Determination of Residual Stress Tensor in Textured Rolled Steel

URČENÍ TENZORU MAKROSKOPICKÉ ZBYTKOVÉ NAPJATOSTI V TEXTUROVANÉ VÁLCOVANÉ OCELI

Jiří Čapek¹, Zdeněk Pala¹, Martin Černík²

¹Katedra inženýrství pevných látek, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze
²U. S. Steel Košice, s.r.o., Slovensko

Keywords: residual stresses, texture, Winholtz-Cohen method

Abstract

The goal of this contribution was to choose an appropriate method for the calculation of macroscopic stress tensor in textured steel material and subsequently put forward a procedure of diffraction data acquisition and evaluation. The main result of the work done is *stress.m* program using a method of calculation of anisotropic elastic constants as a weighted average between single-crystal and X-ray elastic constants. This model method is suitable only for materials with very strong or very weak texture. Hence, we used the *stress.m* program in order to determine macroscopic stress tensor in a strongly textured rolled steel sample. Considering a presence of texture, shear stresses stayed unchanged within the experimental inaccuracies, values of compressive normal stresses 11 and 22 increased by approximately 40 MPa and the value of component of stress tensor 33 decreased to zero.

Abstrakt

Cílem této práce bylo vybrat vhodnou metodu pro výpočet tenzoru makroskopické zbytkové napjatosti v texturovaném ocelovém materiálu a následně navrhnout postup měření i vyhodnocení difrakčních dat. Hlavním výsledkem je program stress.m, využívající metody výpočtu anizotropních elastických konstant jako vážený průměr mezi monokrystalickými a rentgenografickými elastickými konstantami. Tato modelová metoda je ovšem vhodná pouze pro velmi silně, nebo velmi slabě texturované materiály. Program stress.m byl proto aplikován pro výpočet tenzoru napětí v silně texturovaném válcovaném ocelovém vzorku. Výsledkem bylo, že pokud se přihlédlo k přítomnosti textury, smyková napětí zůstala v rámci chyby nezměněná, tlaková normálová napětí 11 a 22 se zvýšila cca o 40 MPa a hodnota složky tenzoru napětí 33 se snížila v rámci chyby na statisticky nevýznamnou.

1. Úvod

Určení stavu zbytkové napjatosti v pevných látkách rentgenovou difrakcí představuje příkladné využití fyzikálního inženýrství, tedy aplikaci fyzikálních metod na řešení inženýrské problematiky. Problematika reálné struktury pevných látek nabývá v posledních letech na aktuálnosti, neboŢ je úzce spojena s poruchami v materiálu. Textura neboli přednostní orientace je často skloňovaným pojmem v různých oblastech průmyslu. Její význam je značný, jelikož při její existenci má materiál v různých směrech různé vlastnosti.

Většina doposud v praxi využívaných metod difrakčních měření a algoritmů výpočtu zbytkových napětí předpokládá ideální případ izotropního polykrystalického materiálu, což není splněno v případě existence krystalografické textury neboli přednostní orientace. Vzhledem k relativně častému výskytu přednostní orientace nejen v kovových materiálech je více než žádoucí mít k dispozici metodu, postup a případně též výpočetní program pro korektní určení zbytkových napětí. Ovšem každá metoda má určité meze použitelnosti.

2. Teorie/experiment

V praxi se s ideálně polykrystalickým materiálem téměř nelze setkat. Většina polykrystalických materiálů má v určitém směru orientovaný větší počet krystalitů než v ostatních (tj. určitý krystalografický směr v krystalitech je přednostně orientován vůči geometrickému směru ve vzorku). Texturovaný materiál si lze proto představit jako mezistupeň uspořádání krystalitů neboli stav mezi polykrystalickým a monokrystalickým charakterem pevné látky.

Při vytváření programu *stress.m*, viz obr. 1, na výpočet stavu zbytkové napjatosti v texturovaných materiálech bylo čerpáno z [1], kde H. Dölle uvádí vztah pro určení XSF konstant (X-ray stress factor – anizotropní elastické konstanty):

$$R_{ij}(hkl, ,) = \frac{{}^{i}r_{ij}(hkl) - {}^{a}(s_{33ij})}{{}^{i} - {}^{a}}, \qquad (1)$$

kde R_{ij} jsou XSF konstanty závislé na *hkl* a úhlech , . Dále ^{*i*} (resp. ^{*a*}) je objemový podíl netexturované (resp. texturované) složky ve vzorku, r_{ij} jsou kombinace XEC konstant (X-ray elastic constants – rentgenografické elastické konstanty) vypočítané na základě některého ze zvolených modelů a jsou monokrystalické elastické konstanty v laboratorní souřadné soustavě *L*, váhově průměrované přes ideální orientace.

Váha se určuje z naměřených PPO (přímých pólových obrazců), konkrétněji z relativních intenzit jednotlivých náklonů a rotací vzorku, které jsou zvoleny na základě známých ideálních orientací rovin $\{211\}$ železa, viz [2] str. 191. Převod konstant z laboratorní souřadné soustavy *L*, která je spojena s difraktujícími krystality, do soustavy souřadné vzorku *S* je podrobně popsán v [1, 3].

Pro takto zvolený postup je nutností splnit určitou podmínku, při jejíž zanedbání chyba výpočtu rapidně roste. Jedná se o limitní případy textury. Buď musí být přítomen



Obrázek 1. Grafické prostředí programu stress.m.

malý počet silných reflexí (tedy přítomnost silné a ostré textury), nebo samozřejmě naopak vzorek bez textury (nebo s velmi slabou).

Samotný výpočet tenzoru zbytkových napětí se provádí dle zobecněné napěťové rovnice (2) *metodou Winholtze-Cohena* [4],

$$R_{ij}(hkl, ,)_{ij}.$$

$$(2)$$

Program *stress.m*, viz obr. 1, vyžaduje výběr mezi texturovaným a netexturovaným kubickým materiálem, zadání monokrystalických a XEC konstant. Existuje možnost zadat výpočet XEC konstant pomocí lineárních elastických metod (*Reussova, Voigtova* nebo *Eshelbyho-Krönerova*). Dále je nutné zadat celkový počet náklonu , ve kterých se materiál měřil, a do připraveného souboru parametry měření a naměřené hodnoty difrakčních úhlů rovin {hkl}. Nakonec do textového souboru je nutné vložit relativní intenzity PPO rovin {hkl}, z jejichž deformací se vypočte napětí. Je důležité, aby tyto roviny vykazovaly silnou texturu a materiál nebyl hrubozrnný, jelikož z těchto relativních intenzit program určuje jak váhové faktory ideálních orientací, tak objemový podíl texturované části v materiálu.

Pro nutnost přítomnosti velmi silné textury byl použit vzorek válcovaného plechu na výrobu konzerv, viz obr. 2.

Určování zbytkových napětí vzorku probíhalo na vertikálním difraktometru X'Pert PRO v Braggově-Brentanově geometrii s rentgenkou s chromovou anodou ((CrK)=0,2291062 nm) a s čarovým ohniskem. Texturní měření také probíhalo na difraktometru X'Pert PRO ovšem v Schulzově reflexní geometrii s rentgenkou s kobaltovou anodou ((CoK)=0,1790307 nm) a s bodovým ohniskem.



Obrázek 2. Vzorek plechu na výrobu konzerv s vyznačeným směrem válcování.

3. Výsledky/diskuze

Fázovou analýzou byly v cca 10 m povrchové vrstvě zjištěny fáze: -Fe, $FeSn_2$, SnO. Z jejich relativních intenzit je patrná přítomnost silné textury. Z Debyeova-Scherrerova experimentu na zpětný odraz, viz obr. 3, plyne silná textura rovin {211} a vhodná velikost krystalitů pro texturní i napěťovou analýzu.

XEC konstanty byly vypočítány na základě *Eshelbyho-Krönerova modelu*, z [5] byly vybrány monokrystalické elastické konstanty -Fe: $s_{1111} = 7,6$ TPa⁻¹, $s_{1122} = -2,8$ TPa⁻¹, $s_{1212} = 2,15$ TPa⁻¹ (dle Voigtovy notace je $s_{1111} = s_{11}$, $s_{1122} = s_{12}$, $4s_{1212} = s_{44}$). S ohledem na značný vliv hodnoty mezirovinné vzdálenosti rovin {*hkl*} nenapjatého materiálu na hodnotu složky tenzoru zbytkových napětí ₃₃, byla hodnota d_0 určena v témže vzorku na základě nalezení tzv. beznapěťového směru ^{*} pomocí algoritmu zabudovaného





Obrázek 4. Graf závislosti $d(\sin^2)$ vzorku plechu na výrobu konzerv při úhlu = 90° s odhadem přesnosti d a proložením lineární závislosti odpovídající zpracování dat bez zahrnutí vlivu textury.

Obrázek 3. Debyeův kroužek rovin *{211}* vzorku zpracování dat bez zahrnutí vlivu textury. plechu na výrobu konzerv.

v komerčním programu X'Pert Stress, což vedlo k získání hodnoty $d_0^{211} = 0,11702$ nm.

Pro pozdější porovnání výsledků byl ovšem nejdříve určen tenzor zbytkové napjatosti bez uvažování přítomnosti textury (standardní výpočet trojosého stavu napjatosti *metodou Winholtze-Cohena* a s použitím XEC konstant vypočítaných dle Eshelbyho a Krönera, tedy pomocí modelu zahrnujícího vliv interakce mezi krystalitem a jeho okolím), viz následující tenzor (3).

124			5			
8	62		1	3	MPa	(3)
1	0	52	1	2	5	

Z tohoto výsledku je patrné, že stav napjatosti v ozářeném objemu vzorku je trojosý s nenulovou hodnotou tzv. hydrostatického napětí 33.

Z obr. 4, kde je závislost $d^{211}(\sin^2)$ pro azimut = 90°, je patrná nevhodnost postupu použitého při výpočtu tenzoru (3), neboť hodnoty d^{211} v závislosti na sin² oscilují. Jedná se tedy o nelineární závislost, která se charakteristicky pozoruje v případě existence přednostní orientace v ozářeném objemu. Je zřejmé, že standardní metoda výpočtu tenzoru zbytkových napětí byla v tomto případě zcela nekorektní

Pro kvantitativní určení přednostní orientace byly určeny IPO (inverzní pólové obrazce) a PPO. Důkaz stupně přítomné textury rovin {211} ve vzorku je uveden na obr. 5, kde je IPO ve směru, s majoritní orientací rovin {211} (a rovin s podobnou pozicí ve stereografické projekci). Pro výpočet stavu zbytkové napjatosti texturovaného vzorku programem *stress.m* je zapotřebí PPO rovin {211}, viz obr. 6. Ze škály intenzit tohoto PPO je patrná silná textura.

Nyní již byla k dispozici všechna potřebná vstupní data pro výpočet tenzoru zbytkové napjatosti se započítáním přítomnosti textury (určení trojosého stavu napjatosti *metodou Winholtze-Cohena*, ovšem s použitím XSF konstant), viz následující tenzor (4). V námi použitém modelu je zahrnut vliv interakce mezi krystalitem a jeho



Obrázek 5. Inverzní pólový obrazec (001).



Obrázek 6. Přímý pólový obrazec rovin {211} s vyznačeným válcovacím (RD) a transverzálním (TD) směrem.



Obrázek 7. Závislost XEC vypočtených dle různých modelů v závislosti na korekce má na smykové parametru *(hkl)* pro železné materiály. Červený bod na ose "3" odpovídá vliv než na normálové. orientačnímu faktoru rovin {211}.

okolím jen pro náhodně orientované krystality s objemovým podílem ^{*i*} (ve vztahu (1) jsou *r_{ij}* vypočítány na základě modelu Eshelbyho a Krönera), ovšem pro část materiálu s přednostní orientací s objemovým podílem ^{*a*} je tato interakce zanedbána, což ve svém důsledku vede k Reussově modelu. Netriviální úkol spočívající v zahrnutí interakce mezi krystalitem a jeho okolím pro texturovaný materiál bude předmětem další práce. Konkrétně v tomto článku řešeném problému, jsou ovšem v případě rovin {211} železa rozdíly mezi XEC vypočtenými dle *Voigtova*, *Reussova* nebo *Eshelbyho-Krönerova modelu* zanedbatelné (viz obr. 7, kde je kombinace Millerových indexů *hkl*), otázkou však zůstává, budou-li zanedbatelné i pro případ texturovaného materiálu.

Z tohoto výsledku je patrné, že v rámci zmíněných aproximací lze stav napjatosti ve vzorku charakterizovat jako dvouosý, kdy je napětí ₃₃ v rámci chyby nulové.

Program *stress.m* dle pólové hustoty odhadl podíl texturovaného materiálu na 81 %. Tato hodnota je dostatečně veliká na to, aby tento výsledek mohl být brán v rámci zmíněných aproximací jako korektní. H. Dölle, viz [1], pracuje s hodnotou 80 %. Při porovnání tenzorů zbytkové napjatosti se zanedbáním přítomnosti textury (3) a se započítáním textury (4) je patrné že se hodnoty složek tenzorů liší. Hodnoty normálových napětí 11, 22 jsou v případě započítání textury o 40–50 MPa v absolutní hodnotě větší a složka 33 je v případě předpokladu započítání textury v rámci chyby nulová. S ohledem na hodnotu složky 33 u předpokladu zanedbání textury (-52 MPa) lze usoudit, že výsledný tenzor s korekcí na přítomnost textury je správnější. Takováto hodnota složky

₃₃, u případu zanedbání textury, by totiž znamenala, že na povrchu vzorku je tato hodnota nulová a v absolutní hodnotě exponenciálně roste do hloubky cca 4 m

Tabulka 1. Výsledné XEC pro roviny {211}železných materiálů.

Model	s ₁ , TPa ⁻¹	s ₂ , TPa ⁻¹
Reussův	-1,275	5,825
Eshelbyho- Krönerův	-1,241	5,722
Voigtův	-1,206	5,618

k hodnotě 52 MPa, což značí nezanedbatelný gradient napětí. Navíc experimentálně změřená závislost $d(\sin^2)$, viz obr. 4, nemá typický průběh, pokud by ve vzorku byl přítomný gradient napětí. Je patrné, že korekce má na smykové složky napětí menší vliv než na normálové.

4. Závěr

Ze změřené závislosti $d(\sin^2)$, viz obr. 4, Debyeova kroužku rovin {211} na obr. 3 a PPO rovin {211} na obr. 6 vyplývá, že v ozářené oblasti vzorku je přítomná přednostní orientace a nelze tedy použít standardní metody výpočtu stavu makroskopické zbytkové napjatosti. Byl tedy vytvořen program *stress.m* na výpočet tenzoru zbytkových napětí v kubických silně texturovaných materiálech, jehož použití nás vede k vyslovení následujících závěrů:

- vypočtený podíl texturované složky v ozářené oblasti vzorku je dostatečný pro splnění předpokladu korektního výsledku v rámci daného přiblížení (81 %),
- srovnání tenzorů napětí vypočtených se zanedbáním přítomnosti textury (3) a pro případ započítání textury (4) bylo zjištěno, že normálová napětí 11, 22 jsou v případě předpokladu přítomnosti textury v absolutní hodnotě větší,
- hodnota ₃₃ je v rámci chyby statisticky nevýznamná, zatímco při předpokladu zanedbání textury dosahuje tato složka hodnoty -52 MPa.

Reference

- 1. H. Dölle, J. Appl. Cryst., 12, (1979), 489-501.
- 2. V. Hauk, *Structural and residual stress analysis by nondestructive methods*. Amsterdam: Elsevier. 1997.
- 3. H. J. Bunge, *Texture analysis in matherial science: mathematical methods*. London: Butterworth. 1983.
- R. A. Winholtz, J. B. Cohen, *Austr. J. Phys.*, 41, (1988), 189-199.
- I. C. Noyan, J. B. Cohen, *Residual Stress Measurement* by Diffraction and Iterpretation. New York: Springer-Verlag. 1987.

Poděkování

Tato práce vznikla za podpory Technologické agentury České republiky s označením TA02011031.