STUDIUL INFLUENȚEI TIPURILOR DE LEGĂTURI ATOMICE ASUPRA NUMĂRULUI CONSTANTELOR DE ELASTICITATE

Autor: Mihail VÎRLAN
Conducător științific: dr. hab., prof. univ. Vasile MARINA

Universitatea Tehnică a Moldovei

Abstract: În lucrare este analizat un spectru larg de date experimentale privind constantele de elasticitate în funcție de tipul legăturilor între atomi. Este elaborat un algoritm rațional de analiză a rezultatelor experimentale prezentate sub formă matricială. Eficiența algoritmului elaborat este ilustrată în cadrul analizei unor forme polinomiale a relațiilor dintre constantele de elasticitate.

Cuvinte cheie: *constante de elasticitate, legături atomice, matrice*, *date experimentale.*

1. Introducere

În literatura de specialitate se operează cu un volum mare de date experimentale. Aceste date sunt prezentate în formă de tabele. În lucrare sunt analizate datele experimentale care se referă la constantele de elasticitate ale monocristalelor. Pentru a simplifica procedeul de operare cu constantele de elasticitate este propusă prezentarea matricială.

Se analizează constantele de elasticitate ale monocristalelor pentru urmatoarele materiale: *Fe, Cr, Mo, W, V, Nb, Ta*, ce sunt atribuite fiecarui rând a matricei în ordinea respectivă. Constantele c_{11}, c_{44}, c_{12}, sunt aranjate respectiv în coloanele unu, doi şi trei. Matricea (1), este rațional de construit pentru materiale ce au aceialaşi tip a legăturilor între atomi. Analizând fiecare tip de interacțiune aparte, se poate de gasit legități importante pentru studiu în continuare.

$$c = \begin{pmatrix} 2.43 & 1.219 & 1.38 \\ 3.909 & 1.034 & 0.897 \\ 4.649 & 1.088 & 1.655 \\ 5.326 & 1.631 & 2.05 \\ 2.323 & 0.46 & 1.194 \\ 2.527 & 0.319 & 1.331 \\ 2.664 & 0.875 & 1.581 \end{pmatrix} \qquad (1)$$

2. Modalități de analiză a rezultatelor experimentale prezentate sub formă matricială

Să admitem că constantele de elasticitate prezentate în tabel se supun unei legi de variație:

$$a_{11}x_1^{\ 2} + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{22}x_2^{\ 2} + a_{33}x_3^{\ 2} = 0 \quad (2)$$

Împărțind ecuația (2) la a_{33} şi notând prin $C = a_{11}x_1^{\ 2} + a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^{\ 2}$, iar $B = a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2$ obținem: $c + bx_3 = x_3^{\ 2}$, sau $x_3^{\ 2} - Bx_3 - C = 0$. Rezolvând ecuația de gradul doi obținem rădăcinile, care reprezintă valoarea obținută în mod teoretic a constantei c_{44}, în baza constantelor c_{11} şi c_{12}.

Declarând în MathCad polinomul (4), şi coeficienții acestui polinom (5), respectând regulile de lucru în acest program. În aşa fel este uşor de operat cu aceste date experimentale facând referire la componentele matricii.

$$y(y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6) = y_1 \cdot x_1^{\ 2} + y_2 \cdot x_1 \cdot x_2 + y_3 \cdot x_1 \cdot x_3 + y_4 \cdot x_2 \cdot x_3 + y_5 \cdot x_2^{\ 2} + y_6 \cdot x_3^{\ 2} \qquad (4)$$

$a_{i,1} := (c_{i,1})^2$; $a_{i,2} := c_{i,1} \cdot c_{i,3}$; $a_{i,3} := c_{i,1} \cdot c_{i,2}$; $a_{i,4} := c_{i,3} \cdot c_{i,2}$; $a_{i,5} := (c_{i,3})^2$ (5)

Deasemenea declarăm termenii liberi: $b_i := (c_{i,2})^2$.

Matricea (6)reprezintă coeficienții sistemul de ecuații.

$$a = \begin{pmatrix} 5.905 & 3.353 & 2.962 & 1.682 & 1.904 \\ 15.28 & 3.506 & 4.042 & 0.927 & 0.805 \\ 21.613 & 7.694 & 5.058 & 1.801 & 2.739 \\ 28.366 & 10.918 & 8.687 & 3.344 & 4.202 \\ 5.396 & 2.774 & 1.069 & 0.549 & 1.426 \end{pmatrix} \quad (6)$$

$|a| = -7.776, \quad \det A \neq 0, \quad a \cdot y = b \Rightarrow y = a^{-1} \cdot b$.

Declarăm ceea ce am notat prin $C = a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2$, iar $B = a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2$, având în vedere necunoscutele y, ce au fost determinate: $B_i = y_{3,1}c_{i,1} + y_{4,1}c_{i,3}$; $C_i = y_{1,1}(c_{i,1})^2 + y_{2,1}c_{i,1}c_{i,3} + y_{5,1}(c_{i,3})^2$.

Obținem ecuația de gradul doi, $x_3^2 - Bx_3 - C = 0$, rezolvând această ecuație obținem rădăcinile:

$$X3_{1_i} := \frac{B_i + \sqrt{(B_i)^2 + 4C_i}}{2} \qquad X3_{2_i} := \frac{B_i - \sqrt{(B_i)^2 + 4C_i}}{2} \quad (7)$$

$X3_{1_i} =$	$X3_{2_i} =$
1.219	0.451
1.034	0.544
1.282	1.088
1.631	1.213
1.031	0.46

Rădăcinile ecuației de gradul doi (7), deasemenea pot fi incluse în matricea constantelor de elasticitate (1), pentru a putea face comparația constantei de elasticitate c_{44}, pentru fiecare material concretobținută în mod teoretic cu datele experimentale din literatură.Pentru aceasta radacinile ecuației de gradul doi trebuie de declarat în felul urmator:

$$c_{i,4} := \frac{B_i + \sqrt{(B_i)^2 + 4C_i}}{2}, \quad c_{i,5} := \frac{B_i - \sqrt{(B_i)^2 + 4C_i}}{2}.$$

Calculelese vor efectua pentru fiecare cinci materiale aparte pe care le indicam printr-o variabilă şir $i := 1..5$,oricîte materiale nu ar fi incluse în matricea (1). Coloanele patru şi cinci a matricei (8), reprezintă rădăcinile ecuației de gradul doi (7).

$$c = \begin{pmatrix} 2.43 & 1.219 & 1.38 & 1.219 & 0.451 \\ 3.909 & 1.034 & 0.897 & 1.034 & 0.544 \\ 4.649 & 1.088 & 1.655 & 1.282 & 1.088 \\ 5.326 & 1.631 & 2.05 & 1.631 & 1.213 \\ 2.323 & 0.46 & 1.194 & 1.031 & 0.46 \\ 2.527 & 0.319 & 1.331 & 0 & 0 \\ 2.664 & 0.875 & 1.581 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Concluzie:În urma analizei rezultatelor obținute se observă că rădăcinile ecuației pătrate ne dau valoarea obținută în mod teoretic a constantei c_{44}, în baza constantelor c_{11} şi c_{12}, pentru materiale concrete. În aşa mod se poate de analizat un spectru larg de date experimentale privind constantele de elasticitate în funcție de tipul legăturilor între atomi

Bibliografie

1. DEMIDOV S. P. *Teoria uprugosti*, Moskva, Vişaia şcola 1979.
2. MARINA V.: *Calculul Tensorial, Pentru Ingineri*,Vol I, Tehnica-Info, Chişinău 2006.