

5. Fasta ämnens elastiska egenskaper (hårdhet o. dyl)

[AM 22, Kittel s.80-]

Med elasticitet menas enkelt sagt det hur fasta ämnen ger efter när man pressar på dem. Den klassiska elasticitetsteorin är i själva verket en kontinuitets-teori men utgående från atomernas växelverkningsmodeller är det möjligt att härleda denna teori.

Den grundläggande terminologin är på engelska, svenska och finska:

- stress = tryck eller spänning = jännitys. Har tryck-enheter, kraft/area.
- strain = spänning eller uttöjning eller deformation = jännitys tai venymä. Är enhetslös.

Den svenska terminologin är alltså lite problematisk då ordet spänning kan ha två olika betydelser, men engelskan är klar. Med "stress" menas alltså trycket som ett material utsätts för, och "strain" hur mycket den dras ut (positiva värden) eller pressas ihop (negativa värden). På svenska är det bra att använda ordet "uttöjning" för det kan inte missförstås och har intuitivt rätt förtecken.

Den klassiska elasticitetsteorin ger sambandet mellan tryck och uttöjning, och härleds till nästa utgående från atomär struktur i material.

5.1. Härledning av elasticitetstensorn

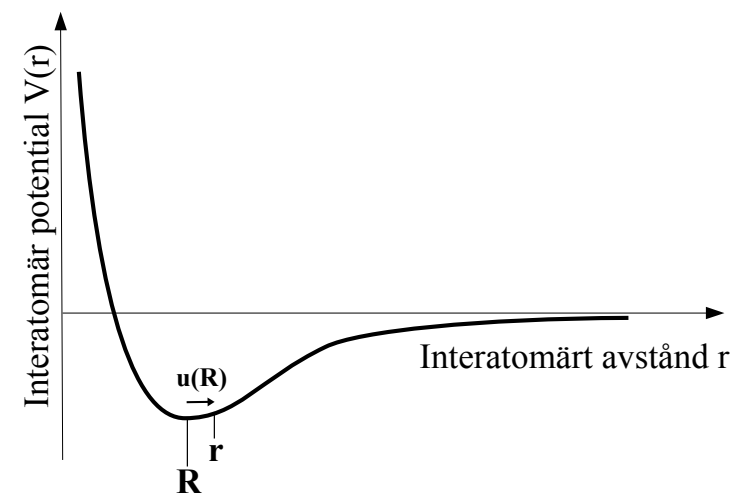
Betrakta en godtycklig interatomär potential V . Vi såg i förra kapitlet att de alltid har en tämligen jämn potentialgrop kring atomernas jämviktslägen \mathbf{R} . Alltså kan vi utveckla potentialen med hjälp av den tredimensionella versionen av Taylors serie

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \cdot \nabla f(\mathbf{r}) + \frac{1}{2!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^2 f(\mathbf{r}) + \frac{1}{3!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^3 f(\mathbf{r}) + \dots$$

Vi betraktar atomer som har förflyttats från positionerna \mathbf{R} till \mathbf{r} . Nu kan man skriva:

$$\mathbf{r}(\mathbf{R}) = \mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}) \quad (1)$$

där \mathbf{u} är en mängd vektorer som beskriver förflyttningarna. Om vi nu har en potentialfunktion $V(\mathbf{r})$, och utvidgar den kring jämviktsavståndet \mathbf{R} för en atom som har förflyttats lite från potentialgropens mitt till positionen \mathbf{r} , får vi för den totala energin U i systemet



$$U \approx \frac{N}{2} \sum V(\mathbf{R} - \mathbf{R}') + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} (\mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')) \cdot \nabla V(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (2)$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} [(\mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')) \cdot \nabla]^2 V(\mathbf{R} - \mathbf{R}') + \dots \quad (3)$$

där summorna löper över atomens och dess grannars jämviktspositioner \mathbf{R} och \mathbf{R}' .

Den första termen i utvecklingen $\sum V(\mathbf{R})$ är ju bara gittrets jämviktsenergi eller kohesions-energi. Inom elasticitetsteori har nollpunktens läge ingen skillnad, och man väljer för enkelhets skull att flytta nollpunkten så att $U = 0$ då alla atomer är i sina jämviktslägen.

Termen $\nabla V(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ försvinner uppenbart, ty den är ju helt enkelt kraften på atomer i deras jämviktslägen, som måste vara $\equiv 0$ i en kristall i jämvikt.

Den andra derivatan är den första termen i utvecklingen som blir kvar. I den **harmoniska approximationen** för fasta ämnen arbetar man bara med denna term. De högre termerna kallas **anharmoniska** termer, och har betydelse t.ex. för värme-expansion.

I den klassiska **första ordningens elasticitetsteori** använder man sig av den harmoniska approximationen. Området där denna approximation fungerar bra kallas **linjär elasticitet**.

Den harmoniska termen

$$[(\mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')) \cdot \nabla]^2 V(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$$

har ialles 9 termer, som också kan skrivas

$$\sum_{\mu, \nu} [u_{\mu}(\mathbf{R}) - u_{\mu}(\mathbf{R}')] D_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') [u_{\nu}(\mathbf{R}) - u_{\nu}(\mathbf{R}')]]$$

där μ och ν löper över koordinaterna x, y, z . Vi har alltså ersatt vektornotationen med en index-notation. D innehåller nu derivatorna i formen:

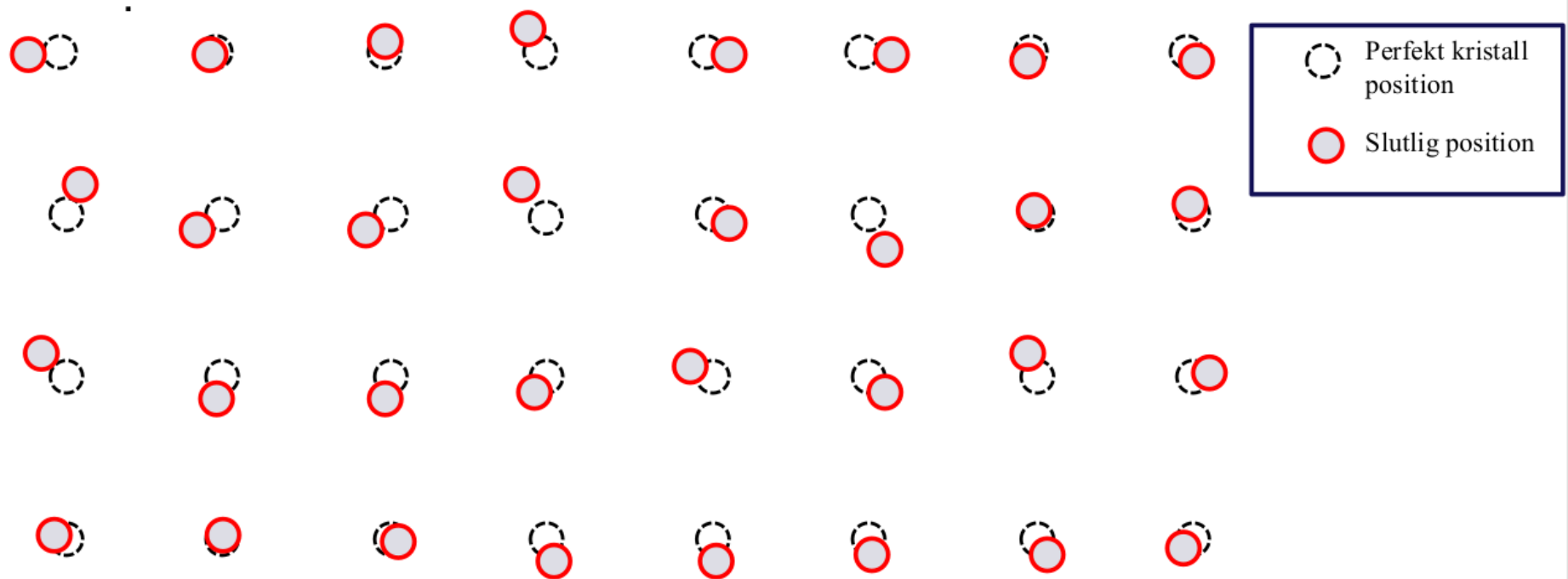
$$D_{\mu\nu} = \frac{\partial^2 V(\mathbf{r})}{\partial r_{\mu} \partial r_{\nu}}$$

och vi kan skriva hela den harmoniska potentialenergin

$$U = -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\mathbf{R}, \mathbf{R}' \\ \mu, \nu}} [u_{\mu}(\mathbf{R}') - u_{\mu}(\mathbf{R})] D_{\mu\nu}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) [u_{\nu}(\mathbf{R}') - u_{\nu}(\mathbf{R})]$$

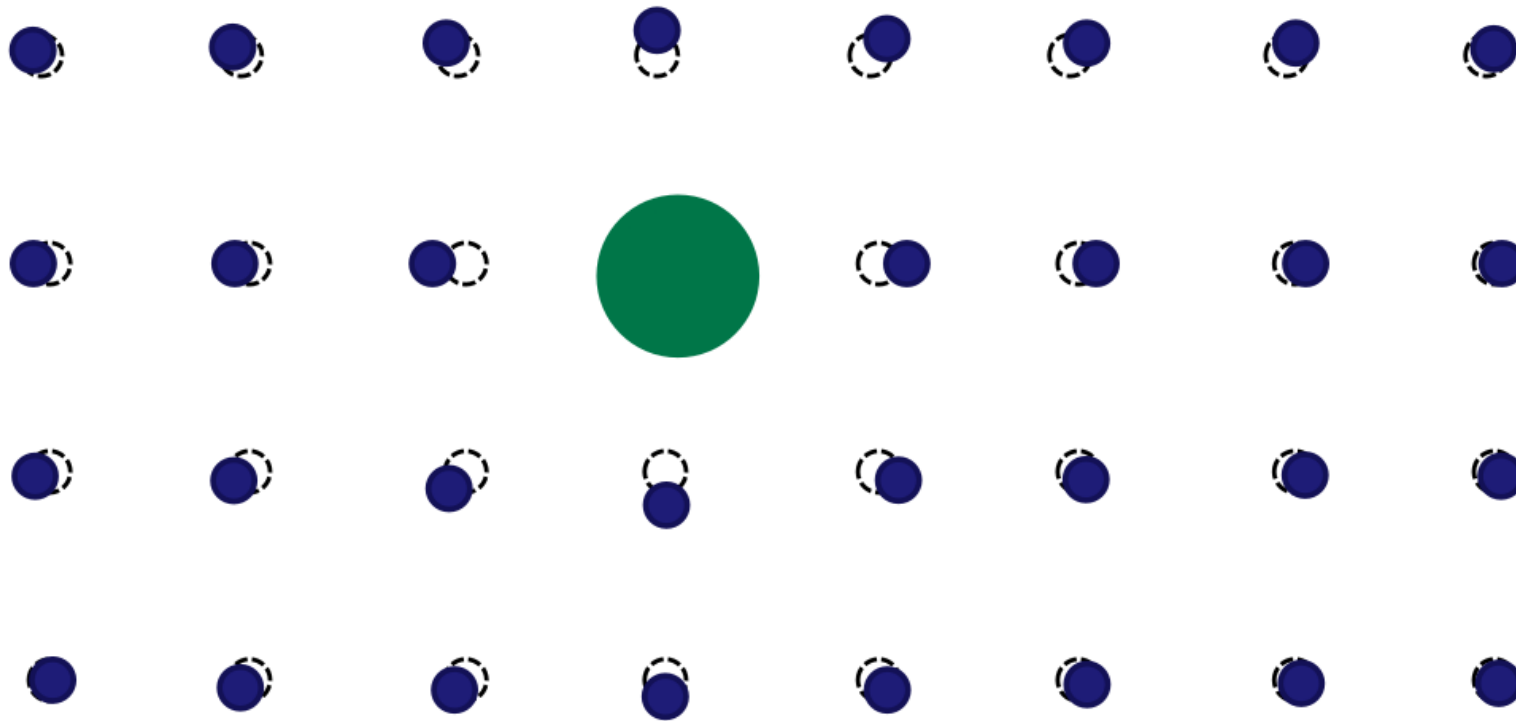
(Bytet av ordning är möjligt p.g.a. gittrets inversions-symmetri och den harmoniska formen: ett teckenbyte i förflyttningen leder till samma energi.)

Hittills har förflyttningarna i atomernas platser $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ kunnat vara helt godtyckliga:



Men detta är inte särdeles sannolikt för en elastisk förflyttning av atomer i jämvikt. Mycket troligare är att förflyttningsfältet $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ varierar jämnt och kontinuerligt. Detta är intuitivt enkelt och förstå

om man tänker på hur förflyttningarna kan uppstå från ett sk. **dilatationscenter** (t.ex. en större atom i en kristall); det är tämligen klart att dessa är kontinuerliga kring den större atomen:



För att komma vidare måste antar vi dessutom att vårt gitter är ett monatomärt Bravais-gitter, så att alla punkter och “bindningar” är ekvivalenta ((det kan uppstå intressanta komplikationer i icke-Bravais-gitter, som dock är klart överkurs för denna kurs)).

Om vi nu definierar en kontinuerlig funktion $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, som är $= \mathbf{u}(\mathbf{R})$ i Bravais-gittrets punkter \mathbf{R} kan vi göra Taylor-approximationen

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}') = \mathbf{u}(\mathbf{R}) + (\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}}$$

och därmed

$$\begin{aligned} U &= -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\mathbf{R}, \mathbf{R}' \\ \mu, \nu}} [(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \cdot \nabla \mathbf{u}_\mu(\mathbf{R})] D_{\mu\nu}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) [(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \cdot \nabla \mathbf{u}_\nu(\mathbf{R})] \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\mathbf{R}, \mathbf{R}' \\ \mu, \nu, \sigma, \tau}} \left[(R'_\sigma - R_\sigma) \frac{\partial u_\mu(\mathbf{R})}{\partial x_\sigma} \right] D_{\mu\nu}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \left[(R'_\tau - R_\tau) \frac{\partial u_\nu(\mathbf{R})}{\partial x_\tau} \right] \end{aligned}$$

där vi alltså bara i senare steget skrivit om nablorna i summeringsnotation.

Nu kan man ytterligare ta ut ∇ -termerna som ju beror bara på \mathbf{R} , och sätta in termerna med \mathbf{R}' i en inre summa. Då dessutom nu $(\mathbf{R}' - \mathbf{R})$ ju måste också vara en vektor i Bragg-gittret, kan man

byta summerings-indexet \mathbf{R}' till \mathbf{R}'' och få:

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{R} \\ \mu, \nu, \sigma, \tau}} \frac{\partial u_\mu(\mathbf{R})}{\partial x_\sigma} \frac{\partial u_\nu(\mathbf{R})}{\partial x_\tau} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}''} R''_\sigma D_{\mu\nu}(\mathbf{R}'') R''_\tau \quad (4)$$

Den senare termen är en tensor av fjärde rang, betecknas med

$$E_{\sigma\mu\tau\nu} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} R_\sigma D_{\mu\nu}(\mathbf{R}) R_\tau \quad (5)$$

och kallas **elasticitetstensor**.

Det viktiga är nu att $E_{\sigma\mu\tau\nu}$ enbart beror på vektorerna \mathbf{R} , dvs. atomernas perfekta positioner, inte på uttöjningsfältet. Alltså är $E_{\sigma\mu\tau\nu}$ en konstant (med 81 komponenter) för ett specifikt material.

Nu vidare för att \mathbf{u} ju varierar långsamt, kan man skriva om ekv. 4 som en integral,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu, \sigma, \tau} \int d\mathbf{r} \frac{\partial u_\mu(\mathbf{R})}{\partial x_\sigma} \frac{\partial u_\nu(\mathbf{R})}{\partial x_\tau} \bar{E}_{\sigma\mu\tau\nu} \quad (6)$$

där

$$\bar{E}_{\sigma\mu\tau\nu} = \frac{E_{\sigma\mu\tau\nu}}{\Omega}$$

där Ω är volymen per en primitiv enhetscell i Bravais-gittret (och alltså också volymen per atom).

Ekvation 6 är utgångspunkten för hela den klassiska elasticitetsteorin. Den ger energin för ett specificerat uttöjningsfält u om man känner materialets elasticitetstensor E .

Trots att vi utgick från atomer i vår härledning, ser man att ekvationen är en ren kontinuitetsekvation.

För att sammanfatta detta ur fysikalisk synvinkel: med en härledningen som börjar från interatomära potentialer, kommer man med ett par fysikaliskt mycket rimliga approximationer fram till en helt kontinuerlig teori! Därmed är klassisk (linjär) elasticitetsteori välmotiverad, och används vitt uttryckligen som en kontinuum-teori! Moderna "Finite Element Method"-simuleringar av materials mekanisk egenskaper, som är mycket använda i industrin, baserar sig på linjär elasticitetsteori.

Tensorn E har hela 81 element(!), så detta verkar inte alltför trevligt att arbeta med. Det visar sig dock att man snabbt kan drastiskt minska på antalet termer som måste beaktas genom att betrakta olika symmetrier.

Den första symmetrin är enkel. Det är uppenbart att ekvation 5 är symmetrisk med avseende på utbyte av indexena $\sigma \leftrightarrow \tau$. Likaså är $D_{\mu\nu}$ symmetrisk med avseende på utbyte av $\mu \leftrightarrow \nu$ p.g.a. den harmoniska approximationen. Alltså räcker det med att bestämma $E_{\sigma\mu\tau\nu}$ för de sex värdena

$$xx, \quad yy, \quad zz, \quad yz, \quad zx, \quad xy$$

för indexparet $\mu\nu$ och $\sigma\tau$ var för sig. Detta har redan sänkt antalet element som bör betraktas till $6 \times 6 = 36$.

Nästa steg för att reducera index följer från att betrakta en rotation av kristallen. Det är uppenbart att en rotation kan inte ändra på kristallens energi. Så om vi nu gör rotationen

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \partial\omega \times \mathbf{R},$$

sätter in denna modifikation av gittret i ekv. 4 och kräver att $U = 0$, kan man lätt visa att U kan bero bara på en symmetrisk kombination av u -derivatorna,

$$\varepsilon_{\sigma\mu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial u_\sigma}{\partial x_\mu} \right) \quad (7)$$

Nu kan man skriva om ekv. 4 i formen

$$U = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left[\sum_{\mu, \nu, \sigma, \tau} \varepsilon_{\sigma\mu} c_{\sigma\mu\tau\nu} \varepsilon_{\tau\nu} \right] \quad (8)$$

där

$$c_{\sigma\mu\tau\nu} = -\frac{1}{8\Omega} \sum_{\mathbf{R}} [R_{\sigma} D_{\mu\nu} R_{\tau} + R_{\mu} D_{\sigma\nu} R_{\tau} + R_{\sigma} D_{\mu\tau} R_{\nu} + R_{\mu} D_{\sigma\tau} R_{\nu}] \quad (9)$$

Betraktelse av dessa ekvationer visar att uppenbart är ekvationerna symmetriska vid utbyte av $\sigma\mu \leftrightarrow \tau\nu$. Från den senare ekvationen ser man också genast att $c_{\sigma\mu\tau\nu}$ är invariant vid transformationerna $\sigma \leftrightarrow \mu$ och $\tau \leftrightarrow \nu$. Detta reducerar antalet oberoende index i $c_{\sigma\mu\tau\nu}$ till 21 (antalet kommer av de 6 diagonal-elementen som bildas av matrisen som bildas av de 6 indexparen $\sigma\mu$ plus de 6 indexparen $\tau\nu = \sigma\mu$ + de 15 elementen i ena halvan av matrisen på någondera sidan diagonalelementen).

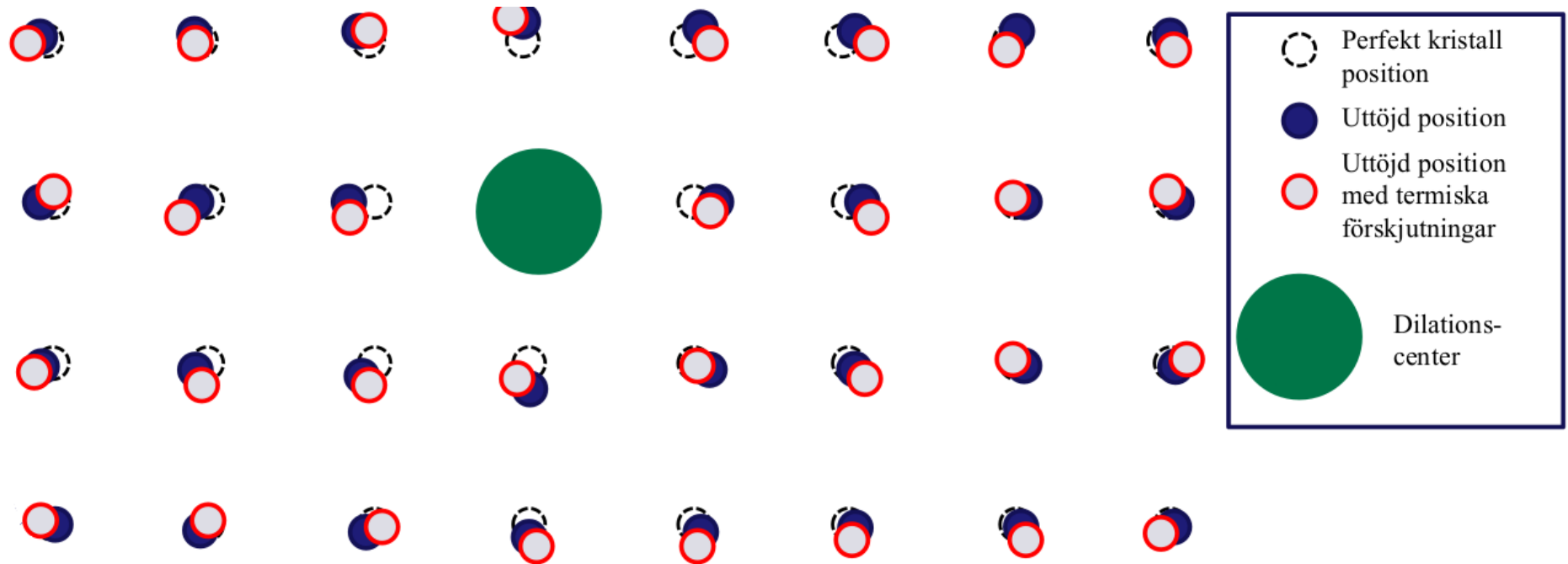
I dethär skedet är det dags att introducera en ny notation, med långt färre index än i notationen ovan.

5.1.1. Interlud: samband med termiska förskjutningar

Före vi fortsätter med elasticitet, påpekar vi en viktig fysikalisk tilläggsaspekt om förskjutningarna. Vi ser senare på kursen att atomernas termisk förskjutningar kring jämviktslähet är av storleksordningen 0.1 \AA vid normala temperaturer.

Förskjutningarna från elasticitetsfält kan vara mycket mindre, $\sim 0.001 \text{ \AA}$. Betyder detta att de är betydelslösa vid normala temperaturer?

Nej! Sambandet är det att de elastiskaförskjutningarna förflyttar på jämviktspunkten för de termiska. I andra ord, om man tar atomernas momentana platsers medeltal över en lång tid, får man den elastiskt förskjutna positionen.



Förskjutningar i kristaller kan mätas med t.ex. röntgen- eller elektrondiffraktion. Då de mäter över makroskopiska tider, medan atomers vibrationer sker på ps-tidskalor, ger mätningarna uttryckligen medeltalsförskjutningarna av atomer (de termiska förskjutningarna påverkar breddningen av diffraktionspikarna).

5.1.2. Ingenjörnotation för elasticitet

Notation som användes ovan är den vetenskapligt bäst motiverade och elegantaste, men samtidigt också något otymplig med alla sina index. Den överlägset vanligare notationen är den s.k. ingenjörnotationen ("engineering notation") för elasticitet. Den utgår från det att man ens i värsta fall inte behöver mer än 36 olika element för att beskriva elasticitet.

I notationen överför man koordinatparena $\mu\nu$ och $\sigma\tau$ till index från 1-6 enligt följande:

$$xx \rightarrow 1, \quad yy \rightarrow 2, \quad zz \rightarrow 3, \quad ,yz \rightarrow 4, \quad zx \rightarrow 5, \quad xy \rightarrow 6 \quad (10)$$

Nu introduceras nya elasticitetselement $C_{\alpha\beta}$ enligt transformationerna

$$C_{\alpha\beta} = c_{\sigma\mu\tau\nu}$$

där $\alpha \leftrightarrow \sigma\mu$, $\beta \leftrightarrow \tau\nu$ enligt samma regler som i (10). På liknande sätt omvandlas komponenterna $\varepsilon_{\mu\nu}$ till komponenter e , men så att

$$e_{\mu\nu} = \begin{cases} \varepsilon_{\mu\nu} & \text{då } \mu = \nu \\ 2\varepsilon_{\mu\nu} & \text{då } \mu \neq \nu \end{cases}$$

och nu kan vidare e också betecknas e_α enligt transformationsreglerna 10.

Nu kan alltså ekvationen för energitätheten i kristallen skrivas i den betydligt enklare formen

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{r} e_\alpha C_{\alpha\beta} e_\beta \quad (11)$$

Konstanterna $C_{\alpha\beta}$ kalla elastiska styvhets-konstanter eller **elastiska moduler** och bildar alltså en 6×6 -matris. Elementen i den inversa matrisen $S = C^{-1}$ kallas "elastic compliance constants" eller helt enkelt elastiska konstanter.

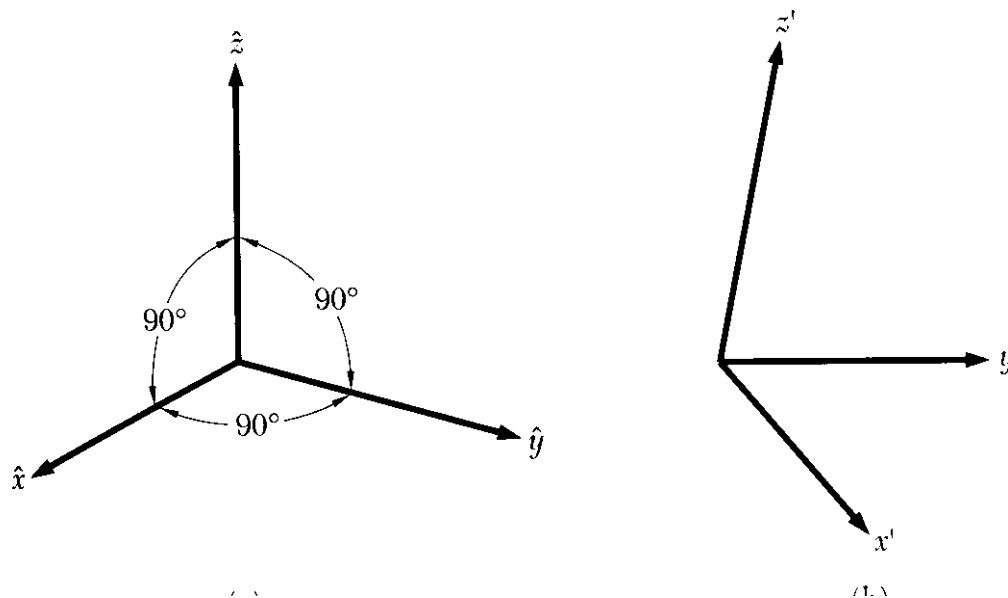
5.1.3. Geometrisk tolkning av e och C

Efter all denna härledningsrumba har man lätt tappat taget till vad i all världen detta nu hade och göra med materials hårdhet, och hurdan modifiering av materialet e :s komponenter nu egentligen betyder ?

För att förstå detta börjar vi med att betrakta följande enkla, likformiga modifikation av ett rätvinkligt koordinatsystem med enhetsvektorerna \mathbf{i} , \mathbf{j} och \mathbf{k}

$$\begin{aligned}\mathbf{x}' &= (1 + \epsilon_{xx})\mathbf{i} + \epsilon_{xy}\mathbf{j} + \epsilon_{xz}\mathbf{k} \\ \mathbf{y}' &= \epsilon_{yx}\mathbf{i} + (1 + \epsilon_{yy})\mathbf{j} + \epsilon_{yz}\mathbf{k} \\ \mathbf{z}' &= \epsilon_{zx}\mathbf{i} + \epsilon_{zy}\mathbf{j} + (1 + \epsilon_{zz})\mathbf{k}\end{aligned}\tag{12}$$

vars geometriska tolkning är en uttöjning av koordinataxlarna som beskrivs av ϵ_{xx} , ϵ_{yy} och ϵ_{zz} , samt en vridning eller skjuvning som beskrivs av de övriga indexena:



Notera: detta $\epsilon \neq \varepsilon$ som användes ovan! Men vi ser snart att de nog har ett samband.

Variablerna $\epsilon \ll 1$ då vi rör oss inom det linjära elastiska området.

Om man gör denna deformation av koordinataxlarna, hur påverkas då positionen av en atom som ursprungligen ligger vid $\mathbf{r} = (x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k})$? Efter deformationen kommer dess plats att vara $\mathbf{r}' = x\mathbf{x}' + y\mathbf{y}' + z\mathbf{z}'$, och **förflyttningen** ("displacement") \mathbf{u} (samma som i ekvation (1))

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}' - \mathbf{r} = x(\mathbf{x}' - \mathbf{i}) + y(\mathbf{y}' - \mathbf{j}) + z(\mathbf{z}' - \mathbf{k})$$

som genom insättning i 12 blir

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (x\epsilon_{xx} + y\epsilon_{yx} + z\epsilon_{zx})\mathbf{i} + (x\epsilon_{xy} + y\epsilon_{yy} + z\epsilon_{zy})\mathbf{j} + (x\epsilon_{xz} + y\epsilon_{yz} + z\epsilon_{zz})\mathbf{k}$$

som kan också skrivas i en mer allmän form

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = u_x(\mathbf{r})\mathbf{i} + u_y(\mathbf{r})\mathbf{j} + u_z(\mathbf{r})\mathbf{k}$$

Här ser vi alltså att deformationfältet $u(\mathbf{r})$ kan skrivas med hjälp av enkla transformationer av koordinataxlarna som beskrivs av koefficienterna ϵ . Vidare ser man genast att

$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \epsilon_{xy} = \frac{\partial u_y}{\partial x}, \quad \text{osv.}$$

Dessa ekvationer gäller för övrigt som första approximation också för icke-likformiga distortioner av rummet.

Nu kan man igen definiera koefficienter $e_{\alpha\beta}$ på basen av koefficienterna ϵ . Koefficienterna med samma index är helt enkelt

$$e_{xx} = \epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}; \quad e_{yy} = \epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}; \quad e_{zz} = \epsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad (13)$$

och koefficienter med olika index definieras så att de beror på ändringen av vinkeln mellan koordinataxlarna

$$\begin{aligned}
 e_{xy} &= \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' \cong \epsilon_{yx} + \epsilon_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \\
 e_{yz} &= \mathbf{y}' \cdot \mathbf{z}' \cong \epsilon_{zy} + \epsilon_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \\
 e_{zx} &= \mathbf{z}' \cdot \mathbf{x}' \cong \epsilon_{zx} + \epsilon_{xz} = \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}
 \end{aligned} \tag{14}$$

Jämförelse med ekvationerna för e ovan visar att dessa definitioner faktiskt är helt samma.

I.o.m. att ändringarna i koordinataxlarna är små, gäller

$$\begin{aligned}
 e_{xy} &= \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' = |\mathbf{x}'| |\mathbf{y}'| \cos \theta \approx \sqrt{1 + 2\epsilon_{xx}} \sqrt{1 + 2\epsilon_{yy}} \cos \theta \\
 &\approx (1 + \epsilon_{xx})(1 + \epsilon_{yy}) \cos \theta \approx (1 + \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \cos \theta
 \end{aligned}$$

där alla termer av ordningen ϵ^2 lämnats bort omedelbart.

Nu ser vi vad sambandet med koefficienterna ϵ , ϵ och e är. För koefficienterna med samma index

gäller helt enkelt

$$\epsilon_{\alpha\alpha} = \varepsilon_{\alpha\alpha} = e_{\alpha\alpha} = e_n$$

medan för koefficienterna med olika index gäller

$$\epsilon_{\alpha\beta} + \epsilon_{\beta\alpha} = 2\varepsilon_{\alpha\beta} = e_{\alpha\beta} = e_n$$

där indexet n bestäms av villkoren (10).

För att notationens-konfusionen skulle vara fullständig, använder en del källor ε när de menar e som är definierat här, osv. Om man arbetar med dessa borde man därför alltid definiera sin notation i början på något entydigt sätt !

Alla dessa index kallas **“strain”** på engelska, på svenska kan man kalla dem **spännings-komponenter** eller **uttöjnings-komponenter**.

Men här kommer vi i fortsättningen att använda främst ingenjörnotationen med C_{ij} och e_{ij} .

Nu kan vi också lätt beräkna hur en transformation av gittret ändrar på volymen. Efter deformationen blir volymen

$$V' = V(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' \times \mathbf{z}') \cong V(1 + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (15)$$

där vi igen lämna bort termer $O(e^2)$, och volymförändringen, **dilatationen**,

$$\delta = \frac{V' - V}{V} \cong e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$$

Sambandet med tryck är nu lätt att härleda. Enligt termodynamikens andra grundlag är

$$dE = TdS - PdV$$

Vid $T = 0$ gäller alltså $dE = -PdV$. Detta är alltså ekvationen för gaser, och P är en skalär som kallas **hydrostatiskt** tryck. För gitter arbetar man dock med ett generaliserat tryck i tensorform som ofta betecknas σ_{ij} och kallas **“stress”** på engelska. Det kunde kallas **påfrestning** eller **belastning** på svenska, men vi använder helt enkelt tryck. Med “stress” menas det yttre arbete som görs på ett system, och dess komponenter har motsatt tecken till det inre trycket i systemet. Notera att detta leder också till att det är fullt möjligt att ha negativa tryck inom materialfysiken, i motsats till klassisk termodynamik för gaser där tryck är alltid positiva.

Energiekvationens generalisering blir nu

$$dU/V = \sum_{ij} \sigma_{ij} de_{ij}$$

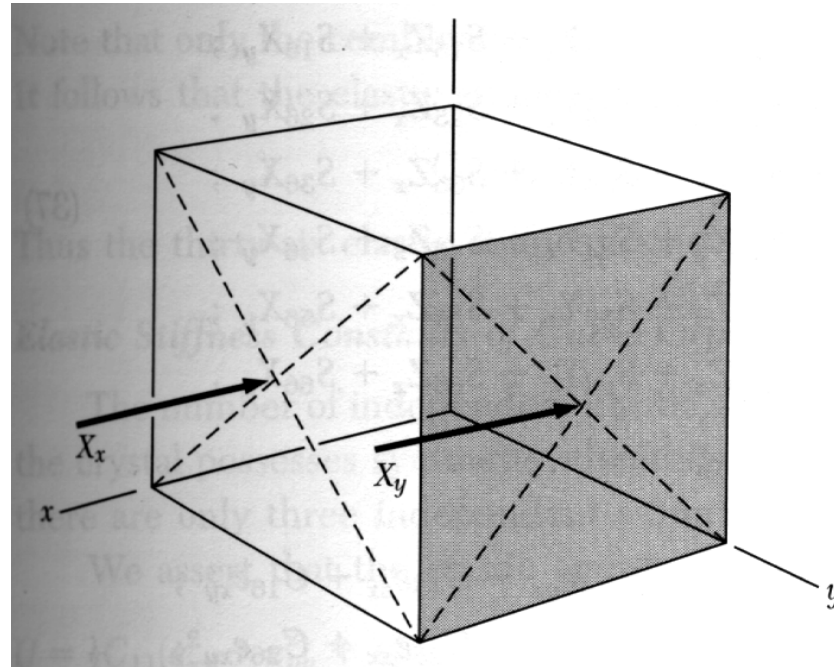
där U/V är energitätheten i systemet. Jämförelse med ekv. (8) visar nu att

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} c_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (16)$$

Denna lag som vi härlett säger alltså att trycket har ett linjärt beroende på uttöjningen, och kallas också Hookes lag.

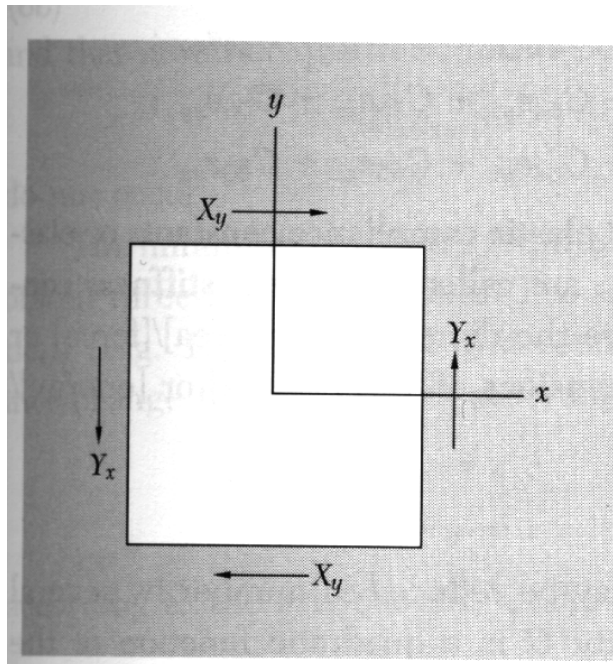
(Lagen var ursprungligen var inte precis given i denna tensorform: Hooke själv levde på 1600-talet och framförde lagen i formen "*ut tensio sic vis*").

Komponenterna i tryck-tensorn σ har en klar geometrisk tolkning. De är helt enkelt en kraft per enhetsarea som påverkar ett rätvinkligt block av ett material som är arrangerat längs med koordinataxlarna



T.ex. $\sigma_{11} = X_x$ är en kraft/area i X -riktningen som verkar på x -sidan, $\sigma_{12} = X_y$ en kraft/area i X -riktningen som verkar på y -sidan osv. Den stora bokstaven betecknar alltid kraftens riktning, den lilla sidan den verkar på. Storheterna har enheter av kraft/area eller energi/volym, alltså tryck-enheter.

Det existerar alltså nio av dessa kraft-komponenter. Men för att kroppen skall hållas i statiskt jämvikt, kan skjuvningskomponenterna inte vara oberoende. Betrakta t.ex. följande fall:



Nu måste $Y_x = X_y$ ty annars hamnar blocket i en rotation. På motsvarande sätt gäller $Y_z = Z_y$ och $Z_x = X_z$. De kvarvarande sex komponenterna kan väljas vara t.ex. X_x, Y_y, Z_z, Y_z, Z_x och X_y .

Nu kan man skriva om ekvationen (16) i ingenjörnotation så att

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_x \\ Y_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{pmatrix} \quad (17)$$

Här har vi använt oss av det faktumet att de självständiga elastiska konstanterna C är högst 21 till antalet och skrivit t.ex. C_{14} i stället för C_{41} .

5.1.4. Ytterligare reducering av antalet elastiska moduler

Hittills har vår härledning gällt för alla Bravais-gitter. Om man nu dessutom betraktar symmetrier hos ett specifikt gitter, kan man reducera antalet ytterligare.

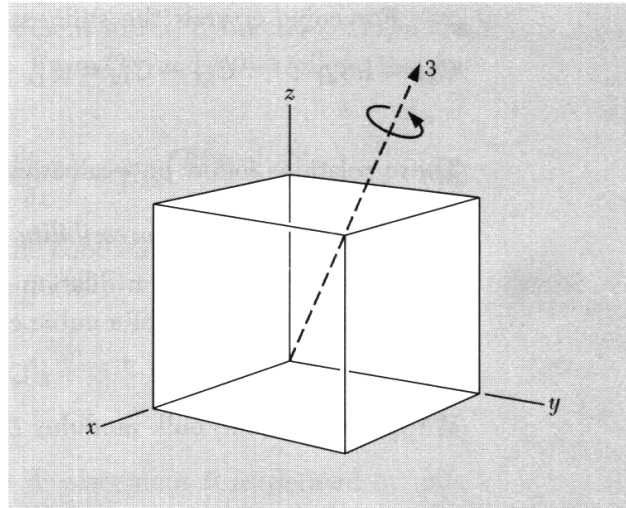
T.ex. för **kubiska system** påstår vi att energins (11) täthet U_t kan skrivas enbart med

$$U_t = \frac{1}{2}C_{11}(e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2}C_{44}(e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + C_{12}(e_{yy}e_{zz} + e_{zz}e_{xx} + e_{xx}e_{yy}) \quad (18)$$

dvs. att termer som innehåller

$$(e_{xx}e_{xy} + \dots); \quad (e_{yz}e_{zx} + \dots); \quad (e_{xx}e_{yz} + \dots);$$

inte förekommer. Detta kan visas genom att betrakta rotationer av gittret runt de fyra $\langle 111 \rangle$ -axlarna så att koordinat-axlarna byts:



Lite omtanke visar att detta är ekvivalent med följande permuteringar av koordinat-axlarna:

$$x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$$

$$-x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow -x$$

$$x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow x$$

$$-x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow -x$$

Dessa permuteringar ändrar också tecken på uttöjningsskomponenterna, t.ex. $e_{x,-y} = -e_{xy}$. Uppenbart är nu energitätheten (18) invariant vid transformationerna. Däremot kan tecknet på termer av typen $e_{xx}e_{xy}$ ändras vid transformationen, vilket kan komma att ändra på energin.

Därmed kan dessa termer inte förekomma, och alltså måste därtillhörande elastiska moduler vara $\equiv 0$.

Genom insättning i energitäthetens ekvation (11) kan man förvissa sig om att de numeriska faktorerna också är rätt.

Alltså behöver vi bara tre (!) elastiska moduler C_{11} , C_{12} och C_{44} för att fullständigt beskriva de elastiska egenskaperna för kubiska system !

Detta är en ganska dramatiskt framgång om man tänker på att vi började med 81 möjliga index.

Genom att betrakta liknande transformationer kan man reducera antalet elastiska moduler för andra Bravais-gitter. Här följer en tabell över antalet moduler som behövs:

Table 22.1

NUMBER OF INDEPENDENT ELASTIC CONSTANTS

CRYSTAL SYSTEM	POINT GROUPS	ELASTIC CONSTANTS
Triclinic	all	21
Monoclinic	all	13
Orthorhombic	all	9
Tetragonal	C_4, C_{4h}, S_4	7
	$C_{4v}, D_4, D_{4h}, D_{2d}$	6
Rhombohedral	C_3, S_6	7
	C_{3v}, D_3, D_{3d}	6
Hexagonal	all	5
Cubic	all	3

De elastiska konstanterna kan i princip härledas om man känner till växelverkingarna mellan atomer. Men de kan också mätas direkt genom ultraljudsmätningar (de har ett nära samband med gittervibrationer, som behandlas senare på kursen).

5.2. Elastiska egenskaper för kubiska gitter

Hädaneftre betraktar vi enbart kubiska system. För dessa kan alltså samband mellan yttre tryck och uttöjning skrivas på följande sätt:

$$\begin{pmatrix} X_x \\ Y_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{pmatrix} \quad (19)$$

Vi härleder nu några makroskopiska hårdhets-egenskaper utgående från dessa mikroskopiska definitioner.

Det enklaste måttet på ett materials elastiska hårdhet är **bulkmodulen** B , som helt enkelt berättar hur mycket volymen på ett material ändras om man trycker ihop det med ett hydrostatiskt yttre

tryck P . Den definieras som

$$B = -V \frac{dP}{dV}$$

Inversen på bulkmodulen $K = 1/B$ kallas **kompressibilitet**.

Ett konstant positivt yttre tryck motsvarar fallet $X_x = Y_y = Z_z = -dP$, som leder till en storleksförändring $e_{xx} = e_{yy} = e_{zz}$. Alla skjuvningskomponenter X_y, e_{xy} etc. är nu noll. Alltså fås

$$dP = -X_x = -(C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{xx} + C_{12}e_{xx}) = -(C_{11} + 2C_{12})e_{xx}$$

Volymförändringen vid en transformation är nu (se ekv. 15)

$$dV = V(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) = 3e_{xx}V$$

Alltså fås

$$B = -V \frac{-(C_{11} + 2C_{12})e_{xx}}{3e_{xx}V} = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$$

Notera att B inte alls beror på C_{44} . Detta har sin förklaring i att C_{44} är ett mått på skjuvning (vridning) av en kristall, och en jämn ihoppressning leder ju inte till någon skjuvning..

Alltså har vi på detta sätt visat att utgående från rent mikroskopiska begrepp kan man härleda fasta ämnens makroskopiska transformationsegenskaper.

Här är en tabell på några experimentella elastiska konstanter för grundämnen:

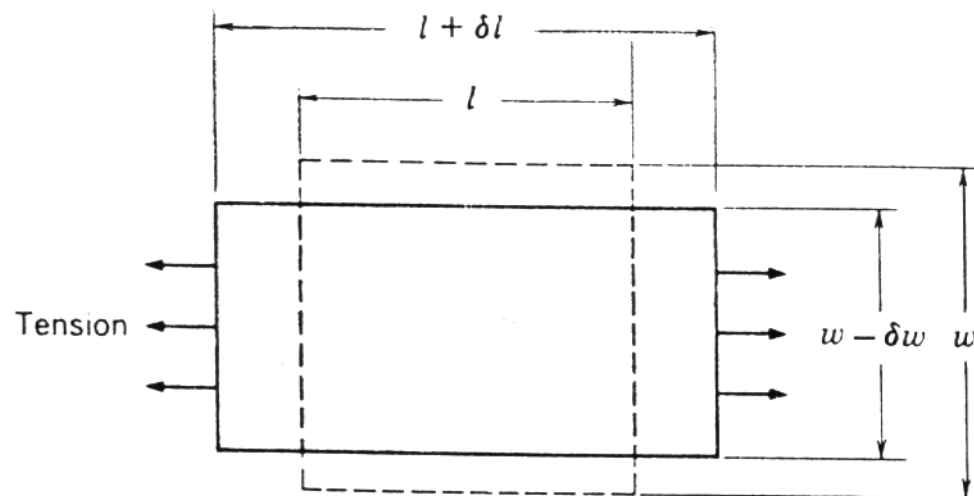
Crystal	Stiffness constants, in 10^{12} dyne/cm ² (10^{11} N/m ²)			Temperature, K	Density, g/cm ³
	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄		
W	5.326	2.049	1.631	0	19.317
	5.233	2.045	1.607	300	—
Ta	2.663	1.582	0.874	0	16.696
	2.609	1.574	0.818	300	—
Cu	1.762	1.249	0.818	0	9.018
	1.684	1.214	0.754	300	—
Ag	1.315	0.973	0.511	0	10.635
	1.240	0.937	0.461	300	—
Au	2.016	1.697	0.454	0	19.488
	1.923	1.631	0.420	300	—
Al	1.143	0.619	0.316	0	2.733
	1.068	0.607	0.282	300	—
K	0.0416	0.0341	0.0286	4	
	0.0370	0.0314	0.0188	295	
Pb	0.555	0.454	0.194	0	11.599
	0.495	0.423	0.149	300	—
Ni	2.612	1.508	1.317	0	8.968
	2.508	1.500	1.235	300	—
Pd	2.341	1.761	0.712	0	12.132
	2.271	1.761	0.717	300	—

För att göra en uppskattning på storleksordningen av den elastiska kompressionen, låt oss beräkna

hur mycket perfekt koppar skulle pressas ihop av ett tryck på 1 kbar. Med värdena i tabellen fås $B = 1.42 \times 10^{11} \text{ N/m}^2 = 1420 \text{ kbar}$. Nu fås $dV/V = -dP/B = 0.0007 = 0.07\%$. Kompressibiliteten är alltså ganska så liten, vilket ju inte är överraskande då den vardagliga erfarenheten ju klart säger att metaller inte går att pressa ihop mycket.

Två andra viktiga mått för materials hårdhet är **Youngs modul** Y och **Poissons kvot** μ . Young's modul kallas också ibland vilseledande den elastiska modulen E eller skjuvningsmodulen ("shear modulus").

Dessa definieras på följande sätt. Betrakta ett fritt block av material, som dras ut med ett tryck X_x , medan alla andra tryck-komponenter är $= 0$.



Nu kommer dess form att ändras så att $e_{xx} > 0$ och $e_{yy} = e_{zz} < 0$. Youngs modul definieras som

$$Y = \frac{X_x}{e_{xx}}$$

och Poissons kvot som

$$\mu = \frac{\delta w/w}{\delta l/l} = -e_{yy}/e_{xx}$$

Genom insättning i ekv. 19 kan man visa att för kubiska kristaller gäller (jfr. räkneövningen) för uttöjning längs med en $\langle 100 \rangle$ -riktning:

$$Y = (C_{11} + 2C_{12}) \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$$

och

$$\mu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$$

Notera att dessa är de mikroskopiska definitionerna på Young's modul. De är inte nödvändigtvis alls samma värden som kan erhållas med en makroskopisk mätning, och dessutom beror de på kristallriktning (dessa ekvationer antar implicit att man betraktar en kubisk kristall och drar den ut i 100-riktning).

För beräkningar om Youngs modul i andra kristallriktningar, se [Heino et al, Europhys. Lett. 41 (1998) 273].

Från tabellen ovan kan man räkna ut Young's modul för några vanliga metaller. Här ges också värden för jämförelses skull för diamant, kolnanorör och grafen (de två sistnämnda är ännu inte kända med hög noggrannhet, olika mätningar ger avvikande värden, som dock är av samma storleksordning som de i tabellen).

Ämne	Y (GPa)
W	408
Cu	72.5
Ni	150.8
Au	46.5
K	1.1
Diamant	1040
Grafen	upp till ~ 2400 har rapporterats [Lee et al, Nano Lett. 12 (2012) 4444]
Kolnanorör	upp till ~ 1800 har rapporterats [Treacy et al, Nature 381 (1996) 678]

Diamant är faktiskt ur denna synvinkelsätt det hårdaste materialet som finns – men samtidigt är det mycket skört, vilket begränsar dess nytthet i praktiska tillämpningar!

Däremot är grafen och kolnanorör inte sköra, vilket gör dem mycket intressanta för mekaniska

tillämpningar – om man bara kunde översätta den höga mekaniska styrkan från enskilda atomlager till makroskopisk skala...

5.2.1. Isotropiska material

[Hirth and Lothe]

Från beskrivningen ovan är det klart att kristallens inre orientation kan påverka dess elastiska egenskaper. Ett viktigt specialfall är dock det där så inte är fallet, alltså då de elastiska egenskaperna är oberoende av riktning. Sådana material kallas **isotropiska** material.

För att se vad detta innebär för de elastiska konstanterna, betrakta en expansion av x – *axeln* utan skjuvning eller modifikation av de övriga axlarna. För enkelhets skull gör vi detta för ett kubiskt system. Vi använder nu indexerna ε , som går att transformera, men för vilka ekv. (19) gäller på samma sätt som för e pga. den kubiska symmetrin. Alltså är $\varepsilon_{xx} > 0$ och alla andra $\varepsilon = 0$. Insättning i ekv. 17 ger

$$\sigma_{11} = C_{11}\varepsilon_{xx} \quad (20)$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = C_{12}\varepsilon_{xx} = \frac{C_{12}}{C_{11}}\sigma_{11} \quad (21)$$

Betrakta nu en rotation av 45° runt z -axeln, som har en transformations-matris

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Man kan visa att en rotation omvandlar ε och σ enligt formeln

$$\varepsilon'_{ij} = \sum_{lm} T_{il} T_{jm} \varepsilon_{lm}$$

och motsvarande. för σ . Därmed fås t.ex.

$$\varepsilon'_{xy} = T_{11} T_{21} \varepsilon_{xx} = -\frac{1}{2} \varepsilon_{xx}$$

(i.o.m. att alla andra termer utom ε_{xx} är 0 blir bara detta kvar) och

$$\sigma'_{12} = T_{11} T_{21} \sigma_{11} + T_{12} T_{22} \sigma_{22} = -\frac{1}{2} \sigma_{11} + \frac{1}{2} \sigma_{22}$$

Men nu om vi betraktar den sista raden i ekv. (19) för det roterade koordinatsystemet, ser vi att

$$\sigma'_{12} = 2C_{44} \varepsilon'_{12}$$

och genom sammanslagning av de två senaste ekvationerna med ekv. (20) fås

$$2C_{44} = C_{11} - C_{12} \quad (22)$$

Detta är alltså villkoret för att ett kubiskt material är isotropiskt. I.o.m. att ett isotropiskt material inte beror på gitterriktningar, kan man också för övriga symmetrier visa att de oberoende gitterkonstanternas antal faktiskt reduceras till bara 2.

Alltså har vi nu för isotropiska material reducerat antalet behövliga elastiska konstanter ytterligare, till 2. Längre ner än det kan man inte komma för fasta ämnen.

För icke-isotropiska material beskrivs graden av **anisotropi** (“anisotropy ratio”) A som

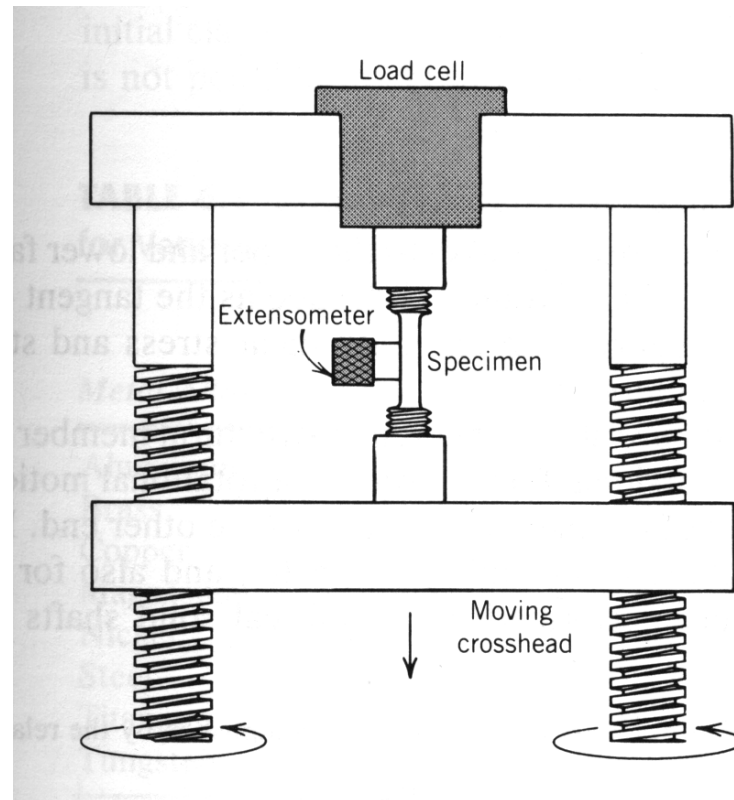
$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$$

som är alltså $\equiv 1$ för isotropiska material. Här är några värden på A [Hirth-Lothe s. 837]:

Al	1.21
Cr	0.67
Cu	3.21
Au	2.9
W	1.00
C (diamant)	1.21
Si	1.56
Ge	6.35

Få grundämnen är alltså isotropiska: några av de få exemplen är W och (nästan) Al. Men isotropiska ämnen är ändå extremt viktiga inom ingenjörsvetenskapen i.o.m. att mångkristallina ämnen, vilket ju metaller oftast är i praktiken, är nästan perfekt isotropiska p.g.a. den slumpmässiga orientationen av kristallkornen. Därför är beskrivning av isotropiska material mycket viktig i praktiskt byggnadsarbete och val av material. För deras beskrivning används också oftast i stället för de elastiska modulerna C helt enkelt Youngs modul Y och Poissons förhållande μ , som alltså nu räcker för fullständig beskrivning av materialets linjära elastiska egenskaper.

Youngs modul Y och Poissons förhållande μ är också lätta att mäta genom att makroskopiskt dra ut eller pressa ihop ett material och mäta dess längd- resp. bredd-förändring.



5.3. Vätskor

Nu har vi alltså kommit ner från 21 oberoende elastiska moduler till bara 2, genom att kontinuerligt förenkla strukturen i materialet. En logisk nästa fråga är att vilken förenkling skall man göra för att komma ner från 2 till 1?

Svaret är att man skall göra materialet till en vätska! Definition på en vätska är i själva verket att det är ett kondenserat ämne där man inte kan mäta en skjuvmodul, alltså t.ex. Y . Då är den enda kvarvarande elastiska modulen hur mycket vätskans volym kan komprimeras vid yttre tryck, dvs. bulkmodulen B !

Den exakta definitionen för en vätska innehåller i själva verket ett numeriskt gränsvärde för en skjuvnings-effekt, som säger att ett fast ämne är ett material vars skjuvviskositet är större än $10^{14.6}$ poise.

5.4. Plasticitet och hårdhet

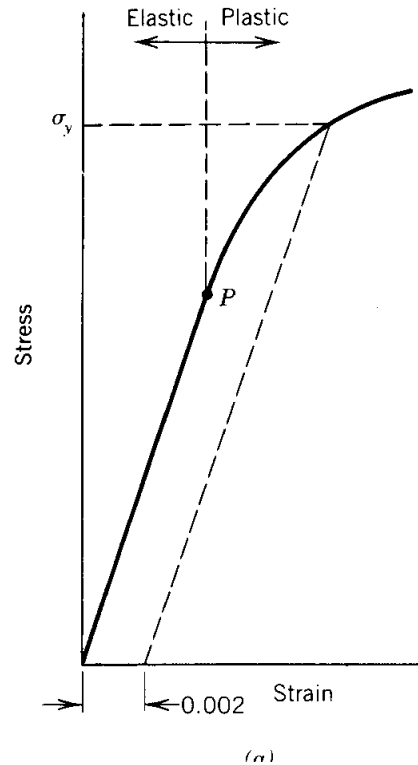
5.4.1. Plasticitet

Hittills har vi hela tiden antagit att den harmoniska approximationen gäller, och sett att det leder till ett enkelt linjärt förhållande mellan en yttre kraft på ett material och dess deformation. Från vardaglig erfarenhet vet vi dock väl att detta förhållande inte kan hålla för godtyckligt stora deformationer: för eller senare går materialet sönder.

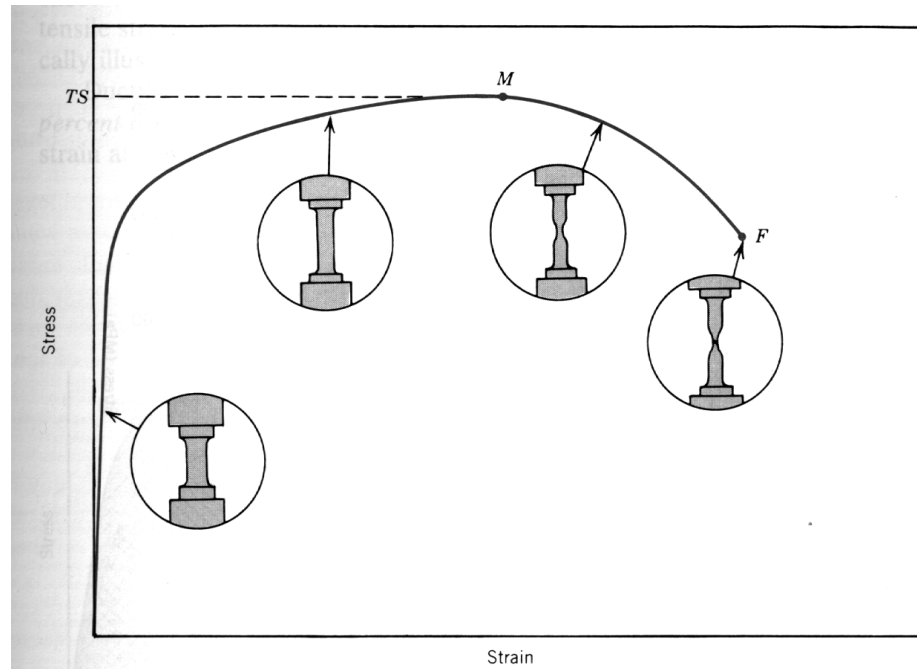
Men redan före ett material går sönder kan man skilja på olika beteende-områden. Det elastiska området (av vilket den linjära delen som beskrevs ovan är den första) kännetecknas av att deformationer inte är bestående, utan att om man upphör att påverka på materialet med en kraft, återställer den sig i sitt ursprungliga läge.

Med **plasticitet** menas sådana transformationer av material som leder till en bestående ändring i dess form efter att man slutat deformera det. Här är det alltså fråga om en sorts hysteresis-effekt. Att man deformerar materialet så starkt att det ursprungliga läget inte återställs betyder dock inte nödvändigtvis ännu att det går sönder: materialets egenskaper på atomnivå kan ändras före den går slutgiltigt sönder.

Skillnaden mellan elastiskt och plastiskt beteende syns tydligt i s.k. stress-strain-kurvor, t.ex.



Två storheter som används för att beteckna denna praktiska hårdhet är **flytgränsen** “yield strength”. Den bestäms genom som punkten där trycket har läst till en förflyttning av 0.002 i uttöjningen från slutet på det elastiska området (se bilden ovan). En annan viktig storhet är den **draghållfastheten** (“tensile strength”), som är helt enkelt punkten där uttöjningen börjar minska i ett utdragningstest:



Här är en tabell över några vanliga metallers flytgränser och tensila styrkor:

TABLE 6.2 Typical Mechanical Properties of Several Metals in an Annealed State, and of Commercial Purity

<i>Metal</i>	<i>Yield Strength [psi (MPa)]</i>	<i>Tensile Strength [psi (MPa)]</i>	<i>Ductility, %EL (in 2 in.)</i>
Gold	Nil	19,000 (130)	45
Aluminum	4,000 (28)	10,000 (69)	45
Copper	10,000 (69)	29,000 (200)	45
Iron	19,000 (130)	38,000 (262)	45
Nickel	20,000 (138)	70,000 (480)	40
Titanium	35,000 (240)	48,000 (330)	30
Molybdenum	82,000 (565)	95,000 (655)	35

Det måste dock betonas att dessa värden varierar starkt inom samma material beroende på hur den har tillverkats. En massa faktorer: kornstorlek, dislokationstäthet, orenhetsgrad, tom. hur metallen har processerats, kan inverka med mer än en storleksordning på dess makroskopiska styrka! Dessa beroenden är i allmänhet inte väl kända eller förstådda.

Ett undantag är dock beroendet av flytgränsen σ_y på kornstorlek. För den gäller, för en metall som annars har liknande egenskaper, den empiriskt erhållna Hall-Petch-lagen som säger att

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k_y}{\sqrt{d}} \quad (23)$$

där d är kornstorleken i medeltal, och σ_0 och k_y materialkonstanter som bör bestämmas.

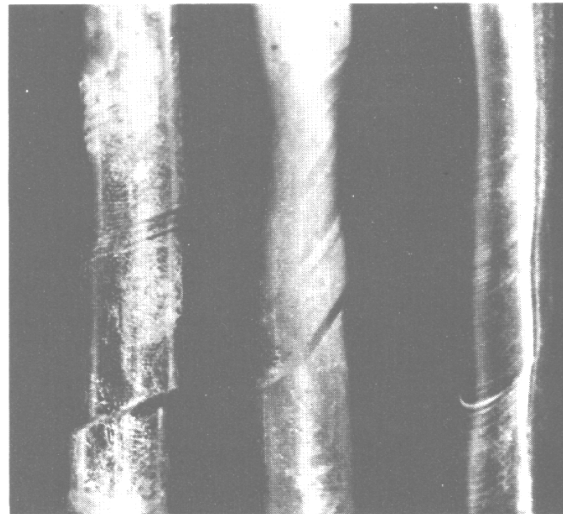
Från ekvationen ser man att desto mindre kornstorlek, desto hårdare blir materialet. Detta är orsaken till att nanokristallina material är av stort intresse: bara med att minska på kornstorleken, kan man öka på hårdheten. Experiment och datorsimuleringar visar att detta kan lyckas ner till storlekar $d \sim 10$ nm.

Experimentellt har man kunnat visa att koppar med en kornstorlek $d = 23$ nm kan ha en flytgräns på ung. 770 MPa, alltså faktiskt en storleksordning bättre än värdet i tabellen ovan. [Youssef, Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 929].

För mindre kornstorlekar än 10 nm blir materialet igen mjukare. [Koch and Narayan, MRS Proceedings 634 (2001) B5.1.1]

5.4.2. Skjuvning (“slip”) och elastisk hårdhet

Om man tillämpar ett skjuvningstryck (“shear”) på ett enhetskristallint material, och känner till atomstrukturen i den, kunde man tänka sig att skjuvningen sker då atomplanen börjar glida bredvid varandra. Denna process, som kallas “slip” på engelska, och egentligen **skjuvning** på svenska, går bra att observera och ser ut ungefär på följande sätt:



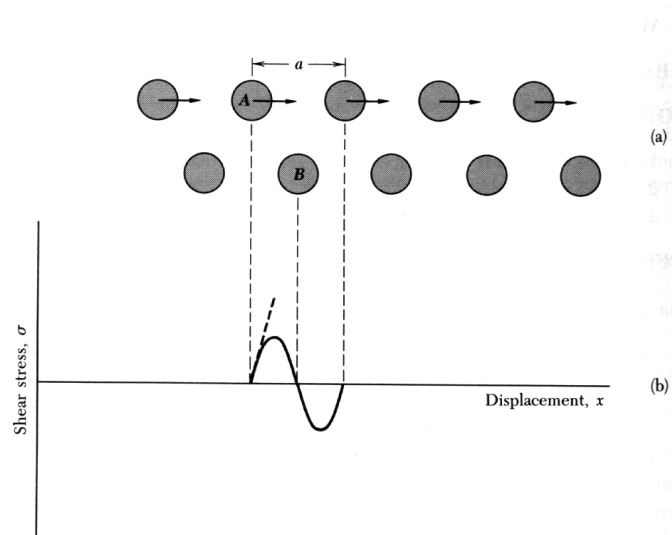
Glidningen sker faktiskt i riktningen av kristallplan, så man kunde väl tänka sig att det sker genom att plan glider bredvid varandra. En analys av de vanligaste gittrena visar att glidning kan bäst ske längs med vissa kristallplan (**skjuvningsplan**) i vissa kristallriktningar (**skjuvningsriktning**). I

tabellen här visas dessa riktningar och deras antal i FCC- och BCC-metaller. En kombination av planet och riktningen kallas ett **skjuvningssystem** och betecknas t.ex. $\{111\}\langle 110\rangle$.

TABLE 7.1 Slip Systems for Face-Centered Cubic, Body-Centered Cubic, and Hexagonal Close-Packed Metals

<i>Metals</i>	<i>Slip Plane</i>	<i>Slip Direction</i>	<i>Number of Slip Systems</i>
Face-Centered Cubic			
Cu, Al, Ni, Ag, Au	$\{111\}$	$\langle \bar{1}10\rangle$	12
Body-Centered Cubic			
α -Fe, W, Mo	$\{110\}$	$\langle \bar{1}11\rangle$	12
α -Fe, W	$\{211\}$	$\langle \bar{1}11\rangle$	12
α -Fe, K	$\{321\}$	$\langle \bar{1}11\rangle$	24
Hexagonal Close-Packed			
Cd, Zn, Mg, Ti, Be	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0\rangle$	3
Ti, Mg, Zr	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0\rangle$	3
Ti, Mg	$\{10\bar{1}1\}$	$\langle 11\bar{2}0\rangle$	6

Låt oss uppskatta vad trycket för att detta sker kunde vara. Betrakta följande situation, där atomerna i det övre planet förflyttas med avseende på det lägre:



För små förflyttningar x är nu trycket σ proportionell mot

$$\sigma = Gx/d$$

där d är avståndet mellan planena och G är någon skjuvningsmodul (“shear modulus”), t.ex. C_{44} . När förflyttningen har skett över hela avståndet a , måste energin vara tillbaka i sitt ursprungliga läge. Alltså kan energin skrivas som någon periodisk funktion. Vi väljer t.ex. en sin-funktion, och genom att ställa villkoret att $\sigma(x) = Gx/d$ för små x fås

$$\sigma = \frac{Ga}{2\pi d} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

(genom att göra approximationen $\sin x \approx x$ ser man att detta faktiskt reduceras till Gx/d för små x). Maximi-skjuvnings-trycket σ_c som krävs för att förflytta atomer är nu

$$\sigma_c = \frac{Ga}{2\pi d}$$

som ifall $a \approx d$ är helt enkelt $\sim G/6$. Denna styrka av kristallen att motstå sönderbrytning kallas dess **teoretiska styrka**. En noggrannare analys ger en lite noggrannare uppskattning på $G/30$.

När man i början av förra seklet lärde känna kristall-strukturer, gjordes en liknande uppskattning som ovan snabbt. När man sedan mätte kristallers styrka, fick man svar av samma storleksordning, och var nöjd och glad. För en stund.

När man sedan nämligen började tillverka bättre och bättre makroskopiska enhetskristaller, föll värdena stadigt, och blev till slut 1-3 storleksordningar mindre än de teoretiska värdena! Detta är också ungefär nivån där de typiskt ligger ännu idag. Här är några exempel:

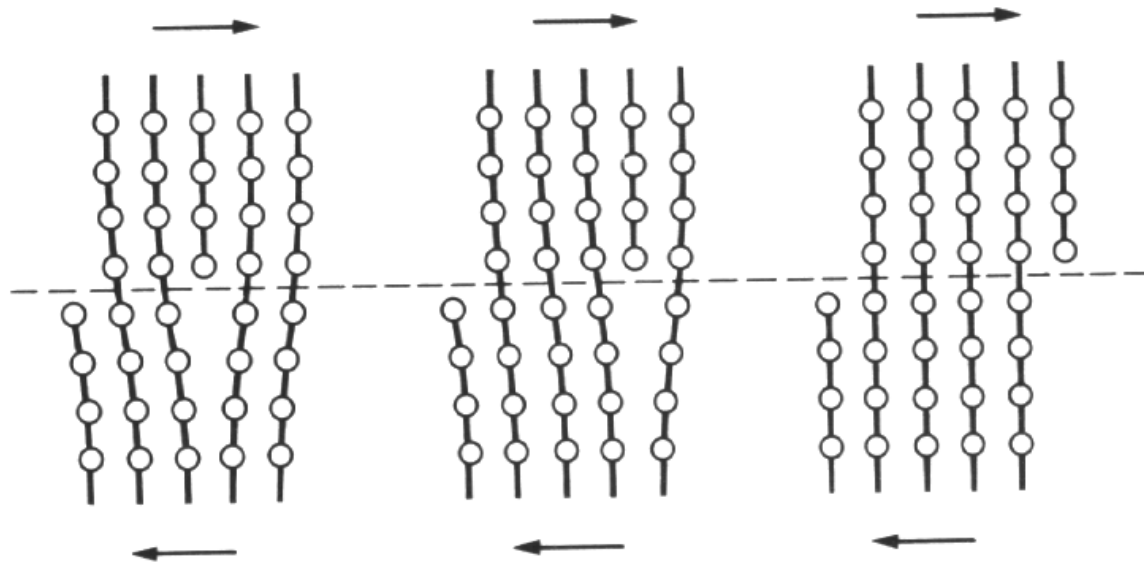
Table 1 Comparison of shear modulus and elastic limit

	Shear modulus G , in dyn/cm ²	Elastic limit σ_c , in dyn/cm ²	G/σ_c
Sn, single crystal	1.9×10^{11}	1.3×10^7	15,000
Ag, single crystal	2.8×10^{11}	6×10^6	45,000
Al, single crystal	2.5×10^{11}	4×10^6	60,000
Al, pure, polycrystal	2.5×10^{11}	2.6×10^8	900
Al, commercial drawn	$\sim 2.5 \times 10^{11}$	9.9×10^8	250
Duralumin	$\sim 2.5 \times 10^{11}$	3.6×10^9	70
Fe, soft, polycrystal	7.7×10^{11}	1.5×10^9	500
Heat-treated carbon steel	$\sim 8 \times 10^{11}$	6.5×10^9	120
Nickel-chrome steel	$\sim 8 \times 10^{11}$	1.2×10^{10}	65

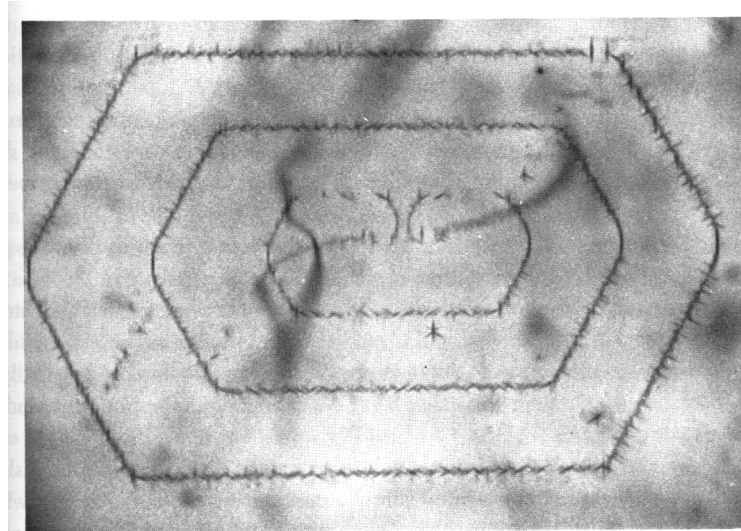
Detta var för ett stort problem i materialfysiken, ända tills tre forskare år 1934 (Orowan, Polanyi och Taylor) oberoende av varann *uppfann dislokationen* för att beskriva det underliga beteendet.

Förklaringen till att metaller bryts sönder mycket tidigare än kristallstrukturen skulle förutsätta ligger

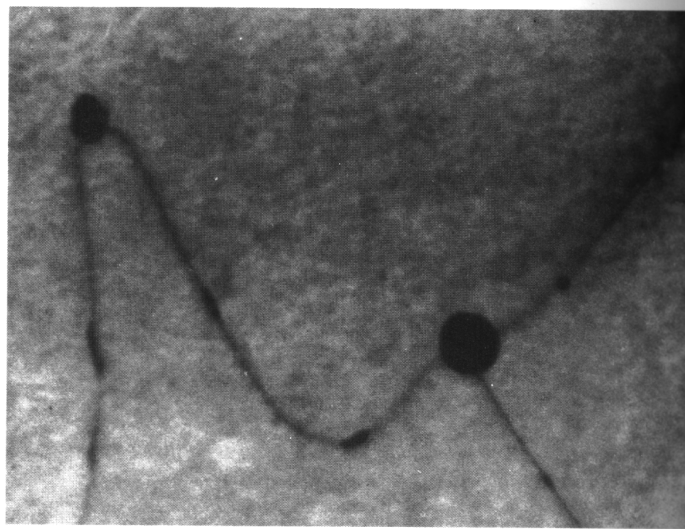
i att de alltid har något antal dislokationer i sig. Som vi såg tidigare på kursen, kan dislokationer röra sig lätt i kristallen:



Detta gör kristallen mycket mjuk och deformierbar, och därmed också lätt att dra sönder. Detta är grundorsaken till att metaller som koppar, silver och speciellt guld är mjuka och lätta att bearbeta: i FCC-strukturen är det speciellt enkelt att låta atomplan glida bredvid varann, och alltså finns det utrymme för mycket dislokationsaktivitet. Det hjälper inte heller nödvändigtvis att försöka sänka antalet dislokationer, för under deformation kan speciella källor skapa nya dislokationer kontinuerligt:



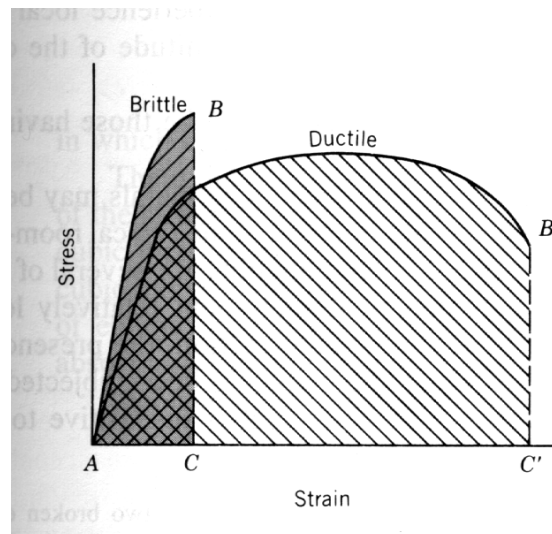
Men i kristaller av dålig kvalitet (som i de från början av förra seklet) finns det en massa orenheter. Dessa har egenskapen att stoppa ("pin down") dislokationernas rörelse varmed så att de inte kan leda till deformation, varmed kristallen igen blir hård i elastisk bemärkelse. Här är dislokationer i MnO som har stoppats av orenheter:



Ett specialfall av kristaller som är av så hög kvalitet att man faktiskt uppmätt en hårdhet med brytning som är ungefär den teoretiska styrkan är s.k. **whiskers**, som är perfekta, hårliknande kristaller som växer runt en enda skruv-dislokation. Med undantag av denna skruvdislokation, som inte kan orsaka glidning av atomer under påfrestning, är “whiskers” i praktiken dislokationsfria, och kan alltså ha en styrka som motsvarar den teoretiska.

5.4.3. Mekanisk hårdhet

Här är det dock skäl att påpeka om att hårdhet är ett mångtydigt begrepp. Om man försöker dra sönder en kristall, som i bilden ovan, är det det elastiska och plastiska beteendet som dominerar. Men ett material som är mycket starkt elastiskt, kan dock samtidigt vara mycket **spröd** (skör). Med sprödhet menas att ett material far lätt sönder om man introducerar den minsta lilla spricka eller uttöjning någonstans, varifrån den kan brytas sönder genom en katastrof-liknande rörelse framåt av sprickan. Motsatsen till sprödhet är **duktilitet** (tänjbarhet), eng. "ductility". På en stress-strain-kurva ser skillnaden mellan spröda och tänjbara material ut på följande sätt:



Perfekta kristaller är oftast mycket spröda, iom. att de inte har dislokationer eller andra orenheter som kunde stoppa en spricka från att fortplanta sig. Detta förklarar varför t.ex. diamant och andra ädelstenar (som har nästan ingen dislokationsaktivitet) är lätta att spräcka sönder trots att de har extremt stor elastisk hårdhet.

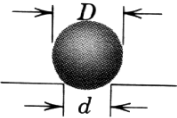

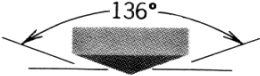
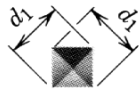
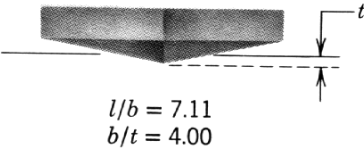
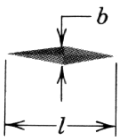
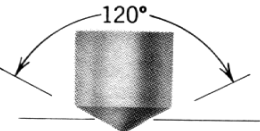

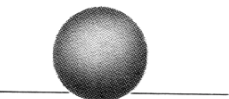

Bland metaller är BCC- och FCC-metaller, som har ett stort antal aktiva skjuvningsystem, är också oftast ganska duktila, medan HCP-metaller, som oftast har relativt få, är ganska spröda.

Material med mycket hög dislokationstäthet är också spröda, därför att ett stort antal dislokationer kommer oundvikligen att korsas varandra och därmed stoppa varandra, och kan också brytas sönder katastrofalt. Detta är t.ex. vad som händer när man vänder på ett gem eller en sked av och an tillräckligt länge så att det bryts: man skapar dislokationer inne i den ända tills de stoppar varandras rörelse, varvid objektet brister.

För att testa praktisk (pseudo-)elastisk hårdhet använder man främst olika indentations-test. Det enklaste testet går ut på att helt enkelt testa vilket material kan skrapa ett annat, och ordna de efter detta. Modernare och lite mer exakta test är s.k. indentations-test, där man med våld försöker pressa in ett prov i ett annat, och mäter området eller djupet i vilket materialet har pressats in. Vi

går inte in på dessa desto vidare, men för att ge en ytlig bild av hur det görs är här en lista av vanliga hårdhetstest:

TABLE 6.4 Hardness Testing Techniques

Test	Indenter	Shape of Indentation		Load	Formula for Hardness Number ^a
		Side View	Top View		
Brinell	10-mm sphere of steel or tungsten carbide			P	$HB = \frac{2P}{\pi D[D - \sqrt{D^2 - d^2}]}$
Vickers microhardness	Diamond pyramid			P	$HV = 1.854P/d_1^2$
Knoop microhardness	Diamond pyramid			P	$HK = 14.2P/l^2$
Rockwell and Superficial Rockwell	<ul style="list-style-type: none"> { Diamond cone { $\frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$ in. diameter steel spheres 			<ul style="list-style-type: none"> 60 kg 100 kg 150 kg 	<ul style="list-style-type: none"> } Rockwell 15 kg 30 kg 45 kg
					

^a For the hardness formulas given, P (the applied load) is in kg, while D , d , d_1 , and l are all in mm.

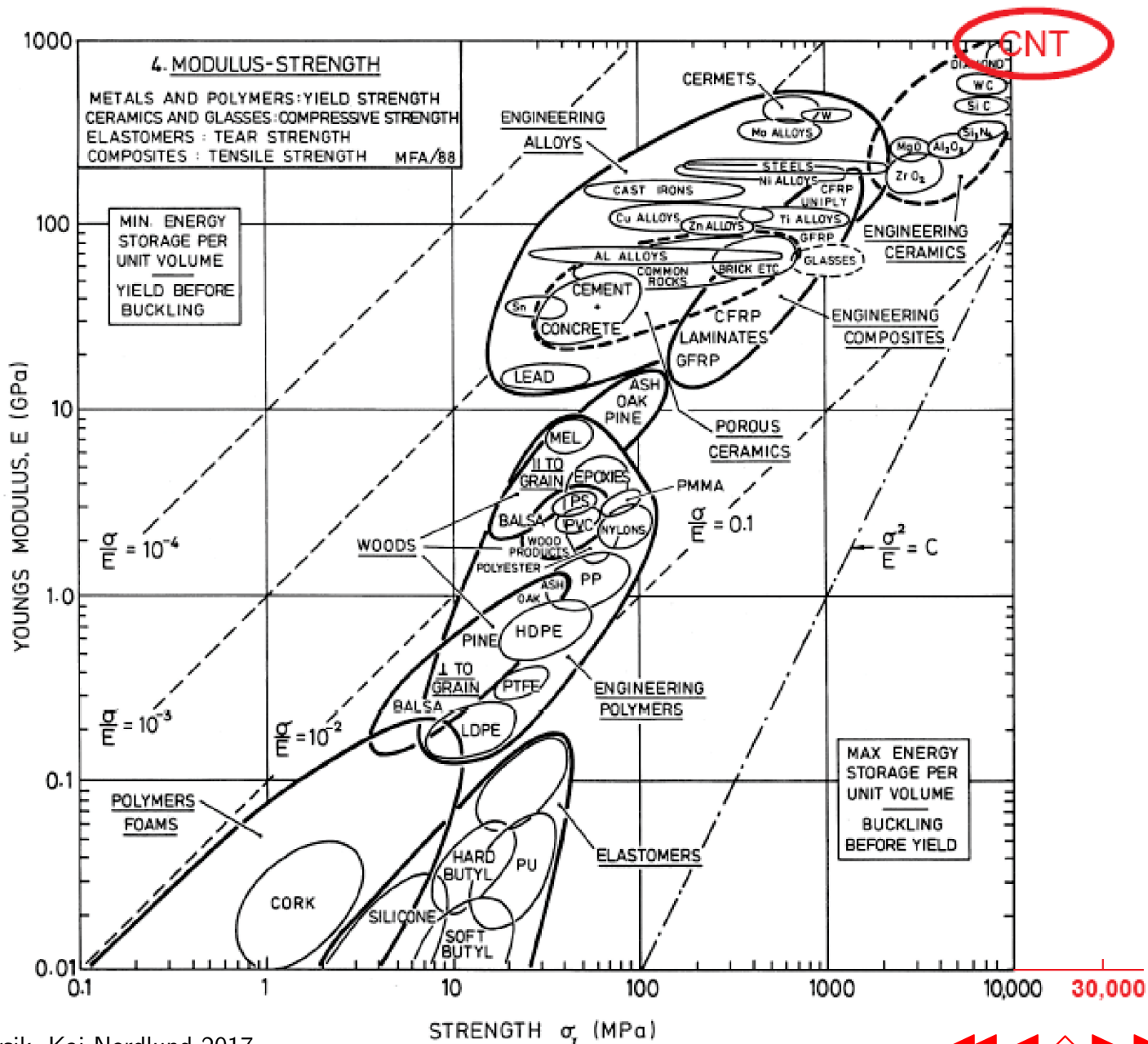
Source: Adapted from H. W. Hayden, W. G. Moffatt, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. III, *Mechanical Behavior*. Copyright © 1965 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.

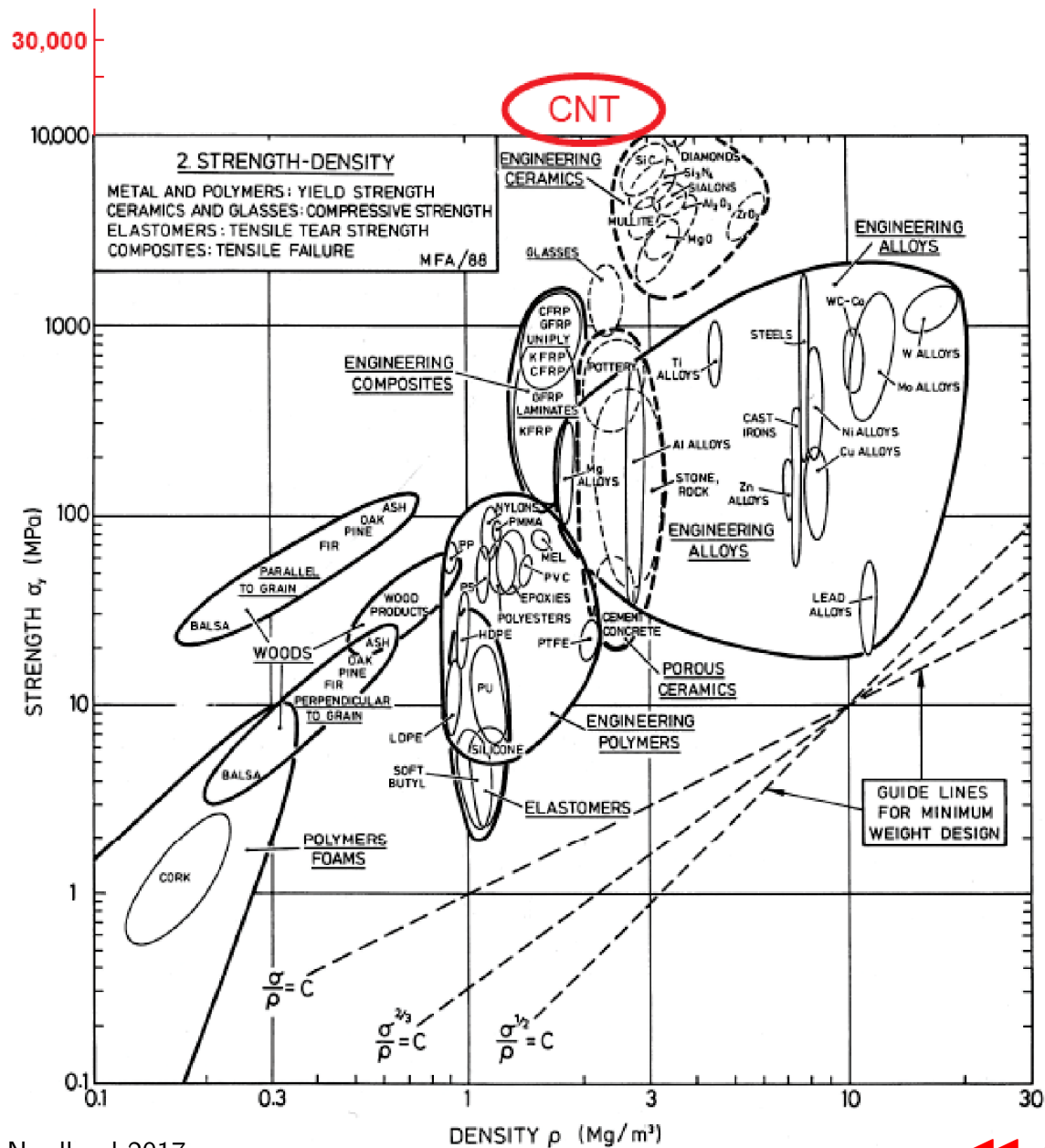
Idealiska relativt mjuka material som går att processera lätt är därför just metaller av god renhetsgrad som har en relativt lägg dislokationstäthet och hög dislokationsaktivitet. Materialtillverkningen går i mycket ut just på att spela med elastiskt hårda vs. spröda material. T.ex. är ett bra sätt att tillverka en kniv att i dess mitt ha ett material med hög dislokationstäthet och/eller mycket orenheter, som därmed är mycket hårt och vasst. Men samtidigt är det också sprött, så man vill omge det med renare, mjukare material som hindrar kniven från att brista sönder.

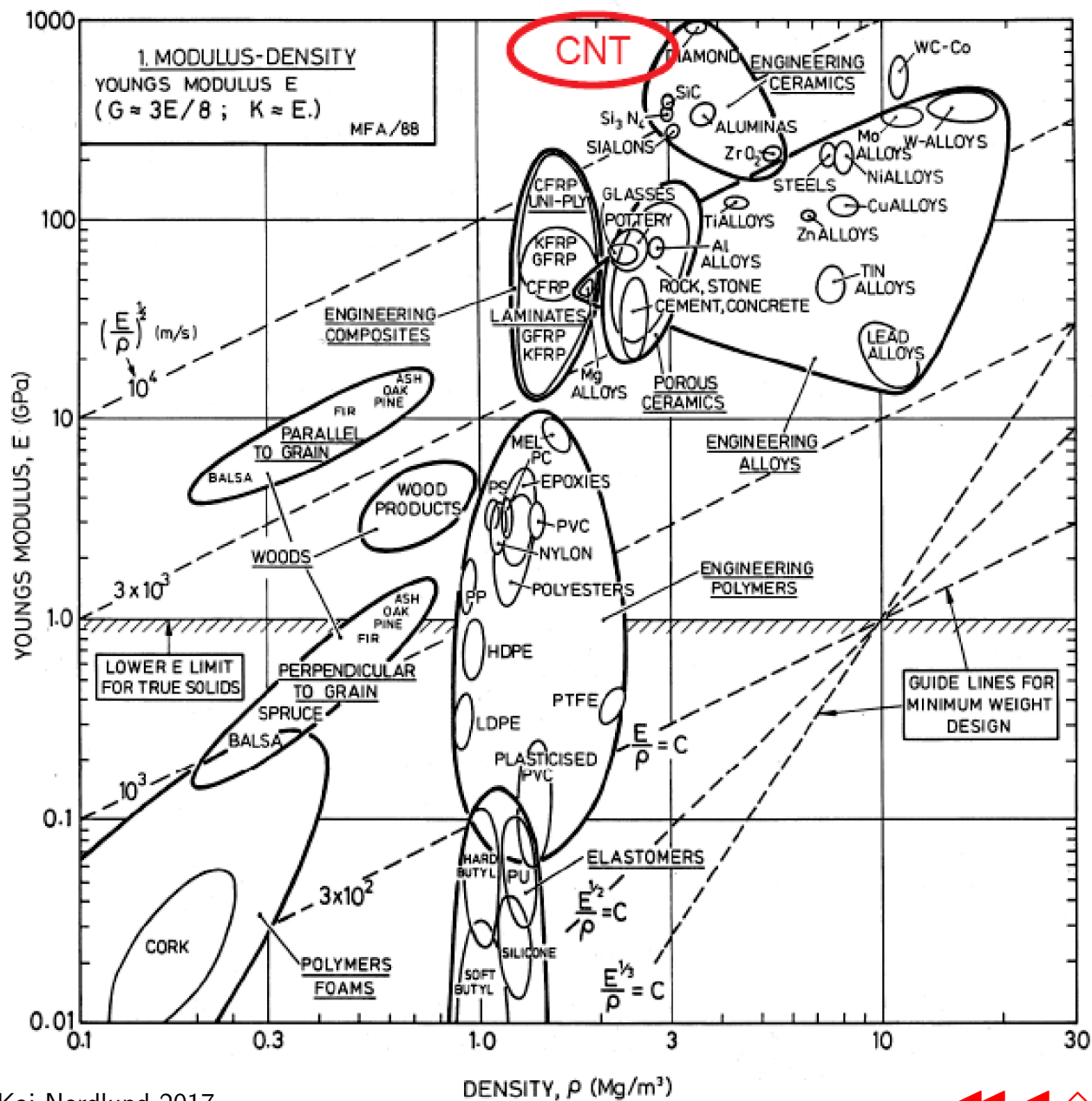
5.5. Översikt över materials hårdhet

Till slut för detta kapitel ges 3 grafer som sammanfattar materialklassers hårdhet som funktion av 2 parametrar i taget. Grafernas källa: [M. F. Ashby, Acta Metall. 37 (1989) 1273]. Kolnanorörens data (CNT) har satts in av Doc. Antti Kuronen (HU).

Bilderna ges främst för allmänbildning, detaljerade innehållet är inte centralt för denna kurs.







Vad har du åtminstone lärt dig i detta kapitel?

- Du känner till begreppen stress = tryck och strain = spänning, linjär elasticitet, plasticitet, skjuv, hydrostatiskt tryck och isotropi.
- Du känner till tensor- och ingenjörnotationen för elasticitet och hur de hänger ihop
- Du kan räkna med ingenjörnotationen för tryck, uttöjning inom linjär elasticitet. Du minns utantill elasticitetstensorn för kubiska kristaller.
- Du känner till definitionerna på och kan räkna med Youngs modul och Poissons kvot.
- Du vet hur man kommer ner från 21 oberoende elastiska konstanter till 1.
- Du känner till begreppen plasticitet, skjuvningplan, teoretisk styrka, whisker, sprödhet och duktilitet.
- Du vet att ordet “hårdhet” inte är entydigt definierat vetenskapligt.