Elastičnost kristala

« Fizika čvrstog stanja »

Ivo Batistić

Fizički odsjek, PMF
Sveučilište u Zagrebu

predavanja 2014/2015 (zadnja inačica 6. veljače 2015.)

Pregled predavanja

Tenzor deformacije i tenzor naprezanja

Termodinamika elastičnih deformacija

Hookeov zakon za izotropnu sredinu

Elastični valovi u izotropnoj sredini

Hookeov zakon za kristal

Stabilnost kubičnih kristala

Stlačivost tijela

Elastični valovi u kristalu

Temperaturna ovisnost elastičnih konstanti

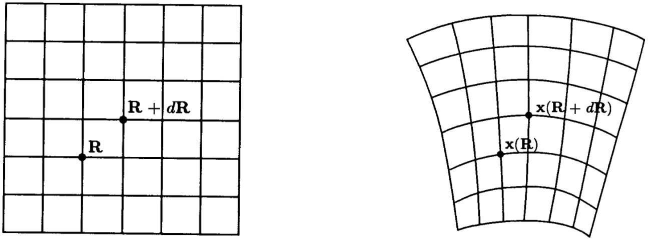
Tenzor deformacije i tenzor naprezanja

Tenzor deformacije

Do sada smo promatrali kristal kao idealnu pravilnu rešetku u kojoj ioni/atomi zauzimaju točno određene položaje. U realnom kristalu atomi/ioni se mogu gibati, kristalna rešetka se može deformirati.

- Deformacije mogu nastati spontano (kao termodinamičke fluktuacije) ili kao rezultat primjene vanjskih sila.
- **U ovom predavanju** zanemaruje se atomska struktura.
- Kristal se promatra kao **homogena kontinuirana sredina**.
- Radi se o dugovalnoj aproksimacije koja vrijedi za elastične valove kojima je $\lambda > 10^{-8}$ m (100 Å).
- Tipične frekvencije takvih valova su $10^{11} - 10^{12}$ Hz.
- Pretpostavlja se da su deformacije dovoljno male da se nelinearnosti, odstupanja od Hookeovog zakona, mogu zanemariti.

Tenzor deformacije



- U nedeformiranom sredstvu položaji točaka zadani su preko radijus vektora: $\vec{R}$.
- U deformiranom mediju točka na položaju $\vec{R}$ prelazi u $\vec{x}(\vec{R})$:

$$\vec{R} \longrightarrow \vec{x}(\vec{R}) = \vec{R} + \vec{u}(\vec{R})$$

- $\vec{u}(\vec{R})$ je pomak točke iz ravnotežnog položaja (položaja u nedeformiranom kristalu).

Tenzor deformacije

Promatrajmo dvije beskonačno bliske točke medija zadane s položajima:

$$\vec{R} \qquad \text{i} \qquad \vec{R} + d\vec{R}$$

U deformiranoj sredini one prelaze u:

$$\vec{x}(\vec{R}) \qquad \text{i} \qquad \vec{x}(\vec{R} + d\vec{R})$$

Čemu je jednaka udaljenost točaka u deformiranoj sredini?

$$\begin{aligned}
d\vec{x} &= \vec{x}(\vec{R} + d\vec{R}) - \vec{x}(\vec{R}) \\
&= \sum_i \vec{e}_i \left(x_i(\vec{R} + d\vec{R}) - x_i(\vec{R}) \right) \\
&= \sum_i \vec{e}_i \left(dR_i + u_i(\vec{R} + d\vec{R}) - u_i(\vec{R}) \right) \\
&= \sum_i \vec{e}_i \left(dR_i + \sum_j \frac{\partial u_i}{\partial R_j} dR_j \right)
\end{aligned}$$

Tenzor deformacije

Promjena udaljenosti bliskih točaka zbog deformacije:

$$d\vec{x}^2 - d\vec{R}^2 = \sum_{i,j} 2u_{ij}\, dR_i\, dR_j$$

gdje je:

$$u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial R_j} + \frac{\partial u_j}{\partial R_i} + \underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial R_j}\frac{\partial u_j}{\partial R_i}}_{\text{nelinearni član}}\right)$$

Nelinearne članove ćemo zanemariti.
Pretpostavljamo da su deformacije male.

Veličina u_{ij} zove se **tenzor deformacije**.

Lagrangeov i Eulerov koordinatni sustav

- Između položaja u nedeformiranom sustavu, $\vec{R}$, i položaja deformiranog sustava, $\vec{x}$, postoji jednoznačno preslikavanje.

$$\vec{x}(\vec{R}) \leftrightarrow \vec{R}(\vec{x})$$

- Deformaciju $\vec{u}(\vec{R})$ možemo prikazivati preko koordinata deformiranog sustava:

$$\vec{u}(\vec{R}) \longrightarrow \vec{u}(\vec{x}) = \vec{u}(\vec{R}(\vec{x}))$$

- Sustav prikazivanja deformacije
  - preko **nedeformiranih** koordinata nazivamo **Lagrangeov**,
  - dok sustav prikazivanja deformacije preko **deformiranih** koordinata nazivamo **Eulerov**.

- U Eulerovom sustavu koordinata nedeformirane pozicije su:

$$\vec{R} = \vec{x} - \vec{u}(\vec{x})$$

Jedinični vektori

Za položaje $\vec{R}$ i $\vec{R} + d\vec{R}$ možemo izabrati početak i kraj jediničnog vektora $\vec{i}$:

$$d\vec{R} = (1, 0, 0)$$

U deformiranom sustavu jedinični vektor postaje:

$$\begin{aligned}
\vec{i}' &= \vec{x}(\vec{R} + \vec{i}) - \vec{x}(\vec{R}) \\
&= \vec{i} + \vec{u}(\vec{R} + \vec{i}) - \vec{u}(\vec{R}) \\
&= \vec{i}\left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial R_x}\right) + \vec{j}\,\frac{\partial u_y}{\partial R_x} + \vec{j}\,\frac{\partial u_z}{\partial R_x}
\end{aligned}$$

Na isti način:

$$\begin{aligned}
\vec{j}' &= \vec{i}\,\frac{\partial u_x}{\partial R_y} + \vec{j}\left(1 + \frac{\partial u_y}{\partial R_y}\right) + \vec{k}\,\frac{\partial u_z}{\partial R_y} \\
\vec{k}' &= \vec{i}\,\frac{\partial u_x}{\partial R_z} + \vec{j}\,\frac{\partial u_y}{\partial R_z} + \vec{k}\left(1 + \frac{\partial u_z}{\partial R_z}\right)
\end{aligned}$$

Jedinični vektori

Promjena dužina vektora:

$$
\begin{aligned}
\vec{i}' \cdot \vec{i}' - 1 &= 2\frac{\partial u_x}{\partial R_x} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial R_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial R_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial R_x}\right)^2 \approx 2\frac{\partial u_x}{\partial R_x} = 2\,u_{xx} \\
\vec{j}' \cdot \vec{j}' - 1 &\approx 2\frac{\partial u_y}{\partial R_y} = 2\,u_{yy} \\
\vec{k}' \cdot \vec{k}' - 1 &\approx 2\frac{\partial u_z}{\partial R_z} = 2\,u_{zz}
\end{aligned}
$$

Promjena kutova:

$$
\begin{aligned}
\vec{i}' \cdot \vec{j}' &\approx \frac{\partial u_x}{\partial R_y} + \frac{\partial u_y}{\partial R_x} = 2\,u_{xy} \\
\vec{j}' \cdot \vec{k}' &\approx \frac{\partial u_y}{\partial R_z} + \frac{\partial u_z}{\partial R_y} = 2\,u_{yz} \\
\vec{k}' \cdot \vec{i}' &\approx \frac{\partial u_z}{\partial R_i} + \frac{\partial u_x}{\partial R_z} = 2\,u_{zx}
\end{aligned}
$$

Promjena volumena

Dijagonalni elementi tenzora deformacije opisuju promjenu dužina jediničnih vektora
a nedijagonalni elementi opisuju promjenu kutova između jediničnih vektora.

Volumen je zadan s mješovitim produktom vektora:

$$V' = \vec{i}' \cdot (\vec{j}' \times \vec{k}') \approx 1 + \underbrace{u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}}_{=\delta V/V}$$

Relativna promjena volumena dana je tragom tenzora deformacije.

Tenzor naprezanja

- Ako sredina nije deformirana molekule se nalaze u stanju termalne ravnoteže. Svi dijelovi sredine su u mehaničkoj ravnoteži. Sile na pojedine dijelove sredine (podsustavi) su jednake nuli.
- Ako se pojavi deformacija, ravnoteža je poremećena. Tada se javljaju **restitucijske sile** koje nastoje sustav vratiti u ravnotežu.
- Restitucijske sile su međuatomske/međumolekularne sile kratkog dosega.
- Međudjelovanje pojedinih dijelova sustava događa se na dodirnim površinama.
- Izuzetak od ovoga su sustavi u kojima se deformacijom stvara dugodosežno električno polje (piro- i piezoelektrični materijali). To nisu tvari koje se ovdje razmatraju.

Ako sile **jesu** kratkog dosega, ukupnu sila koja djeluje na neki podsustav zadana je silama na njegovoj površini.

Tenzor naprezanja

- Sila koja djeluje na jediničnu površinu tijela naziva se **naprezanje**.
- Sila nije nužno okomita na površinu nego postoje i tangencijalne komponente (npr. sila trenja je tangencijalna).
- Sila ovisi o orijentaciji površine tj. o vektoru okomitom na površinu:

Neka je jedinična površina dS, $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ jedinični vektor okomit na površinu ($dS_j = dS\, n_j$). Sila na površinu:

$$\begin{aligned}
df_x &= dS\,(\sigma_{xx}\, n_x + \sigma_{xy}\, n_y + \sigma_{xz}\, n_z) = \sum_j \sigma_{xj}\, dS_j \\
df_y &= dS\,(\sigma_{yx}\, n_x + \sigma_{yy}\, n_y + \sigma_{yz}\, n_z) = \sum_j \sigma_{yj}\, dS_j \\
df_z &= dS\,(\sigma_{zx}\, n_x + \sigma_{zy}\, n_y + \sigma_{zz}\, n_z) = \sum_j \sigma_{zj}\, dS_j
\end{aligned}$$

Skup od 9 veličina, σ_{ij}, zove se **tenzor naprezanja**. Dimenzija tenzora naprezanja je sila po površini ili energija po volumenu. (Tenzor deformacije je bezdimenzionalan.)

Sila

Ukupna sila koju osjeća neki podsustav omeđen površinom S dana je s integralom:

$$\vec{F} = \sum_i \vec{e}_i F_i = \sum_i \vec{e}_i \overbrace{\int_S \sum_j (dS_j\, \sigma_{ij})}^{F_i} = \sum_{i,j} \vec{e}_i \int_S dS_j\, \sigma_{ij}$$

Sila koju osjeća kockica u točci (x, y, z) dimenzija $\Delta x, \Delta y$ i Δz u x-smjeru je:

$$\begin{aligned}
\Delta F_x &= [\sigma_{xx}(x + 0.5\Delta x, y, z) - \sigma_{xx}(x - 0.5\Delta x, y, z)]\ \Delta y\, \Delta z\, + \\
&\quad [\sigma_{xy}(x, y + 0.5\Delta y, z) - \sigma_{xy}(x, y - 0.5\Delta y, z)]\ \Delta x\, \Delta z\, + \\
&\quad [\sigma_{xz}(x, y, z + 0.5\Delta z) - \sigma_{xz}(x, y, z - 0.5\Delta z)]\ \Delta x\, \Delta y \\
&\approx \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \right) \Delta x\, \Delta y\, \Delta z
\end{aligned}$$

Gustoća sile (sila po jedinici volumena) je dana gradijentom tenzora naprezanja:

$$\vec{f} = \sum_{i,j} \vec{e}_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_j}$$

Zakretna sila

Ukupna sila može se izračunati i preko volumnog integrala gustoće sile:

$$\vec{F} = \int_V d^3R \left(\sum_{i,j} \vec{e}_i \, \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_j} \right)$$

Ukupna zakretna sila na neki podsustav dana je analognim izrazom:

$$\vec{M} = \int_V d^3R \sum_i \vec{e}_i \, \epsilon_{ijk} R_j f_k$$

gdje je ϵ_{ijk} antisimetrični tenzor (Levi-Civita):

$$\begin{aligned} \epsilon_{xyz} = \epsilon_{yzx} = \epsilon_{zxy} &= +1 \\ \epsilon_{xzy} = \epsilon_{zyx} = \epsilon_{yxz} &= -1 \\ \text{sve ostalo} &= 0 \quad (\text{bilo koja dva ista indeksa}) \end{aligned}$$

Zakretna sila

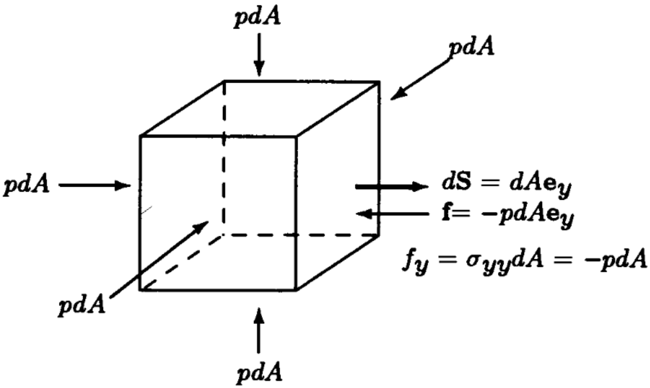
Zakretna sila:

$$
\begin{aligned}
\vec{M} &= \int_V d^3R \sum_i \vec{e}_i\, \epsilon_{ijk} R_j \sum_l \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial R_l} \\
&= \sum_i \vec{e}_i \left[\int_V d^3R \sum_l \epsilon_{ijk} \left(\frac{\partial}{\partial R_l} (R_j\, \sigma_{kl}) - \delta_{lj}\, \sigma_{kl} \right) \right] \\
&= \sum_i \vec{e}_i \left[\sum_l \int_S dS_l\, \epsilon_{ijk} R_j\, \sigma_{kl} - \int_V d^3R\, \epsilon_{ijk} \sigma_{kj} \right]
\end{aligned}
$$

Volumni dio izraza treba biti jednak je nuli, a to je zadovoljeno ako je tenzor naprezanja simetričan:

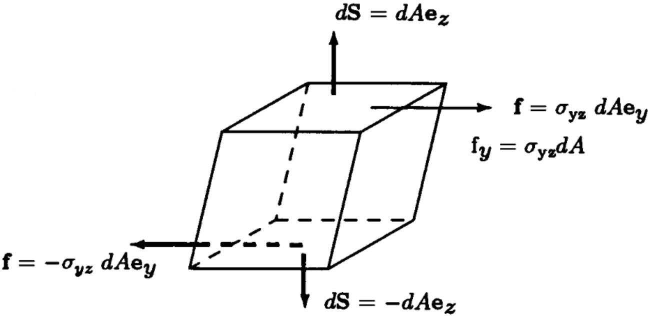
$$
\sigma_{ij} = \sigma_{ji}
$$

Hidrostatska kompresija



$$\sigma = \begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix}$$

Smicanje



$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \end{pmatrix}$$

Termodinamika elastičnih deformacija

Mala promjena deformacije, npr. $\delta\vec{u}$, u sustavu u kojem postoje interne sile između njegovih dijelova, vrši rad.

Izvršeni rad:

$$\begin{aligned}
\delta W &= \int_V d^3R\,\delta\vec{u}\cdot\left(\sum_{i,j}\vec{e}_i\,\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial R_j}\right) = \sum_{i,j}\int_V d^3R\,\delta u_i\,\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial R_j} \\
&= \sum_{i,j}\int_V d^3R\left[\frac{\partial}{\partial R_j}\left(\delta u_i\sigma_{ij}\right) - \sigma_{ij}\,\underbrace{\delta\frac{\partial u_i}{\partial R_j}}_{\delta u_{ij}}\right] \\
&= \sum_{i,j}\int_S dS_j\,\left(\sigma_{ij}\,\delta u_j\right) - \int_V d^3R\left(\sum_{i,j}\sigma_{ij}\,\delta u_{ij}\right)
\end{aligned}$$

U beskonačnoj sredini može se pretpostaviti da nema deformacije u beskonačnosti, prema tome nema niti naprezanja $\Longrightarrow$ površinski integral = 0

Termodinamičke funkcije

Rad sustava zbog promjene deformacije po jedinici volumena je:

$$\delta w = -\sum_{i,j} \sigma_{ij}\, \delta u_{ij}$$

- Proces deformiranja događa se dovoljno sporo da se može smatrati da je sustav svakom trenutku u ravnotežnom stanju koje odgovara vanjskim uvjetima.
- Proces deformiranja je reverzibilan.
  (Reverzibilni procesi su oni u kojima se sustav cijelo vrijeme u ravnotežnom stanju.)

Termodinamičke funkcije

Dovedena toplina $(dq = Tds)$ i izvršeni rad dw dovode do promjena gustoće unutrašnje energije (e):

$$de = T\,ds - dw = T\,ds + \sum_{i,j} \sigma_{ij}\, du_{ij}$$

Ako su sile hidrostatske kao što su one u plinovima i tekućinama, tada je:

$$\sigma_{ij} = -p\,\delta_{ij}$$

(Postoji samo okomita komponenta sile na površinu). Promjena unutrašnje energije je:

$$\begin{aligned} de &= T\,ds + \sum_{i,j} \sigma_{ij}\, du_{ij} = T\,ds - p \sum_{i} du_{ii} \\ &= T\,ds - p\,\frac{dV}{V} \end{aligned}$$

To je izraz već otprije poznat iz termodinamike.

Termodinamičke funkcije

Analogno, slobodna energija sustava po jedinici volumena je:

$$df = -s\,dT + \sum_{i,j} \sigma_{ij}\,du_{ij}$$

Moguće je definirati termodinamički potencijal koji je funkcija naprezanja:

$$\phi(T, \sigma_{ij}) = e - T\,s - \sum_{i,j} \sigma_{ij}\,u_{ij} = f - \sum_{i,j} \sigma_{ij}\,u_{ij}$$

Vrijedi:

$$d\phi = -s\,dT - \sum_{i,j} u_{ij}\,d\sigma_{ij}$$

Iz termodinamičkih potencijala može se izračunati i deformacija i naprezanje u ravnotežnom stanju:

$$\sigma_{ij} = \left(\frac{\partial e}{\partial u_{ij}}\right)_s = \left(\frac{\partial f}{\partial u_{ij}}\right)_T \qquad u_{ij} = -\left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma_{ij}}\right)_T$$

Hookeov zakon za izotropnu sredinu

Hookeov zakon

Da bi se mogla razmatrati termodinamička svojstva sustava potrebno je znati kako slobodna energija ovisi o deformaciji.

Pretpostavke:

- Deformacija je dovoljno mala da se slobodna energija može razviti u Taylorov red po u_{ij}.
- Temperatura medija je svuda ista.
- Temperature deformiranog i nedeformiranog medija su iste.
- U odsustvu deformacije (u_{ij}) naprezanje σ_{ij} =0

$\Longrightarrow$ slobodna energija ne sadrži linearne članove u deformaciji.

Hookeov zakon

Opći mogući član u razvoju slobodne energije po deformaciji sadrži članove tipa:

$$a_{ijkl}\, u_{ij}\, u_{kl}$$

Takav opći član nema svojstvo skalara da je isti u svakom koordinatnom sustavu.

Slobodna energija koja je skalar ne sadrži takav opći član.

Slobodna energija sadrži samo **skalarne kvadratne kombinacije** komponenti u_{ij}-tenzora koje su iste u svakom koordinatnom sustavu.

Različiti koordinatni sustavi se dobiju jedan iz drugog:

- rotacijama za proizvoljni kut ako je sustav izotropna sredina.
- točkastim grupnim transformacijama ako se radi o kristalu.

Dekompozicija matrice/tenzora u ireducibilne dijelove

Mnoge fizikalne veličine opisane su vektorima, a oni se obično prikazuju kao skup od 3 broja koja predstavljaju projekcije vektora na koordinatne osi:

$$\vec{r} = x\,\vec{i} + y\,\vec{j} + z\,\vec{k}$$

gdje su koordinate:

$$x = \vec{r} \cdot \vec{i}, \qquad y = \vec{r} \cdot \vec{j}, \qquad z = \vec{r} \cdot \vec{k}.$$

Koordinate ovise o izboru koordinatnog sustava. Izborom drugog koordinatnog sustava, zarotiranog u odnosu na prvi, vektor će imati drugi skup koordinata koje ga predstavljaju. Nove koordinate obično su dane kao linearna kombinacija starih:

$$\begin{aligned} x' &= R_{11}\,x + R_{12}\,y + R_{13}\,z \\ y' &= R_{21}\,x + R_{22}\,y + R_{23}\,z \\ z' &= R_{31}\,x + R_{32}\,y + R_{33}\,z \end{aligned}$$

Dekompozicija matrice/tenzora u ireducibilne dijelove

- Tako i matrica/tenzor mijenja svoje komponente u novom zarotiranom koordinatnom sustavu. Pri tome su nove komponente matrice, njih 9, dane kao linearna kombinacija starih 9 komponenata. Dakle matrica transformacije je 9×9.
- Transformacija matrice se može značajno pojednostaviti uočavanjem neke pravilnosti:
  - dijagonalna matrica je u svakom koordinatnom sustavu ista. (trag matrice - jedan nezavisni broj)
  - simetrična matrica čiji trag je jednak nuli, pri transformaciji ponovo ostaje simetrična s tragom jednakim nuli. (5-dimenzionalni vektor)
  - antisimetrična matrica pri transformaciji ponovo ostaje antisimetrična. (3-dimenzionalni vektor)

Pojedini dijelovi matrice se transformiraju nezavisno jedni od drugih. Svaka 3×3 matrica može se rastaviti u dijelove koji se transformiraju međusobno nezavisno ($9 = 5 + 3 + 1$).

Hookeov zakon za izotropnu sredinu

Za izotropnu sredinu postoje samo dvije skalarne kombinacije:

- Trag odnosno kvadrat traga tenzora u_{ij}:

$$(\sum_i u_{ii})^2$$

- Dužina 5-dimenzionalnog vektora (simetričnog dijela tenzora).

$$\sum_{i,j} u_{ij}^2$$

Izraz smo pojednostavili tako što smo zadržali trag.

Hookeov zakon za izotropnu sredinu

Između izraza s tragom i izraza s bez traga postoji veza:

$$
\begin{aligned}
\sum_{i,j} u_{ij}^2 &= \sum_{i,j} \left(\overbrace{u_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k u_{kk})}^{\text{trag je nula}} + \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k u_{kk}) \right)^2 \\
&= \sum_{i,j} \left(u_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k u_{kk}) \right)^2 + \frac{1}{9}\,(\sum_i u_{ii})^2 \overbrace{\sum_{i,j} \delta_{ij}^2}^{=3} \\
&\quad + \frac{2}{3}\,(\sum_k u_{kk}) \sum_{i,j} \delta_{ij} \left(u_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k u_{kk}) \right) \\
&= \sum_{i,j} \left(u_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k u_{kk}) \right)^2 + \frac{1}{3}(\sum_i u_{ii})^2 \\
&\quad + \frac{2}{3}\,(\sum_k u_{kk}) \underbrace{\left(\sum_{i,j} u_{ij}\,\delta_{ij} - \frac{1}{3}(\sum_k u_{kk}) \sum_{i,j} \delta_{ij}^2 \right)}_{=0}
\end{aligned}
$$

Hookeov zakon za izotropnu sredinu

Stoga razvoj slobodne energije po deformaciji je:

$$f = f_0 + \frac{1}{2}\,\lambda\,(\sum_i u_{ii})^2 + \mu\,\sum_{i,j} u_{ij}^2$$

Parametri u razvoju, λ i μ, su poznati kao Laméovi koeficijenti.

Napiše li se slobodna energija preko deformacije bez traga:

$$f = f_0 + \frac{1}{2}\,K\,(\sum_i u_{ii})^2 + \mu\,\sum_{i,j}\left(u_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k u_{kk})\right)^2$$

gdje je:

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\,\mu$$

K je **modul stlačivosti** (hidrostatska kompresibilnost) a μ je **modul smicanja** (eng. *shear modulus* ili *modulus of rigidity*)

Naprezanje u izotropnoj sredini

U stanju termodinamičke ravnoteže slobodna energija ima minimum. f kao funkcija komponenti u_{ij} treba imati minimum za $u_{ij} = 0$. $\Longrightarrow$ koeficijenti u razvoju slobodne energije trebaju biti pozitivni:

$$K > 0 \qquad \text{i} \qquad \mu > 0$$

Iz slobodne energije se može izračunati naprezanje za danu deformaciju:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \left(\frac{\partial f}{\partial u_{ij}}\right)_T \\ &= K\Big(\sum_k u_{kk}\Big)\,\delta_{ij} + 2\mu\left(u_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}\Big(\sum_k u_{kk}\Big)\right) \end{aligned}$$

Deformacija za dani tenzor naprezanja

Trag tenzora naprezanja:

$$\sum_i \sigma_{ii} = 3\,K\,(\sum_i u_{ii})$$

odnosno:

$$(\sum_i u_{ii}) = \frac{1}{3\,K}\,(\sum_i \sigma_{ii})$$

Iz izraza za tenzor naprezanja slijedi:

$$u_{ij} = \frac{1}{9\,K}(\sum_i \sigma_{ii})\,\delta_{ij} + \frac{1}{2\,\mu}\left(\sigma_{ij} - \frac{1}{3}\,\delta_{ij}(\sum_k \sigma_{kk})\right)$$

Deformacija za dani tenzor naprezanja

U slučaju hidrostatskog tlaka ($\sigma_{ij} = -p\,\delta_{ij}$):

$$\left(\sum_i u_{ii}\right) = -\frac{p}{K}$$

Budući da je:

$$\left(\sum_i u_{ii}\right) = \frac{\delta V}{V}$$

slijedi:

$$\frac{1}{K} = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

Inverzna vrijednost modula stlačivosti naziva se stlačivost ili kompresibilnost.

Elastični valovi u izotropnoj sredini

Jednadžbe gibanja

Izraz za gustoću sile:

$$\vec{f} = \sum_{i,j} \vec{e}_i \, \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_j}$$

može se iskoristiti u jednadžbama gibanja:

$$\rho \, \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = \vec{f}$$

pa se dobiva:

$$\rho \, \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad = \quad \overbrace{\left(K + \frac{\mu}{3}\right)}^{\lambda+\mu} \sum_j \frac{\partial^2 u_j}{\partial R_i \partial R_j} + \mu \sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial R_j^2}$$

U vektorskoj notaciji:

$$\rho \, \ddot{\vec{u}} = (\lambda + \mu) \, \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right) + \mu \, \Delta \vec{u}$$

Valovi u izotropnoj sredini

Traži se rješenje gornje jednadžbe u obliku ravnih valova:

$$\vec{u} = \vec{e}\, e^{\imath(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

gdje je $\vec{e}$ vektor polarizacije vala. Uvrštavanjem se dobiva:

$$\rho\,\omega^2\,\vec{e} = (\lambda+\mu)\,\vec{k}\left(\vec{k}\cdot\vec{e}\right) + \mu\,k^2\,\vec{e}$$

Vektor polarizacije se može razložiti na longitudinalno i transverzalno titranje:

$$\begin{aligned} \vec{e}_L &= \vec{k}\left(\vec{k}\cdot\vec{e}\right)/k^2 \\ \vec{e}_T &= \vec{e} - \vec{e}_L \end{aligned}$$

(ne postoji u plinovima i tekućinama)

s frekvencijama titranja:

$$\omega_L = \sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho}}\cdot|\vec{k}| \qquad \omega_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}\cdot|\vec{k}|$$

Brzine zvučnih valova u dugovalnoj granici

Tvar	c_L (m/s)	c_T (m/s)
Be	12720	8330
Mg	5700	3170
Al	6360	3130
Ti	6260	2920
V	6000	2780
Cr	6850	3980
Fe	5920	3220
Ni	5810	3080
Cu	4760	2300
Ag	3640	1690
Au	3280	1190
Pb	2050	710

Hookeov zakon za kristal

Hookeov zakon za kristal

- Za kristalnu sredinu skup rotacijskih (i drugih) transformacija je reduciran u odnosu na izotropnu sredinu.
- Stoga postoji veći broj skalarnih kombinacija koje ostaju invarijantne na simetrijske operacije.

Slobodna energija je općenito:

$$f = f_0 + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} C_{ijkl} u_{ij} u_{kl}$$

Tenzor elastičnih modula, C_{ijkl}, ima ova simetrijska svojstva:

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= C_{jikl} \\ C_{ijkl} &= C_{ijlk} \\ C_{ijkl} &= C_{klij} \end{aligned}$$

Hookeov zakon za kristal

Broj različitih mogućih komponenti tenzora elastičnih modula:

$$6 + \frac{30}{2} = 21$$

U kristalima koji imaju veći broj simetrijskih operacija taj je broj značajno manji:

Rešetka	kubična	heksagonska	tetragonska	ortorombska	…
broj el. konstanti	3	5	6	9	…

Za kombinacije indeksa uobičajeno je koristiti slijedeću notaciju:

$$\begin{aligned} xx &\rightarrow 1 \\ yy &\rightarrow 2 \\ zz &\rightarrow 3 \\ yz &\rightarrow 4 \\ zx &\rightarrow 5 \\ xy &\rightarrow 6 \end{aligned}$$

Kubični kristal

Slobodna energija za kubični kristal:

$$
\begin{aligned}
f(T, u_{ij}) &= f_0(T) + \frac{C_{11}}{2}\left(u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + u_{zz}^2\right) + \frac{C_{44}}{2}\left(u_{xy}^2 + u_{yz}^2 + u_{zx}^2\right) \\
&\quad + C_{12}\left(u_{yy}u_{zz} + u_{zz}u_{xx} + u_{xx}u_{yy}\right)
\end{aligned}
$$

Simetrijske operacije:

$$
\begin{aligned}
\tfrac{\pi}{2}\ \text{rotacija oko } z\text{-osi}: &\quad x \to y, y \to -x \\
\tfrac{\pi}{2}\ \text{rotacija oko } y\text{-osi}: &\quad x \to z, z \to -x \\
\tfrac{\pi}{2}\ \text{rotacija oko } x\text{-osi}: &\quad y \to z, z \to -y \\
\tfrac{2\pi}{3}\ \text{rotacija oko dijagonale}: &\quad x \to y \to z \to x \\
\ldots &
\end{aligned}
$$

Sve tri kombinacije tenzora deformacije su invarijantne na navedene simetrijske operacije.

Elastični moduli kubičnih kristala

Tvar	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
Al	108	62	28.
Na	7.59	6.33	4.3
K	3.69	3.18	1.9
Rb	2.96	2.44	1.6
Cr	348	67	100
Fe	230	135	11
Ni	247	153	12
Cu	169	122	75.
Ag	122	92	45.
Au	191	162	42.
Pb	48.8	41.4	14.
C	1079	124.5	57
Si	165.6	63.9	79.
Ge	129	48.3	67.
NaCl	49.47	12.88	12.8
KCl	40.69	7.11	6.3
NaBr	39.7	10.01	9.9
GaAs	118.8	53.7	59.
TiC	500	113	17

Stabilnost kubičnih kristala

Stabilnost kubičnih kristala

Slobodna energija se može zapisati:

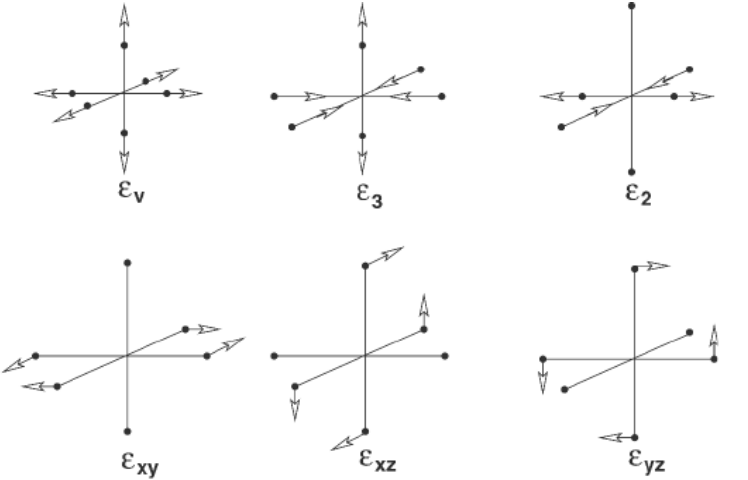
$$f = f_0 + \begin{pmatrix} u_{xx} & u_{yy} & u_{zz} & u_{yz} & u_{zx} & u_{xy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{xx} \\ u_{yy} \\ u_{zz} \\ u_{yz} \\ u_{zx} \\ u_{xy} \end{pmatrix}$$

Stabilnost rešetke zahtijeva da je kvadratična kombinacija pozitivna za proizvoljnu deformaciju rešetke. To će biti zadovoljeno ako su sve vlastite vrijednosti matrice pozitivne.

Vlastiti vektori i pripadne vlastite vrijednosti su:

$C_{11} + 2\,C_{12}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$	hidrostatska kompresija
$C_{11} - C_{12}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}(u_{xx} + u_{yy} - 2\,u_{zz})$	tetragonska deformacija
$C_{11} - C_{12}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(u_{xx} - u_{yy})$	ortorombska deformacija
C_{44}	u_{yz}, u_{zx}, u_{xy}	smicanje

Homogene deformacije kubičnog kristala



Stlačivost tijela

Izotermalna i adijabatska (izoentropska) stlačivost

Tlak je:

$$p(V,T) = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S$$

- **izotermalna stlačivost**
  Ako su promjene tlaka toliko spore da sustav cijelo vrijeme ima istu temperaturu kao okolina, tada je:

$$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{V\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T}$$

- **adijabatska stlačivost**
  Ako su promjene tlaka toliko brze da sustav ne stigne razmijeniti toplinu s okolicom, tada je:

$$\kappa_S = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S = \frac{1}{V\left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S}$$

Izotermalna i adijabatska (izoentropska) stlačivost

Između adijabatske i izotermalne stlačivost postoji veza.

$$
\begin{aligned}
dV &= \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T dp + \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p dT \\
&\Rightarrow \\
\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S &= \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T + \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S
\end{aligned}
$$

Budući da vrijedi:

$$
dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T dp
$$

slijedi da je:

$$
\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = -\frac{\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T}{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p} = \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p}{\frac{C_p}{T}} = \frac{T}{C_p}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p
$$

Izotermalna i adijabatska (izoentropska) stlačivost

Gdje smo iskoristili Maxwellove relaciju:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T}$$

Definiramo koeficijent rastezanja pri konstantnom tlaku:

$$\alpha = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

Tada je:

$$\kappa_S = \kappa_T - \frac{\alpha^2 T}{C_p/V}$$

Deformacija zbog promjene temperature

- Pretpostavlja se da je na temperaturi T_0 tijelo nedeformirano.
- Ako se promjeni temperatura, zbog termalnog rastezanja pojavit će se deformacija čak i kada su vanjske sile jednake nuli.
- U razvoju slobodne energije po deformaciji pojavit će se linearni član u deformaciji čiji je koeficijent u razvoju proporcionalan promjeni temperature.

$$f(T, u_{ij}) = f_0(T) - \left(\sum_{i,j} \alpha_{ij} u_{ij}\right) \cdot (T - T_0) + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} C_{ijkl}\, u_{ij}\, u_{kl}$$

gdje je α_{ij} simetrični tenzor.
Za izotropnu sredinu, nije teško provjeriti da je:

$$\alpha_{ij} = \alpha\, K \delta_{ij}$$

gdje je α koeficijent rastezanja, a K modul stlačivosti.

Elastični valovi u kristalu

Elastični valovi u kubnom kristalu

Jednadžbe gibanja:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = f_i = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_j} = \sum_j \frac{\partial}{\partial R_j}\left(\frac{\partial f}{\partial u_{ij}}\right)$$

Za kubni kristal:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= C_{11}\frac{\partial^2 u_x}{\partial R_x^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial R_y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial R_z^2}\right) + (C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial R_x \partial R_y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial R_x \partial R_z}\right)\\
\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= C_{11}\frac{\partial^2 u_y}{\partial R_y^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial R_x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial R_z^2}\right) + (C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial R_x \partial R_y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial R_y \partial R_z}\right)\\
\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= C_{11}\frac{\partial^2 u_z}{\partial R_z^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial R_x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial R_y^2}\right) + (C_{12}+C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial R_x \partial R_z} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial R_y \partial R_z}\right)
\end{aligned}$$

Rješenje se može tražiti u obliku ravnih valova:

$$\vec{u} = \vec{e}\, e^{\imath(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Elastični valovi u kubnom kristalu

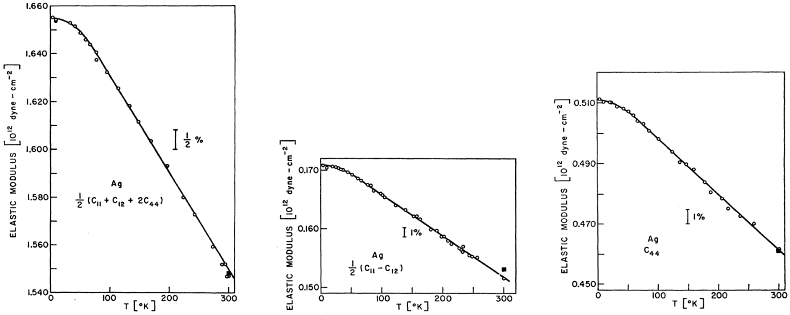
- Za svaki valni broj $\vec{k}$ postoje tri rješenja.
- Općenito rješenja nisu čista longitudinalna ili transverzalna titranja.
- Čisto longitudinalno/transverzalno titranje se pojavljuje tek za posebne smjerove širenja.

Npr. za valove s valnim brojem u smjeru [100], brzina širenja je:

$$
\begin{aligned}
c_L &= \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \\
c_T &= \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}
\end{aligned}
$$

Temperaturna ovisnost elastičnih konstanti

Temperaturna ovisnost elastičnih konstanti



Temperaturna ovisnost elastičnih konstanti za srebro. Iz članka J. R. Neighbours & G. A. Alers, Phys. Rev. **111** (1958) 707.

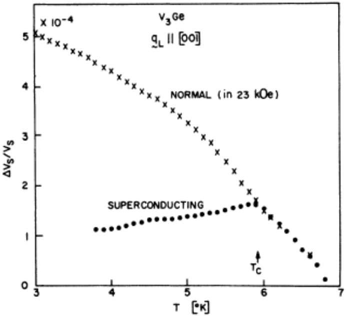
- Elastične konstante obično rastu s padom temperature.
- Temperaturna ovisnost obično je izazvana elektron-rešetka ili/i anharmoničkim rešetka-rešetka međudjelovanjem.

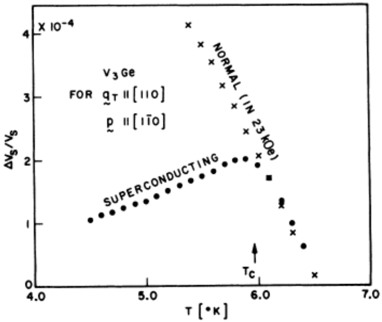
Temperaturna ovisnost elastičnih konstanti

- Postoje sustavi u kojima elastična konstanta opada s temperaturom.
- To je obično posljedica strukturnog faznog prijelaza (2. vrste) na nižim temperaturama.
- Na strukturnom faznom prijelazu visokotemperaturna faza postaje nestabilna (uvjeti stabilnosti nisu zadovoljeni),
- Na temperaturama ispod faznog prijelaza dolazi do rekonstrukcije rešetke na kojima su uvjeti stabilnosti rešetke opet zadovoljeni.

Temperaturna ovisnost elastičnih konstanti

Temperaturna promjene u elastičnim konstantama mogu biti praćene ili izazvane drugim faznim transformacijama.





Pojava supravodljivosti u V_3Ge praćena je promjenom temperaturne ovisnosti brzine zvuka. Iz članka L. R. Testardi, Phys. Rev. **B3** (1971) 95.