

Venituse iseloomustavad maatriksid ning venituskoefitsientide tuletused

Artur Tamm

18. märts 2009. a.

1 Võret iseloomustav maatriks ning venitusmaatriksid

Igasugused kristalle on võimalik kirjeldada Bravais' võrega, mis koosneb elementaarrakkudest. Kolmemõõtmelise kristalli korral iseloomustatakse rakku kolme võrevektoriga:

$$\vec{a} = (a_x, a_y, a_z); \quad (1.1)$$

$$\vec{b} = (b_x, b_y, b_z); \quad (1.2)$$

$$\vec{c} = (c_x, c_y, c_z); \quad (1.3)$$

Kristall on invariantne translatsioonide suhtes, mida kirjeldab võrevektoritest moodustatud translatsioonivektor \vec{R}_n , mis saadakse järgnevalt:

$$\vec{R}_n = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}, \text{ kus } n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}; \quad (1.4)$$

Elementaarrakku iseloomustav maatriks koostatakse võrevektoritest järgmiselt:

$$R = \begin{pmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{pmatrix}; \quad (1.5)$$

Kristalli venituse iseloomustamiseks on võimalik kirjeldada ruutmaatriksiga D , mille dimensiooniks on 3, mis mõjub võret iseloomustavale maatriksile R järgnevalt:

$$R' = R.D; \quad (1.6)$$

Saadud tulemus R' iseloomustab deformeeritud Bravais' võret. Tehe \cdot on maatrikskorrutis.

2 Erinevad deformatsiooni matriksid

2.1 Võrevektorite suunalised deformatsioonid

Elementaarraku deformatsioone vektorite suunas iseloomustavad järgmised matriksid[1]:

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1 + \delta & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (2.1)$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \delta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (2.2)$$

$$D_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \delta \end{pmatrix}; \quad (2.3)$$

Matriksid D_1 , D_2 ning D_3 iseloomustavad vastavalt vektorite \vec{a} , \vec{b} ning \vec{c} suhtelist muutust suuruse δ võrra. Vektorite pikkuse muutus iseloomustab kristallvõre elementaarraku venitust või kokkusurumist kindla võrevektori suunas.

2.2 Elementaarraku deformatsioon, mis tekib võrevektori nihutamisel tema sihis

Matriksid D_4 , D_5 ning D_6 , mis avalduvad järgmiselt[1]:

$$D_4 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & \frac{\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \\ 0 & \frac{\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \end{pmatrix}; \quad (2.4)$$

$$D_5 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 & \frac{\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 \\ \frac{\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \end{pmatrix}; \quad (2.5)$$

$$D_6 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & \frac{\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 \\ \frac{\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \end{pmatrix}; \quad (2.6)$$

2.3 Võrevektorite suunaline deformatsioon konstantsel elementaarraku ruumalal

Järgnevad maatriksid iseloomustavad deformatsioone vastavate võrevektorite suunas nii, et elementaarraku ruumala jääb samaks[1]:

$$D_7 = \begin{pmatrix} \frac{1+\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \end{pmatrix}; \quad (2.7)$$

$$D_8 = \begin{pmatrix} \frac{1+\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \end{pmatrix}; \quad (2.8)$$

$$D_9 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\delta}{\sqrt[3]{1-\delta^2}} \end{pmatrix}; \quad (2.9)$$

3 Venituse iseloomustavad elastsuskoeffitsiendid

Eelnevalt kirjeldatud deformatsiooni maatriksitega mõjudes on võimalik leida kristalli energia sõltuvuse elementaarraku muutuste suhtes. Energia muutus on üldjuhul kirjeldatav järgmise võrrandiga:

$$E(V, \delta) = E(V, 0) + V_0 \left(\sum_i \tau_i \xi_i \delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{i,j} \delta_i \xi_i \delta_j \xi_j \right) + O(\delta^3); \quad (3.1)$$

Viimases võrrandis suurus δ iseloomustab defaormatsiooni suurust ning τ on deformatsiooni tensori komponent. Liige $O(\delta^3)$ iseloomustab Taylori rea kolmandat järku väikeseid suurusi, mida antud lähnduses ei arvetstata. Suurus ξ omandab järgnevaid väärtusi.

$$\xi_i = \begin{cases} 1 & \text{kui } i \in \{1, 2, 3\} \\ 2 & \text{kui } i \in \{4, 5, 6\} \end{cases}; \quad (3.2)$$

Põhimõtteliselt on arvutatud tulemused lähendatavad järgmisele võrrandiga.

$$f(\delta) = \alpha + \beta\delta + \gamma\delta^2; \quad (3.3)$$

Lisaks elementaarraku muutusest tingitud energia muutusele tuleb arvestada raku ruumalast tingitud muutusega $E(V, 0)$. Võttes viimasest võrrandist teist järku osatuletise δ_i järgi taandub viimane probleem välja ning saame võrrandi:

$$\gamma_i = V_0 c_{i,i} \quad (3.4)$$

Viimase võrrandiga on võimalik kätte saada kõik paarisindeksitega elastsuskoeffitsiendid $c_{1,1}, c_{2,2}, c_{3,3}, c_{4,4}, c_{5,5}$ ning $c_{6,6}$.

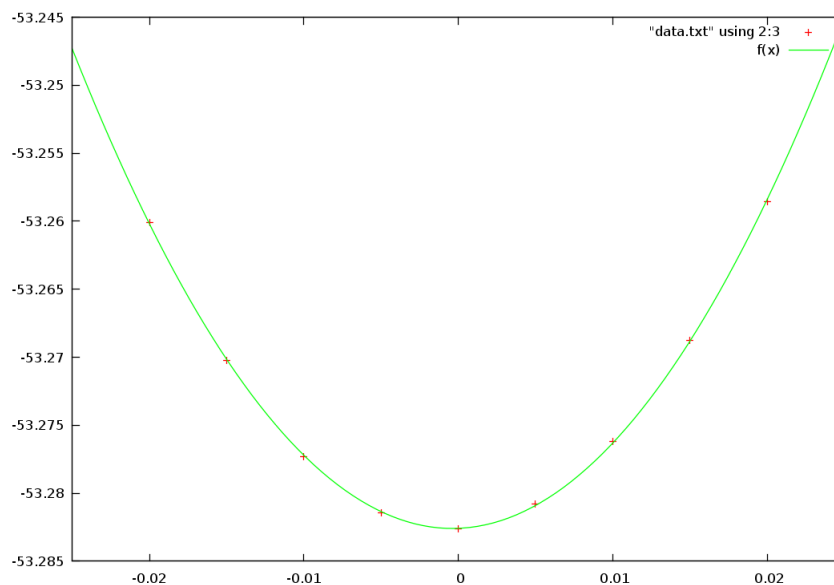
4 Arvutuslikud tulemused, graafikud ja koefitsiendid

4.1 Venitusmaatriks D_1

Venitusmaatriksi D_1 abil on võimalik leida elastsuskoeffitsient $C_{1,1}$ järgnevalt võrrandist.

$$E(V, \delta) = E(V_0, 0) + V_0 \tau_1 \delta + V_0 \frac{c_{1,1}}{2} \delta^2; \quad (4.1)$$

Viimast võrrandit on võimalik lähendada funktsiooniga $f(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$. Toome järgnevalt välja vastava graafiku.



Joonis 1: Arvutuspunktid maatriksi D_1 jaoks, venitusel 2%

Ning funktsiooni $f(x)$ sobitatud koefitsiendid.

Arvestades, et $V_0 = 85.962A^3$ on võimalik leida suuruse $C_{1,1}$ väärtuse.

$$c_{1,1} = 216.97 \text{ GPa}; \quad (4.2)$$

Tabel 1: Sobitatud funktsiooni $f(x)$ koefitsiendid koos veaga

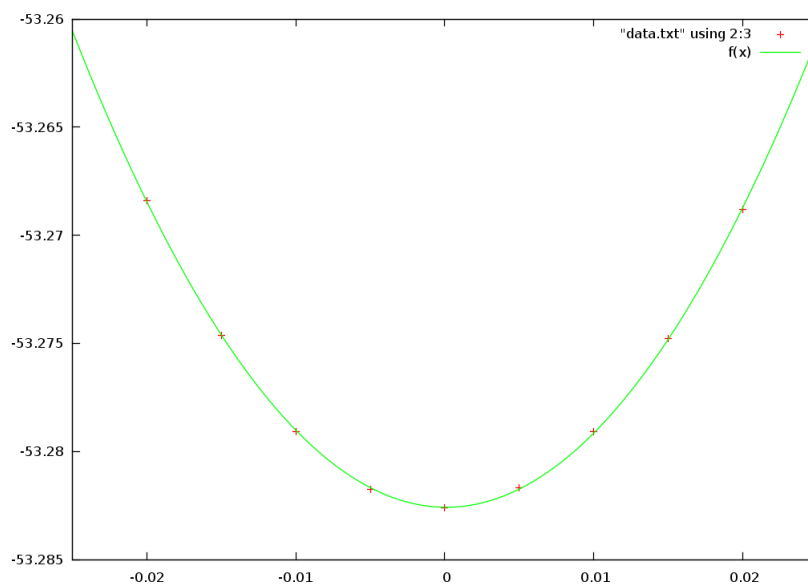
Koefitsient	Väärtus	Määramatus
α	-53.2826	$6.198 \cdot 10^{-5}$
β	0.0448333	0.003167
γ	58.2065	0.2795

4.2 Venitusmaatriks D_2

Venitusmaatriksi D_2 abil on võimalik leida elastsuskoeffitsient $C_{2,2}$ järgnevast võrrandist.

$$E(V, \delta) = E(V_0, 0) + V_0 \tau_2 \delta + V_0 \frac{C_{2,2}}{2} \delta^2; \quad (4.3)$$

Viimast võrrandit on võimalik lähendada funktsiooniga $f(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$. Toome järgnevalt välja vastava graafiku.



Joonis 2: Arvutuspunktid maatriksi D_2 jaoks, venitusel 2%

Ning funktsiooni $f(x)$ sobitatud koefitsiendid.

Tabel 2: Sobitatud funktsiooni $f(x)$ koefitsiendid koos veaga

Koefitsient	Väärtus	Määramatus
α	-53.2826	$6.317 \cdot 10^{-5}$
β	-0.00666(6)	0.00172
γ	34.9385	0.01518

Arvestades, et $V_0 = 85.962A^3$ on võimalik leida suuruse $C_{2,2}$ väärtuse.

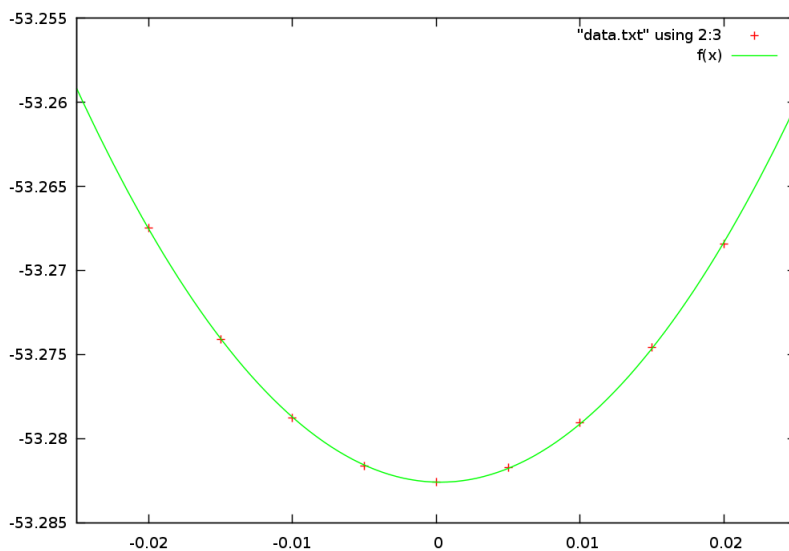
$$c_{2,2} = 130.24 \text{ GPa} \quad (4.4)$$

4.3 Venitusmaatriks D_3

Venitusmaatriksi D_3 abil on võimalik leida elastsuskoeffitsient $C_{3,3}$ järgnevast võrrandist.

$$E(V, \delta) = E(V_0, 0) + V_0 \tau_3 \delta + V_0 \frac{c_{3,3}}{2} \delta^2; \quad (4.5)$$

Viimast võrrandit on võimalik lähendada funktsiooniga $f(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$. Toome järgnevalt välja vastava graafiku.



Joonis 3: Arvutuspunktid maatriksi D_3 jaoks, venitusel 2%

Ning funktsiooni $f(x)$ sobitatud koefitsiendid.

Tabel 3: Sobitatud funktsiooni $f(x)$ koefitsiendid koos veaga

Koefitsient	Väärtus	Määramatus
α	-53.2826	$3.199 \cdot 10^{-5}$
β	-0.01993(3)	0.001634
γ	36.6342	0.1443

Arvestades, et $V_0 = 85.962A^3$ on võimalik leida suuruse $C_{3,3}$ väärtuse.

$$c_{3,3} = 136.56 \text{ GPa} \quad (4.6)$$

5 Viited

Viited

[1] P. Ravindran, *et al.*, *J. Appl. Phys.* **84**, 4891 (1998).