Дается описание алгоритма построения Делоне, используемого в настоящей работе. Этот алгоритм базируется на построении выпуклой оболочки набора точек (генераторов) методом "Разделяй и властвуй" и является наиболее эффективным с точки зрения скорости и количества сохраняемой информации. Количество операций этого алгоритма определяется как  $O(n \log n)$ . Приведены примеры построения триангуляции Делоне и диаграммы Вороного на плоскости для 5000 генераторов (центров роста зерен), координаты которых являются случайными равномерно распределенными величинами, а также случайными величинами, распределенными в соответствии с нормальным и экспоненциальным законами.

Для смоделированных двумерных микроструктур определены распределения зерен по площадям, которые качественно хорошо согласуются с экспериментальными, полученными EBSD (Electron Backscattered diffraction) методом.

**В параграфе 4.2** приведен расчет упругих свойств изотропных и текстурированных материалов с учетом количества зерен в образце, а также оценка ошибки определения этих свойств, обусловленная ограниченным количеством зерен. Назовем ФРО, которые описывают распределение ориентаций бесконечно большого числа зерен  $f^c(g)$  и соответствующие им полюсные фигуры  $P_h^c(y)$  "непрерывными". Если образец содержит  $N$  зерен, то он может быть описан "дискретной" ФРО  $f^d(g, N)$ , которая представляется суммой по отдельным ориентациям (без рассмотрения симметрии кристалла):

$$f^d(g, N) = \frac{1}{V} \sum_{n=1}^N V_n \delta(gg_n^{-1}), \quad V = \sum_{n=1}^N V_n, \quad \frac{1}{8\pi^2} \int_{SO(3)} \delta(gg_n^{-1}) dg = 1, \quad (24)$$

т.е. выражена через сумму  $\delta$ -функций на  $SO(3)$ .

Свойства поликристалла с ФРО, записанной в соответствии с (24), могут быть найдены следующим образом в предположении об одинаковом объеме зерен  $V_n = V_0 = V/N, n=1, \dots, N$ :

$$E_{ijkl} = \sum_{n=1}^N E_{ijkl}(g) f^d(g, \mathbf{N}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E_{ijkl}(g_n), \quad (25)$$

где  $E_{ijkl}(g_n)$  - свойство кристаллита (монокристалла) с номером  $n$ . Для исследования влияния количества зерен на определение свойств текстурированного материала была смоделирована совокупность индивидуальных ориентаций (трехмерных вращений)  $g_n \in SO(3)$  для набора зерен  $N$ , которая отвечает закону распределения, порождаемому броуновским движением на  $SO(3)$  [16]. Равномерное распределение ориентаций дает модель изотропного тела.

Пусть  $t$  - последовательность элементарных вращений на малый угол  $\Lambda$  вокруг оси со случайным направлением, и броуновское движение начинается с фиксированной ориентации  $g = \{0^\circ, 0^\circ, 0^\circ\}$ ,  $g \in SO(3)$ , тогда  $\rho_t(\vec{r})$  - плотность распределения вероятности для точки иметь координаты  $\vec{r} \in S^3 \subset \mathfrak{R}^4$  ( $S^3$  - единичная сфера четырехмерного евклидова пространства  $\mathfrak{R}^4$ ) после  $t$  вращений при предельных условиях  $t \rightarrow \infty$ ,  $\Lambda \rightarrow 0$ ,  $\Lambda^2 t \rightarrow const$ :

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{-l(l+1)D\} \frac{\sin\left((2l+1)\frac{\omega}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)}, \quad D = \frac{\Lambda^2 t}{6}, \quad (26)$$

где  $D$  - параметр, характеризующий остроту распределения (остроту текстуры). Моделировались однокомпонентные текстуры - одна гауссовская компонента типа (30) с центром  $g = \{0^\circ, 0^\circ, 0^\circ\}$  и параметрами рассеяния  $D = 0.042$  ( $HWHM=19.7^\circ, \Lambda_0 = 0.025, t_0=400$ ) и  $D = 0.0192$  ( $HWHM=13.6^\circ, \Lambda_0 = 0.012, t_0=800$ ). Модуль Юнга рассчитывался как среднее значение результатов расчета для десяти статистических реализаций алгоритма генерирования совокупности индивидуальных ориентаций. Далее оценена разница между результатами этого расчета и результатами, полученными в предположении бесконечного числа зерен (ошибка вычисления упругих свойств) для изотропных и текстурированных (рис. 4 - расчет N1) материалов с кубической и гексагональной симметриями.

**В параграфе 4.3** рассмотрено влияние распределения зерен по объемам (площадям) на ошибку определения упругих свойств изотропных и текстурированных материалов.

В этом случае свойства поликристалла из  $N$  зерен, текстура которого характеризуется ФРО  $f^d(g, N)$  (24), находятся следующим образом:

$$E_{ijkl} = \sum_{n=1}^N E_{ijkl}(g) f^d(g, N) = \frac{1}{V} \sum_{n=1}^N E_{ijkl}(g_n) V_n, \quad (27)$$

где  $V$  - объем поликристалла,  $V_n$  - объем  $n$ -ого кристаллита,  $E_{ijkl}(g_n)$  - свойство кристаллита (монокристалла) с номером  $n$ .



Распределение зерен по площадям получено из моделирования двумерных микроструктур с использованием подхода Вороного. Показано, что учет этого распределения приводит к увеличению ошибки определения упругих свойств (рис. 4).

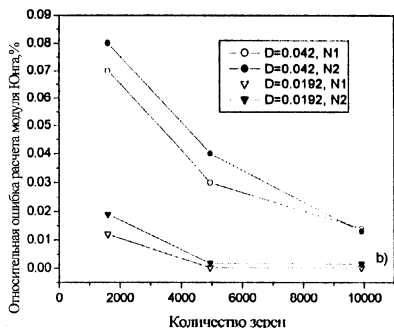
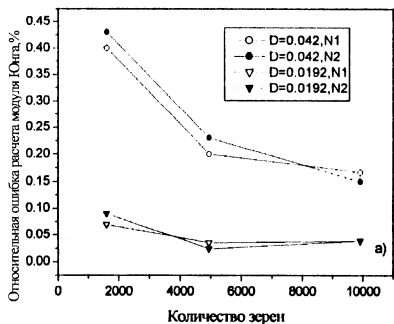


Рис. 4. Зависимость от числа зерен относительной ошибки вычисления модуля Юнга, рассчитанного для двух моделей текстур с учетом (расчет N2) и без учета (расчет N1) распределения зерен по площадям для а) меди, б) цинка.

Расчет проведен на примере меди и цинка. Изменение ошибок становится пренебрежимо малым при количестве зерен  $N > 8000$  для меди и  $N > 10000$  для цинка для менее острой текстуры ( $D=0.042$ ) и при  $N > 4000$  для меди и  $N > 5000$  для цинка для более острой текстуры ( $D=0.0192$ ).

Поскольку модуль Юнга был определен как среднее арифметическое результатов расчета десяти независимых реализаций алгоритма построения диаграммы Вороного и алгоритма генерирования совокупности индивидуальных ориентаций (трехмерных вращений), то результат расчета не зависит от статистической реализации этих алгоритмов. Кроме того, установлено, что результат расчета слабо зависит от распределения случайных точек (центров роста зерен) на плоскости.

**В заключении** изложены основные выводы диссертационной работы:

1. Показано, что результат расчета упругих свойств зависит в основном от выбранного метода восстановления ФРО для материалов со слабой анизотропией упругих свойств монокристалла и в большей степени от выбранного способа усреднения свойств монокристаллов для материалов с сильной анизотропией упругих свойств монокристалла.
2. Реализован метод расчета модуля Юнга кубических текстурированных поликристаллических материалов, использующий представление ФРО в виде суммы круговых гауссовских распределений на группе вращений  $SO(3)$ . Метод не требует большого количества численных вычислений и дает возможность представить явно модуль Юнга поликристалла через упругие

свойства монокристалла и параметры гауссовского распределения, которые являются параметрами текстуры.

3. Показано, что из методов расчета упругих постоянных, используемых при определении напряженного состояния текстурированного материала с помощью дифракции, наиболее точно описывает упругое поведение материала модель "bulkpathgeo", поскольку она не только обеспечивает равенство "обратных свойств" в случае поликристалла, но и учитывает влияние всех зерен материала.
4. Разработана модель твердого тела, позволяющая определять минимальный объем поликристаллического материала, необходимый для прогноза его упругих свойств с требуемой заданной точностью, в зависимости от ФРО.
5. Показано, что учет распределения зерен по площадям приводит к увеличению относительной ошибки определения модуля Юнга изотропных и текстурированных материалов (на примере модельных текстур). Приведена оценка величины этого эффекта для меди и цинка. Изменение ошибок становится пренебрежимо малым при количестве зерен  $N > 8000$  для меди и  $N > 10000$  для цинка для одной из рассмотренных моделей текстуры.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Lychagina T.A., Brokmeier H.-G., Some practical results for calculating elastic properties of textured cubic polycrystals. *Physica status solidi (a)*, Vol. 184, No. 2, pp.373-380 (2001)
2. Lychagina T.A., Brokmeier H.-G., Practical aspects of calculating elastic properties of textured hexagonal polycrystals. *Proceedings of the Twelfth International Conference on Textures of Materials (ICOTOM-12)*, Editor Szpunar J.A., Montreal, Quebec, Canada. NRC Research Press, Ottawa, Canada, Vol. 1, pp.541-546 (1999)
3. Lychagina T.A., Nikolayev D.I., Influence of the texture on the Al-6%Mg alloy deformation. *Texture and Microstructure*, Vol. 33/1-4, pp.111-123 (1999)
4. Lychagina T.A., Brokmeier H.-G. The example of texture influence in stress analysis. Препринт ОИЯИ Е14-2002-50, *Materials Science Forum* (в печати)
5. Lychagina T.A., Nikolayev D.I., Model investigation of the grain number to apply quantitative texture analysis averaging. Препринт ОИЯИ Е14-2002-49, *Physica Status Solidi* (в печати)
6. Т.А.Лычагина, Практические аспекты расчета упругих свойств текстурированных гексагональных поликристаллов, сборник трудов III конференции молодых ученых и специалистов, Дубна, ОИЯИ, с.106-109 (1999)
7. D.I.Nikolayev, V.V.Luzin, T.A.Lychagina, A.A.Dzjuba, V.A.Kogan and T.Te.Nijenhuis, X'pert texture: Overview of a software package for quantitative texture analysis. *Proceedings of the Twelfth International Conference on Textures of Materials (ICOTOM-12)*, Editor Szpunar J.A., Montreal, Quebec, Canada. NRC Research Press, Ottawa, Canada, Volume 1, pp.241-246 (1999)

8. Т.А.Лычагина, Х.-Г. Брукмайер, Исследование влияния ошибки установки образца на определение текстуры медного стержня методом дифракции нейтронов. Научная сессия МИФИ-99, сборник трудов, том 3, с.131-132

*Цитируемая литература*

- [1] Bunge H. J., "Texture Analysis in Material Science", Butterworths, London, 1982, 593 с.
- [2] Matthies S., Vinel G.W., Helming K., "Standard Distributions in Texture Analysis", Akademie-Verlag Berlin, 1987, v. 1-3.
- [3] H.-G. Brokneier, U. Zink, R. Schnieber and B. Witassek, Tex-2, Texture analysis at GKSS research center (Instrumentation and application), Materials Science Forum, v. 273-275, 277-282 (1998)
- [4] Вальтер К., Исаков Н.Н., Никитин А.Н., Уллемайер К., Хайнитц Й., "Исследование текстурного строения геоматериалов дифракционным методом с помощью нейтронного спектрометра высокого разрешения в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка", Физика Земли, №6, с. 37-44, (1993)
- [5] Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik. Teubner Verlag, Leipzig (1928)
- [6] Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. Z. Angew. Math. Mech., 9, 49-58 (1929)
- [7] Hill R., The elastic behaviour of crystalline aggregate. Proc. Phys. Soc. A65, 349- 354 (1952)
- [8] Dahms M., Bunge H.J., "The Iterative Series-Expansion Method for Quantitative Texture Analysis. I. General Outline", J. Appl. Cryst., 22, 439 (1989)
- [9] Савелова Т.И., "Функции распределения зерен по ориентациям в поликристаллах и их гауссовские приближения", Заводская лаборатория, т. 50(4), с. 48-52. (1984)
- [10] Александров К.С., Айзенберг Л.А. Способ вычисления физических констант поликристаллических материалов. Доклады АН СССР, 167, 1028-1031 (1967)
- [11] Matthies S., Humbert M. On the Principle of a Geometric Mean of Even-Rank Symmetric Tensors for Textured Polycrystals. J. Appl. Cryst., v. 28, 254-266 (1995)
- [12] Noyan I. C., Cohen J. B. Residual Stress. Measurement by Diffraction and Interpretation, Material Research Engineering, Springer-Verlag, 1987
- [13] Matthies S. Moment Pole Figures in Residual Stress Analysis. Textures and Microstructures, v. 25, 229 (1996)
- [14] Matthies S., Humbert M., Schuman Ch. On the Use of the Geometric Mean Approximation in Residual Stress Analysis, phys.stat.sol.(b), v. 186, K41(1994)
- [15] Препарата Ф., Шеймос М. Вычислительная геометрия: Введение/ Пер. с англ.- М. Мир, 1989, 478 с.
- [16] Roberts P.H., Winch D.E. On Random Rotations. Adv. Appl. Prob., 16, 638-655 (1984)

Получено 11 апреля 2002 г.

Макет *Н. А. Киселевой*

ЛР № 020579 от 23.06.97.

Подписано в печать 12.04.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,25. Уч.-изд. л. 1,24. Тираж 100 экз. Заказ № 53229.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.