

CU PRIVIRE LA DESCRIEREA COMPORTĂRII MATERIALELOR POLIFAZICE CU REȚEA CRISTALINĂ CUBICĂ

V. Marina

Universitatea Tehnică a Moldovei

INTORODUCERE

Principiile de trecere de la starea microscopică la starea macroscopică pentru materiale policristaline cu o singură fază au fost enunțate în [1-3]. Unele variante de generalizare a ecuațiilor de compoziție în cazul materialelor cu mai multe faze au fost propuse în [4,5]. Din variația generalizată, în caz particular, rezultă modelul elaborat în [1-3].

În lucrare se propune un model în care pe lângă ierarhia structurală utilizată în [4,5] se introduc niveluri de structură la scară de faze. Astfel în aproximația statistică noțiunile fundamentale de tensiuni și deformații se introduc la trei niveluri: element de structură în faza considerată, fază, conglomerat. În schema analizată fiecare fază interacționează în mod direct cu conglomeratul.

Se construiește un sistem complet de ecuații nelineare în baza căruia se precizează constantele de elasticitate la scară macroscopică. Este pusă în evidență influența constantelor de elasticitate la scară macroscopică și ponderea fazelor asupra proprietăților conglomeratului policristalin la scară macroscopică.

1. PRINCIPIILE GENERALE DE TRECERE DE LA SCARĂ MICROSCOPICĂ LA SCARĂ MACROSCOPICĂ

La construirea unui sistem util de ecuații constitutive se impune un studiu concomitent al comportării materialelului la nivel de particulă materială, element de structură, fază și conglomerat. Tensiunile și deformațiile la nivel de particulă materială le notăm prin \tilde{t}_{ij} , \tilde{d}_{ij} ; la nivel de element de structură în faza f - \bar{t}_{ij} , \bar{d}_{ij} iar la nivel de fază - $t_{ij}^{(f)}$, $d_{ij}^{(f)}$. La scară macroscopică (la nivel de conglomerat) tensiunile se notează prin t_{ij} , iar deformațiile d_{ij} . În baza ecuațiilor geometrice

$$\tilde{d}_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad (i,j = 1,2,3)$$

de echilibru

$$\tilde{t}_{ij,j} + \rho \tilde{b}_i = 0$$

și condițiilor de omogenitate la nivel de conglomerat

$$\tilde{u}_i / \Delta S_0 = u_i = d_{ij} x_j = const ,$$

$$p_i^{(n)} / \Delta S_0 = t_{ij} n_j, t_{ij} = const ,$$

unde prin \tilde{u}_i sunt notate deplasările particulei materiale, iar prin $p_i^{(n)}$ forțele de suprafață, se obțin relațiile [1]:

$$t_{ij} = \frac{1}{\Delta V_0} \int_{\Delta V_0} \tilde{t}_{ij} dV = \langle \tilde{t}_{ij} \rangle_{\Delta V_0} = \langle \tilde{t}_{ij} \rangle, \quad (1.1)$$

$$d_{ij} = \frac{1}{\Delta V_0} \int_{\Delta V_0} \tilde{d}_{ij} dV = \langle \tilde{d}_{ij} \rangle, \quad (1.2)$$

$$\langle \tilde{t}_{ij} \tilde{d}_{ij} \rangle_{\Delta V_0} = \langle \tilde{t}_{nm} \rangle_{\Delta V_0} \langle \tilde{d}_{nm} \rangle_{\Delta V_0}. \quad (1.3)$$

Dacă tensorul tensiune \tilde{t}_{ij} și deformație \tilde{d}_{ij} se descompun în deviatori $\tilde{\sigma}_{ij}$, $\tilde{\varepsilon}_{ij}$ și tensori sferici $\tilde{\sigma}_0 \delta_{ij}$, $\tilde{\varepsilon}_0 \delta_{ij}$:

$$\tilde{t}_{ij} = \tilde{\sigma}_{ij} + \tilde{\sigma}_0 \delta_{ij}, \quad \tilde{d}_{ij} = \tilde{\varepsilon}_{ij} + \tilde{\varepsilon}_0 \delta_{ij}, \quad (1.4)$$

în mod analog la scară macroscopică

$$t_{ij} = \sigma_{ij} + \sigma_0 \delta_{ij}, \quad d_{ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_0 \delta_{ij}, \quad (1.5)$$

atunci se demonstrează că

$$\sigma_{ij} = \langle \tilde{\sigma}_{ij} \rangle_{\Delta V_0} = \langle \tilde{\sigma}_{ij} \rangle, \quad \sigma_0 = \langle \tilde{\sigma}_0 \rangle; \quad (1.6)$$

$$\varepsilon_{ij} = \langle \tilde{\varepsilon}_{ij} \rangle, \quad \varepsilon_0 = \langle \tilde{\varepsilon}_0 \rangle \quad (1.7)$$

În relațiile (1.1)- (1.7) figurează mărimile fizice mediile cărora în conglomerat depind numai de datele de la suprafață. Însă după cum a fost stabilit în [1] nu toate mărimile fizice se bucură de aceasta proprietate, de exemplu

$$\langle \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{ij} \rangle \neq \langle \tilde{\sigma}_{nm} \rangle \langle \tilde{\varepsilon}_{nm} \rangle, \quad \langle \tilde{\sigma}_0 \tilde{\varepsilon}_0 \rangle \neq \langle \tilde{\sigma}_0 \rangle \langle \tilde{\varepsilon}_0 \rangle. \quad (1.8)$$

Din (1.8) rezultă că măsura macroscopică a unor mărimi fizice nu coincide cu analogul microscopic potrivit. Diferența la astfel de mărimi, numită discordanță [1-3]

$$\Delta = \langle \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{ij} \rangle - \langle \tilde{\sigma}_{ij} \rangle \langle \tilde{\varepsilon}_{ij} \rangle, \quad \langle \tilde{t}_{ij} \rangle \langle \tilde{d}_{ij} \rangle = const, \quad (1.9)$$

depinde nu numai de datele de pe suprafața conglomeratului, dar și de structura lui.

Înformația privind elementele de structură care pot fi descifrate din macroexperiență se concretizează în baza principiului enunțat în lucrarea [1]: în orice interacțiune reală necorcondanța Δ obține valoarea extremă

$$\langle \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{ij} \rangle - \langle \tilde{\sigma}_{ij} \rangle \langle \tilde{\varepsilon}_{ij} \rangle = Extr. \quad (1.10)$$

Relațiile (1.1)- (1.10) sunt necesare dar nu și suficiente pentru construirea ecuațiilor constitutive la scară macroscopică în baza ecuațiilor constitutive la scară microscopică.

2. ECUAȚIILE DE COMPOZIȚIE A INTERACȚIUNILOR ELEMENTELOR DE STRUCTURĂ ÎN CONGLOMERAT

Expresiile (1.1) - (1.3) rezultă din principiile generale ale termodinamicii, iar (1.10) reflectă o interacțiune informațională și ca urmare este numit principiu informațional. Pentru a obține un sistem complet de ecuații, în baza căruia se precizează relația dintre structură și proprietăți, trebuie să ținem cont și de fenomenul de auto-coordonare a procesului de deformare în conglomerat. Conform [2,3], elementele de structură în conglomerat își cedează unele proprietăți individuale în contul unor proprietăți comune. Din aceasta cauză, nu se poate trece direct de la microtensiuni și deformații la macrotensiuni și deformații. Fenomenul de auto-coordonare a interacțiunilor termomecanice, care se produc în ierarhia nivelurilor de structură, se reflectă prin intermediul mărimilor termomecanice, definite la nivel de element de structură în faza considerată

$$\bar{t}_{ij}^{(f)} = \langle \tilde{t}_{ij}^{(f)} \rangle_{\Delta \bar{V}_f}, \quad \bar{d}_{ij}^{(f)} = \langle \tilde{d}_{ij}^{(f)} \rangle_{\Delta \bar{V}_f}, \quad (2.1)$$

unde $\Delta \bar{V}_f$ prezintă volumul elementului de structură și tensiunilor și deformațiilor la nivel de fază

$$t_{ij}^{(f)} = \langle \tilde{t}_{ij}^{(f)} \rangle_{\Delta V_f}, \quad d_{ij}^{(f)} = \langle \tilde{d}_{ij}^{(f)} \rangle_{\Delta V_f} \quad (2.2)$$

În relațiile (2.2) prin ΔV_f este notat volumul total al fazei „f”.

Tensorii tensiune și deformație la nivel de particula materială pot fi prezentați sub formă:

$$\tilde{t}_{ij}^{(f)} = t_{ij} + \Delta t_{ij}^{(f)} + \Delta \bar{t}_{ij}^{(f)} + \tilde{t}_{ij}^{(f)}; \quad (2.3)$$

$$\Delta t_{ij}^{(f)} = t_{ij}^{(f)} - t_{ij}, \quad \Delta \bar{t}_{ij}^{(f)} = \bar{t}_{ij}^{(f)} - t_{ij}^{(f)}, \quad (2.4)$$

$$\Delta \tilde{t}_{ij}^{(f)} = \tilde{t}_{ij}^{(f)} - \bar{t}_{ij}^{(f)},$$

$$\tilde{d}_{ij}^{(f)} = d_{ij} + \Delta d_{ij}^{(f)} + \Delta \bar{d}_{ij}^{(f)} + \Delta \tilde{d}_{ij}^{(f)}, \quad (2.5)$$

$$\Delta d_{ij}^{(f)} = d_{ij}^{(f)} - d_{ij}, \quad \Delta \bar{d}_{ij}^{(f)} = \bar{d}_{ij}^{(f)} - d_{ij}^{(f)}, \quad (2.6)$$

$$\Delta \tilde{d}_{ij}^{(f)} = \tilde{d}_{ij}^{(f)} - \bar{d}_{ij}^{(f)},$$

unde prin $\Delta \tilde{t}_{ij}$, $\Delta \tilde{d}_{ij}$ sunt notate fluctuațiile tensiunilor și deformațiilor în particulele materiale din interiorul elementului de structură a fazei considerate ($\bar{t}_{ij} = const, \bar{d}_{ij} = const$); $\Delta \bar{t}_{ij}^{(f)}$, $\Delta \bar{d}_{ij}^{(f)}$ reprezintă fluctuațiile tensiunilor și deformațiilor la nivel de elemente de structură; $\Delta t_{ij}^{(f)}$, $\Delta d_{ij}^{(f)}$ - fluctuațiile tensiunilor și deformațiilor la nivel de fază. În cele ce urmează ne vom limita la aproximația statistică

$$\Delta \tilde{t}_{ij}^{(f)} = 0, \quad \Delta \tilde{d}_{ij}^{(f)} = 0; \quad (2.7)$$

astfel se face abstracție de influența formei și dimensiunilor elementelor de structură.

Conform principiului enunțat în [1-5] fluctuațiile tensiunilor la fiecare nivel de structură sunt funcții univoce de fluctuațiile deformațiilor; în aproximație lineară au loc relațiile

$$t_{ij}^{(f)} - t_{ij} = A_{ijnm} (d_{nm}^{(f)} - d_{nm}), \quad (2.8)$$

$$\bar{t}_{ij}^{(f)} - t_{ij}^{(f)} = A_{ijnm}^{(f)} (\bar{d}_{nm}^{(f)} - d_{nm}^{(f)}), \quad (2.9)$$

unde tensorii de ordinul pentru $A_{ijnm}^{(f)}$, $A_{ijnm}^{(f)}$ reflectă interacțiunile dintre faze, respectiv între elementele de structură din faza considerată. Observăm că relațiile (2.8), (2.9) satisfac (integral) în mod automat ecuațiile de echilibru și relațiile geometrice a lui Cauchy.

Substituid prezentările (2.3) și (2.4) în aproximație statistică, în relațiile fundamentale (1.3) și (1.10) vom obține

$$\sum_{f=1}^N \left(\Delta t_{ij}^{(f)} \Delta d_{ij}^{(f)} + \left\langle \Delta \bar{t}_{ij}^{(f)} \Delta \bar{d}_{ij}^{(f)} \right\rangle_{\Omega} \right) \psi^{(f)} = 0, \quad (2.10)$$

$$\sum_{f=1}^N \left(\Delta \sigma_{ij}^{(f)} \varepsilon_{ij}^{(f)} + \left\langle \Delta \bar{\sigma}_{ij}^{(f)} \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} \right\rangle_{\Omega} \right) \psi^{(f)} = Extr, \quad (2.11)$$

unde prin $\psi^{(f)}$ este notată ponderea fazei „f”,

$$\sum_{f=1}^N \psi^{(f)} = 1, \quad (2.12)$$

iar prin $\langle \cdot \rangle_{\Omega}$ este notată operația de integrare după factorul de orientare. La scrierea (2.10), (2.11) s-a presupus că din punct de vedere statistic elementele de structură în interiorul unei faze, după factorul de orientare Ω sunt repartizate omogen.

În baza relațiilor (2.2), (2.8), (2.12) se pot construi ecuațiile constitutive la scară macroscopică, dacă sunt cunoscute relațiile fizice la scară microscopică.

3. RELAȚIILE FIZICE

În lucrare ne vom limita la cazul comportării linear elastice a elementelor de structură în conglomerat. Astfel relațiile fizice la scară microscopică se scriu sub forma

$$t_{ij}^{(f)} = \bar{c}_{ijnm}^{(f)} \bar{d}_{nm}^{(f)}, \quad (3.1)$$

unde prin $\bar{c}_{ijnm}^{(f)}$ sunt notate constantele de microelasticitate în faza „f”, care depind de orientarea axelor cristaline a elementului de structură considerat. Pentru elemente de structură cu cel mai simetric sistem (rețea cubică cu volum centrat sau cu fețe centrate), în care cristalizează majoritatea materialelor, componentele tensorului

$\bar{c}_{ijnm}^{(f)}$ în sistemul cristalografic de coordonate se exprimă numai prin trei mărimi independente

$$c_{1111}^{(f)} \sim c_{11}^{(f)} = c_{22}^{(f)} = c_{33}^{(f)},$$

$$c_{1122}^{(f)} = c_{12}^{(f)} = c_{13}^{(f)} = c_{23}^{(f)};$$

$$c_{2323} = c_{44} = c_{55} = c_{66}.$$

Datorită acestei simetrii, relațiile între tensiuni și deformații (3.1) în sistemul cristalografic de coordonate x_i^* se reduc la trei tipuri de expresii

$$\bar{\sigma}_{11}^{(f)} = \left(c_{11}^{(f)} - c_{12}^{(f)} \right) \bar{\varepsilon}_{11}^{(f)}, \dots, \quad (3.2)$$

$$\bar{\sigma}_{ij}^{(f)} = 2c_{44}^{(f)} \bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)}, \quad i \neq j \quad (3.3)$$

$$\bar{\sigma}_0^{(f)} = \left(c_{11}^{(f)} + 2c_{12}^{(f)} \right) \bar{\varepsilon}_0^{(f)}. \quad (3.4)$$

Dacă mediul structural neordonat este statistic omogen și izotrop pentru fiecare fază, atunci la nivel de faze și conglomerat pot fi scrise relațiile

$$\sigma_{ij}^{(f)} = 2G^{(f)} \varepsilon_{ij}^{(f)}, \quad \sigma_0^{(f)} = K^{(f)} \varepsilon_0^{(f)}; \quad (3.5)$$

$$\sigma_{ij} = 2G \varepsilon_{ij}, \quad \sigma_0 = K \varepsilon_0; \quad (3.6)$$

unde prin $G^{(f)}$ și $K^{(f)}$ sunt notate constantele fictive de elasticitate la nivel de fază, iar G , K_0 – conglomerat. În baza relațiilor fizice (3.2) - (3.6) și ecuațiilor fundamentale (1.1), (1.2), (2.2), (2.8) - (2.12) pot fi determinate constantele de elasticitate la scară macroscopică.

4. SCHEMA DE CALCUL A MACROCONSTANTELOR DE ELASTICITATE

În ipoteza fazelor statistic omogene și izotrope, tensorii $A_{ijnm}^{(f)}$ și A_{ijnm} se prezintă sub formă

$$A_{ijnm}^{(f)} = A_0^{(f)} t_{ijnm} - A^{(f)} D_{ijnm}, \quad (4.1)$$

$$A_{ijnm} = A_0 t_{ijnm} - A D_{ijnm}, \quad V_{ijnm} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{nm}, \quad (4.2)$$

$$D_{ijnm} = \frac{1}{2}(\delta_{in}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jn}) - V_{ijnm}, \quad f = 1, 2, \dots, N \quad (4.3)$$

Ținând seama de (1.4), (1.5) și (4.1), (4.2) în (2.8), (2.9) stabilim următoarele expresii pentru ecuațiile de compoziție a interacțiunilor, care se produc în conglomerat

$$\bar{\sigma}_{ij}^{(f)} - \sigma_{ij}^{(f)} = A^{(f)}(\varepsilon_{ij}^{(f)} - \bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)}), \quad (4.4)$$

$$\bar{\sigma}_0^{(f)} - \sigma_0^{(f)} = A_0^{(f)}(\bar{\varepsilon}_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)}); \quad (4.5)$$

$$\sigma_{ij}^{(f)} - \sigma_{ij} = A(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{(f)}), \quad (4.6)$$

$$\sigma_0^{(f)} - \sigma_0 = A_0(\varepsilon_0^{(f)} - \bar{\varepsilon}_0). \quad (4.7)$$

Să stabilim la început consecințele care rezultă din (4.4), (3.2), (3.3) și (3.5); în sistemul cristalografic de coordonate se obțin relațiile

$$\bar{\varepsilon}_{11}^{*(f)} = \frac{(A^{(f)} + 2G^{(f)})\bar{a}_{1n}\bar{a}_{1m}\varepsilon_{nm}^{(f)}}{c_{11} - c_{12} + A^{(f)}} \dots, \quad (4.8)$$

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{*(f)} = \frac{(A^{(f)} + 2G^{(f)})\bar{a}_{in}\bar{a}_{jm}\varepsilon_{nm}^{(f)}}{2c_{44} + A^{(f)}}, \quad i \neq j \quad (4.9)$$

unde prin $\bar{a}_{ij} = \cos(\bar{x}_i, x_j)$ sunt notate cosinusurile directoare, cu ajutorul cărora se precizează poziția sistemului cristalografic de coordonate față de sistemul global. Revenind la sistemul global de coordonate

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} = \bar{a}_{ki}\bar{a}_{qj}\bar{\varepsilon}_{kq}^{*(f)}, \quad (4.10)$$

și utilizând expresiile generale de integrare după factorul de orientare Ω

$$\begin{aligned} \langle \bar{a}_{np}\bar{a}_{mq}\bar{a}_{kc}\bar{a}_{le} \rangle_{\Omega} &= \frac{1}{15}(2\delta_{nm}\delta_{kl} - \delta_{nk}\delta_{ml})\delta_{pq}\delta_{ce} + \\ &+ \frac{1}{15}(3\delta_{nk}\delta_{ml} - \delta_{nm}\delta_{kl})I_{pqce}, \quad (4.11) \end{aligned}$$

găsim formulele, deduse pentru cazul materialelor policristaline cu o singură fază [3]

$$3\frac{2G^{(f)} + A^{(f)}}{2c_{44}^{(f)} + A^{(f)}} + 2\frac{2G^{(f)} + A^{(f)}}{c_{11}^{(f)} - c_{12}^{(f)} + A^{(f)}} = 5, \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \langle \Delta\bar{\sigma}_{ij}^{(f)}\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} \rangle_{\Omega} &= -\frac{A^{(f)}}{5}\left(2\left(\frac{2G^{(f)} - c_{11}^{(f)} + c_{12}^{(f)}}{c_{11}^{(f)} - c_{12}^{(f)} + A^{(f)}}\right)^2 + \right. \\ &+ \left. 3\left(\frac{2G^{(f)} - 2c_{44}^{(f)}}{2c_{44}^{(f)} + A^{(f)}}\right)^2\right)\varepsilon_{nm}^{(f)}\varepsilon_{nm}^{(f)}, \end{aligned}$$

Din relațiile (3.5), (3.6) și (4.5) stabilim expresiile pentru valorile medii ale componentelor deviatorului tensorului deformație în faze

$$\varepsilon_{ij}^{(f)} = \frac{A + 2G}{A + 2G^{(f)}}\varepsilon_{ij}. \quad (4.14)$$

Ținând seama în (4.14) că $\sum \varepsilon_{ij}^{(f)}\psi^{(f)} = \varepsilon_{ij}$ găsim relația de calcul pentru modulul macroscopic de forfecare

$$(A + 2G)\sum_{f=1}^N \frac{\psi^{(f)}}{A + 2G^{(f)}} = 1. \quad (4.15)$$

Deoarece din (4.14) rezultă că

$$\Delta\sigma_{ij}^{(f)} = -A\Delta\varepsilon_{ij}^{(f)},$$

cu ajutorul formulei (4.14) deducem relația

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{ij}^{(f)}\Delta\varepsilon_{ij}^{(f)} &= -A\Delta\varepsilon_{nm}^{(f)}\Delta\varepsilon_{nm}^{(f)} = \\ &= -A\left(\frac{2G}{A + 2G^{(f)}}\right)^2\varepsilon_{nm}\varepsilon_{nm}. \quad (4.16) \end{aligned}$$

Ținând seamă de (4.13), (4.14) și (4.16) în (2.11) stabilim următoarea relație fundamentală

$$\begin{aligned} \sum_{f=1}^N \left(A\left(\frac{2G}{A + 2G^{(f)}}\right)^2 + \frac{A^{(f)}}{5}\left(\frac{A + 2G}{A + 2G^{(f)}}\right)^2 \right) \times \\ \times \left(2\left(\frac{2G^{(f)} - c_{11}^{(f)} + c_{12}^{(f)}}{c_{11}^{(f)} - c_{12}^{(f)} + A^{(f)}}\right)^2 + \right. \\ \left. + 3\left(\frac{2G^{(f)} - c_{44}^{(f)}}{2c_{44}^{(f)} + A^{(f)}}\right)^2 \right) \frac{\psi^{(f)}}{2G} = Extr \quad (4.17) \end{aligned}$$

La scrierea expresiei (4.17) s-a ținut seama că produsul interior al mărimilor experimentale $\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$ nu variază.

Astfel expresiile (2.12), (4.12), (4.15) și (4.17) formează un sistem complet de ecuații neliniare în baza cărora se precizează parametri interni necunoscuți $A^{(f)}$, A , $G^{(f)}$ și modulul macroscopic de forfecare G , iar cum rezultă din ecuațiile menționate depinde numai de constantele de microelasticitate a fazelor $c_{11}^{(f)} - c_{12}^{(f)}$, $2c_{44}^{(f)}$ și ponderea lor $\psi^{(f)}$.

În continuare vom stabili a doua constantă macroscopică de elasticitate – modulul de compresiune K . În acest scop revenim la relațiile (3.4), (3.5), (3.6), (4.5), (4.7) și (2.10). Integrând relația (3.4) găsim

$$K^{(f)} = c_{11}^{(f)} + 2c_{12}^{(f)} \quad (4.18)$$

Substituind (3.5) în (4.5) și ținând seama că $\bar{K}^{(f)} = K^{(f)}$ aflăm

$$\left(K^{(f)} - A_0^{(f)}\right) \left(\bar{\varepsilon}_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)}\right) = 0 \quad (4.19)$$

Deoarece $\bar{\varepsilon}_0^{(f)} \neq \varepsilon_0^{(f)}$, din (4.19) deducem

$$A_0^{(f)} = K^{(f)} = c_{11}^{(f)} + 2c_{12}^{(f)}. \quad (4.20)$$

Din (4.19) rezultă că datorită egalității $\bar{K}^{(f)} = K^{(f)}$ fluctuațiile tensorului sferic nu pot fi precizate în baza ecuațiilor de compoziție. Aceasta nedeterminare poate fi depășită și în bază formulei (2.10), care după descompunerea tensorilor tensiune și deformație în deviatori și tensori sferici, devine

$$\begin{aligned} & \sum_{f=1}^N \left((\sigma_{ij}^{(f)} - \sigma_{ij}^{(f)}) \left(\varepsilon_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \right) + \\ & + 3 \left(\sigma_0^{(f)} - \sigma_0^{(f)} \right) \left(\varepsilon_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)} \right) + \\ & + \left\langle \left(\bar{\sigma}_{ij}^{(f)} - \sigma_{ij}^{(f)} \right) \left(\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \right\rangle_{\Omega} + \\ & + \left\langle 3 \left(\bar{\sigma}_0^{(f)} - \sigma_0^{(f)} \right) \left(\bar{\varepsilon}_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)} \right) \right\rangle_{\Omega} \psi^{(f)} = 0. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Modelul devine complet determinat dacă vom admite că pentru fiecare element de structură are loc relația

$$\begin{aligned} & \left(\bar{\sigma}_{ij}^{(f)} - \sigma_{ij}^{(f)} \right) \left(\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) + \\ & + 3 \left(\bar{\sigma}_0^{(f)} - \sigma_0^{(f)} \right) \left(\bar{\varepsilon}_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Substituind în (4.22) relațiile (4.4), (4.5) și ținând seama de (4.20) stabilim expresia

$$\begin{aligned} & \left(\bar{\varepsilon}_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)} \right)^2 = \frac{A^{(f)}}{3K^{(f)}} \left(\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \times \\ & \times \left(\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \end{aligned} \quad (4.23)$$

în baza căreia se precizează variația tensorului sferic în interiorul fazei considerate; mărimile $\bar{\varepsilon}_{ij}^{(f)}$, $\varepsilon_{ij}^{(f)}$ și $A^{(f)}$ după cum rezultă din sistemul (4.12), (4.14), (4.15), (4.17), (4.8), (4.9) sunt cunoscute.

Din (3.5), (3.6) și (4.7) găsim

$$\varepsilon_0^{(f)} = \frac{K - A_0}{K^{(f)} - A_0} \varepsilon_0. \quad (4.24)$$

Deoarece $\sum_{f=1}^N \varepsilon_0^{(f)} \psi^{(f)} = \varepsilon_0$, din (4.24)

rezultă

$$(K - A_0) \sum \frac{\psi^{(f)}}{K - A_0} = 1. \quad (4.25)$$

În expresia (4.25) figurează două necunoscute A_0 și K ; pentru a obține un sistem complet de ecuații vom utiliza relația (4.21) din care rezultă

$$\begin{aligned} & \sum_{f=1}^N \left((\sigma_{ij}^{(f)} - \sigma_{ij}^{(f)}) \left(\varepsilon_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \right) + \\ & + 3 \left(\sigma_0^{(f)} - \sigma_0^{(f)} \right) \left(\varepsilon_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)} \right) \psi^{(f)} \end{aligned} \quad (4.26)$$

La scrierea formulei (4.26) s-a ținut cont de expresia (4.22). Înlocuind în (4.26) relațiile (4.6), (4.7) găsim

$$\begin{aligned} & A \sum_{f=1}^N \left(\varepsilon_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \left(\varepsilon_{ij}^{(f)} - \varepsilon_{ij}^{(f)} \right) \psi^{(f)} = \\ & = 3A_0 \sum \left(\varepsilon_0^{(f)} - \varepsilon_0^{(f)} \right)^2 \psi^{(f)} \end{aligned} \quad (4.27)$$

Cu ajutorul formulelor (4.14), (4.24) expresia (4.27) poate fi scrisă sub forma

$$\begin{aligned} & 4 \sum_{f=1}^N \left(\frac{G - G^{(f)}}{A + 2G} \right) \psi^{(f)} = \\ & = \left[\sum_{f=1}^N \left(\frac{K - K^{(f)}}{K^{(f)} - A_0} \right)^2 \psi^{(f)} \right] \frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon_{ij} \varepsilon_{ij}}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Expresiile (4.25), (4.28) formează un sistem complet de ecuații, în baza căruia se determină parametrul intern A_0 și modulul macroscopic de compresiune K .

Din ecuațiile obținute rezultă că modulul macroscopic de compresiune depinde nu numai de constantele de elasticitate a elementelor de structură și ponderea fazelor, dar și de starea de deformare $\frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}}$. În consecință stabilim că prezența mai multor faze în conglomerat provoacă efect măsurabil specific.

5. CONCLUZII

Din modelul structural analizat în lucrare rezultă că fiecare element de structură la scară microscopică provoacă un efect măsurabil la scară macroscopică. Pornind de la relațiile stabilite între cauză și efect, reușim în baza experiențelor la scară macroscopică să formulăm concluzii în privința microstructurii materialului examinat. Dacă din macroexperiență stabilim că starea de tensiune sau de deformare nu influențează mărimea modulilor de forfecare G și compresiune K , atunci putem afirma că materialul policristalin examinat este monofazic și cu rețea cristalină cubică. În cazul materialului policristalin cu rețea cubică cu mai multe faze, din macroexperiență vom constata că modulul de forfecare nu este influențat de starea de tensiune, iar modulul de compresiune K depinde de starea de tensiune/deformare. Menționăm că efectele enumerate nu rezultă din alte teorii de trecere de la starea microscopică la starea macroscopică. Pe baza efectelor neliniare stabilite în cadrul modelului structural propus de autor, se poate afirma că există o echivalență între problema directă, adică deducerea ecuațiilor constitutive la scară macroscopică în baza ecuațiilor constitutive la scară microscopică, și problema inversă, descifrarea caracteristicilor termomecanice la scară

microscopică din macroexperiență. Observăm că problema inversă, până la descoperirea efectelor neliniare în [1-5], se considera de majoritatea specialiștilor că n-are soluție.

Existența soluției inverse are mare importanță practică și științifică. Deoarece elementele de structură în conglomerat își modifică unele proprietăți, direcția de cunoaștere de la micro la macro, mai ales în procesele ireversibile, conduce la unele erori inevitabile la descrierea comportării conglomeratului. Aceasta consfătuire rămâne valabilă și în problema inversă, deoarece nu toate detaliile elementelor de structură pot fi precizate din macroexperiență. Astfel, procesul de cunoaștere va deveni mai complet dacă studiul se va efectua în ambele direcții.

Bibliografie

1. Marina V. Stat Equation under Proportional Noniothermal Loading, *International Applied Mechanics*, Vol.33, Nr.2, p.92-99, 1996.
2. Marina V. The principles of passing From the Microscopic state to the Macroscopic one, *Metallurgy and New Materials Researches*, Vol.IV, Nr.4, p. 14-28, 1998.
3. Marina V. Principy perehoda ot micro c macro naprajeonno-deformirovannomu sostoianiu, *Buletinul Academiei de Științe a Republicii Moldova, Matematica*, Nr.2, p.16-24, 1998.
4. Marina V. Regarding the possibilities to decode the microstructure characteristics from macro-experience, *Metallurgy and New Materials Researches*, Vol. X, N4, p. 1-14, 2002.
5. Marina V. Modelarea comportării neliniare și anizotrope a unei țesături în domeniul reversibil, *Meridian Ingineresc*, N 2, p.42-45, 2003.