



HELSINGIN YLIOPISTO
HELSINGFORS UNIVERSITET
UNIVERSITY OF HELSINKI

MATERIALFYSIK VT 2016

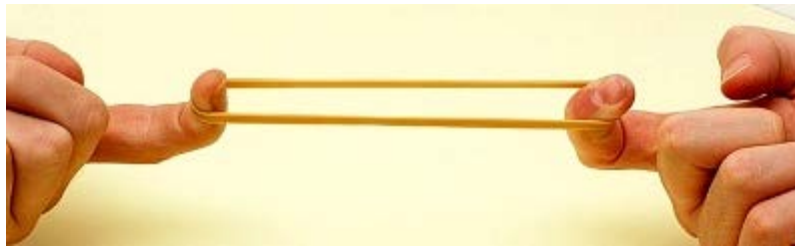
7. Fasta ämnens mekaniska egenskaper 7.1 Elasticitet

[Kittel]



7.1. Grund-definitionerna

- Elasticitet: icke-bestående, reversibel deformation av material
 - Minnesregel: elastiskt gummiband



- Plasticitet: bestående, ickereversibel deformation av material
 - Minnesregel: modellera

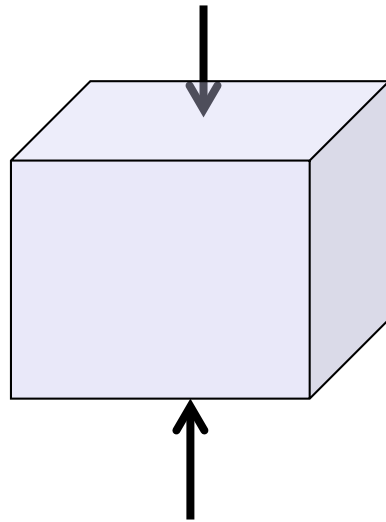




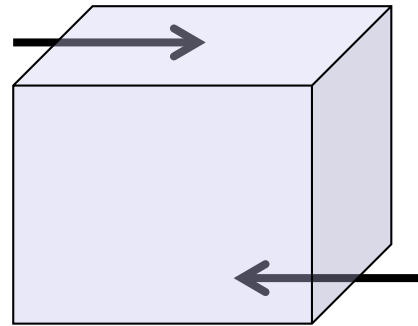
Elasticitet vs. plasticitet

- Ett materials respons till en yttre påfrestning (kraft) utgör dess mekaniska egenskaper

Normala krafter



Skjuvkrafter



- **Elasticitet:** området av reversibla transformationer i form.
- **Plasticitet:** området av irreversibla (åtminstone delvis permanenta) transformationer i form.

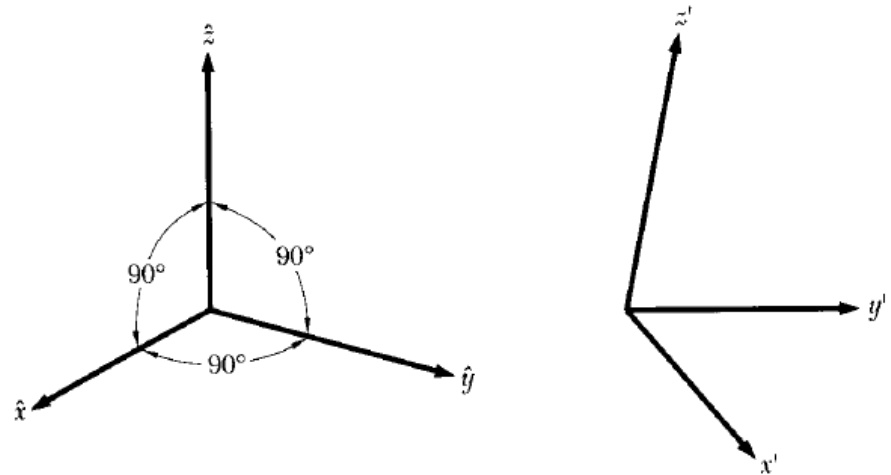


Elasticitetsteori

- Elasticitet har en väldefinierad matematisk teori, som utgår från 4-dimensionella tensorer
 - Denna går inte igenom på denna kurs
 - Den svenska kursen i Fasta tillståndets fysik har en utförlig härledning, baserad på Kittels bok. Ges också på engelska i slutet av dessa slides som referens
- Den kan förenklas till en 2-dimensionell relativt enkel notation, som kallas **ingenjörnotation för elasticitet** och sammanfattas här
- I härledning är en grundförutsättning att masscentrumrörelsen av systemet är $= 0$



Elasticitetsteori



- Man utgår från atompositioner i jämvikt

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

- Efter en påfrestning/tryck (engelska "**stress**") kan materialet förändras så att atompositionerna förskjuts

$$\mathbf{r}' = x\mathbf{x}' + y\mathbf{y}' + z\mathbf{z}'$$

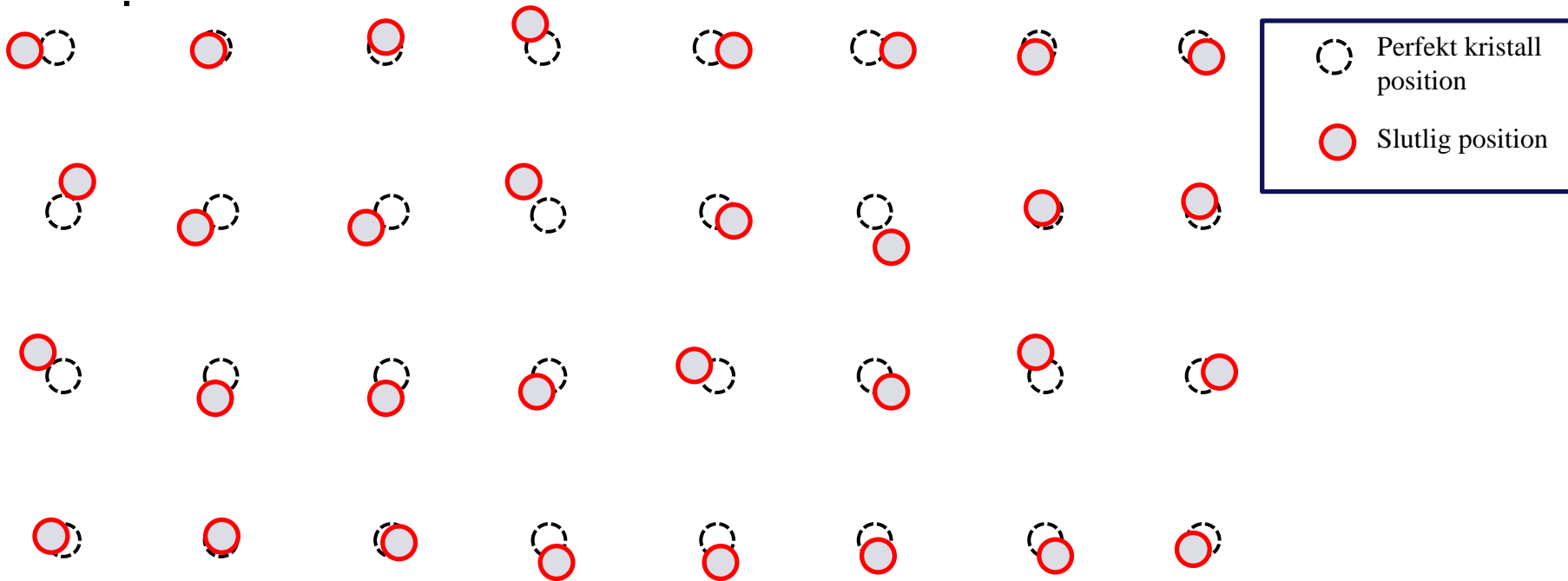
- Den mekaniska påfrestningen kan då beskrivas med **förflyttningen ("displacement")**

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



Elasticitetsteori

- Tillsvidare har förändringarna i $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ varit godtyckliga

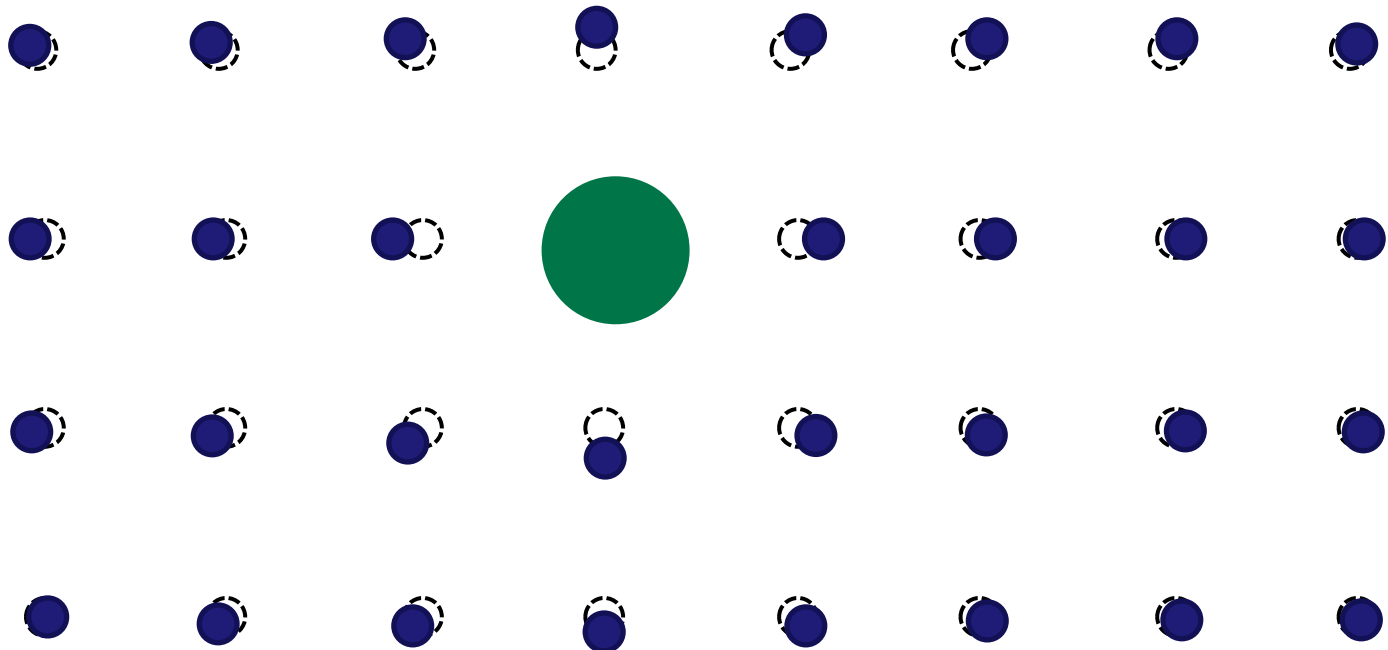


- Men sådana slumpmässiga förskjutningar är osannolika för ett fast ämne i jämvikt. Det är mycket mer sannolikt att uttöjningsfältet (strain field) $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ förändras jämt och kontinuerligt.



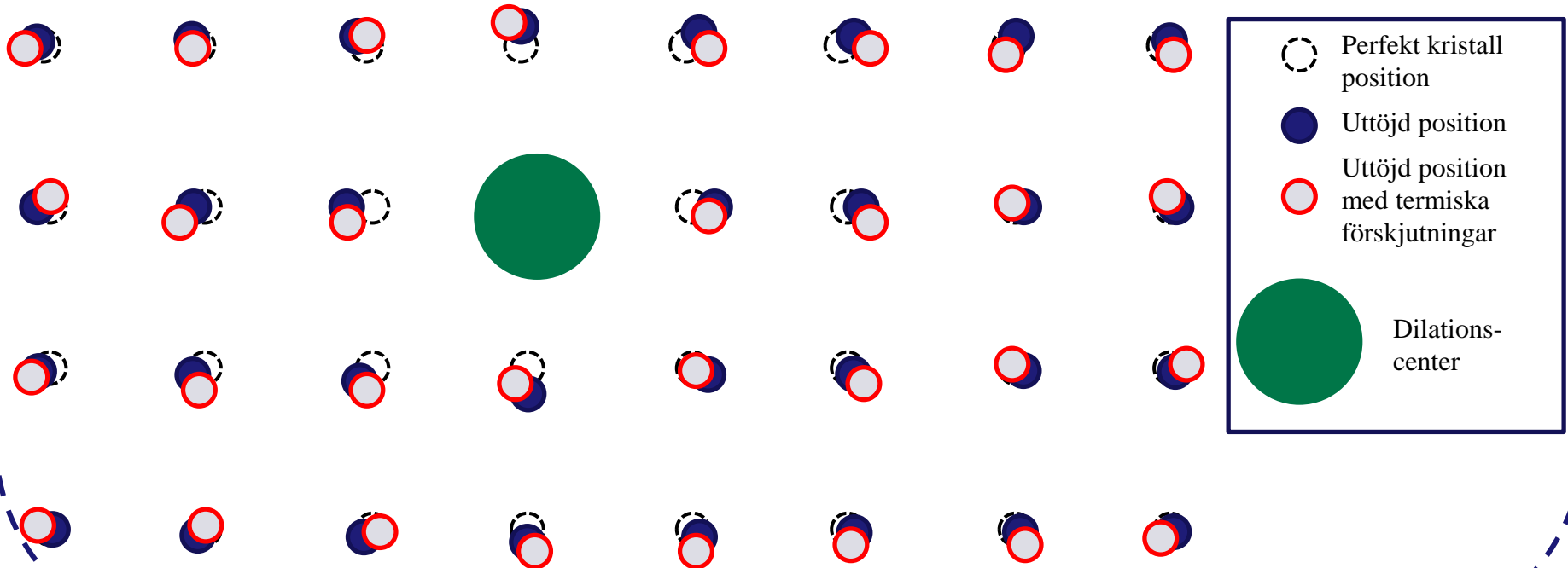
Illustration av realistiska atomförskjutningar

- Illustration av kontinuerliga förskjutningar som kommer ut från ett dilationscenter – t.ex. en mycket större atom i ett gitter



Parentes: hur förhåller sig detta till termiska atomförskjutningar?

- Atomers termiska rörelse är mer eller mindre slumpmässig runt jämviktsläget
 - Om det finns ett uttöjningsfält, är den termiska rörelsen centrerad på den uttöjda atompositionen. Dvs. om man gör ett långtidsmedelvärde, skulle man få positionen som ges av elasticitetsteori.





Elasticitetsteori: uttöjningskoefficienterna

- Nu kan man definiera 6 koefficienter för förflyttningen på följande standardsätt:

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

$$e_{xy} = \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' \approx \epsilon_{yx} + \epsilon_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}$$

$$e_{yz} = \mathbf{y}' \cdot \mathbf{z}' \approx \epsilon_{zy} + \epsilon_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}$$

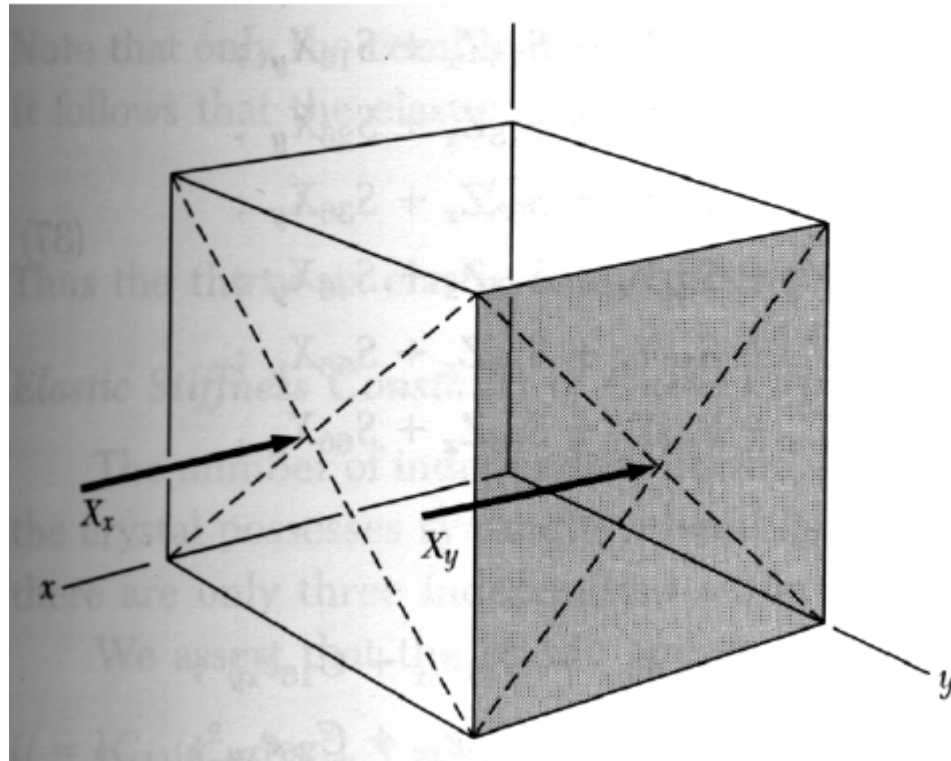
$$e_{zx} = \mathbf{z}' \cdot \mathbf{x}' \approx \epsilon_{zx} + \epsilon_{xz} = \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}$$

- På engelska "strain"-koefficienter, på svenska spänningskoefficienter men hellre **uttöjningskoefficienter**. Kan vara > 0 eller < 0
 - Fler koefficienter behövs inte p.g.a. symmetriskäl
- *Undvik ordet spänning om möjligt: det kan på svenska betyda både engelska stress och strain => begreppsförvirring*



Elasticitetsteori: uttöjningskrafterna

- Analogt kan man definiera motsvarande krafter





Linjära elasticitetsteorins grundekvation

- Nu kan man skriva upp grundekvationen, Hookes lag, för linjär elasticitet för enhetskristaller

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

- Här är C-koefficienterna, som är 21 stycken, materialkonstanterna som fullständigt beskriver ett Bravais-gitters linjära elastiska egenskaper.



Reduktion i antalet koefficienter

- Till all tur behövs inte alla dessa i alla fall ...
 - Tack vara kristallsymmetrier reduceras antalet oberoende konstanter starkt för högsymmetriska system, enligt följande:

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



Elasticitet för kubiska system

- I det viktigaste kubiska systemet reduceras detta till en ganska enkel ekvation:

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

- Här ger C_{11} och C_{12} egenskaperna för normala krafter och C_{44} för skjuvkrafter
- Dessa **mikroskopiska** elastiska konstanter kan mätas från ultraljudshastigheter i enhetskristaller



Bulkmodulen

- Det enklaste måttet för elasticitet är bulkmodulen, som definieras med

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

- Man kan ganska enkelt härleda att för kubiska kristaller är

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



Exempelvärden

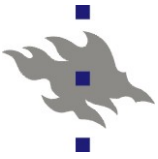
■ Tabell från Kittels bok, för att ge storleksordning:

■ Enheten här

$$10^{11} \text{ N/m}^2 =$$

$$100 \text{ GPa}$$

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	—



Isotropiska material

- Ett ytterligare viktigt begrepp är **isotropiska material**: dessa definieras (för mekaniska egenskaper) som en där de elastiska konstanterna är samma oberoende av i vilken riktning de mäts
 - Enhetskristaller är nästan aldrig isotropiska
 - Polykristallina ämnen där kornstorleken \ll materialets dimension och amorfa ämnen är isotropiska.
- **I isotropiska material är antalet oberoende elastiska konstanter bara 2**
 - Bulkmodulen och Youngs modul (definieras i nästa kapitel)
- **Till slut: i en vätska är antalet oberoende elastiska konstanter 1** – de har ju per definition ingen skjuvmodul
 - Bulkmodulen

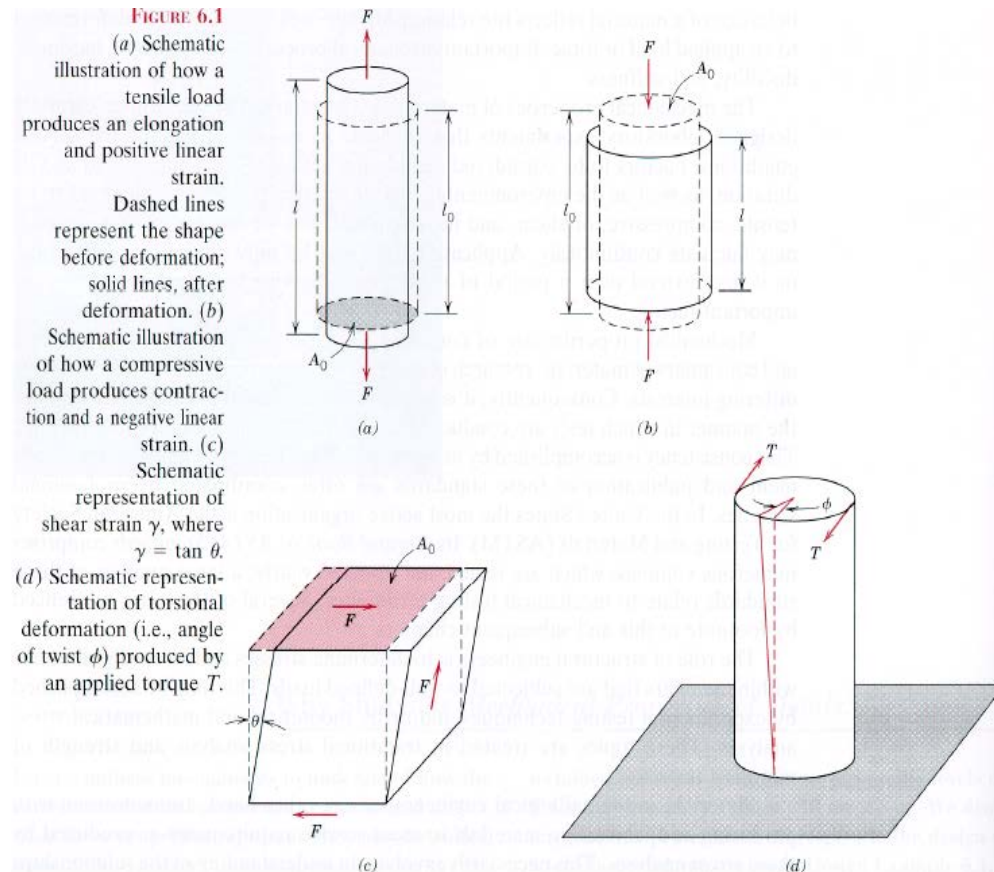


7.2. Mätning av makroskopisk elasticitet

- Nu skall vi se på hur man kan mäta **makroskopisk** elasticitet i praktiken

- Olika sätt att mäta elasticitet illustreras i bilden till höger

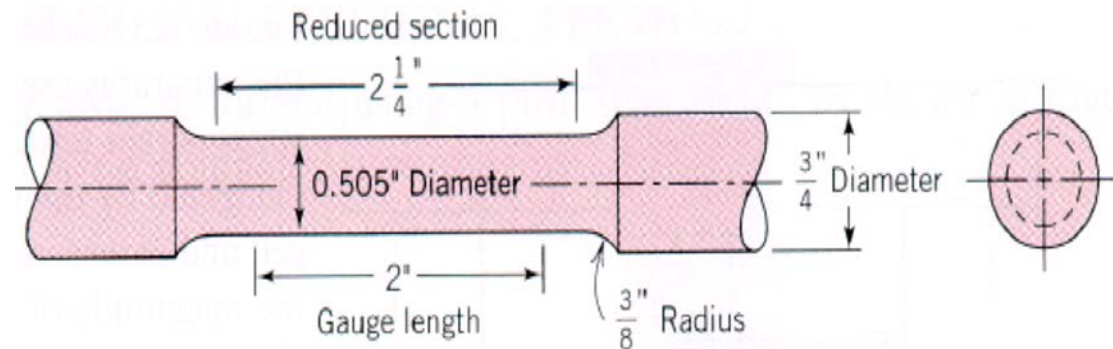
- a) uttjörning
- b) kompression
 - Negativ uttjörning
- c) skjuvning
- d) torsion/vridning





Dragprov

- Ett mycket allmänt använt sätt att mäta elasticitet är med så kallade **dragprov**, även kallat **sträckprov** (eng. "tensile test")
- Provena ser ut på följande sätt:



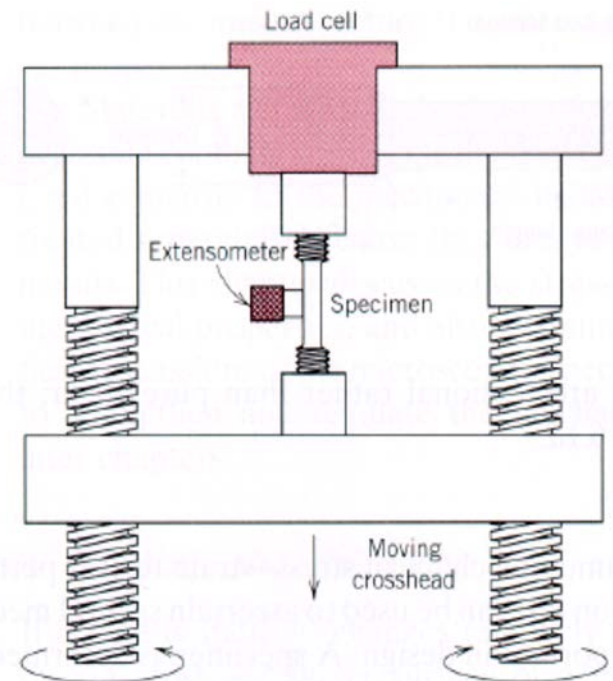
där det är viktigt att förstå att detta är alltså formen *före* utdragning!

- Dessa har vissa vanliga standardmått: det kanske vanligaste är 2 tum för mätlängden ("gauge length") och diametern ungefär 0.5 tum



Dragprov

- Att dra ut ett dylikt prov görs med maskiner som till sin grundprincip är mycket enkla
- Uttöjning koncentreras till mittdelen av provet
- Provet dras ut med en konstant takt
- Samtidigt mäts:
 - Kraften som används
 - Den resulterande uttöjningen med en ***extensometer***





Dragprov

- Ur mätningen kan man bestämma två storheter direkt: **ingenjörstryck** och **ingenjörsutlöjningen** (det senare begreppet även känt som **linjär normaltöjning** på svenska), ”engineering stress and strain”

- Ingenjörstrycket σ fås med

$$\sigma = \frac{F}{A_0}$$

där F är den uppmätta kraften och A_0 den *ursprungliga* arean

- Ingenjörsutlöjningen ϵ fås med

$$\epsilon = \frac{l_i - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0}$$

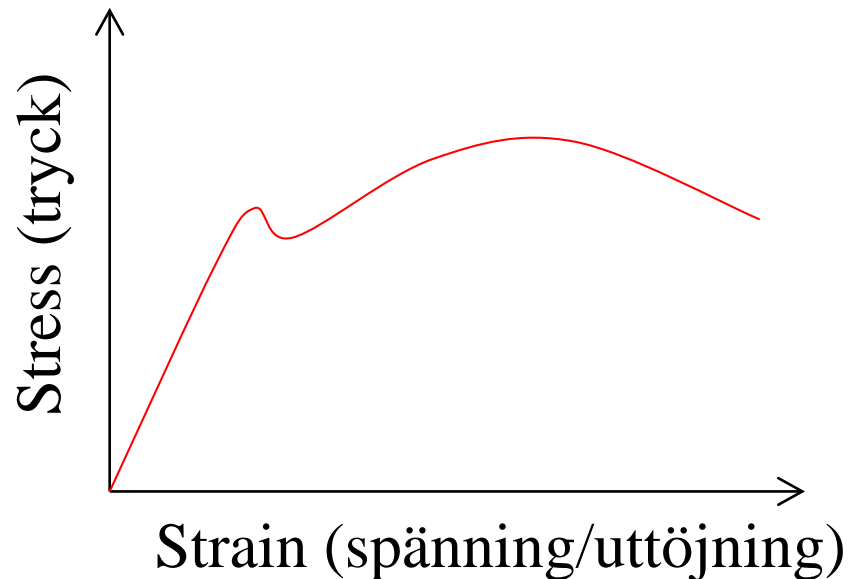
där extensometern används till att mäta töjningen

- Givetvis kan man även göra motsvarande kompressionsprov



Tryck-uttöjnings-kurvor

- Resultaten av en uttöjningsmätning presenteras s.g.s. alltid i ett så kallad tryck-uttöjnings-diagram som visar trycket som funktion av uttöjningen
 - Engelska: "stress-strain plot", "stress-strain curves"
- Schematiskt ser dessa alltså ut på följande sätt





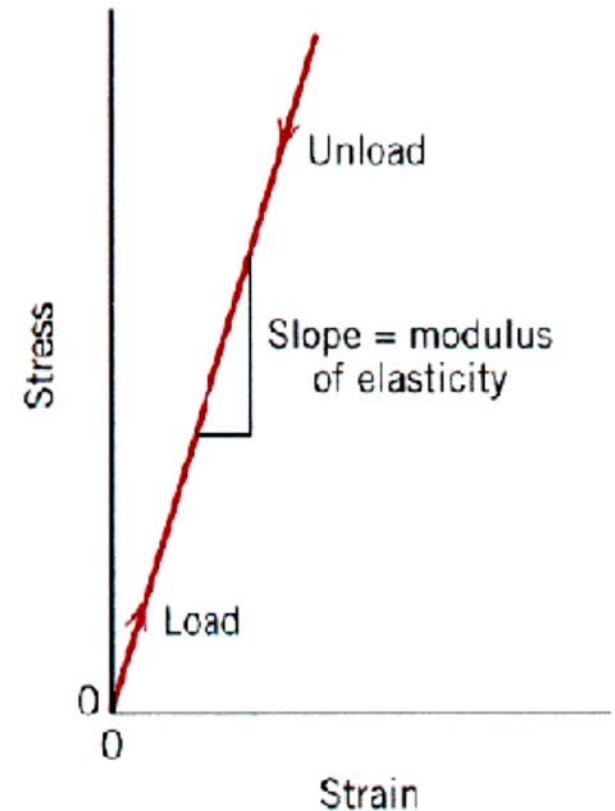
Elasticitet i kurvorna

- Den första delen av tryck-uttöjningskurvor är ofta linjär
- Då kan sambandet mellan tryck och uttöjning uttryckas i formen

$$\sigma = Y \varepsilon$$

där Y är en konstant i det linjära området. Konstanten kallas **Youngs modul** och själva lagen är en version av **Hookes lag!**

- I makroskopisk elasticitet kallas Y ofta också helt enkelt den **elastiska modulen**





Skjuvmodulen

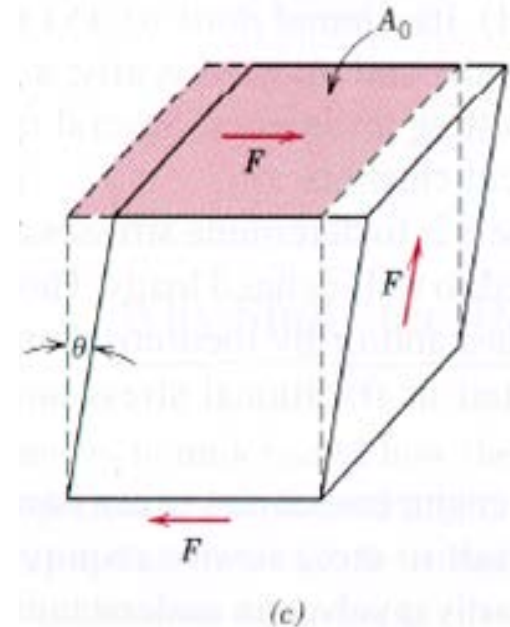
- Skjuvtrycket definieras makroskopiskt som

$$\tau = \frac{F}{A_0}$$

i en mätning som illustreras i bilden till höger.

- Skjuvuttöjningen γ definieras som $\tan \theta$, där θ är vinkeln i bilden
- Skjuvmodulen G definieras av

$$\tau = G\gamma$$





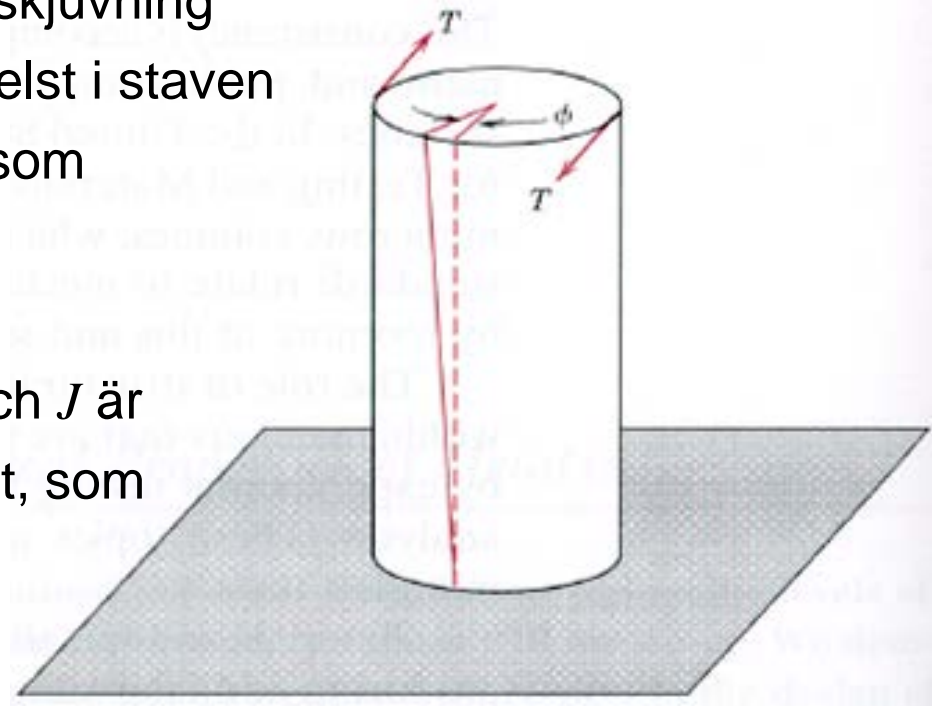
Torsion

- Torsion är en variant av skjuvning
- Skjuvtrycket τ var som helst i staven vid radien r kan skrivas som

$$\tau_\phi = \frac{Tr}{J}$$

där T är vridmomentet och J är polära tröghetsmomentet, som för cylindrar är

$$J = \frac{\pi}{2}r^4$$



- Torsionskoefficienten K definieras som vridmomentet som krävs för att vrida materialet med vridvinkeln ("twist") ϕ . Dvs.

$$K = \frac{T}{\phi}$$



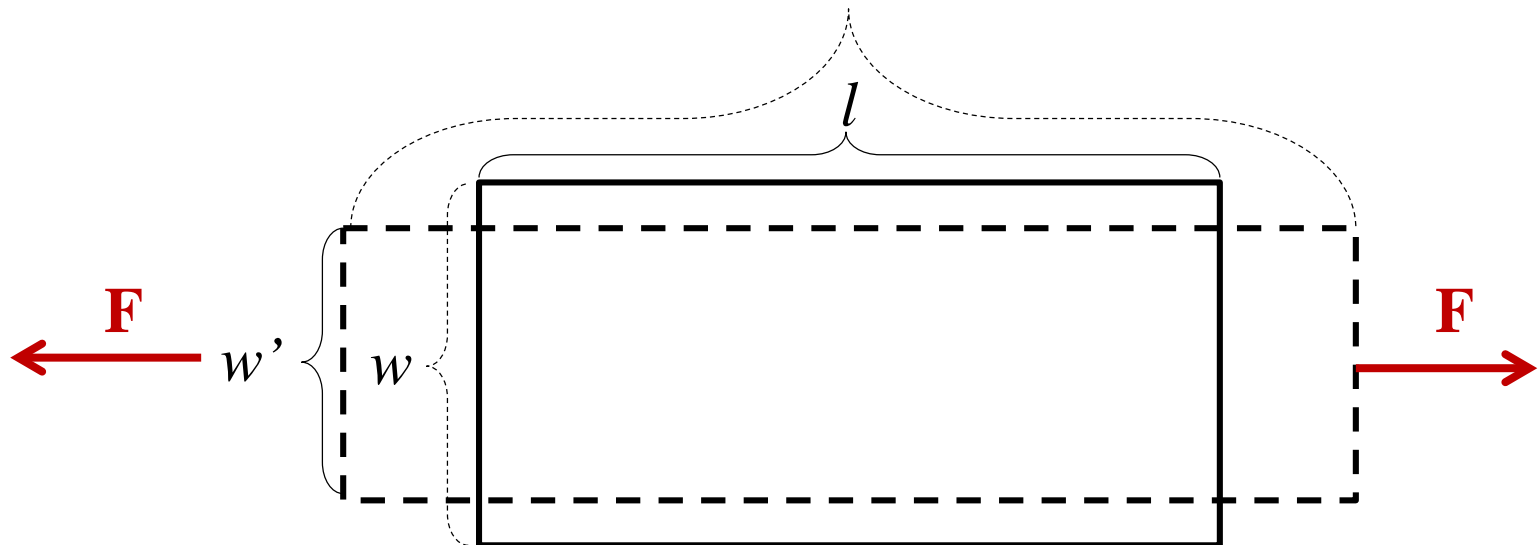
Samband mellan modulerna

- För isotropiska material är skjuv- och elastiska modulen inte oberoende (kom ihåg att dessa har enbart 2 oberoende elastiska konstanter).
 - För dem gäller sambandet

$$Y = 2G(1 + \mu)$$

där μ är Poissons kvot

- Poissons kvot definieras som $Y = \frac{\frac{w-w'}{w}}{\frac{l'-l}{l}} = \frac{\Delta w/w}{\Delta l/l}$





Skjuvmodulen för kubiska enhetskristaller

- För kubiska enhetskristaller kan alla elastiska konstanter ges som funktion av C_{11} , C_{12} och C_{44} (jfr. kapitel 7.1).
- Y och μ är för dragning i en (100)-riktning:

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

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

- För skjuvmodulen är läget lite komplicerat, för den makroskopiska definitionen kan ge olika samband beroende på kristallriktning. Men för isotropiska kubiska enhetskristaller gäller

$$G = C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$$



Exempelvärden

- Nedan är värden på Y , μ och G för vanliga metaller

Table 6.1 Room-Temperature Elastic and Shear Moduli, and Poisson's Ratio for Various Metal Alloys

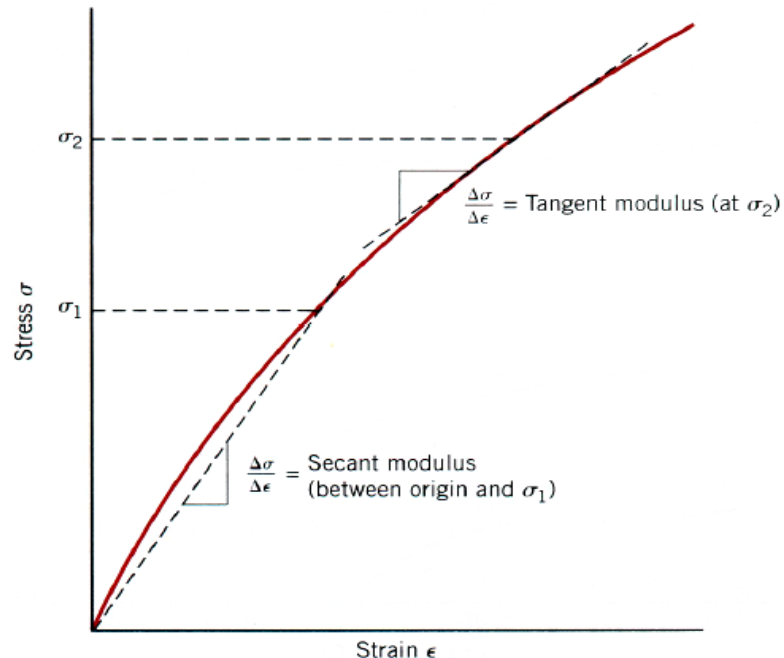
<i>Metal Alloy</i>	<i>Modulus of Elasticity</i>		<i>leikkauskerroin</i> <i>Shear Modulus</i>		<i>Poisson's Ratio</i>
	<i>GPa</i>	<i>10⁶ psi</i>	<i>GPa</i>	<i>10⁶ psi</i>	
Aluminum	69	10	25	3.6	0.33
Brass	97	14	37	5.4	0.34
Copper	110	16	46	6.7	0.34
Magnesium	45	6.5	17	2.5	0.29
Nickel	207	30	76	11.0	0.31
Steel	207	30	83	12.0	0.30
Titanium	107	15.5	45	6.5	0.34
Tungsten	407	59	160	23.2	0.28

- Notera att Poissons kvot är ganska exakt 0.3 för alla metaller
- För den isotropa metallen W var jämförelsevis $C_{44} = 160.7$ GPa som stämmer bra med värdet ovan!



Icke-linjära elastiska material

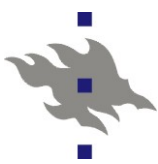
- Det finns många ämnen som inte följer linjär elasticitet i något område, t.ex. betong, vissa gjutjärn och polymerer
- För dessa kan man istället definiera tangent- eller sekantmoduler för någon bestämd punkt på tryck-uttöjningskurvan





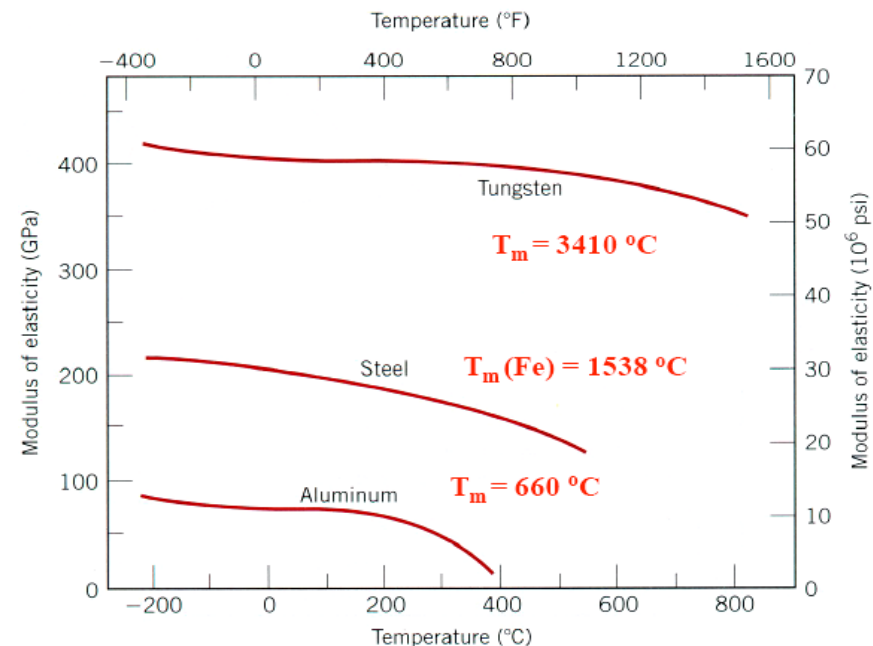
Anelasticitet

- Hittills har vi antagit att de elastiska modulerna är tidsberoende, dvs. värdet beror inte på takten med vilken experimentet görs
- I verkligheten är så inte exakt fallet, utan elasticiteten kan ha ett tidsberoende: om man drar ut materialet, fortsätter det att utvidgas en stund, och när man lättar på trycket tar det en ändlig tid för materialet att återvända till ursprungsläget
- Tidsberoendet kallas ***anelasticitet***, och material där effekten är märkbar, ***viskoelastiska***
- T.ex. i vanliga metaller existerar nog effekten, men är i de flesta sammanhang negligerbar, medan den i vissa polymerer kan vara mycket betydande.



Temperaturberoendet av de elastiska konstanterna

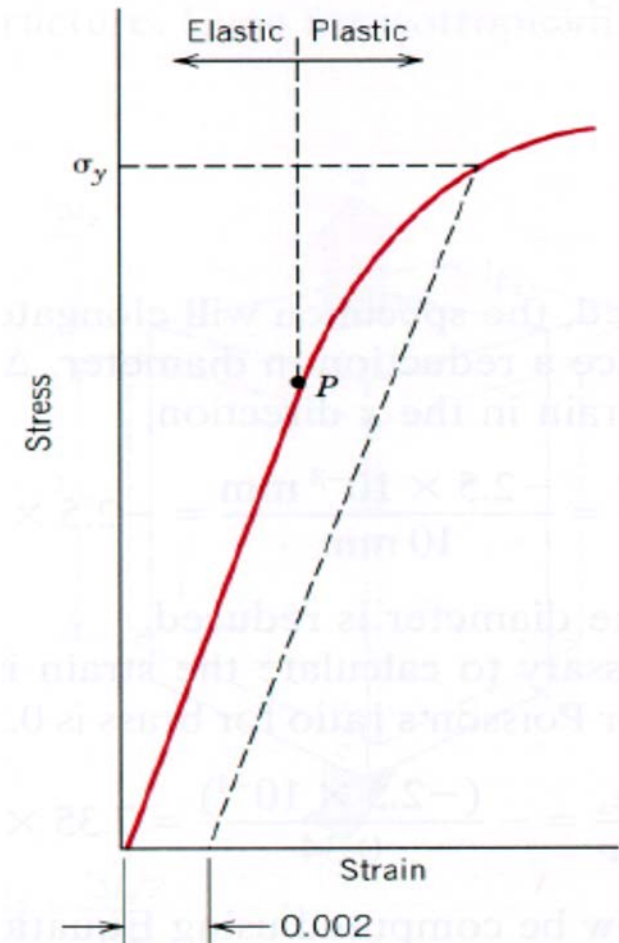
- Temperaturberoendet av de elastiska konstanterna är i allmänhet svagt förutom nära smältpunkten
 - Orsaken är det att konstanterna beror på potentialgropens form, som ju inte ändrar i sig med T . Vid höga temperaturer blir dock anharmoniska (icke-paraboliska) termer i gropen betydelsefulla och sänker något på de elastiska modulerna





7.3. Plasticitet

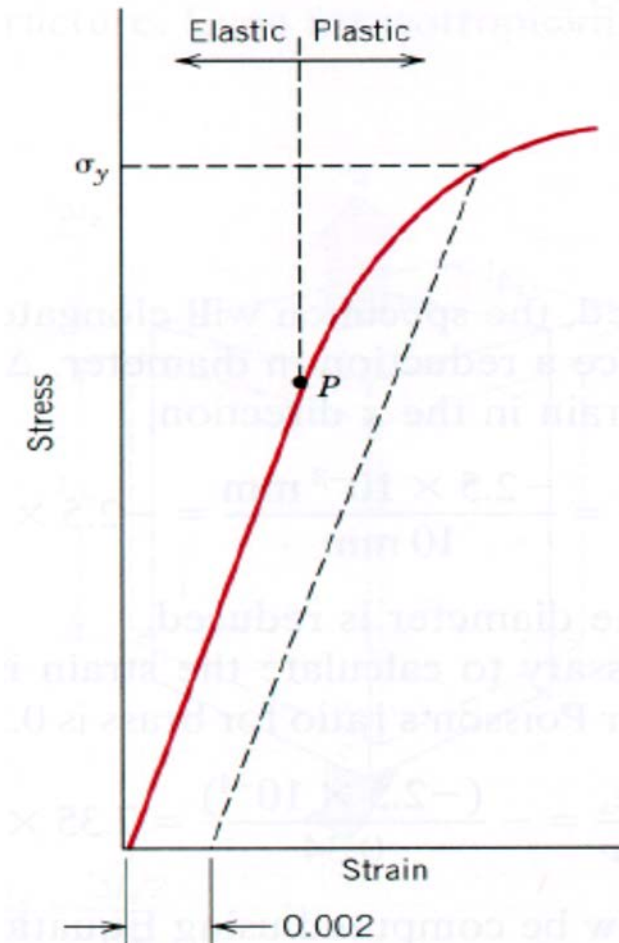
- Ovanom det linjära området i uttöjnings-tryck-diagram gäller Hookes lag inte mera och materialet anses modifieras plastiskt
- Notera att denna definition inte är helt definitiv, för den kan uppenbart inte gälla för icke-linjära elastiska material eller material med en betydande område av andra ordningens elasticitet
 - För dessa måste man definiera någon godtycklig övergångsuttöjning, t.ex. $\varepsilon = 0.005$





Plasticitetsdefinitioner: flytgräns

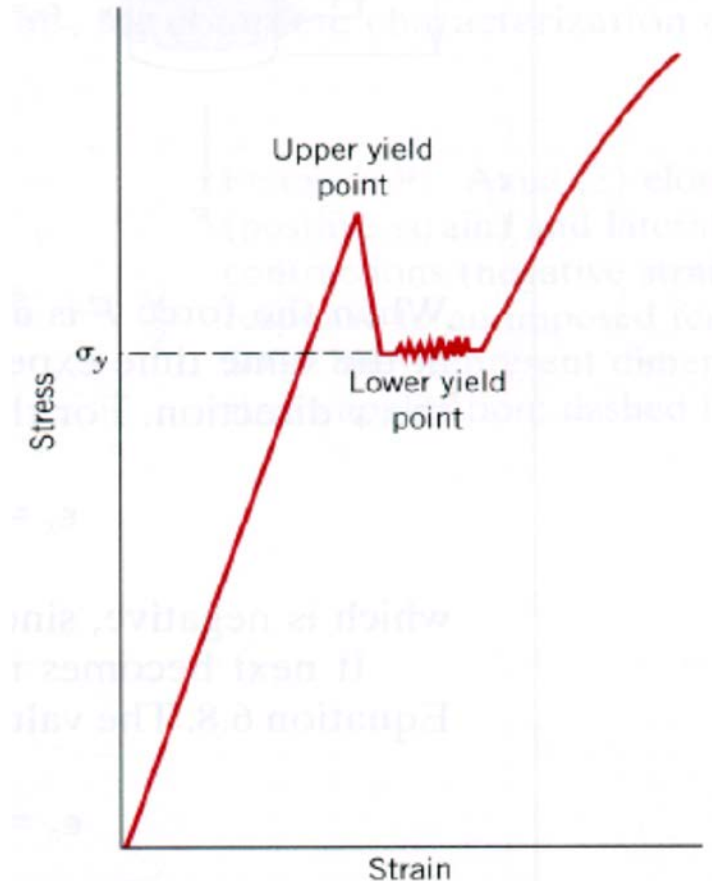
- Punkten P i diagrammet kallas **proportionalitetsgränsen**
- Men ofta är det svårt att bestämma denna punkt noggrannt
- Därmed har man definierat ett annat mått på bredden av det elastiska området: materialets **flytgräns/uttöjning**, även känd som **sträckgräns/uttöjning** σ_y ("yield strength/stress")
- Den kan definieras på många olika sätt, men det vanligaste är den som illustreras i bilden: uttöjningen vid vilken en permanent deformation på 0.2 % har åstadkommits om man ritat en linje neråt med det linjära områdets vinkelkoefficient





Flytgräns

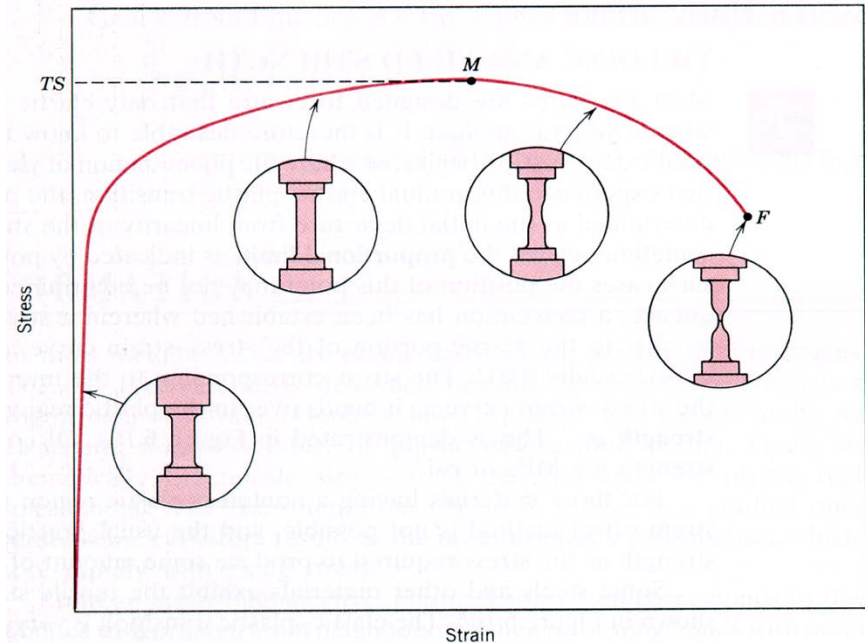
- En del material har ett mycket klart definierat slut på det linjära området, som illustreras i bilden till höger
- För material med detta beteende kan man mycket entydigt definiera flytgränsen σ_y som nivån för den ungefär konstanta platån i bilden
 - ("yield point" = **flytgräns** el. **sträckgräns**)





Draghållfasthet

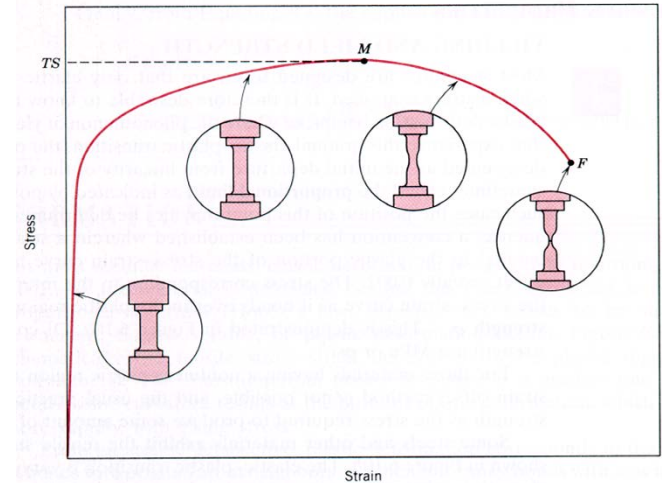
- Om man ser på ett helt tryck-uttöjningsdiagram ser de oftast ut på följande sätt
- Trycket TS vid maximet i kurvan M kallas **draghållfasthet** (eng. tensile strength)
- Vid punkten M börjar provet smalna, vilket kallas **midjebildning** (eng. "necking")
 - Därför krävs mindre kraft för att åstadkomma ytterligare uttöjning, så kurvan börjar sjunka
- Vid punkten F bryts provet slutgiltigt, vilket kallas **bristning** eller **fraktur** ("fracture"). Trycket vid vilka detta sker kan kallas **frakturhållfasthet** och motsvarande uttöjning **frakturuttöjning** ϵ_f





Sanntryck, sanntöjning och sannuttöjning

- Den uppmärksamma läsaren märker senast i detta skede att tryck-uttöjningskurvan ovan inte egentligen motsvarar materialegenskaper ovanom punkten M för att *den effektiva arean A ju minskar vid töjning*



- Genom att mäta den verkliga tvärsnittsarean under deformationen A_i och provets längd l_i kan man korrigera för detta och kan de uttrycka istället **sanntryck** σ_T ("true stress") resp. **sannuttöjning** ε_T ("true strain"):

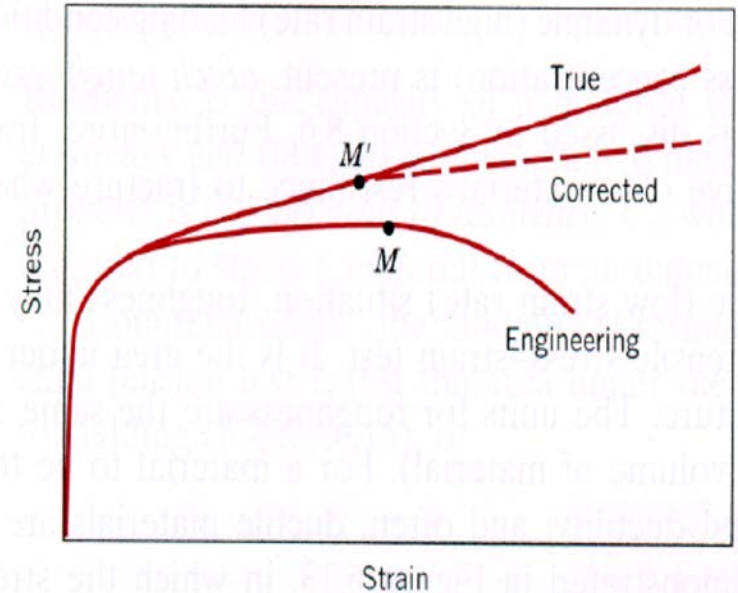
$$\sigma_T = \frac{F}{A_i} \qquad \varepsilon_T = \ln \frac{l_i}{l_0}$$

- Orsaken till logaritmen: ingenjörsuttöjning innehåller antagandet om små förändringar (jfr. 7.A); sannuttöjningen korrigerar för detta



Sanntryck, sanntöjning och sannuttöjning

- Om man använder sanntryck och sannuttöjning, ändrar tryck-uttöjningskurvan form på följande sätt
- Nu ökar sanntrycket alltså hela tiden, vilket beror på att material i allmänhet blir hårdare vid uttöjning (**deformationshårdnande**, "strain hardening")
- Kurvan "corrected" tar ytterligare i beaktande det att efter att en midja formats, är uttöjningen i midjeområdet inte mera rent axiellt utan mer komplicerat.





Deformationshårdnande

- Deformationshårdnande kan ofta beskrivas mellan flytgränsen och midjebildningspunkten med en funktion av formen

$$\sigma_T = K \epsilon_T^n$$

där K och n är konstanter

- n kallas deformationshårdningsexponenten som har värden mindre än 1. I tabellen intill finns exempelvärden på den

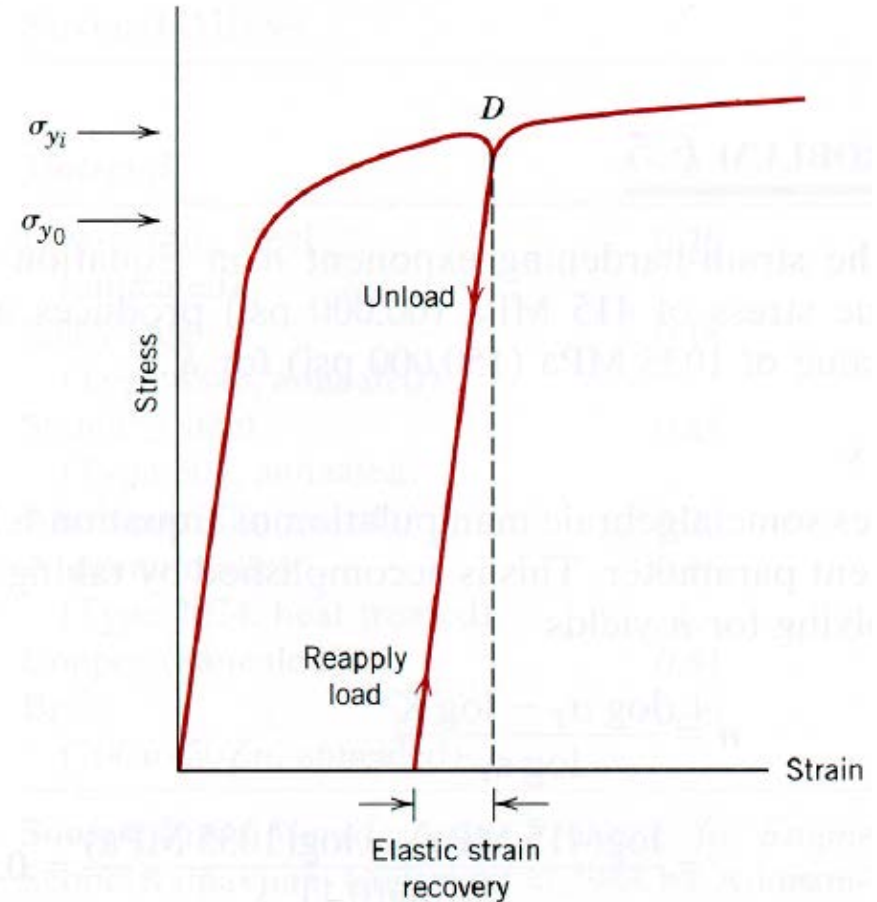
Table 6.3 Tabulation of n and K Values (Equation 6.19) for Several Alloys

<i>Material</i>	<i>n</i>	<i>K</i>	
		<i>MPa</i>	<i>psi</i>
Low-carbon steel (annealed)	0.26	530	77,000
Alloy steel (Type 4340, annealed)	0.15	640	93,000
Stainless steel (Type 304, annealed)	0.45	1275	185,000
Aluminum (annealed)	0.20	180	26,000
Aluminum alloy (Type 2024, heat treated)	0.16	690	100,000
Copper (annealed)	0.54	315	46,000
Brass (70Cu–30Zn, annealed)	0.49	895	130,000



Elastisk återhämtning

- Ifall man i det plastiska området avbryter påfrestning, återvänder materialet i allmänhet till en permanent deformation med en vinkelkoefficient som är ungefär den ursprungliga Youngs modulen.
- Om tryck sätts på igen, återvänder man till den plastiska kurvan med en högre flytgräns $\sigma_{y,i}$ än den ursprungliga!
 - Detta hänger ihop med deformationshårdningen





Smidighet/duktilitet

- Ett ytterligare viktigt begrepp är materialets **smidighet**, även känd som **duktilitet** ("ductility"). Det avser hur mycket materialet kan töjas ut före det brister
- Smidighet kan ges ett värde som töjningsprocent ("percent elongation") som

$$\%EL = \left(\frac{l_f - l_0}{l_0} \right) \times 100$$

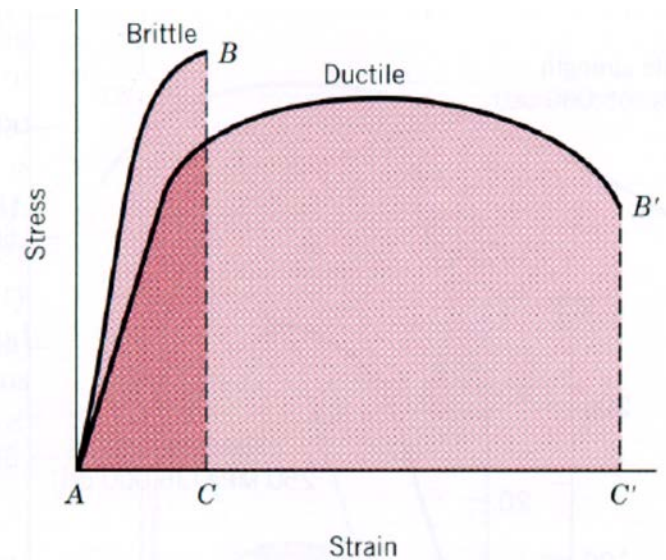
där l_f är frakturlängden och l_0 den ursprungliga längden

- Denna storhet kan bero på längden av provet, för att desto mindre prov, desto större andel kommer från midjeområdet som ju kan antas vara av samma längd vid fraktur, oberoende av l_0 . Därmed borde man alltid då man ger en töjningsprocent också ange provets längd!



Smidighet och skörhet

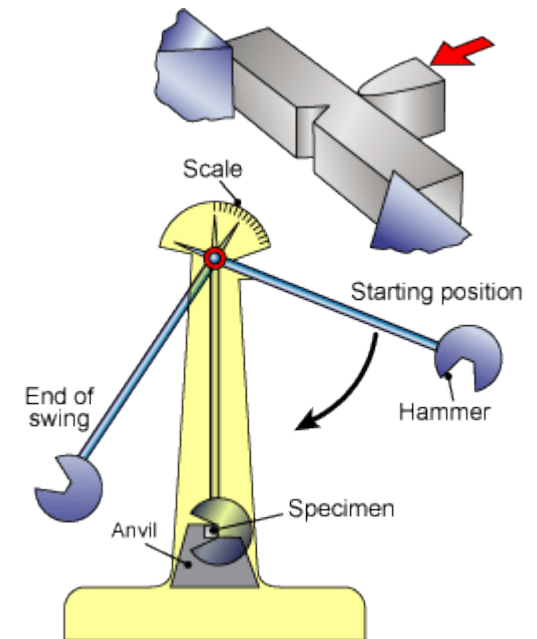
- Begreppet smidighet är också mycket viktigt därför att det används för att definiera sköra material!
- Sköra material ("brittle") är sådana som går sönder vid *mycket liten eller ingen* plastisk deformation
- Motsatsen kallas **formbara** el. **plastiska** el. **smidiga** material
- Gränsen för vad som är ett skört material är inte helt väldefinierat, men kan ges t.ex. som att *material med en frakturuttöjning < 5% är sköra*





Charpy-impakt-test

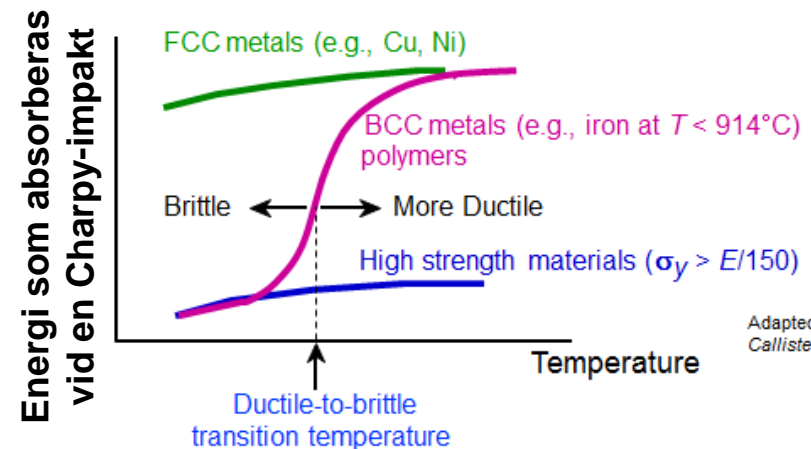
- Graden av skörhet i ett material kan mätas med s.k. Charpy-test
- Iden är att avsiktligt söndra provet, men sedan mäta hur mycket energi det har absorberat då det går sönder
 - Skört material: absorberar bara lite
 - Smidigt material: kan absorbera mycket
- Man har en speciell pendel och mäter helt enkelt hur högt den stiger efter impakten
 - Standard-storlek, geometri och form har definierats för att göra olika provs resultat jämförbara
 - Testet upprepas 3 gånger för varje material





Smidig-till-skör-transitionen

- De flesta metallerna är åtminstone någorlunda smidiga vid rumstemperatur, men en del blir sköra då temperaturen sänks!
 - Temperaturen där detta sker kallas smidig-till-skör-transitionstemperaturen, förkortning **DBTT** från engelska
 - Detta är viktigt att beakta för de flesta metaltillämpningar baserar sig på antagandet att metallen inte är skör!
- Många FCC-metaller (t.ex. koppar- och aluminium-baserade) har ingen DBTT utan är smidiga ner till mycket låga temperaturer, medan BCC och HCP-metaller i allmänhet har en

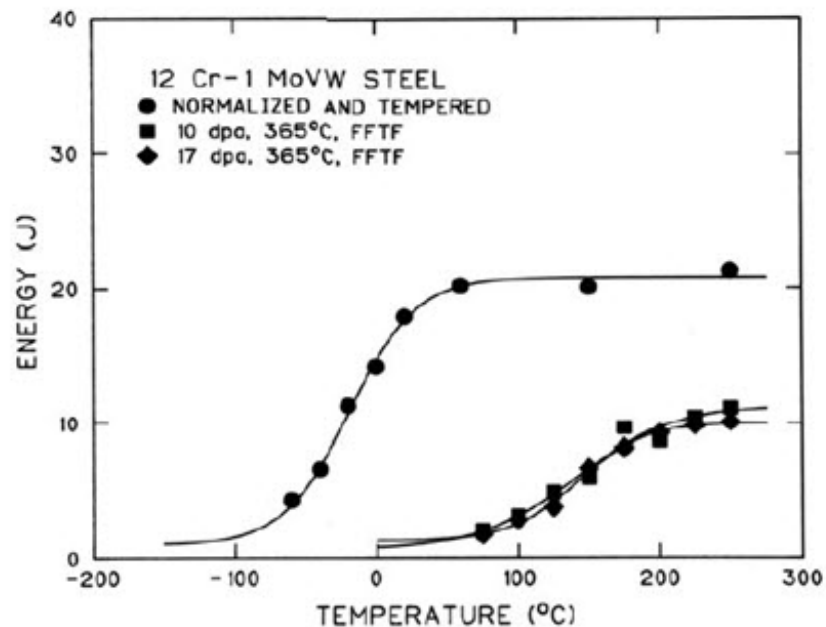


Adapted from Fig. 8.15, Callister7e.



Effekt av strålning

- Strålning höjer ofta på DBTT, vilket är illa om temperaturen höjs ovanför operationstemperaturen.
- Exempeldata för ett stål:



<http://www.totalmateria.com/page.aspx?ID=CheckArticle&site=kts&NM=249>



Exempelvärden

- Här är några exempelvärden på storheterna som behandlats hittills

Table 6.2 Typical Mechanical Properties of Several Metals and Alloys in an Annealed State

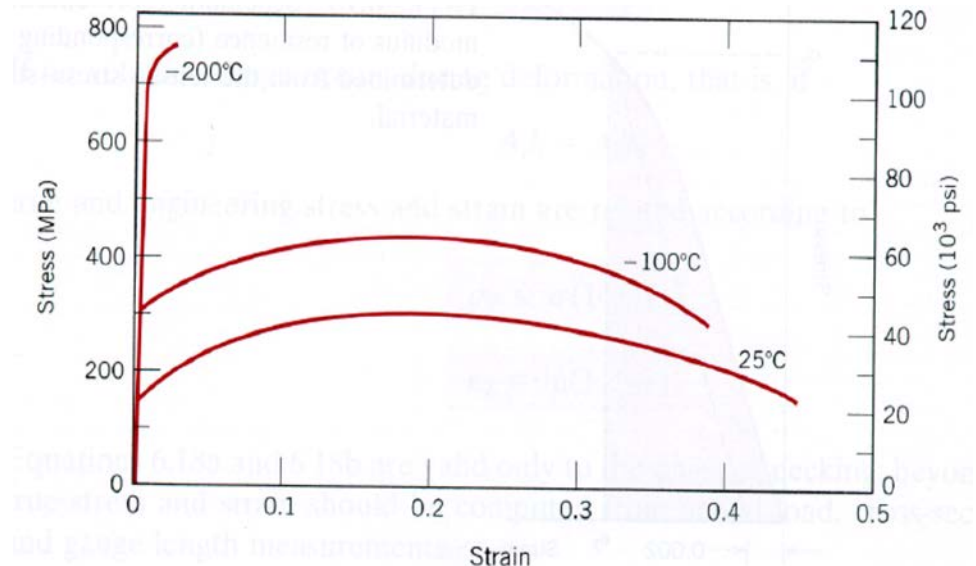
<i>Metal Alloy</i>	<i>Yield Strength MPa (ksi)</i>	<i>Tensile Strength MPa (ksi)</i>	<i>Ductility, %EL [in 50 mm (2 in.)]</i>
Aluminum	35 (5)	90 (13)	40
Copper	69 (10)	200 (29)	45
Brass (70Cu–30Zn)	75 (11)	300 (44)	68
Iron	130 (19)	262 (38)	45
Nickel	138 (20)	480 (70)	40
Steel (1020)	180 (26)	380 (55)	25
Titanium	450 (65)	520 (75)	25
Molybdenum	565 (82)	655 (95)	35



Temperaturberoende

- Det som är viktigt att inse är att det plastiska området är inte en allmän materialkonstant, utan kan bero starkt på hur materialet tillverkats (som påverkar kornstorlek, dislokationstäthet mm.) samt temperaturen
- Här är exempel på tryck-uttöjningskurvor för järn vid tre olika temperaturer:

- Notera hur materialet är de facto skört vid -200 C, och blir sedan smidigt vid rumstemperatur
- Jfr. DBTT ovan



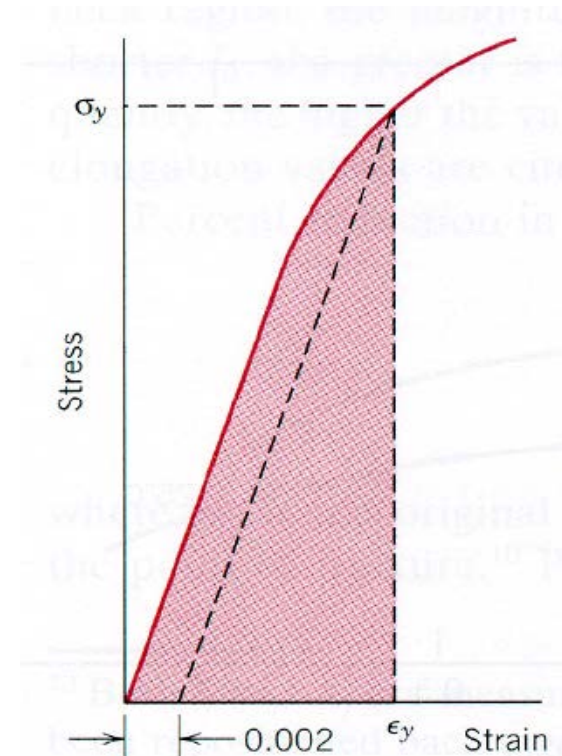


Elastiskt deformationsarbete

- Tills vidare har alla storheter som beskrivits varit mått på uttöjning eller tryck/kraft
- Det finns också mått på hur mycket energi ett material kan absorbera
- Ett sådant är det elastiska deformationsarbetet U_r ("modulus of resilience"), som definieras som integralen under tryck-uttöjningskurvan upp till flytgränsen

$$U_r = \int_0^{\epsilon_y} \sigma d\epsilon$$

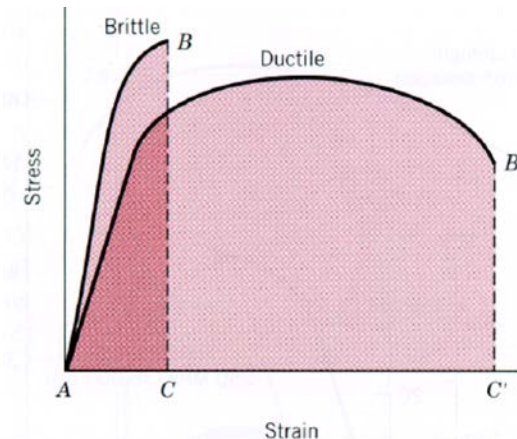
- Hög flytgräns och/eller låg elasticitetsmodul leder till hög U_r . Sådana material är lämpliga som fjädrar: hög reversibel töjning med mycket sparad energi möjlig





Seghet

- Seghet ("toughness") är inte ett exakt definierat begrepp
- Med det avses i allmänhet ett materials förmåga att absorbera energi före bristning
- Värdet för seghet beror dock starkt på hur ett material utsetts för påfrestning: takt, geometri, mm.
- Med **hackseghet** avses ett materials förmåga att motstå hackformation vid en snabb stöt
- Med **bristningsseghet** ("fracture toughness") avses förmåga att motstå bristning då det finns en spricka i det
- För låg påfrestningstakt kan segheten ges som integralen över hela tryck-uttöjnings-kurvan
 - Hög seghet kräver både hög hållfasthet och hög frakturuttöjning
 - Sköra material har ofta högre flytgräns, men mycket lägre seghet än smidiga

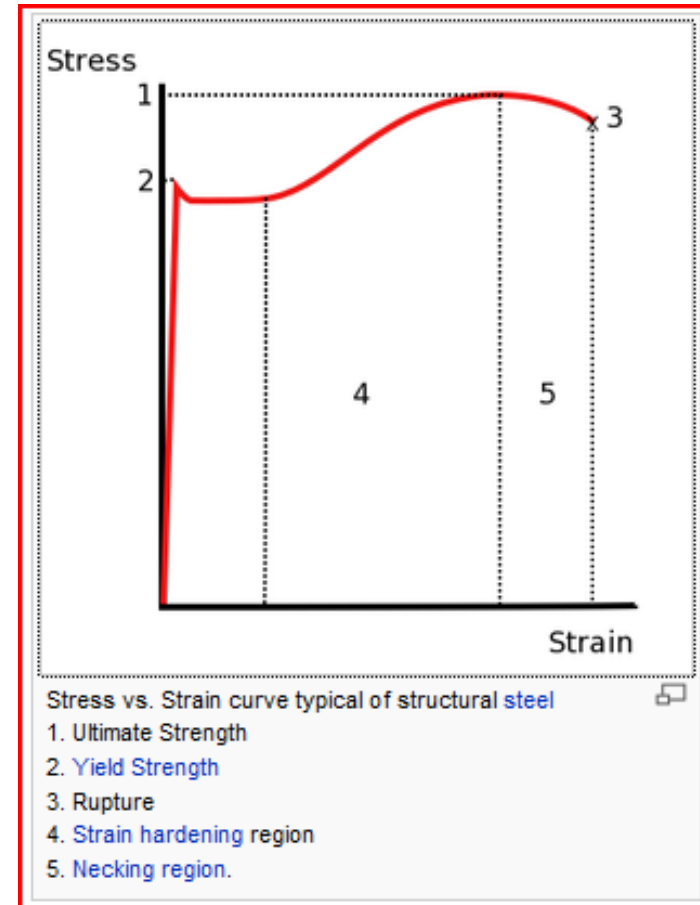




Exempel: stål

- Stål uppvisar ofta ett tryck-
uttöjningsförhållande av den typen
som illustreras intill
- Karakteristiskt är att trycket
sjunker något för att sedan börja
igen öka
- De kvantitativa värdena mellan
olika stål kan variera mycket:

Material	Yield strength (MPa)	Ultimate strength (MPa)
Structural steel ASTM A36 steel	250	400
Steel, API 5L X65 (Fikret Mert Veral)	448	531
Steel, high strength alloy ASTM A514	690	760
Steel, prestressing strands	1650	1860
Steel Wire		
Steel, Piano wire	c. 2000	



[Wikipedia]



Hårdhet

- Hårdhet har många definitioner
- De elastiska konstanterna (t.ex. bulkmodulen, elastiska modulen) kan kallas ***elastisk hårdhet***
- En närmast historiskt betydelsefull definition är den så kallade ***Moh-skalan***, som uppbyggdes med att definiera vilket material kan skrapa ett annat
- Den illustreras intill med både definitionsmineralerna och några andra material däremellan

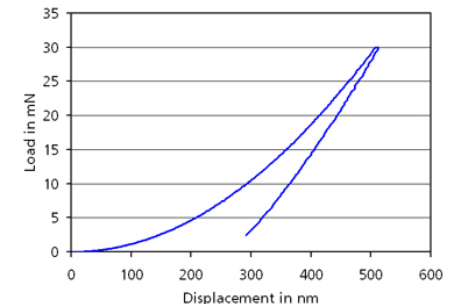
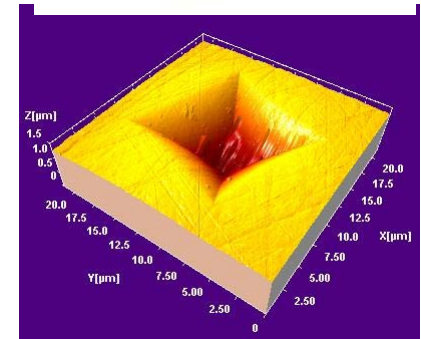
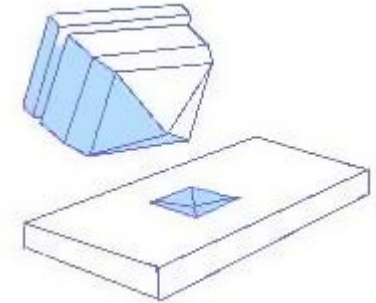
Hardness	Substance or Mineral
1	Talc
2	Gypsum
2.5 to 3	pure Gold, Silver
3	Calcite, Copper penny
4	Fluorite
4 to 4.5	Platinum
4 to 5	Iron
5	Apatite
6	Orthoclase
6.5	Iron pyrite
6 to 7	Glass, Vitreous pure silica
7	Quartz
7 to 7.5	Garnet
7 to 8	Hardened steel
8	Topaz
9	Corundum
10	Diamond
>10	Aggregated diamond nanorods

[Wikipedia]

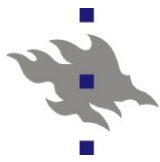


Indenteringstest

- Mohs skala är uppenbart inte speciellt kvantitativ
- De praktiskt mest använda sättet att mäta hårdhet är med **indenteringstest**
 - Kommentar om termen: indentering är inte listat i svenska ordböcker, men förekommer i svenska google, och tekniska ordlistan ger ingen vettig översättning på "indentration test", så jag använder **indentering**
- I dessa tvingas en liten indenter mot ett material med en kontrollerad kraft och takt, och man mäter storleken (djup eller area) på hacket som bildas i materialet
 - Indentern kan vara i makro-, mikro- eller nanoskala
- Mätningen kan kvantifieras som en kraft vs. djupförskjutning-graf



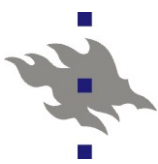
[http://www.fep.fraunhofer.de/enu/bigpic/Ch_elastisch-plastischen.asp]⁵⁰



Varianter av indenteringstest

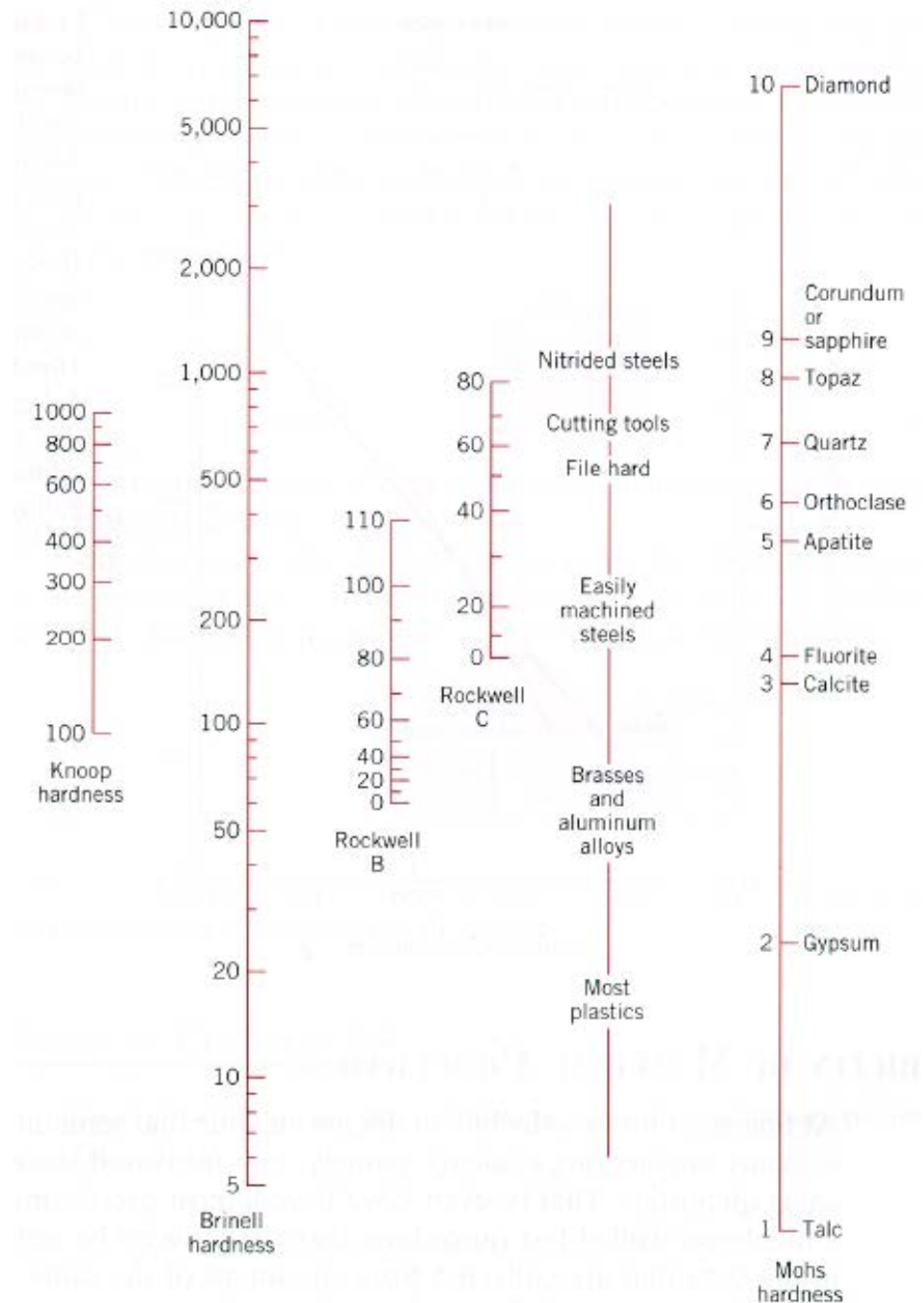
Table 6.4 Hardness Testing Techniques

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 } Rockwell <ul style="list-style-type: none"> 15 kg 30 kg 45 kg } Superficial Rockwell	



Jämförelse av olika hårdhetsskalor

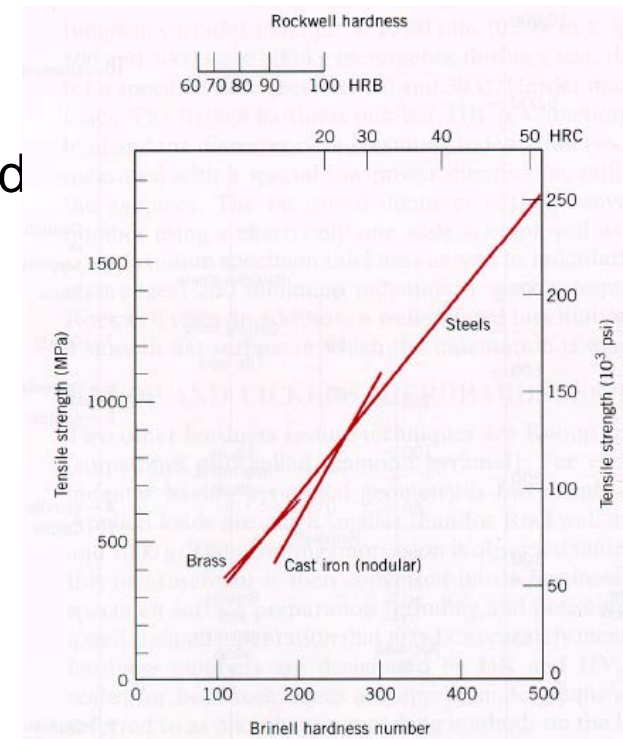
- Värderna som ges av de olika hårdhetsskalorna jämförs approximativt i bilden intill
- Det är viktigt att förstå att ingen av skalorna är absolut så detta är bara riktgivande





Hårdhet vs. elasticitet

- Det är inte möjligt att ge ett entydigt samband mellan indenteringshårdhet och elastiska och plastiska egenskaper!
- I själva verket korrelerar de inte nödvändigtvis alls med varandra: t.ex. diamant är extremt hårt, men mycket skört och har låg seghet
- Men för enskilda material kan man givetvis empiriskt bestämma samband mellan plastisk och indenteringshårdhet.
 - Ett exempel visas intill för några vanliga metaller



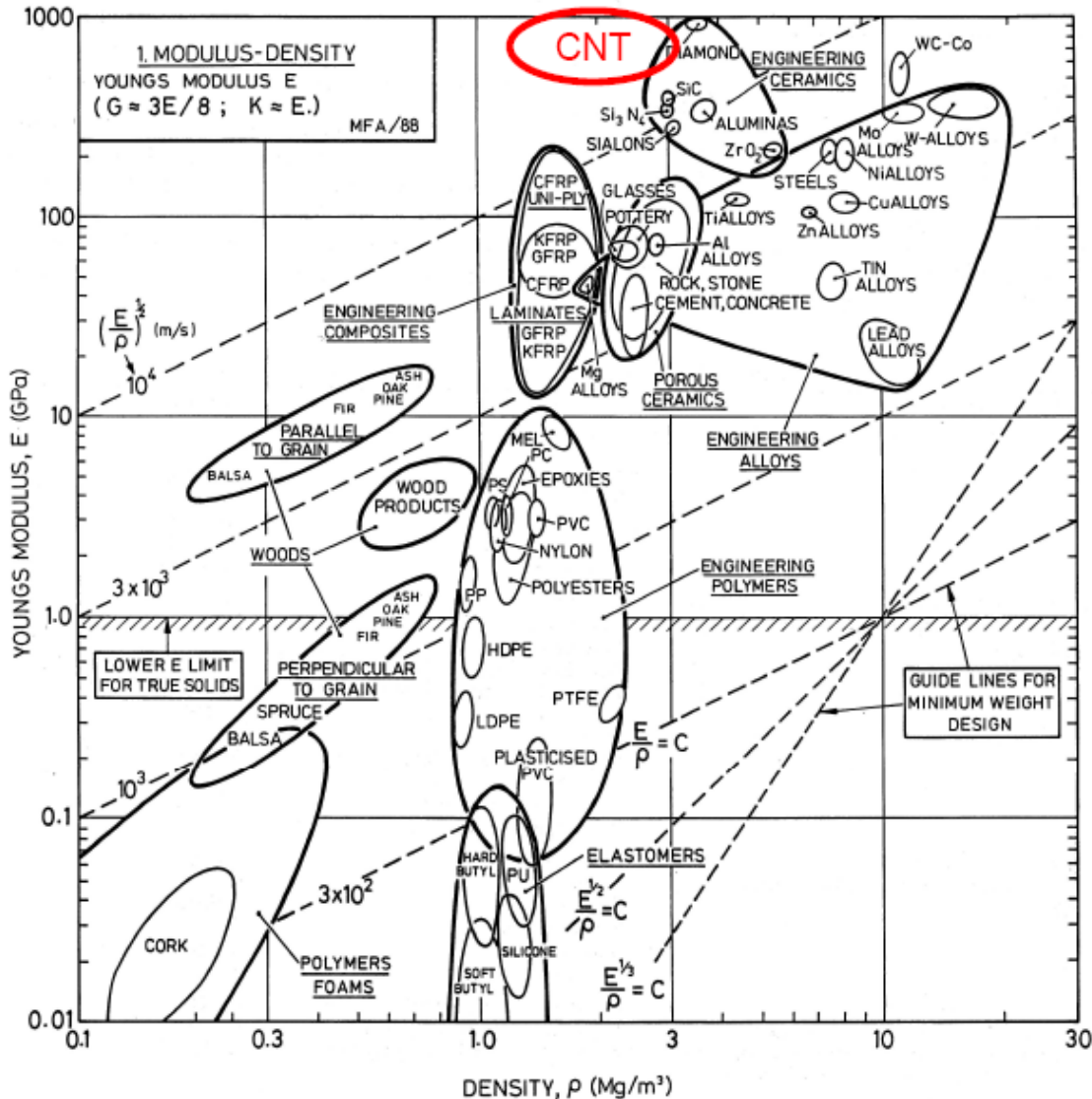


Sammanfattning

- Materials seghet/hårdhet är alltså ett komplicerat kapitel med många olika aspekter att beakta
- Här är en sammanfattning av några av de viktigaste begreppen, ur synvinkeln att starkare är bättre (vilket inte alltid är önskvärt i tillämpningar, tänk bara på gummiband)
- Bulkmodul: Förmåga att motstå volymförändring under tryck
- Youngs modul: Förmåga att motstå uttöjning
- Flytgräns: Gräns till permanent deformation
 - Om man bara talar om materialets styrka ("strength") avses ofta, men inte alltid, detta
- Draghållfasthet: maximal tryck som kan beläggas på materialet
- Hårdhet: förmåga att motstå hack och skrapor
- Smidighet: förmåga att tåla stor utdragning före slutlig sönderfall
- **Begreppen styrka ("strength") och seghet ("toughness") kan betyda flera olika saker beroende på sammanhang!**



Sammanfattningsgraf: Youngs modul vs. densitet

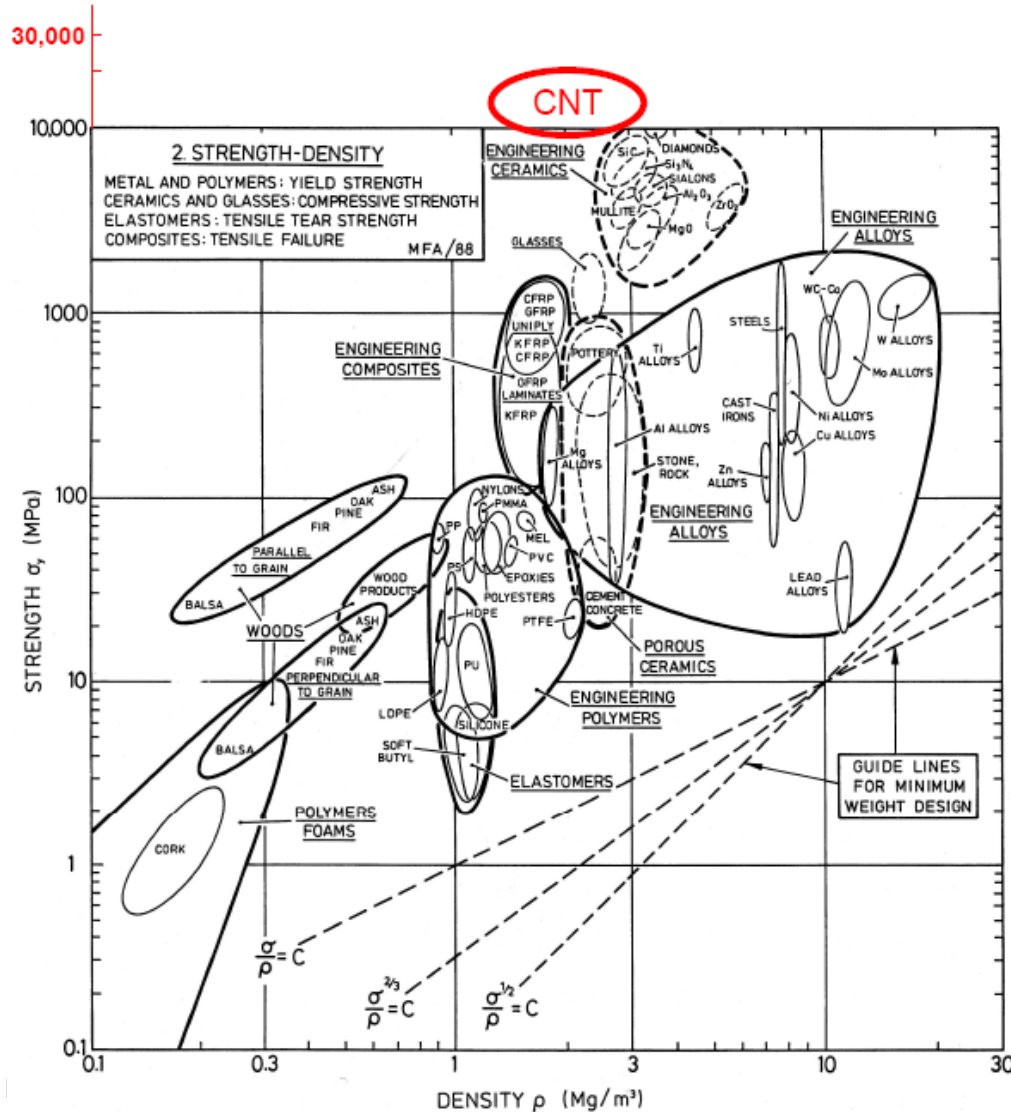


CNT = kolnanorör

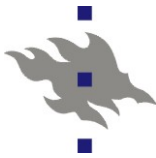
M. F. Ashby, *Acta Metall.*
 37 (1989) 1273.; Chart 1



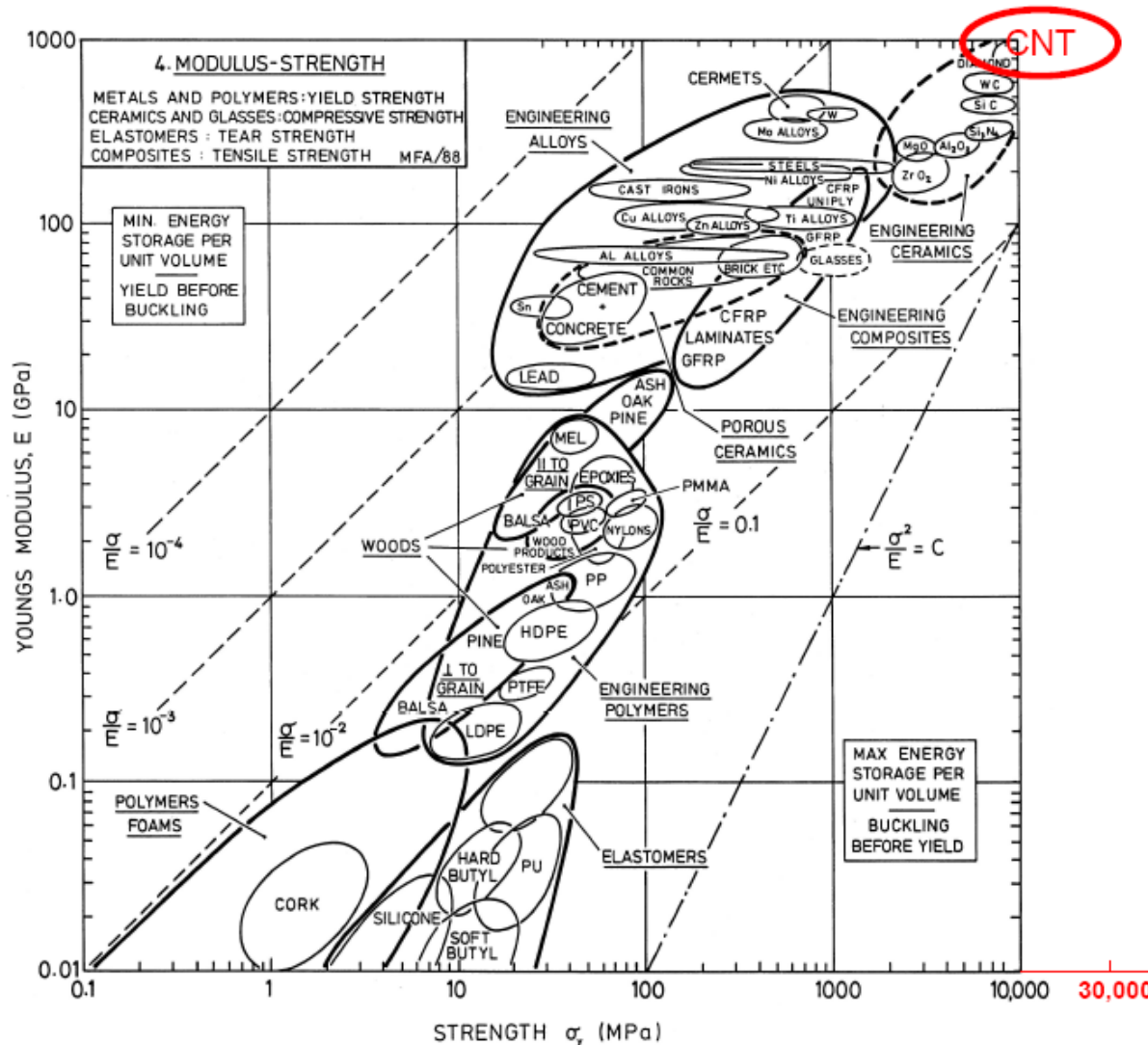
Sammanfattningsgraf: styrka vs. densitet



M. F. Ashby, *Acta Metall.*
 37 (1989) 1273.; Chart 2



Sammanfattningsgraf: Youngs modul vs. styrka



M. F. Ashby, *Acta Metall.*
 37 (1989) 1273.; Chart 4



Appendix: härledning av elasticitetsteorin

- Den linjära elasticitetsteorin kan **härledas** från enkla antaganden om atomära växelverkningar.
- Denna härledning ges nedan på engelska som eventuell referens, men kännedom om detta krävs inte på denna kurs
- Orsak: samma härledning finns på svenska i kursen på Fasta tillståndets fysik

7.A Elasticity

- By elasticity is meant, how a solid responds, when it is pressed. Classical elasticity theory is in fact a continuum theory – but it can be derived from interatomic interaction models
 - This is what we do now for single crystals
- Consider an interatomic potential V . As stated in materials physics I course, the potential has a smooth potential well near the equilibrium interatomic distance R .
- Hence the potential can be expanded with the 3D version of the Taylor expansion

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

- We consider atoms that have moved from \mathbf{R} to \mathbf{r} such that

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

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

- The atoms have moved from point \mathbf{R} to point \mathbf{r} such that

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

where \mathbf{u} is a group of vectors that describe the displacements.

- If we have a potential energy function $V(\mathbf{r})$ and it is written using the Taylor expansion around the equilibrium position \mathbf{R} for an atom that is displaced a little from the equilibrium position \mathbf{r} , we get for the total energy U

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

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

Where the sums are over atoms and their neighbours \mathbf{R} and \mathbf{R}'

7.A Elasticity

Next consider this in detail:

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

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

- The first term in the series $\sum V(\mathbf{R}-\mathbf{R}')$ is the cohesive energy of the crystal. In elasticity theory the zero point does not matter, so for simplicity we set the zero point $U = 0$
- The term $\nabla V(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ obviously must vanish, because it is the force that acts on atoms at the equilibrium distance, and when a crystal is in equilibrium, this force must per definition be $=0$

7.A Elasticity

Now in the expression:

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

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

We see that the second derivative is the first time that is nonzero.

- In the **harmonic approximation** of solids only this term is dealt with. The higher order terms are called **unharmonic** terms. They matter e.g. for thermal expansion.
- In classical first order elasticity theory the harmonic approximation is used. The regime where this approximation is valid is called **linear elasticity**.
 - This is because (as we shall derive) in this regime stress is linearly proportional to strain.

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

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

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

- The harmonic term $[(\mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')) \cdot \nabla]^2 V(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ includes in total 9 terms, which can be written in the form

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

where the indices μ and ν loop over the coordinates x, y, z . The vector notation is here replaced by the (tensor) index notation. D contains now the derivatives in the form:

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

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

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

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

- The harmonic potential energy is now

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



7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

- Let's now assume the lattice is a monatomic Bravais lattices, so all atom positions are equal
- In other lattices (crystals with a basis) there may be more degrees of freedom, so called **internal relaxation**. This means that atoms may under strains relax unsymmetrically with respect to the global relaxation. This kind of lattices have to be treated all separately
- However, any crystal has an underlying Bravais lattice, and the Bravais lattice points will relax as a monatomic lattice, with the equations we now will derive.

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

- Now we can define a function $u(\mathbf{r})$, which is $= u(\mathbf{R})$ in the Bravais lattice points \mathbf{R} , and make again a Taylor series expansion for the points of the other atoms \mathbf{R}' :

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

and insert this in the energy equation

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

which gives

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

Here we changed into the tensor notation for the nabla operator

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

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

- Continuing from this, we can take the nabla- i.e. derivative terms that only depend on the distance \mathbf{R} , and insert the terms \mathbf{R}' into the internal sum . Because the quantity $(\mathbf{R}' - \mathbf{R})$ must also be a vector in the infinite Bravais lattice, we can change the summing index \mathbf{R}' into the index \mathbf{R}'' . We get:

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

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

- The latter term is a fourth rank tensor, known as the **Elasticity tensor**

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

where

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

- Here it is important to understand that the expression is only dependent on the vectors \mathbf{R} , i.e. the perfect positions of the atoms, not the strain field in any particular case. **Thus the elasticity tensor is a materials constant with 81 components for a particular material!**
- When u changes only slowly, the sum can be replaced with an integral and we get

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

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

and Ω is the volume per primitive unit cell in the Bravais lattice, i.e. in a monatomic Bravais crystal simply the volume per atom

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

- The equation

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

is the starting point of classical Elasticity theory. It gives the energy of a given strain field u energian, if the elasticity tensor E is known

- *Even though we started from atoms, this equation is a pure continuum equation!*
- The quantity E has 81 components, so dealing with it is not easy. But by considering the symmetries, one can reduce the number of terms drastically.



7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor: symmetry considerations

- The first symmetry is simple.
- It is clear that E is symmetric with respect to exchange of the indices σ and τ . Likewise, D is symmetric with respect to exchange of the indices μ and ν
- This it is enough that E is defined for the index combinations xx, yy, zz, yz, zx, xy for each of the pairs $\sigma\tau$ and $\mu\nu$.
- This reduced the number of elements to be considered to $6 \times 6 = 36$.
- Next we consider rotation of a crystal. It is obvious, that rotation of a crystal should not change the energy of a crystal

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

- If one makes the rotation $\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \partial\omega \times \mathbf{R}$,

set in the modification to equation (4) and demand that change in $U = 0$, one can easily show that U only depends on the symmetric combination of the u derivatives

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

- Now equation (4) can be written as

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

7.A Elasticity

7.A.2 Elasticity tensor

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

where

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

- Considering these equations shows that they have a symmetry in the exchange $\sigma\mu \leftrightarrow \nu\tau$. From the latter one can see that c is invariant in the exchanges $\sigma \leftrightarrow \mu$ ja $\nu \leftrightarrow \tau$. This reduces the number of independent indices to 21.
- Now it starts to seem like a waste to use 4 indices, originally meant to describe 81 quantities, when we only need at most 21!

7.A Elasticity

7.A.3 Engineering notation for elasticity

- Hence a simplified notation has been introduced for elasticity theory, known as "engineering notation". It starts from that, even in the worst case you do not need more than 36 elements for elasticity (this is before considering the last symmetry)
- The coordinate pairs in the notation above $\mu\nu$ and $\sigma\tau$ are changed to indices 1 – 6 as follows:

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

- Now we take into use a new elasticity quantity with the transformations

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

where $\alpha \leftrightarrow \sigma\mu$ and $\beta \leftrightarrow \tau\nu$ following the same rules as in equation (10).

7.A Elasticity

7.A.3 Engineering notation for elasticity

- Similarly for the strains one can make the change

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

- Now the energy densities can be written in the simpler form

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

- The constants $C_{\alpha\beta}$ are called the elastic stiffness constants or most commonly the **Elastic moduli**. They form a 6x6 matrix.
- The inverse matrix $S = C^{-1}$ is called the **Elastic XXX**.

7.A Elasticity

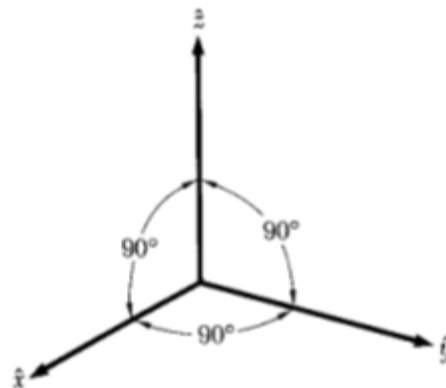
7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

- Consider the unit vector transformation

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

Note difference between the two kinds of epsilons!

$\epsilon \neq \epsilon$ earlier



7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants ϵ and \mathbf{C}

The variables $\epsilon \ll 1$, when one is in the elastic regime.

- When this transformation of the coordinate axes is made, how does it affect an atom in $\mathbf{r} = (x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k})$?
- After the deformation its position is $\mathbf{r}' = x\mathbf{x}' + y\mathbf{y}' + z\mathbf{z}'$,
- It has moved a distance, a "displacement":

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

- With equations (12) one gets

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

which in a more general form is:

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

7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

- We see that the displacement field $u(\mathbf{r})$ can be written with simple transformation of the coordinate axes, which are described by ϵ .

- We further see that

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

- Thus we can define coefficients:

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

and so on...

7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

The full set of strains is defined by

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

7.A Elasticity

Approximations used

$$|\mathbf{x}'| = \sqrt{(1 - \epsilon_{xx})^2 + \epsilon_{yy}^2 - \epsilon_{zz}^2} =$$

$$\sqrt{(1 - 2\epsilon_{xx} + \epsilon_{xx}^2) + \epsilon_{yy}^2 - \epsilon_{zz}^2} \approx \sqrt{1 - 2\epsilon_{xx}}$$

and Taylor expansion $(1-x)^a \approx 1 - ax$ for small x

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

When the changes in the coordinate axes are small, one can approximate

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

where second-order terms have been left out.

- The connections between the three sets of coefficients ϵ , e och e

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

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

- Index n is obtained from the definitions (10).
- All of these are called **strain** ("venymä" in Finnish, "uttöjning" in Swedish)

7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

Let us now calculate how much the lattice deformation changes the volume of the lattice

- The volume is now

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

- where again second order terms $O(e^2)$ have been left out
- The change in volume, i.e. the **dilatation** is

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

- Now we can easily make a connection to pressure. The 2nd law of thermodynamics states that

$$dE = TdS - PdV$$

7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

- Now we can easily make a connection to pressure. The 2nd law of thermodynamics states that

$$dE = TdS - PdV$$

- When $T=0$, $dE = -PdV$.
- This is an equation for gases, where the *scalar quantity* P is the hydrostatic pressure
- For a lattice, the generalized pressure can be written in tensor form σ_{ij} and this is called **stress** ("jännitys" on Finnish, "spänning" in Swedish)^{*ij*}
- The stress is the external work done on the system, and its sign is opposite to the internal stress. (In materials physics a stress can also be negative, contrary to a gas.)

7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

- The generalization of the energy equation is now

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

- Here U/V is the energy density.
- Comparison with equation (8) gives

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

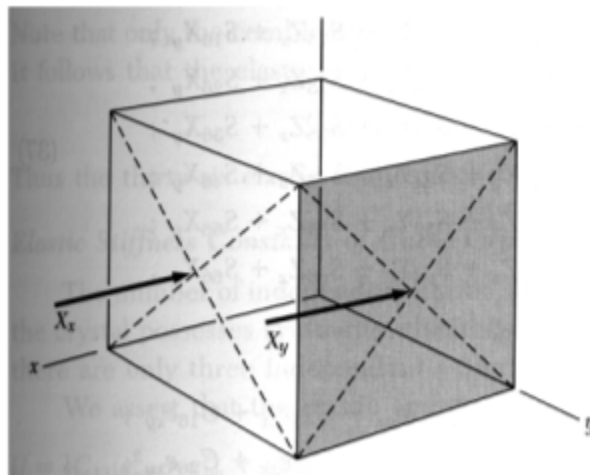
- This equation is the general form of **Hooke's law**.
- It simply gives the linear relation between stress and strain
 - *Historically, it was stated by Hooke as "ut tensio, sic vis" in 1678, i.e. originally it was not exactly a tensor equation...*

7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

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

- The components σ_{ij} of the stress tensor also have a geometric interpretation. They are the force per area element which acts in an angle perpendicular to the body, which is placed according to the coordinate axes ..

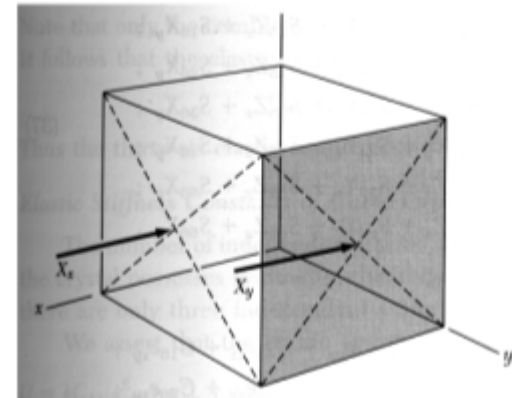


7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

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

- For instance $\sigma_{11} = X_x$ is the force/area in the X direction, that acts on the side x.
- $\sigma_{12} = X_y$ is the force/area in the X-direction, that acts on the side y.
- The units of σ are pressure units

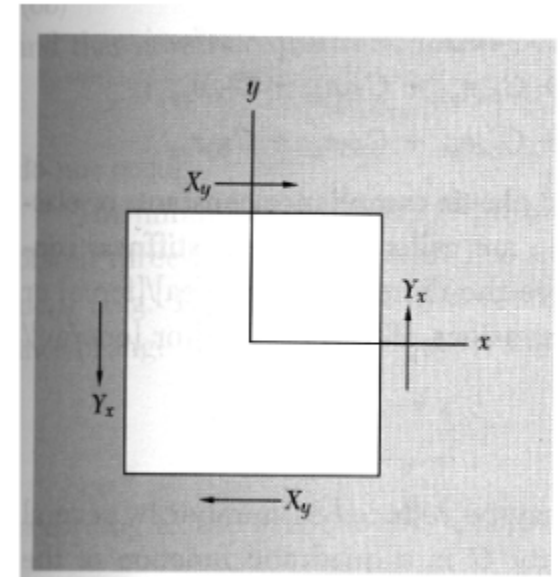


7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

There are in total 9 possible components like this

- However, in order for the macroscopic body to be in equilibrium (immobile), the shear components must cancel. otherwise the body would start rotating
- Example in picture.
- Now we must have $Y_x = X_y$ to prevent rotation.
- Likewise $Y_z = Z_y$ ja $Z_x = X_z$



7.A Elasticity

7.A.4 Geometric interpretation for the constants e and C

In summary, the full Hooke's law can be written out in engineering notation as

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

Reduction in moduli

- This seems huge.
- However, for most crystals with symmetries one can reduce the number of moduli
- Look carefully in the matrix below: the cross moduli are not independent! I.e. number of independent moduli is 21

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix}$$

Reduction in moduli

- Remember from Materials Physics I that Bravais lattices have different degrees of symmetry
- The trigonal has lowest (no) symmetry
- Cubic has highest symmetry

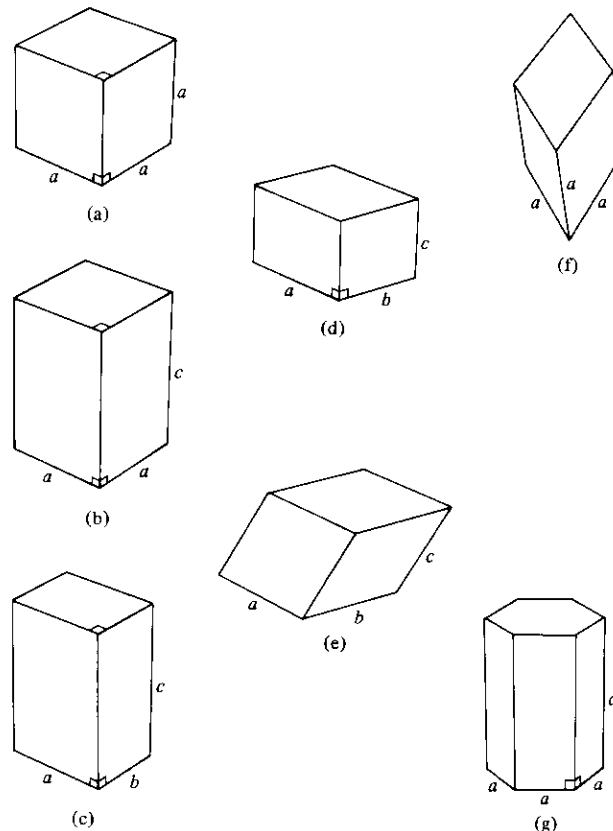
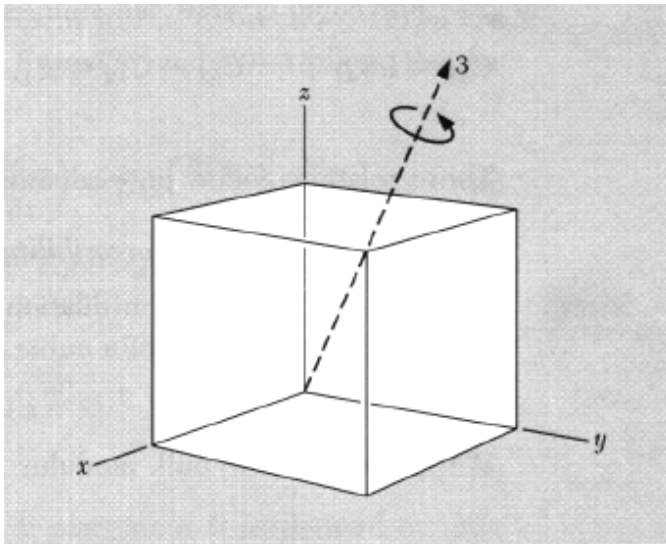


Figure 7.3
Objects whose symmetries are the point-group symmetries of Bravais lattices belonging to the seven crystal systems: (a) cubic; (b) tetragonal; (c) orthorhombic; (d) monoclinic; (e) triclinic; (f) trigonal; (g) hexagonal.

Reduction in moduli

- Consider the cubic system
- Due to the symmetry, it is clear that changing the coordinate axes in the following manners must lead to the same energy



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

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

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

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



Reduction in moduli: cubic crystals (3 moduli)

- From this, one can deduce that terms which contain mixed products

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

cannot appear in the energy expression (otherwise the energy would change on rotation) From this one can derive (not done here explicitly) that the energy can be written

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

i.e. there are only 3 independent elastic constants left!!

Reduction in moduli: cubic crystals (3 moduli)

- Hence in cubic systems linear elasticity is completely defined by the equations

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

- Note that this has a hidden convention: the crystal is assumed to be oriented so that the 100 crystal direction is the x coordinate, 010 y and 001 z

Reduction in moduli

- If one has a cubic unit cell, but treats it so that e.g. the z axis is along the unit cell diagonal (111 crystal direction), the above equations are not valid, but one can transform them from one to the other
- An example of such mathematics: [Heino et al, Europhys. Lett. 4 (1998) 273]

Reduction in moduli

- In general, one can use similar symmetry considerations for all Bravais lattices and deduce that the number of independent elastic constants is:

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



Reduction in moduli

- The elastic constants are an experimentally measurable quantity!
 - They can be measured to high accuracy by measuring ultrasound speeds in high-quality single crystals in different crystal directions
- Tabulations are available, e.g. Huntington, "The elastic constants of crystals", "Academic Press" 1958, New York

Reduction in moduli

- Examples [Kittel]

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	—



Important caveat

- **Very important caveat:** the elastic moduli discussed here are by definition the microscopic, atom-level ones!
- E.g. Bulk moduli and Young's moduli can also of course be measured purely macroscopically, but the values one gets, can be completely different from the microscopic ones
 - This is usually the case for metals in fact, even if they are single crystalline(!)
 - The reason to this discrepancy lead to the discovery of dislocations, which will be dealt with later on during the course