

# Venituse iseloomustavad maatriksid ning venituskoefitsientide tuletused

Artur Tamm

27. 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 venitusi 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 maatriksid

### 2.1 Võrevektorite suunalised deformatsioonid

Elementaarraku deformatsioone vektorite suunas iseloomustavad järgmised maatriksid[1]:

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

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

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

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

## 2.2 Elementaarraku deformatsioon, mis tekib võrevektori nihutamisel tema sihis

Maatriksid  $D_4$ ,  $D_5$  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  $\delta$  iseloomustab deformatsiooni suurust ning  $\tau$  on deformatsiooni tensori komponent. Liige  $O(\delta^3)$  iseloomustab Taylori rea kolmandat järku väikeseid suurusi, mida antud lähenduses ei arvetata. Suurus  $\xi$  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 arvatud 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  $\delta_i$  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  $c_{6,6}$ .

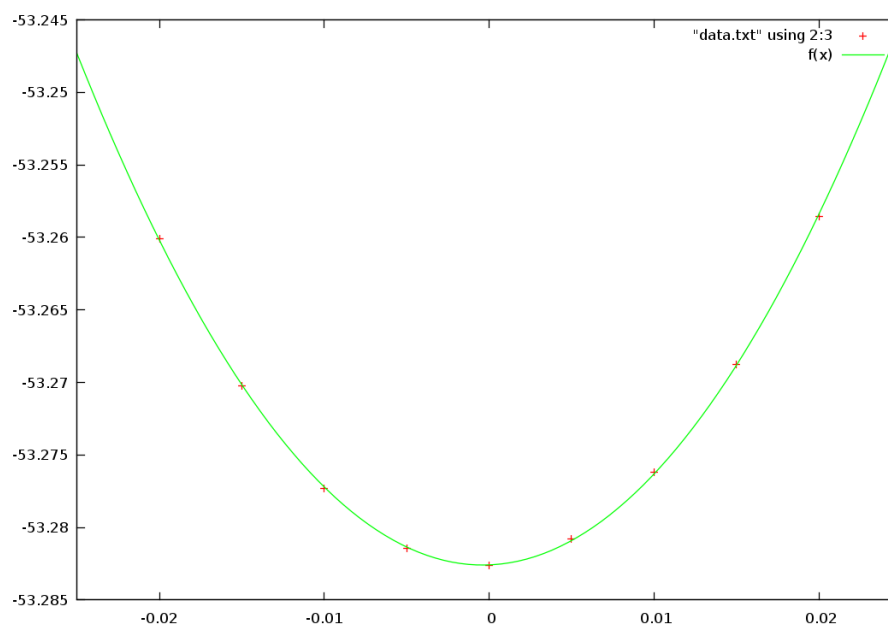
## 4 Arvutuslikud tulemused, graafikud ja koefitsiendid

### 4.1 Venitusmaatriks $D_1$

Venitusmaatriksi  $D_1$  abil on võimalik leida elastsuskoefitsient  $c_{1,1}$  järgnevast 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.

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

Koefitsient	Väärtus	Määramatus
$\alpha$	-53.2826	$6.198 \cdot 10^{-5}$
$\beta$	0.0448333	0.003167
$\gamma$	58.2065	0.2795

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

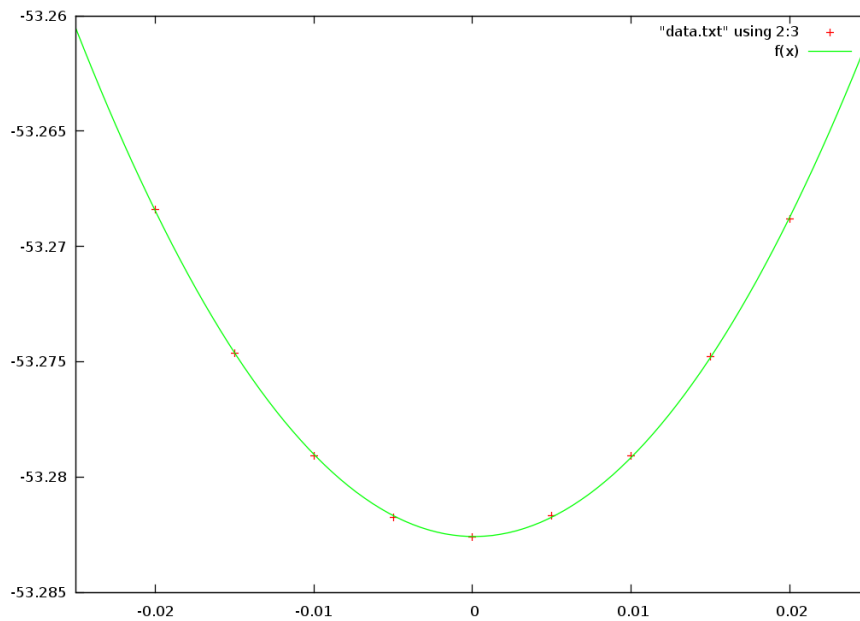
$$c_{1,1} = 216.97 \text{ GPa}; \quad (4.2)$$

## 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
$\alpha$	-53.2826	$6.317 \cdot 10^{-5}$
$\beta$	-0.00666(6)	0.00172
$\gamma$	34.9385	0.01518

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

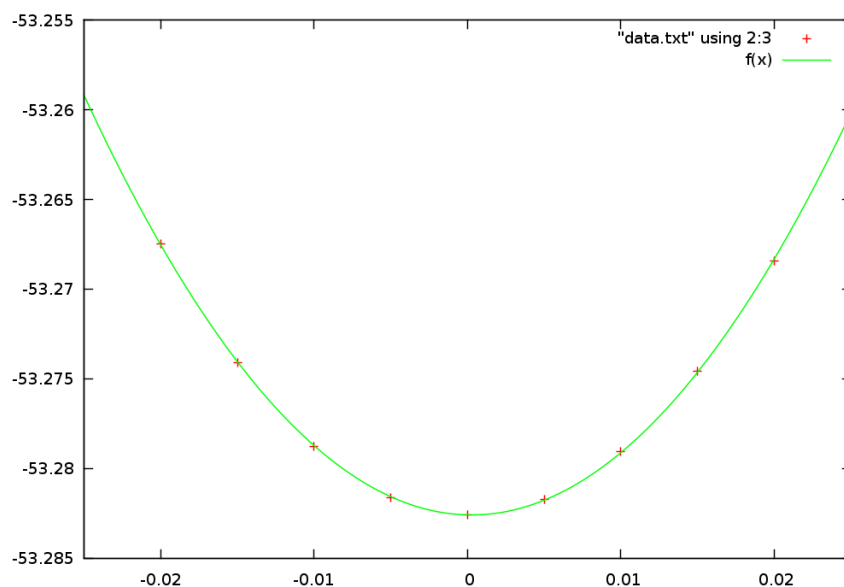
$$c_{2,2} = 130.24 \text{ GPa} \quad (4.4)$$

### 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 koeffitsiendid.

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

Koeffitsient	Väärtus	Määramatus
$\alpha$	-53.2826	$3.199 \cdot 10^{-5}$
$\beta$	-0.01993(3)	0.001634
$\gamma$	36.6342	0.1443

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

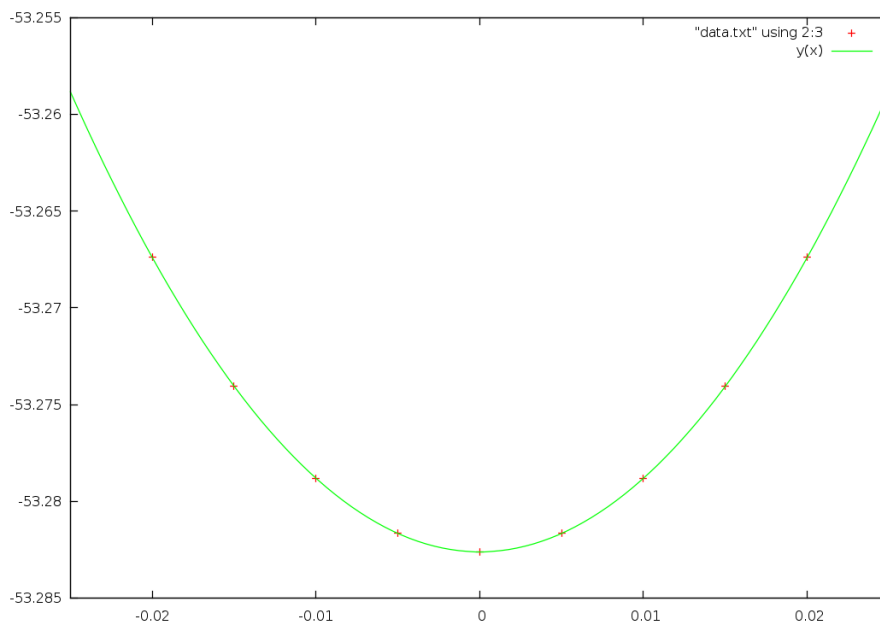
$$c_{3,3} = 136.56 \text{ GPa} \quad (4.6)$$

## 4.4 Venitusmaatriks $D_4$

Venitusmaatriksi  $D_4$  abil on võimalik leida elastsuskoeffitsient  $c_{4,4}$  järgnevast võrrandist.

$$E(V, \delta) = E(V_0, 0) + 2V_0 \tau_4 \delta + 2V_0 c_{4,4} \delta^2; \quad (4.7)$$

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



Joonis 4: Arvutuspunktid maatriksi  $D_4$  jaoks, venitusel 2%

Ning funktsiooni  $f(x)$  sobitatud koeffitsiendid.

Tabel 4: Sobitatud funktsiooni  $f(x)$  koeffitsiendid koos veaga

Koeffitsient	Väärtus	Määramatus
$\alpha$	-53.2826	$4.097 \cdot 10^{-6}$
$\beta$	$4.99999 \cdot 10^{-5}$	0.0002093
$\gamma$	38.0366	0.01847

Arvestades, et  $V_0 = 85.962A^3$  on võimalik leida suuruse  $c_{4,4}$  väärtuse.

$$c_{4,4} = 35.45 \text{ GPa} \quad (4.8)$$

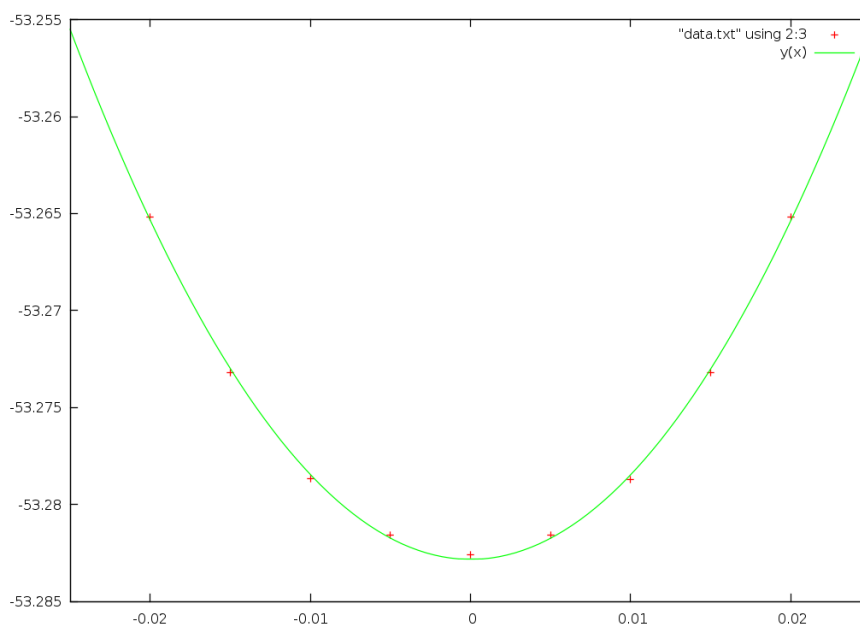


## 4.5 Venitusmaatriks $D_5$

Venitusmaatriksi  $D_5$  abil on võimalik leida elastsuskoeffitsient  $c_{5,5}$  järgnevast võrrandist.

$$E(V, \delta) = E(V_0, 0) + 2V_0 \tau_5 \delta + 2V_0 c_{5,5} \delta^2; \quad (4.9)$$

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



Joonis 5: Arvutuspunktid maatriksi  $D_5$  jaoks, venitusel 2%

Ning funktsiooni  $f(x)$  sobitatud koefitsiendid.

Tabel 5: Sobitatud funktsiooni  $f(x)$  koefitsiendid koos veaga

Koefitsient	Väärtus	Määramatus
$\alpha$	-53.2828	0.0001242
$\beta$	-0.00043(3)	0.006344
$\gamma$	43.7177	0.56

Arvestades, et  $V_0 = 85.962A^3$  on võimalik leida suuruse  $c_{5,5}$  väärtuse.

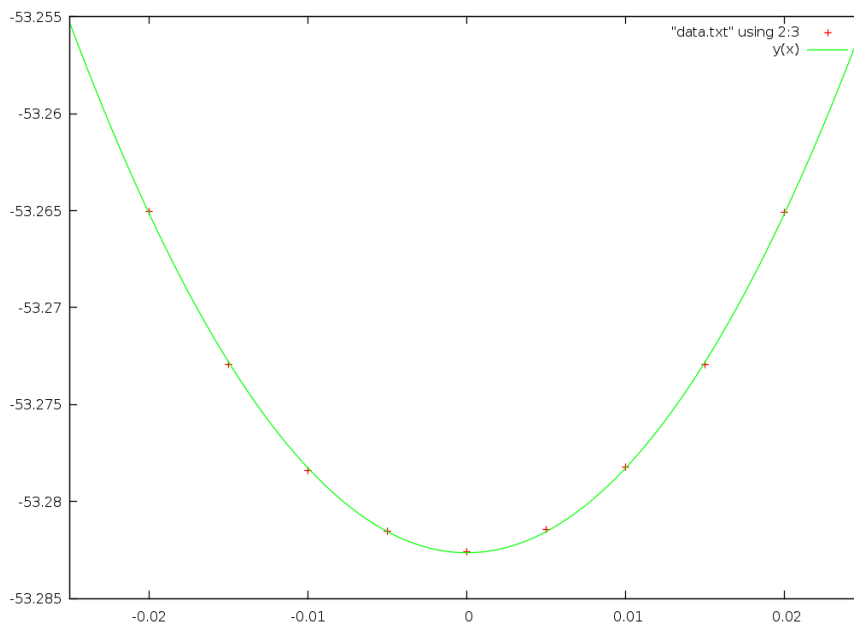
$$c_{5,5} = 40.74 \text{ GPa} \quad (4.10)$$

## 4.6 Venitusmaatriks $D_6$

Venitusmaatriksi  $D_6$  abil on võimalik leida elastsuskoeffitsient  $c_{6,6}$  järgnevast võrrandist.

$$E(V, \delta) = E(V_0, 0) + 2V_0 \tau_6 \delta + 2V_0 c_{6,6} \delta^2; \quad (4.11)$$

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



Joonis 6: Arvutuspunktid maatriksi  $D_6$  jaoks, venitusel 2%

Ning funktsiooni  $f(x)$  sobitatud koeffitsiendid.

Tabel 6: Sobitatud funktsiooni  $f(x)$  koeffitsiendid koos veaga

Koeffitsient	Väärtus	Määramatus
$\alpha$	-53.2826	$6.156 \cdot 10^{-5}$
$\beta$	0.00115	0.003145
$\gamma$	43.7504	0.2776

Arvestades, et  $V_0 = 85.962A^3$  on võimalik leida suuruse  $c_{6,6}$  väärtuse.

$$c_{6,6} = 40.77 \text{ GPa} \quad (4.12)$$

## 5 Viited

### Viited

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