



1st International Conference
"Computational Mechanics and Virtual Engineering"
COMEC 2005
20 – 22 October 2005, Brasov, Romania

INFLUENȚA STĂRII DE TENSIUNE LA SCARĂ MACROSCOPICĂ ȘI STRUCTURII MATERIALULUI ASUPRA STĂRILOR DE TENSIUNE LA SCARĂ MICROSCOPICĂ

V. Marina, Viorica Marina

Universitatea Tehnică a Moldovei, R.Moldova, rezmarina@mail.utm.md

Abstract: Lucrarea se referă la problema valorificării cunoașterii relației dintre structura și proprietăți. Studiul se limitează la efectele provocate de diferența elementelor de simetrie la scară macroscopică și microscopică, care se produc în domeniul solicitărilor reversibile. Calculele numerice sunt efectuate numai pentru materiale policristaline cu rețea cubică. Cercetările numerice demonstrează cu certitudine spectrul fluctuațiilor stărilor de tensiune la scară microscopică este puternic influențat de coeficientul de anizotropie al cristalelor și forma stării de tensiune la scară macroscopică.

Keywords: tensiune, deformație, structura, simetrie, policristal.

1. INTRODUCERE

Până în prezent există în mod separat două tipuri de teorii: teoria deformațiilor ireversibile și teoria ruperii. Aceasta stare de lucru provine în primul rând de la modul limitat de abordare a problemei comportării materialelor, practicat în tratarea pur fenomenologică a fenomenului; se consideră că macroparticula materială nu are dimensiuni dar în același timp este imaginată că reflectă proprietățile termomecanice medii a materialelor. Din acest motiv se formează, prin definiție, prăpastia între Mecanica corpului solid deformabil și Știința materialelor. Ca urmare, în cadrul tratării macroscopice a problemei, nu reușim să reflectăm faptul că unul și același material în funcție de forma stării de tensiune se compoartă în mod diferit. Structura reală a materialului provoacă fluctuații mari ale stărilor de tensiune/deformație la scară microscopică. Numeroasele cercetări teoretice și experimentale efectuate în ultimii ani demonstrează cu certitudine că evoluția proceselor de deformație și fisurare la scară macroscopică este condiționată de tabloul actual al stărilor de tensiune în elementele de structură care reflectă memoria materialului policristalin/compozit privind istoria acțiunii exterioare. Astfel apare necesitatea elaborării unui nou model al Mecanicii corpului solid deformabil în cadrul căruia cele două ramuri ale științei pot fi unificate. Cu toate că la etapa actuală nu există un model acceptat de majoritatea specialiștilor, în lucrare ne propunem un studiu al influenței formei de tensiune la scara macroscopică asupra stărilor de tensiune/deformație la scara microscopică, în cadrul modelului structural elaborat inițial (anii 1975 - 1991) la Institutul de Mecanica al Academiei de Științe al Ucrainei din Kiev și dezvoltat în continuare la Universitatea Tehnică a Moldovei [1-4]. Avantajul acestui model față de alte modele rezultă din comparația rezultatelor teoretice cu cele experimentale pentru diferite procese termomecanice; în astfel de probleme există un singur judecător –experiența.

2. ECUAȚIILE GENERALE ALE MODELULUI STRUCTURAL

În modelul structural [1-4] volumul elementar ΔV_0 se consideră compus dintr-un număr finit sau infinit de subelemente (elemente de structură), care la rândul lor cuprind un număr suficient de mare de atomi, astfel în cât să rămână valabila ipoteza mediului continuu și la scara microscopică. Tensiunile \tilde{t}_{ij} și deformațiile \tilde{d}_{ij} în fiecare micropunct al regiunii ΔV_0 satisfac ecuațiile geometrice și de echilibru ale lui Cauchy, iar pe conturul conglomeratului se admite că sunt satisfăcute condițiile de omogenitate ale tensiunilor și deformațiilor. În aceste condiții se obțin relațiile lui R.Hill [6]

$$t_{ij} = \langle \tilde{t}_{ij} \rangle = \frac{1}{\Delta V_0} \int_{\Delta V_0} \tilde{t}_{ij} dV, \quad d_{ij} = \langle \tilde{d}_{ij} \rangle, \quad (1)$$

$$\langle \tilde{t}_{ij} \tilde{d}_{ij} \rangle = \langle \tilde{t}_{nm} \rangle \langle \tilde{d}_{nm} \rangle = t_{pq} d_{pq} \quad (2)$$

unde prin t_{ij} și d_{ij} sunt notați tensorii tensiune și deformație la scară macroscopică. Relațiile (1),(2)

sunt necesare, dar nu și suficiente pentru deducerea ecuațiilor constitutive la scară macroscopică în baza relațiilor fizice la scară microscopică. Metoda directă de trecere de la starea termomecanică microscopică la starea macroscopică se reduce la întocmirea sistemului de ecuații stohastice ale Mecanicii corpului solid deformabil, soluțiile cărora pot fi obținute numai prin metode numerice. Neajunsul acestei metode constă nu numai în erorile inevitabile de calcul, care în cazul unui sistem de ecuații diferențiale cu derivate parțiale extrem de complicat, pot depăși valorile mărimilor care reflectă efectele analizate, dar și în lipsa informației despre o serie de interacțiuni care se produc în conglomerat. Din aceasta cauza este rațional de dezvoltat și alte modalități de analiză a fenomenelor de deformație și fisurare, care pe lângă principiile clasice ale Mecanicii și Termodinamicii se mai bazează pe unele principii noi: principiul discordanței măsurii microscopice cu analogul macroscopic potrivit și principiul fluctuațiilor tensiunilor și deformațiilor [3,4]. Aceste principii conțin referiri la fenomenul de autocordonare a proceselor de deformație în conglomerat.

Pe lângă tensiunile și deformațiile la nivel de particula materială și conglomerat în modelul structural se introduc tensiuni și deformații la nivel de element de structură, definite prin relațiile:

$$\bar{t}_{ij} = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \tilde{t}_{ij} dV, \quad \bar{d}_{ij} = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \tilde{d}_{ij} dV \quad (3)$$

unde prin ΔV este notat domeniul ocupat de elementul de structură considerat.

Principiul fluctuațiilor tensiunilor și deformațiilor se formulează în modul următor [3]:

$$\bar{d}_{ij} - d_{ij} = B_{ijnm} (\bar{t}_{nm} - t_{nm}) \quad (4)$$

unde tensorul B_{ijnm} reflectă neomogenitatea câmpului tensorului tensiune/deformație la nivel de elemente de structură. Pentru materiale izotrope la scară macroscopică, tensorul B_{ijnm} se consideră izotrop și expresia (4) se descompune în două relații:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} - \varepsilon_{ij} = B (\sigma_{ij} - \bar{\sigma}_{ij}) \quad B \geq 0 \quad (8)$$

$$\bar{\varepsilon}_0 - \varepsilon_0 = B_0 (\sigma_0 - \bar{\sigma}_0) \quad B_0 \geq 0. \quad (9)$$

Principiul discordanței măsurii microscopice cu analogul ei macroscopic potrivit în aproximație statistică, îl scriem sub forma

$$\langle \tilde{t}_{ij} \tilde{d}_{ij} \rangle_{\Omega} - t_{ij} d_{ij} = Extr. \quad (10)$$

unde prin $\langle \cdot \rangle_{\Omega}$ este notată medierea după factorul de orientare al cristalelor Ω .

3.RELAȚIILE DE CALCUL PENTRU MATERIALE POLICRISTALINE CU REȚEA CUBICĂ

În domeniul reversibil relațiile între tensiuni și deformații la nivel de element de structură se admit sub formă

$$\bar{d}_{ij} = \bar{S}_{ijnm} \bar{t}_{nm} \quad (11)$$

unde prin \bar{S}_{ijnm} este notat tensorul coeficienților de elasticitate în sistemul global de coordonate. Pentru materiale policristaline cu o singură fază tensorul \bar{S}_{ijnm} se precizează în baza relației:

$$\bar{S}_{ijnm} = \bar{a}_{pi} \bar{a}_{qj} \bar{a}_{kn} \bar{a}_{lm} S_{pqkl}. \quad (12)$$

În expresia (2) S_{pqkl} reprezintă tensorul coeficienților de elasticitate în sistemul cristalografic de coordonate, iar $\bar{a}_{pi} = \cos(\bar{x}_p, x_i)$ precizează pozițiile sistemelor cristalografice de coordonate \bar{x}_p față de sistemul global de coordonate x_i . Cele nouă componente ale matricelor \bar{a}_{pi} se exprimă prin trei variabile independente:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \cos\psi \cos\varphi - \cos\theta \sin\psi \sin\varphi, \\
a_{12} &= \sin\psi \cos\varphi + \cos\theta \cos\psi \sin\varphi, \\
a_{13} &= \sin\theta \sin\varphi, \\
a_{21} &= -\cos\psi \sin\varphi - \cos\theta \sin\psi \cos\varphi, \\
a_{22} &= -\sin\psi \sin\varphi + \cos\theta \cos\psi \cos\varphi, \\
a_{23} &= \sin\theta \cos\varphi, \\
a_{31} &= \sin\theta \sin\psi, \\
a_{32} &= -\sin\theta \cos\psi, \\
a_{33} &= \cos\theta.
\end{aligned} \tag{13}$$

unde θ, ψ și φ reprezintă unghiurile lui Euler ($0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \psi \leq 2\pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$).

Relațiile între tensiuni și deformații (11) în sistemul cristalografic de coordonate se simplifică și obțin forma

$$\begin{aligned}
\bar{\sigma}_{11} &= \frac{2S+B}{S_{11}-S_{12}+B} \bar{a}_{i1} \bar{a}_{j1} \sigma_{ij}, \quad \bar{\sigma}_{ij} = \bar{t}_{ij} - \frac{1}{3} \bar{t}_{nm} \delta_{ij}, \\
\bar{\sigma}_{22} &= \frac{2S+B}{S_{11}-S_{12}+B} \bar{a}_{i2} \bar{a}_{j2} \sigma_{ij}, \quad \bar{\sigma}_{33} = -\bar{\sigma}_{11} - \bar{\sigma}_{22}, \\
\bar{\sigma}_{ij} &= \frac{2S+B}{2S_{44}+B} \bar{a}_{ni} \bar{a}_{mj} \sigma_{nm}, \quad i \neq j,
\end{aligned} \tag{14}$$

$$\varepsilon_{ij} = 2S\sigma_{ij}. \tag{15}$$

În relațiile (14), (15) prin S_{11}, S_{12}, S_{44} sunt notați coeficienții independenți de elasticitate pentru cristale cu rețea cubică.

Parametru intern B și coeficientul de macroelasticitate S se determină în baza relațiilor (4) - (10), (11) - (14). Pentru materiale policristaline cu rețea cubică în [3] au fost obținute relațiile:

$$B = \sqrt{\frac{S_{44}(S_{11}-S_{12})[4S_{44}+3(S_{11}-S_{12})]}{3S_{44}+S_{11}-S_{12}}}, \tag{16}$$

$$S = \sqrt{\frac{S_{44}(S_{11}-S_{12})(3S_{44}+S_{11}-S_{12})}{4S_{44}+3(S_{11}-S_{12})}}. \tag{17}$$

Substituind formulele (16), (17) în (14), după un șir de transformări găsim

$$\bar{\sigma}_{ij} = \begin{cases} N \sum_{n=1}^3 \bar{a}_{ni} \bar{a}_{nj} \sigma_n, & i = j \\ M \sum_{n=1}^3 \bar{a}_{ni} \bar{a}_{nj} \sigma_n, & i \neq j \end{cases} \tag{18}$$

unde

$$N = \frac{5(1+A)}{2+3A+\sqrt{A(2+3A)(3+2A)}},$$

$$M = \frac{5\sqrt{A}(1+A)}{(2+3A)\sqrt{A}+\sqrt{(2+3A)(3+2A)}}. \tag{19}$$

$$A = \frac{S_{11}-S_{12}}{S_{44}} = \frac{2c_{44}}{c_{11}-c_{12}}. \tag{20}$$

În (20) prin A este notat coeficientul de anizotropie, iar prin c_{11}, c_{12}, c_{44} constantele de elasticitate a monocristalului în sistemul cristalografic de coordonate. Menționăm că în expresia (18) prin σ_n sunt notate valorile proprii ale deviatorului tensorului tensiune la scară microscopică, iar prin $\bar{\sigma}_{ij}$ -componentele deviatorului tensiune la nivel de cristal în sistemul cristalografic de coordonate. Din (18) se observă că starea de tensiune la nivel de element de structură depinde starea de tensiune la scară microscopică, coeficientul de anizotropie al cristalelor, și factorul de orientare a sistemului cristalografic considerat.

5. ANALIZA NUMERICĂ A STĂRILOR DE TENSIUNE LA SCARA MICROSCOPICĂ

În analiza care urmează componentele principale ale deviatorului tensorului tensiune $\sigma_1 \succ \sigma_2 \succ \sigma_3$ la scară microscopică le prezentăm sub forma

$$\sigma_2 = k\sigma_1, \quad \sigma_3 = -(1+k)\sigma_1 \quad (21)$$

unde prin coeficientul k se reflectă forma stării de tensiune. Ținând seama de (21) în (18) stabilim structura expresiei pentru componentele deviatorului tensorului tensiune în fiecare cristal din care se evidențiază influența celor trei factori: coeficientul de anizotropie A , factorul de orientare a sistemului cristalografic de coordonate $\Omega \Rightarrow \theta, \psi, \varphi$ și forma stării de tensiune, reflectată prin coeficientul k :

$$\bar{\sigma}_{ij}(\Omega, A, k) = \begin{cases} N(A)(b_{ij}(\Omega) + kd_{ij}(\Omega))\sigma_1, & i = j \\ M(A)(b_{ij}(\Omega) + kd_{ij}(\Omega))\sigma_1, & i \neq j \end{cases} \quad (22)$$

unde

$$b_{ij}(\Omega) = a_{1i}(\theta, \psi, \varphi)a_{1j}(\theta, \psi, \varphi) - a_{3i}(\theta, \psi, \varphi)a_{3j}(\theta, \psi, \varphi),$$

$$d_{ij}(\Omega) = a_{2i}(\theta, \psi, \varphi)a_{2j}(\theta, \psi, \varphi) - a_{3i}(\theta, \psi, \varphi)a_{3j}(\theta, \psi, \varphi). \quad (23)$$

Din (23) rezultă că matricele $[b_{ij}(\Omega)]$, $[d_{ij}(\Omega)]$ sunt simetrice. În baza relațiilor (22) – (23) calculăm valorile invarianților la scară microscopică care sunt funcții de invarianții respectivi la scară microscopică, unghiurile lui Euler și coeficientul de anizotropie:

$$\sigma(\Omega, A, k) = \sqrt{\sigma_{11}^2(\Omega, A, k) + \sigma_{22}^2(\Omega, A, k) + \sigma_{33}^2(\Omega, A, k) + 2\sigma_{12}^2(\Omega, A, k) + 2\sigma_{13}^2(\Omega, A, k) + 2\sigma_{23}^2(\Omega, A, k)}, \quad (24)$$

$$I_3(\Omega, A, k) = \begin{vmatrix} \sigma_{11}(\Omega, A, k) & \sigma_{12}(\Omega, A, k) & \sigma_{13}(\Omega, A, k) \\ \sigma_{12}(\Omega, A, k) & \sigma_{22}(\Omega, A, k) & \sigma_{23}(\Omega, A, k) \\ \sigma_{13}(\Omega, A, k) & \sigma_{23}(\Omega, A, k) & \sigma_{33}(\Omega, A, k) \end{vmatrix}, \quad (25)$$

În cele ce urmează vom stabili legitățile de variație a stărilor de tensiune la scară microscopică pentru materialul Ni policristalin, cristalele căruia se caracterizează prin următoarele constante: $c_{11} = 24,65, c_{12} = 14,73, c_{44} = 12,47 \times 10^4 \text{ MN/m}^2$.

Rezultatele numerice sunt date în fig.1 – 3. Stările de tensiune la scară microscopică sunt funcții de cinci variabile. Deoarece geometric pot fi prezentate numai funcții de 2 variabile, graficele vor fi construite pentru valori constante ale coeficientului stării de tensiune k , coeficientului de anizotropie al cristalelor A și a unui unghi a lui Euler, de exemplu unghiul θ , care corespunde valorii maxime a modulului deviatorului tensorului tensiune la scară microscopică. Din condițiile de extremum a mărimii la început precizăm valorile variabilelor θ, ψ, φ . Prezentările grafice se vor referi numai la două valori a formei stării de tensiune: $k = -\frac{1}{2}$ (întindere), $k = 0$ (forfecare).

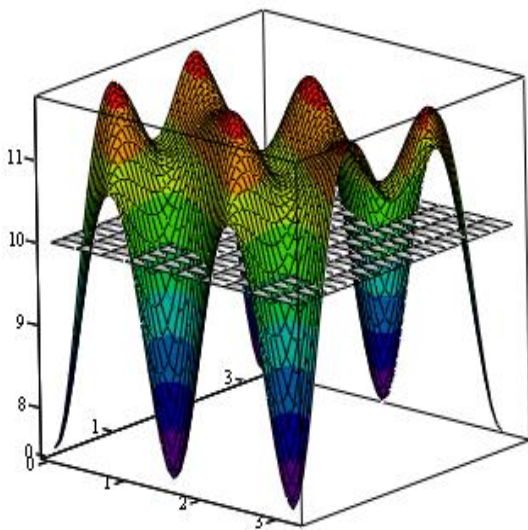
Pentru starea de solicitare la întindere cu modulul macroscopic al deviatorului tensorului tensiune $\sigma = 10 \text{ MPa}$ au fost stabilit intervalul de variație a modulului deviatorului tensorului tensiune la scară microscopică

$\sigma = 7,5022 \div 11,6652$ MPa , iar al treilea invariant al deviatorului $I_3 = 57,4614 \div 216,0114$ MPa³ . Valorile minimale și maxime ale modului deviatorului tensorului tensiune sunt precizate de următoarele valori ale unghiurilor lui Euler

$$\begin{pmatrix} \theta_{\max} \\ \psi_{\max} \\ \varphi_{\max} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,8159 \\ 0,0576 \\ 0,9152 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \theta_{\min} \\ \psi_{\min} \\ \varphi_{\min} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,5708 \\ -0,1774 \\ 1,5708 \end{pmatrix} .$$

Pentru invariantul I_3 valorile extremale se obțin pentru alte poziții ale sistemelor cristalografic de coordonate. În figura 1 a,b sunt prezentate legăturile de variație a modului deviatorului tensorului tensiune pentru cele două tipuri de solicitări la scară macroscopică, obținute pentru secțiunea $\theta = \theta_{\max}$.

a) $k = -0,5$



b) $k = 0$

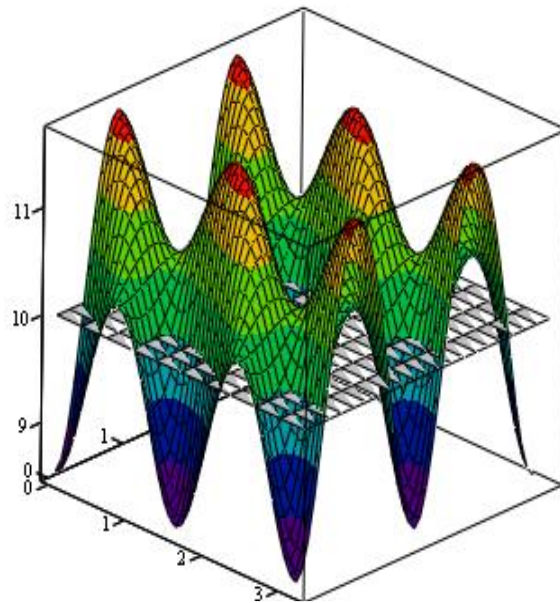
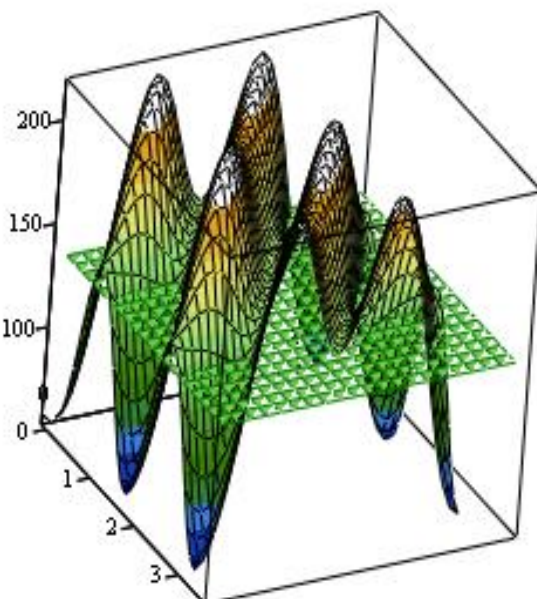


Figura 1

În figura 2 a,b sunt prezentate respectiv legăturile de variație a invariantului I_3 la scară microscopică la întindere și forfecare.

a) $k = -0,5$



b) $k = 0$

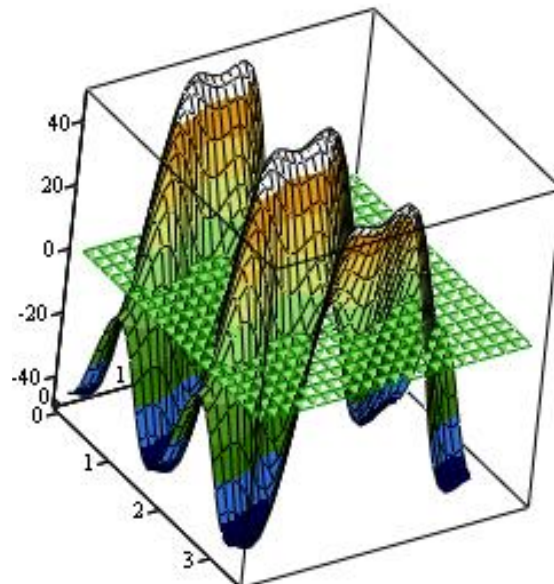


Figura 2

În figura 3 a,b este dată dependența valorii proprii a σ_3 a deviatorului tensorului tensiune pentru cele două tipuri de solicitare și valoarea lui $\theta = \theta_{\max}$.

a) $k = -0,5$

b) $k = 0$

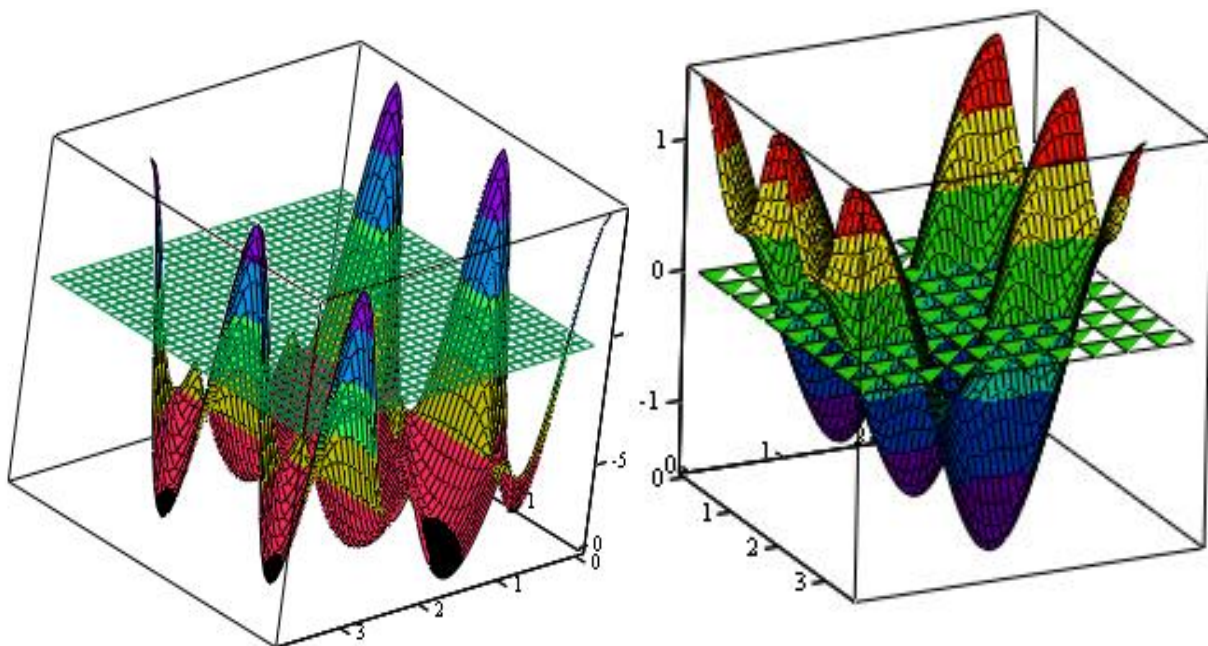


Figura 3

Din figurile prezentate se observă că toate mărimile studiate variază după legi periodice. Se poate de arătat, prin metoda analitică, că periodicitatea menționată provine de la elementele de simetrie a rețelei cristaline.

3. CONCLUZIE

În baza modelului structural se obțin legitățile de variație a stărilor de tensiune/deformație în funcție de tipul de solicitare la scară microscopică și structura materialului. Rezultatele numerice demonstrează că interacțiunile extrem de complexe între particulele materiale din interiorul conglomeratului provoacă un spectru larg de modificări a stărilor de tensiune la scară microscopică. În baza legităților stabilite pot fi explicate sub o formă unitară o serie de fenomene termomecanice care din punct de vedere macroscopic au la bază cauze total diferite.

BIBLIOGRAFIE

- [1] Șevenco Iu. N., Marina V.: Structurnaia modeli sridi pri neiyotermicescom protese nagrujenia, Prikladnaia mehanica, N12, s.19-27, 1976.
- [2] Marina V.: Opredelaiushie uravnenia pri ciclicescom proportionalinom deformirivanii nestabilinîh materialov, Prickladnaia mehanica, N6, s.92-99, 1986.
- [3] Marina V.: Printipi perekhoda ot micro k macro napreajenno deformirovannomu sostoianiu, Izv. A.N. R.M., Matematika, N (27), s. 16-24, 1988.
- [4] Marina V.: The Principles of the Transition from a Macroscopic to a Microscopic State, Science of SINTERING, The international journal of basic and applied sintering and related processes, N 3, p.155-124, 2000.
- [5] Marina V.: Ob odnom novom metode opredelenia macroscopicescih parametrov uprugosti, Progresivnie tehnologii i sistemi masinostroenia, Mejdunarodnii sbornic nauchnih trudov, Donetk, 2003.
- [6] R.Hill: On macroscopicmeasures of plastiwork and deformation in microheterogeneous medium. L.Matematical Physics. N16, p.214, 1975.
- [7] Vvedenie v micromechanicu, pod redactiei M.Onami, Perevod s iaponscogo, Metalurgia, Moskva, 1987.