

9. Elastické vlastnosti kryštálov

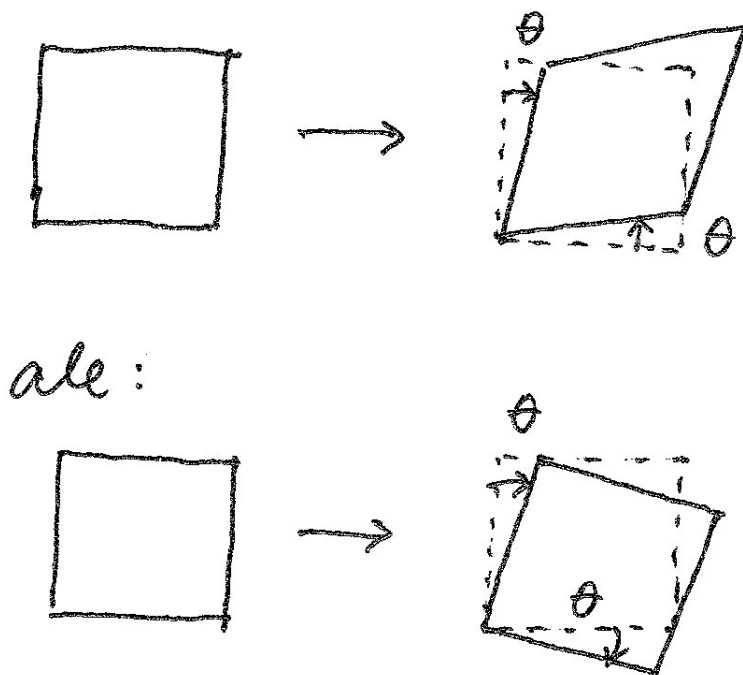
Cieľom tejto prednášky je zhrnúť základné poznatky z mechaniky kontinua. Úlohou je určiť, ako sa deformuje daný kus látky pri zadaných mechanických pôsobeniach. Budeme predpokladať, že deformácie sú elastické, t.j. pri odstránení vonkajších pôsobení sa materiál vráti do pôvodného tvaru. Je empirickým faktom, že pre každý materiál možno definovať tzv. kritické napätie, pri prekročení ktorého sa materiál začína deformovať plasticky, t.j. nevratne. Obmedzíme sa teda na oblasť aplikovaných napätí menších než kritické napätie. Hlavným výsledkom bude identifikácia tých elastických konštánt, ktoré odlišujú tuhé látky od kvapalín. Inými slovami, vyjasníme si otázku, ktorá elastická konštanta je zodpovedná za stály tvar tuhých látok (a absencia ktorej spôsobuje nestály tvar kvapalín).

Tenzor deformácie

Predpokladajme, že pri deformácii atóm pôvodne sediacy v mieste $\mathbf{r}$ prejde do miesta $\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$. Hľadáme veličinu, ktorá bude mierou deformácie materiálu. Vektor posunutia $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ zjavne nie je dobrým meradlom deformácie: napríklad pri homogénnom natiahnutí tyče s dĺžkou L v smere osi x o ΔL bude u_x funkciou polohy v kryštáli. Na ľavom konci tyče bude povedzme $u_x = 0$, kým na pravom konci $u_x = \Delta L$. Pre dlhú tyč môže byť u_x veľké aj pri malej deformácii. Vhodnejšou mierou relatívnej deformácie je teda $u_{xx} = \partial u_x / \partial x$. Existuje však aj iný typ deformácií, pri ktorom nedochádza k zmene objemu: deformácie tvaru. Uvažujme napríklad deformáciu štvorca na kosoštvorec: $u_x = \theta y$, $u_y = \theta x$. Relatívnu deformáciu by sme mohli popísať výrazmi $\frac{\partial u_x}{\partial y} = \frac{\partial u_y}{\partial x} = \theta$. Na druhej strane, čistej rotácii štvorca zodpovedá pole výchyliek $u_x = \theta y$, $u_y = -\theta x$. Preto pri čistej rotácii $\frac{\partial u_x}{\partial y} = -\frac{\partial u_y}{\partial x} = \theta$. Preto ako mieru relatívnej deformácie materiálu definujeme symetrizovaný tenzor deformácie

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad u_{ij} = u_{ji}$$

ktorý je pre čisté rotácie nulový, ako aj má byť. Zložky tenzora deformácie sú bezrozmerné a pri štúdiu elastických vlastností predpokladáme, že $|u_{ij}| \ll 1$.



Teraz si ozrejníme fyzikálny význam stopy tenzora deformácie $u_{ii} = \nabla \cdot \mathbf{u}$.¹ Za tým účelom uvažujme dvojicu atómov v bodoch $\mathbf{r}$ a $\mathbf{r} + d\hat{x}$ v nedeformovanom materiáli, kde $d\hat{x}$ je vektor v smere osi x s dĺžkou dx . V deformovanom kryštáli sa tieto atómy premiestnia do bodov $\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$ a $\mathbf{r} + d\hat{x} + \mathbf{u}(\mathbf{r} + d\hat{x})$. Preto

¹Používame Einsteinovu konvenciu, podľa ktorej treba cez opakujúce sa indexy sumovať.

pôvodný vektor relatívnej vzdialenosti oboch atómov $d\hat{x}$ sa zmení v deformovanom kryštáli takto:

$$d\hat{x} \rightarrow d\hat{x}' = d\hat{x} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} dx, \quad d\hat{x}'_i = (\delta_{i1} + \frac{\partial u_i}{\partial x}) dx$$

Podobne sa transformujú aj elementárne vzdialenosti $d\hat{y}'$ a $d\hat{z}'$ v smeroch y a z . Teda elementárny objem $dV = dx dy dz$ sa transformuje takto:

$$dV \rightarrow dV' = d\hat{x}' \cdot (d\hat{y}' \times d\hat{z}') = \epsilon_{ijk} (\delta_{i1} + \frac{\partial u_i}{\partial x}) (\delta_{j2} + \frac{\partial u_j}{\partial y}) (\delta_{k3} + \frac{\partial u_k}{\partial z}) dV$$

Ak v tomto výraze ponecháme členy do prvého rádu v $\mathbf{u}$, po úprave dostaneme

$$\frac{dV'}{dV} = \epsilon_{ijk} (\delta_{i1} \delta_{j2} \delta_{k3} + \delta_{i1} \delta_{j2} \frac{\partial u_k}{\partial z} + \delta_{i1} \delta_{k3} \frac{\partial u_j}{\partial y} + \delta_{j2} \delta_{k3} \frac{\partial u_i}{\partial x}) = 1 + \nabla \cdot \mathbf{u}$$

Teda u_{ii} má význam relatívneho prírastku objemu. V nestlačiteľných médiách teda musí platiť $u_{ii} = 0$.

Tenzor napätia

Predstavme si teleso, ktoré deformujeme pôsobením vonkajších síl na jeho povrch. Vyčleňme v telese objemový element a pýtajme sa, aká sila naň pôsobí. Zrejme jedinou silou,² ktorá pôsobí na zvolený element, je povrchová sila, ktorou naň pôsobia susedné elementy. Definujme tenzor napätia σ_{ik} ako tlak pôsobiaci v smere i od okolitých elementov na stenu v smere k zvoleného elementu. Potom celková sila na element s povrchom S bude

$$\oint_S \sigma_{ik} dS_k = \int_V \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV$$

kde sme zaviedli vektor $d\mathbf{S} = dS \mathbf{n}$ ako vektor v smere vonkajšej normály $\mathbf{n}$ k nášmu elementu a dS je element povrchu. Pri úprave sme použili Gaussovu vetu na prepísanie povrchového integrálu na integrál cez objem V zvoleného elementu.

Znamienková konvencia je nasledovná: $\sigma > 0$ zodpovedá natáhovaniu, kým $\sigma < 0$ popisuje stláčanie elementu. Potom napríklad ak jedinou nenulovou komponentou tenzora napätia je $\sigma_{xx} > 0$ a celková sila v smere osi x na kockový element s hranou dx je $(\sigma_{xx}(x+dx) - \sigma_{xx}(x))dx^2$.

Podobne ako sme vylúčili čisté rotácie z tenzora napätia, budeme predpokladať, že tenzor deformácie je symetrický, $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, aby sme zaručili, že moment síl od napätového poľa je nulový.

Okrajová podmienka pre tenzor napätia. Najprv si uvedomme, že na každom myslenom rozhraní v kontinuu pôsobia tlaky na materiál na oboch stranách od rozhrania, ktoré sú podľa zákona akcie a reakcie rovnako veľké, ale opačne orientované. Túto úvahu možno uplatniť aj pre samotný povrch materiálu. Ak budeme uvažovať iba hydrostatický vonkajší tlak, t.j. ak zanedbáme možné šmykové zložky tenzora napätia na rozhraní, potom na povrchu materiálu s vonkajšou normálou $\mathbf{n}$ musí platiť

$$\sigma_{ik} n_k = -p n_i,$$

pretože nenulový tlak $p > 0$ napr. v plyne obklopujúcom teleso stláča toto teleso a to tak, že sila pôsobí v smere normály k povrchu. Naopak, pri natáhaní by sme dostali $\sigma_{ik} n_k = p n_k$.

Pohybová rovnica

Všimnime si, že divergencia tenzora napätia má význam objemovej sily. Preto Newtonova pohybová rovnica bude mať tvar

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + f_i,$$

kde sme hustotu hmotnosti média označili ako ρ a pripustili sme, že okrem napätových síl v médiu pôsobia aj objemové sily $\mathbf{f}$, napríklad gravitačná sila $\mathbf{f} = \rho \mathbf{g}$.

Termodynamika deformácie

Počítajme teraz zmenu energie kontinua pri premiestnení bodu $\mathbf{r}$ o $\delta \mathbf{u}(\mathbf{r})$. Ak v médiu existuje napätové

²Ak zatiaľ zanedbáme gravitačné a iné objemové sily.

pole, ktoré generuje objemovú hustotu sily $\mathbf{f}$, potom pri takomto posunutí médium vykoná prácu (t.j. stratí energiu)

$$\int dV f_i \delta u_i = \int dV \partial_k \sigma_{ik} \delta u_i = \int dV \partial_k (\sigma_{ik} \delta u_i) - \int dV \sigma_{ik} \delta (\partial_k u_i) = - \int dV \sigma_{ik} \delta u_{ik}$$

kde sme parciálnu deriváciu označili $\partial_k = \partial/\partial x_k$ a v druhej rovnici sme integrovali per partes. V tretej rovnici sme uvažili, že $\int dV \partial_k (\sigma_{ik} \delta u_i) = \int_S dS_k \sigma_{ik} \delta u_i$, kde integrujeme cez povrch vzorky. Keďže uvažujeme iba prerozdelenie hmoty v médiu bez súčasného posunutia hraníc vzorky, na povrchu vzorky musí byť $\delta \mathbf{u} = 0$ a tento člen vypadne. Použili sme tiež vzťah $\int dV \sigma_{ik} \delta (\partial_k u_i) = \int dV \sigma_{ik} \delta u_{ik}$, ktorý vyplýva zo symetrie tenzora σ_{ik} . Preto zmenu hustoty voľnej energie F možno písať v tvare $dF = \sigma_{ik} du_{ik} - SdT$ a teda tenzor napätia možno určiť z prírastku F :

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{ik}} \right)_T. \quad (1)$$

Hookov zákon

Skúmame Taylorov rozvoj hustoty voľnej energie F pre malé deformácie u_{ij} . Označme hustotu voľnej energie nedeformovaného kryštálu F_0 . Keďže nedeformovaný kryštál s $u_{ij} = 0$ má minimálnu energiu, musia lineárne členy Taylorovho rozvoja absentovať a do druhého rádu v u_{ij} možno písať

$$F = F_0 + \frac{1}{2} C_{ij,kl} u_{ij} u_{kl}. \quad (2)$$

Keďže tenzor deformácie je symetrický, možno žiadať $C_{ij,kl} = C_{ji,kl} = C_{ij,lk}$. Teda namiesto deviatich dvojíc prvých indexov stačí uvažovať šesť rozlíšiteľných dvojíc: 11, 22, 33, 12=21, 13=31, 23=32. To isté samozrejme platí aje pre druhú dvojicu indexov. Preto existuje maximálne 6×6 rôznych koeficientov $C_{ij,kl}$.

Naviac, kvadratickú formu pre F možno symetrizovať a preto bez ujmy na všeobecnosti možno žiadať $C_{ij,kl} = C_{kl,ij}$. Teda matica $C_{ij,kl}$ typu 6×6 je symetrická a ako taká obsahuje maximálne $6 + 5 + 4 + 3 + 2 + 1 = 21$ rôznych prvkov. Dá sa ukázať, že zvyšovaním symetrie média od najnižšej možnej, t.j. triklinickej, až po kubickú, počet nezávislých komponent matice $C_{ij,kl}$ klesá z 21 až na 3 komponenty.

kryštálový systém	počet nezávislých komponent tenzora $C_{ij,kl}$
triklinický	21
monoklinický	13
ortorombický	9
tetragonálny	7 alebo 6
trigonálny	7 alebo 6
hexagonálny	5
kubický	3
izotrópne kontinuum	2

Keď v definícii tenzora napätia (1) použijeme rozvoj (2) voľnej energie kontinua, dostaneme zovšeobecnený Hookov zákon:

$$\sigma_{ij} = C_{ij,kl} u_{kl},$$

t.j. napätie je lineárne úmerné tenzoru deformácie. Tenzor $C_{ij,kl}$ nazývame tenzorom tuhosti: čím je $C_{ij,kl}$ väčšie, tým väčšie napätie je potrebné na vytvorenie danej deformácie.

Izotrópne kontinuum

Skúmame teraz elastické vlastnosti izotrónnych médií. Príkladom takých materiálov môžu byť napríklad sklá, t.j. amorfné látky, alebo tzv. polykryštalické materiály - t.j. materiály pozostávajúce z monokryštalických zrní s náhodnými orientáciami.³

Voľná energia je skalárna veličina: nezávisí od voľby súradnicového systému. Z druhých mocnín zložiek symetrického tenzora u_{ij} možno vytvoriť dva nezávislé skaláry: $(u_{ii})^2$ a $u_{ij} u_{ij}$. Preto v materiáli

³Skúmame malý objem polykryštalického materiálu, ktorý je však dostatočne veľký, aby obsahoval veľa monokryštalických zrní. Takýto objem naozaj nemá význačné smery - ide o izotrónny materiál.

existujú iba dve nezávislé tuhosti, tzv. Lamého koeficienty λ a μ , a rovnica (2) sa zjednoduší na tvar

$$F = F_0 + \frac{\lambda}{2}(u_{ii})^2 + \mu u_{ij}u_{ij}.$$

Cvičenie. Pri otočení súradnicového systému sa transformuje tenzor deformácie. Overte, že veľkosť voľnej energie nezávisí od voľby súradnicového systému.

Hookov zákon pre izotrópne médium dostaneme použitím rovnice (1):

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu u_{ij}$$

V situáciách, kedy je dané napätové pole, je výhodné poznať inverznú formu Hookovho zákona, t.j. vyjadriť u_{ij} ako funkciu σ_{ij} . Za tým účelom najprv vypočítajme stopu σ_{ij} podľa Hookovho zákona: $\sigma_{ii} = (3\lambda + 2\mu)u_{ii}$. Potom dostaneme

$$u_{ij} = \frac{1}{2\mu}\sigma_{ij} - \frac{\lambda\delta_{ij}}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}\sigma_{ll}.$$

Homogénne deformácie

Na objasnenie zmyslu Lamého koeficientov budeme študovať statické deformácie bez naloženého vonkajšieho poľa. Teda hľadáme riešenie rovnice $\partial_k \sigma_{ik} = 0$. Kvôli jednoduchosti budeme študovať iba situácie, v ktorých σ_{ik} = konštanta a teda deformácia je homogénna.

Hydrostatický tlak Nech teleso je vystavené hydrostatickému tlaku p . Okrajovú podmienku $\sigma_{ij}n_j = -pn_i$, ktorá má platiť na celom povrchu vzorky, možno splniť voľbou $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$. Z Hookovho zákona potom dostaneme $u_{ij} = -p\delta_{ij}/(3\lambda + 2\mu)$. Teda teleso pri deformácii mení svoj objem, $\delta V = u_{ii}V$. Modul objemovej stlačiteľnosti K definujeme vzťahom

$$\frac{1}{K} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad \text{preto} \quad K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$$

Teda k modulu objemovej stlačiteľnosti prispievajú obidva Lamého koeficienty.

Uniaxiálny tlak Skúmame prípad, kedy teleso v tvare tyče vystavíme tlaku povedzme v smere osi z . Na bočných stenách telesa nepôsobí žiaden tlak, teda sú voľné. Okrajová podmienka je potom splnená voľbou $\sigma_{zz} \neq 0$ a ostatné komponenty $\sigma_{ij} = 0$. Z Hookovho zákona vyplýva, že nediagonálne komponenty tenzora deformácie sú nulové a

$$u_{zz} = \frac{1}{E}\sigma_{zz}, \quad u_{xx} = u_{yy} = -\frac{\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}\sigma_{zz}$$

kde sme zaviedli tzv. Youngov modul pružnosti

$$E = \frac{\sigma_{zz}}{u_{zz}} = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu},$$

ktorý udáva veľkosť napätia potrebnú na vyvolanie danej deformácie v smere silového pôsobenia. Uvažujme napríklad uniaxiálne stlačenie, $\sigma_{zz} < 0$. Ak takémuto pôsobeniu vystavíme kvapalinu, treba očakávať veľkú deformáciu $u_{zz} < 0$, pretože kvapalina (pôvodne v tvare tyče) z priestoru medzi stláčajúcimi piestmi jednoducho vytečie. Teda v kvapaline musí byť $E = 0$. V kvapaline absentujú šmykové moduly pružnosti, pretože $\mu = 0$.

Namiesto Lamého koeficientov môžeme elasticke vlastnosti charakterizovať dvoma inými koeficientmi: Youngovým modulom pružnosti a tzv. Poissonovým koeficientom

$$\nu = -\frac{u_{xx}}{u_{zz}} = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}.$$

V materiáloch, v ktorých šmykový modul μ je omnoho menší ako λ ,⁴ je Poissonov koeficient $\nu = 1/2$.

⁴napríklad v kvapalinách

materiál	E (GPa)	ν
guma	0.0005	0.5
olovo	5	0.5
sklo	55	0.16
železo	110	0.3
ocel	200	0.3
wolfrám	400	0.3

Tabuľka 1: Tabuľka elastických konštánt vybraných izotropných materiálov. Rádový odhad veľkosti λ, μ dostaneme z rovnice (2), ak odhadneme chemickú energiu na atómovú bunku ako ~ 1 eV: $\lambda, \mu \sim 1 \text{ eV}/1\text{\AA}^3 \sim 10^2$ GPa.