

7. Fasta ämnens mekaniska egenskaper

7.1. Elasticitet

[Ashcroft-Mermin 22, Kittel s.80-]

Fasta ämnens hårdhetsegenskaper är ett mångfasetterat ämne. Den kan anses vara indelad i 2 huvudkategorier:

Elasticitet: området av reversibla transformationer i form.

Plasticitet: området av irreversibla (åtminstone delvis permanenta) transformationer i form.

Dessa har den markanta skillnaden att elasticiteten har en väldefinierad matematisk teori, som fungerar bra i de flesta ämnen.

Plasticiteten i sin tur är ett mycket komplicerat kapitel, med flera olika underliggande mekanismer av vilka en del fortfarande inte är väl förstådda.

7.1.1. Härledning av elasticitetstensorn

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. I detta delkapitel härleder vi de elastiska egenskaperna för enhetskristaller.

Obs: på denna kurs i materialfysik behöver man inte kunna utantill den matematiska formalismen i denna härledning (delkapitel 7.1.1), men nog förstå dess fysikaliska innebörd.

Betrakta en godtycklig interatomär potential V . Som tidigare konstaterats under kursen, har potentialer alltid en tämligen jämn potentialgrop kring atomernas jämviktslägen \mathbf{R} . Alltså kan vi utveckla potentialen med hjälp av den tredimensionella versionen av Taylors serie

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

Vi betraktar atomer som har förflyttats från positionerna \mathbf{R} till \mathbf{r} så att

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

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 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 ap-**

proximationen 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 inalles 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:

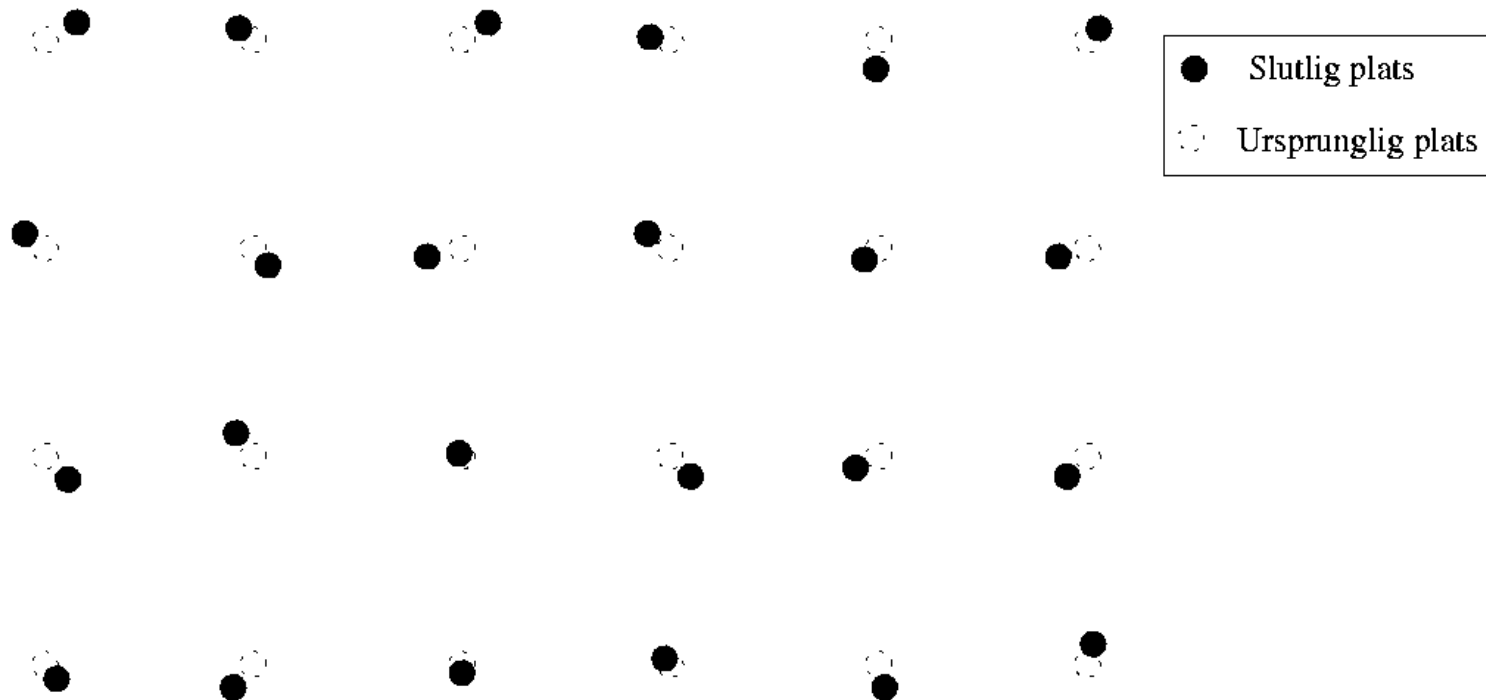
$$D_{\mu\nu} = \frac{\partial^2 V(\mathbf{r})}{\partial r_{\mu} \partial r_{\nu}}$$

och vi kan skriva hela den harmoniska potentialenergin

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

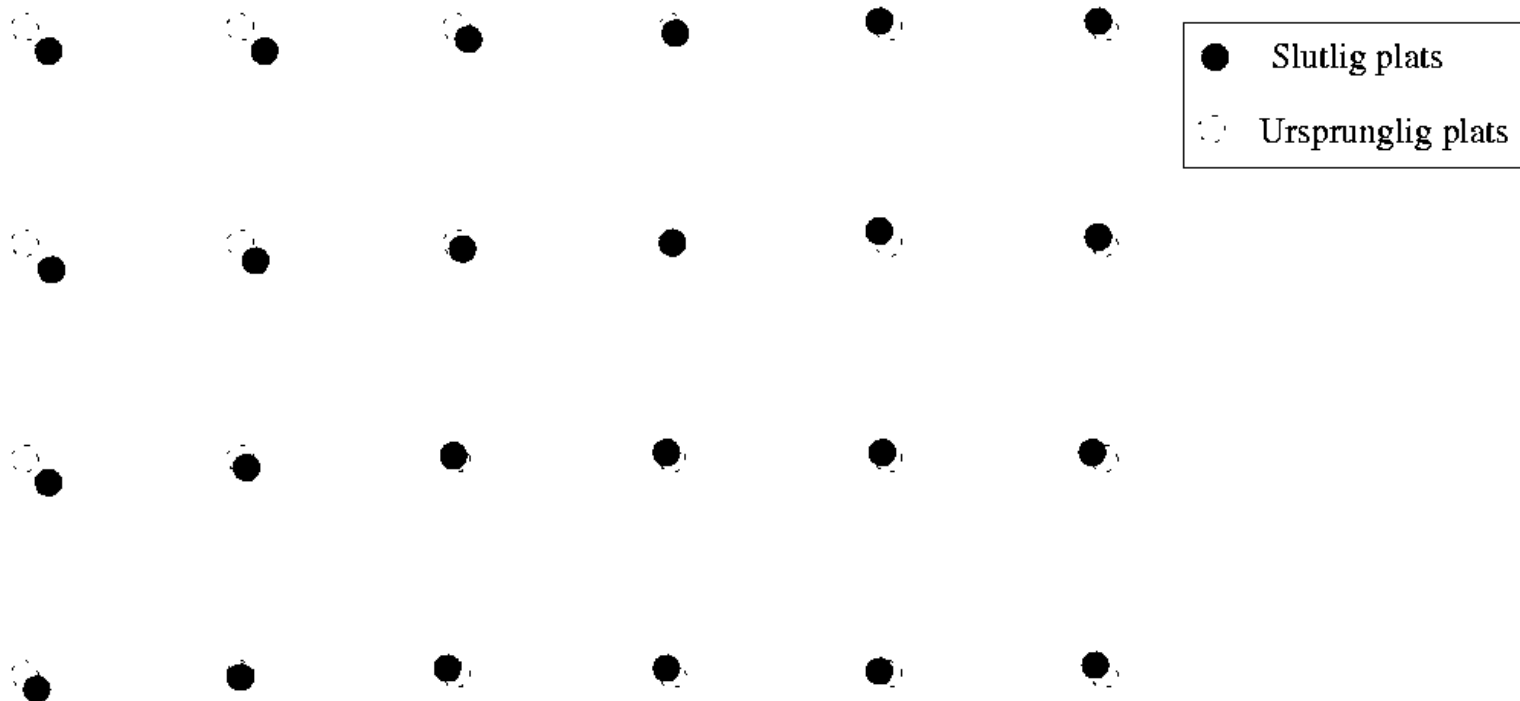
(Bytet av ordning är möjligt p.g.a. gittrets inversions-symmetri och den harmoniska formen: ett teckenbyte i förflyttningen leder till samma energi.)

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. För att komma vidare måste antar vi dessutom att vårt gitter är ett monatomärt Bravais-gitter, så att alla punkter och “bindningar” är ekvivalenta.

I icke-Bravais-gitter kan det förekomma ytterligare frihetsgrader, så kallad **intern relaxation**, som gör att atomerna i en enhetscell relaxerar sig osymmetriskt jämfört med den globala relaxationen. På denna kurs går vi dock inte in på detta ämne mera, emedan dess behandling är specifikt för varje gitter.



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

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

och kallas **elasticitetstensorn**.

Det viktiga är nu att $E_{\sigma\mu\tau\nu}$ enbart beror på vektorerna \mathbf{R} , dvs. atomernas perfekta positioner, inte på spänningsfältet. 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 spänningsfält u om man känner materialets elasticitetstensor E .

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

7.1.2. 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.

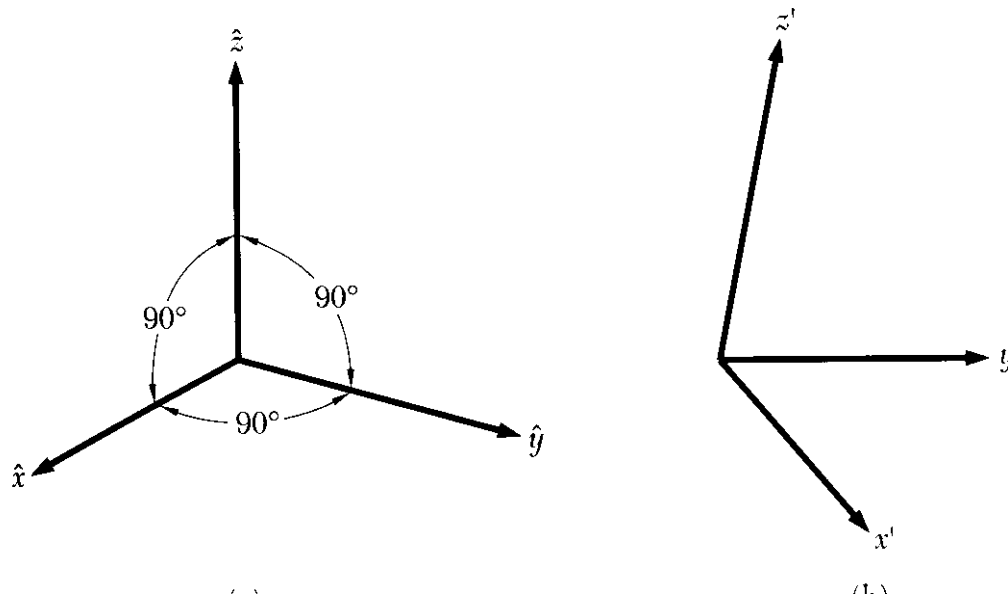
7.1.3. Geometrisk tolkning av e och C

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 töjning 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 $\mathbf{r}' = xx' + yy' + zz'$, 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 rymden.

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 **töjningskomponenter**. Ordet töjning är dock litet missvisande, för indexena kan också vara negativa (kompressiv spänning).

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. Den kan kallas **påfrestning** eller **belastning** eller **spänning** på svenska, men vi använder helt enkelt tryck.

Notera att på svenska kan ordet spänning användas helt korrekt både för “stress” och “strain”, vilket uppenbart kan leda till konfusion. Därför föredrar jag att använda tryck för “stress”.

Med “stress” menas det yttre arbete som görs på ett system, och dess komponenter har motsatt

tecken till det inre trycket i systemet. Det är helt möjligt att ha negativa tryck inom materialfysiken (töjning), 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

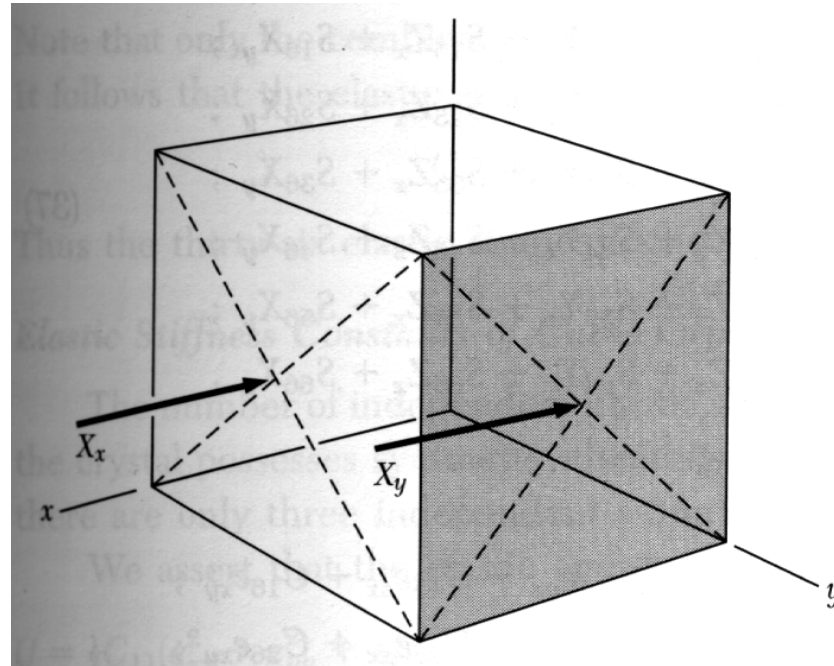
$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} c_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (16)$$

Denna lag som vi härlett säger alltså att trycket har ett linjärt beroende på spänningen, och är känt som **Hookes lag**.

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

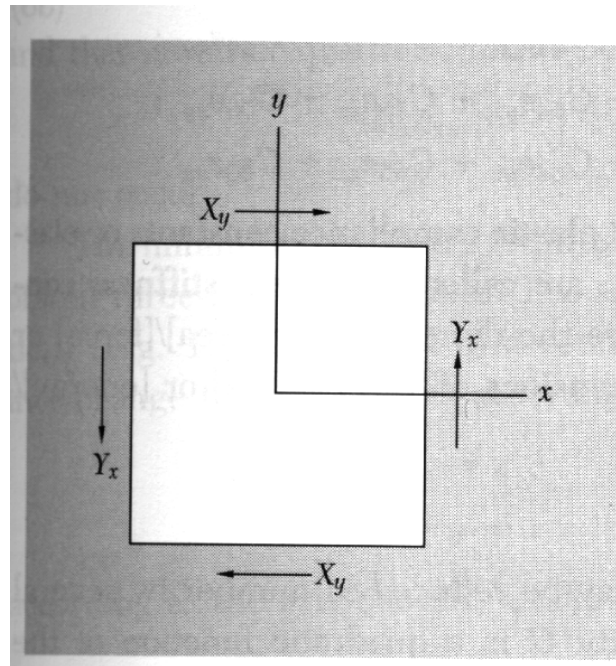
Komponenterna i tryck-tensorn σ har en klar geometrisk tolkning. De är helt enkelt en kraft

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} .

7.1.4. 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.

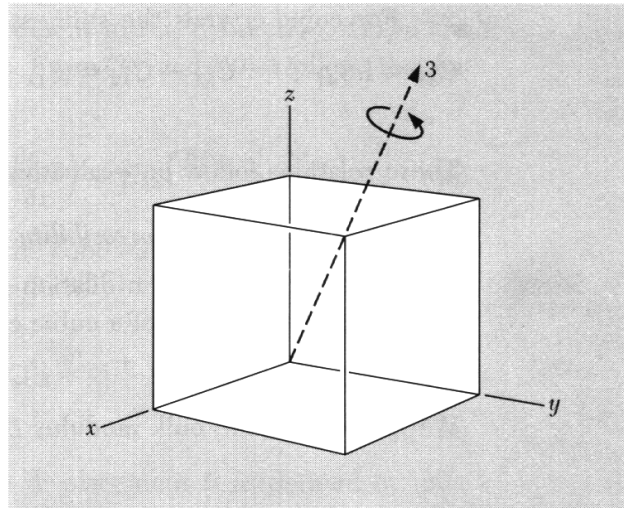
T.ex. för **kubiska system** påstår vi att energins (11) täthet U_t kan skrivas enbart med

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

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 spänningskomponenterna, 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 växelverkningarna mellan atomer. Men de kan också mätas direkt genom ultraljudsmätningar (de har ett nära samband med gittervibrationer, som behandlas senare på kursen).

7.1.5. Elastiska egenskaper för kubiska gitter

Hädanefter betraktar vi enbart kubiska system. För dessa kan alltså samband mellan yttre tryck och spänning 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 **kompresibilitet**.

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:

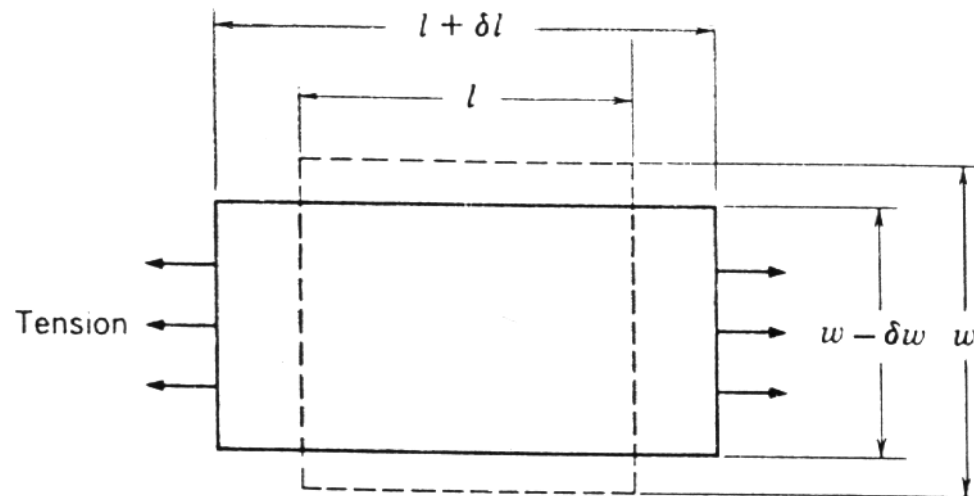
Crystal	Stiffness constants, in 10^{12} dyne/cm ² (10^{11} N/m ²)			Temperature, K	Density, g/cm ³
	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄		
W	5.326	2.049	1.631	0	19.317
	5.233	2.045	1.607	300	—
Ta	2.663	1.582	0.874	0	16.696
	2.609	1.574	0.818	300	—
Cu	1.762	1.249	0.818	0	9.018
	1.684	1.214	0.754	300	—
Ag	1.315	0.973	0.511	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 vår 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 ofta bara den elastiska modulen E .

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

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

och

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

7.1.5.1. 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 materials elasticitet per definition 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 (jfr. vad som sedas om viskositet och definitionen på en vätska tidigare under kursen: för vätskor är ju per definition skjuvmodulen betydelselöst liten, och antalet elastiska konstanter då bara 1).

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.

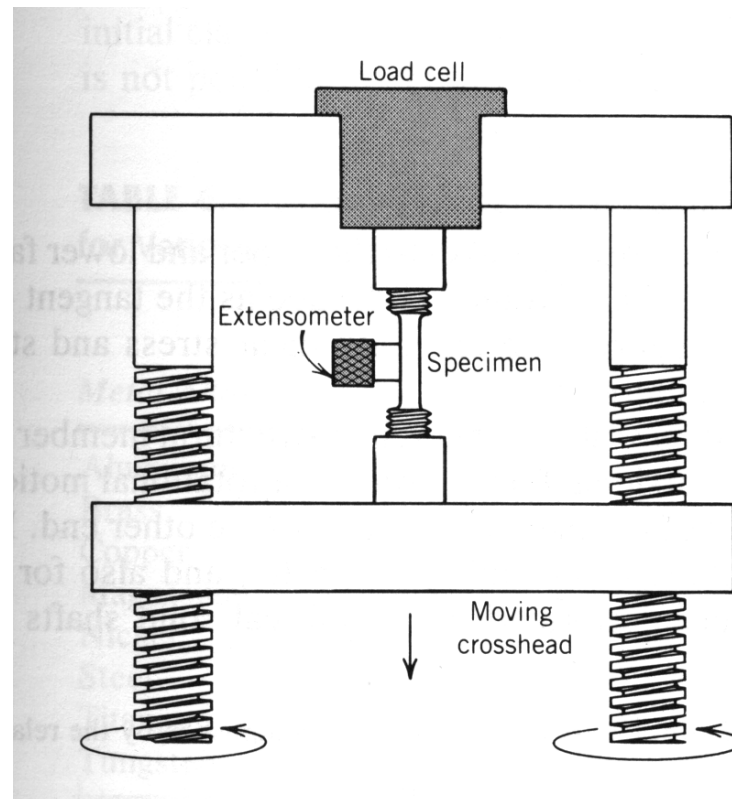
7.1.6. Gränserna för den klassiska elastiska bilden

Allt som behandlades ovan i detta kapitel gällde alltså för enhetskristallina material. Vi har tidigare under kursen sett att de flesta praktiska ämnen är mångkristallina, amorfa eller av blandad natur i sin makroskopiska struktur, så frågan är hur relevant beskrivningen ovan egentligen är.

Just det sist härledda begreppet isotropiskt material är mycket viktig i praktiken. I makroskopiska material försvinner den mikroskopiska informationen som ett medeltal, och de befinner sig oftast då exakt som isotropiska material i sina elastiska egenskaper!

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 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.



En annan mycket relevant fråga är huruvida man kan använda de mikroskopiska elastiska konstanterna C_{xx} för ett ämne till att förutspå Y och μ för samma ämne i makroskopisk mångkristallin form? Svaret är i allmänhet **nej**. Vi kommer senare i detta kapitel att se att komplicerade fenomen som dislokationer påverkar starkt de makroskopiska mekaniska egenskaperna, och därmed **kan de mikroskopiska och makroskopiska elastiska egenskaperna vara märkbart olika**.

Exempel: med ekvationen $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ och $Y = (C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12}) / (C_{11} + C_{12})$ samt värdena i tabellen ovan från Kittel kan man räkna ut bulkmodulen för metaller. Dessa kan jämföras med värden som ges för kommersiella mångkristallina metaller av t.ex. tillverkaren GoodFellows (<http://www.goodfellow.com/csp/active/gfHome.csp>). Här är en sådan jämförelse.

Ämne	B ur C_{11}, C_{12} (kbar)	B ur GoodFellows (kbar)	Y ur C_{11}, C_{12} (kbar)	Y ur GoodFellows (kbar)
W	3107	3110	4083	4110
Cu	1370	1378	667	1298
Au	1728	1710	426	785
Al	761	752	628	706
K	33	31	8.2	35

Här ser man att de två olika värdena på B korrelerar väl, medan för Y korrelerar värdena för de isotropiska materialen W och Al ganska väl, medan de övriga korrelerar väsentligen inte alls!

Och också om B här korrelerar bra, gör det inte nödvändigtvis för alla typer av makroskopiska prover, så man skall aldrig använda makroskopiskt mätta elastiska moduler på mikroskopisk nivå.