

**ДЕРЖАВНИЙ ЗАКЛАД «ПІВДЕННОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ К.Д. УШИНСЬКОГО»**

**Навчально-науковий інститут природничо-математичних наук, інформатики
та менеджменту**

**Кафедра інноваційних технологій та методики навчання природничих
дисциплін**

Брюханов А.О., Волчок Н.А.

**ТЕОРІЯ І ПРАКТИКА ТЕКСТУРНОГО АНАЛІЗУ
Частина 1
Будова і властивості кристалічних тіл**

*Навчальний посібник для здобувачів другого (магісторського) рівня вищої
освіти спеціальності 014 Середня освіта (Фізика. Математика) та
аспірантів спеціальності «Прикладна фізика»*

УДК:

*Рекомендовано до друку вченою радою
Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К. Д. Ушинського» (протокол № 16 від 30 травня 2024 р.)*

Рецензенти:

Ніцук Ю.А., доктор фізико-математичних наук, професор, декан факультету математики, фізики та інформаційних технологій Одеського національного університету імені І.І. Мечнікова

Ваксман Ю.Ф., доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри фізики та астрономії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Брюханов А.О., Волчок Н.А.

Навчальний посібник «Теорія і практика текстурного аналізу» до проведення лекцій, практичних занять, організації самостійної роботи студентів і аспірантів з навчальної дисципліни «Основи кристалофізики» Одеса: Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського, 2024. 115 с.

Частина 1 «Будова і властивості кристалічних тіл» містять опис кристалів і їх властивостей. Розглянуті елементи симетрії, методи зображення і розрахунку кристалів. Представлені основні методи тензорного аналізу кристалів, а також методи прогнозування анізотропії властивостей четвертої тензорної розмірності, що були розроблені в ПНПУ імені К.Д.Ушинського.

© Університет Ушинського, 2024

© Брюханов А.О., Волчок Н.А.

ЗМІСТ

Передмова

Частина 1. БУДОВА І ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІЧНИХ ТІЛ

1. Елементи геометричної кристалографії

- 1.1 Кристалічне тіло. Монокристали та полікристали
 - 1.2. Елементи монокристалу
 - 1.3. Основні властивості кристалічних речовин
 - 1.4. Симетрія кристалів
 - 1.4.1. Вісь симетрії
 - 1.4.2. Площина симетрії
 - 1.4.3. Центр симетрії
 - 1.5. Комірки кристалічних ґрат
 - 1.5.1. Види елементарних комірок
 - 1.6. Системи кристалографічних вісей
 - 1.6.1. Прямокутна (ортогональна) тривісна система координат
 - 1.6.2. Чотирьохвісна система координат
 - 1.7. Індекссування вузлів, площин та напрямків у кристалі
 - 1.7.1. Індеси Міллера
 - 1.7.2. Особливості індексування у гексагональній сингонії
 - 1.8. Кристалографічна зона.
 - 1.9. Координаційне число
 - 1.10. Зображення кристалів
 - 1.10.1. Сферичні проєкції
 - 1.10.2. Стереографічні сітки
 - 1.10.3. Побудова стереографічних проєкцій прямих та площин за сферичними координатами за допомогою стереографічних сіток
 - 1.10.4. Вимірювання кутів між прямими та площинами за допомогою сітки Вульфа
 - 1.10.5. Побудова лінійних та гномонічних проєкцій за сферичними координатами
 - 1.11. Двійники
 - 1.12. Літературні джерела першого розділу
2. Властивості кристалів у механіці суцільних середовищ

Передмова.

Представлена перша частина навчального посібника «Будова і властивості кристалічних тіл» є частиною загального курсу «Теорія і практика текстурного аналізу полікристалів».

Наукові інтереси кафедри фізики ПНПУ багато років сконцентровані в галузі фізики твердого тіла. Більшість співробітників кафедри виконували свої дисертаційні роботи з фізико-математичних наук саме за цією спеціальністю, яка за старою номенклатурою класифікувалася як 01.04.07. - «фізика твердого тіла». Накопичено великий досвід і є ряд істотних досягнень у галузі вивчення структури та властивостей текстурованих (анізотропних) полікристалів кубічних та гексагональних матеріалів. Це і технологія виготовлення титанових судин високого внутрішнього тиску (доц. Совкова Т.С.), текстурно зміцнені цирконієві труби (доц. Тарасов А.Ф.).

Роботами проф. А.Р. Гохмана з співробітниками були розроблені методи функціонального опису текстур та анізотропії властивостей полікристалів. Встановлено вплив текстур на процеси руйнування на мікромасштабному рівні сталевих листів, що використовуються в автобудуванні (доц. Дячок Д.А.). В даний час аспіранти кафедри продовжують розвивати текстурний напрямок кафедри і багато магістрантів також мають намір працювати в цій сфері.

Однак для успішної роботи в галузі фізики металів потрібен певний обсяг знань та навичок. Тому й виникла необхідність написання такого посібника, який давав би аспіранту той обсяг знань, який дозволив би йому ставити завдання та шукати шляхи їх вирішення для досягнення поставленої мети.

Посібник складається з низки розділів, першим з яких є розділ, де структура твердого тіла розглядається на першому масштабному рівні, саме на рівні зеренної структури. Зерна ж визначають кристалічність структури. Якщо зерно має кристалічну структуру, то об'єкт, що вивчається – кристал і може бути

описаний за допомогою законів та правил кристалографії. Загалом вивчати будову речовини на рівні вище зерен без знань кристалографії безглуздо.

По кристалографії написано багато підручників та посібників. Є підручники з геометричної кристалографії, хімічної, фізичної. Для нашого посібника ми розглянули саме ті питання загальної кристалографії, з якими аспіранту чи претенденту доведеться зіткнутися прямо з перших кроків у його дослідницькій роботі, припостановці завдання.

ЧАСТИНА ПЕРША

БУДОВА І ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІЧНИХ ТІЛ

Розділ 1

ЕЛЕМЕНТИ ГЕОМЕТРИЧНОЇ КРИСТАЛОГРАФІЇ

1.1. Кристалічне тіло. Монокристали та полікристали

Колись великого Фейнмана запитали, яку інформацію він залишив би нащадкам, якби знав, що через якийсь час цивілізація на Землі загине, і людству доведеться починати все спочатку: винаходити важіль, вчитися обробляти каміння, створювати ріжучі знаряддя виробництва, добувати вугілля, плавити метал тощо. Які знання допомогли би людям пройти шлях свого розвитку швидше, ніж вони це зробили у відомій історії. Вчений сказав: «Людству треба залишити інформацію про основний принцип молекулярно – кінетичної теорії речовини, – «всі тіла складаються з частинок, які хаотично рухаються та взаємодіють один з одним». Тобто. в основі пізнання світу лежить вчення про будову речовини. Кристал – це і є тіло, що складається з частинок, що взаємодіють між собою (атомів, іонів, молекул) і впорядковано розташованих один щодо одного (рис.1.1).

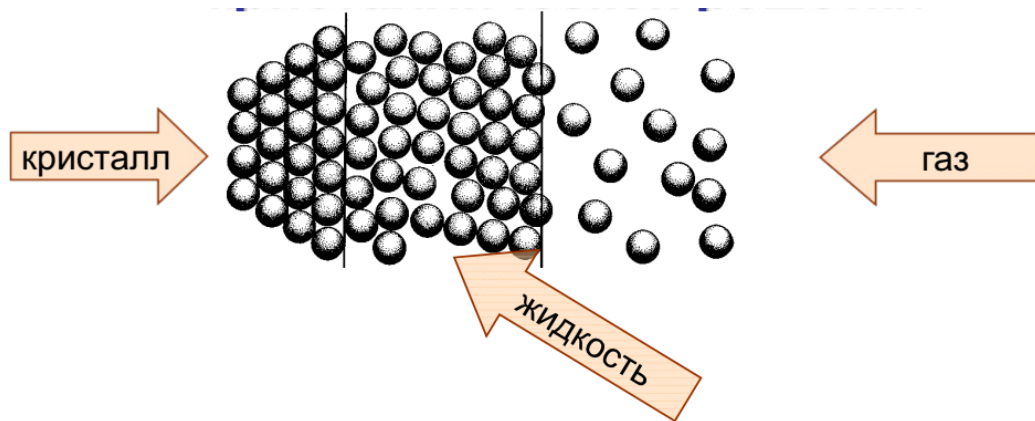


Рис.1.1. Кристал, рідина, газ.

Рідкий стан речовини характеризується відсутністю впорядкованості в розташуванні частинок, які взаємодіють одна з одною, проте частинки здатні вільно переміщатися по всьому об'єму тіла. У газоподібному стані частинки слабо взаємодіють і здатні розлітатись в різні сторони.

Кристалічне тіло є найвищим ступенем внутрішнього порядку, що становлять його частинок.

«Кристали — це ідеальний стан речовини, той глибокий внутрішній порядок, якого прагне Природа» - говорив академік АЕ. Ферсман. "Все, що не кристалічно - не міцно і має поступово перетворитися на кристали".

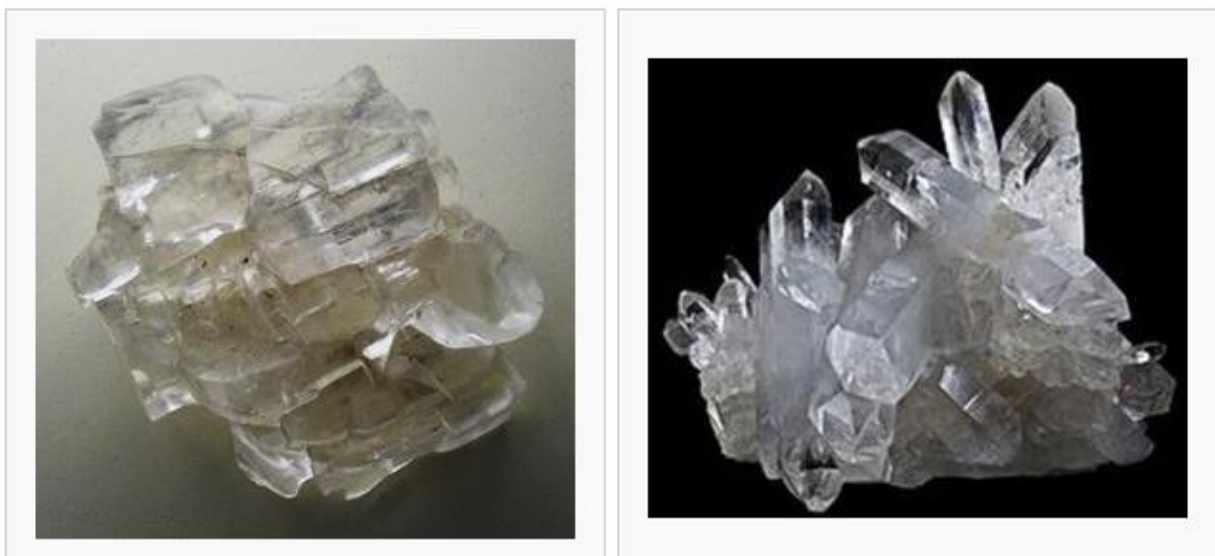
Кристалічні тіла можна розділити на дві групи: монокристали та полікрристали.

Якщо структура (кристалічна решітка), що періодично повторюється, поширюється по всьому об'єму тіла, то утворюється «одиничний кристал» — монокристал. Монокристали мають форму правильних симетричних багатокутників. Монокристалами є більшість мінералів. Але вони рідко досягають розмірів кілька сантиметрів. Прикладами монокристалів можуть бути дорогоцінні камені, ісландський шпат, і топаз (рис. 1.2).



Рис.1.2. Монокристали ісландського шпату (ліворуч) та топазу (праворуч)

У природі частіше зустрічаються монокристали, що безладно зрослися між собою. Такі тверді тіла називають полікрістали. Прикладами полікрісталів є кам'яна сіль (рис. 1.3А), кварц (рис. 1.3.В), цукор, лід, залізо, мідь.



А

В

Рис.1.3. Полікрістали А-кам'яна сіль, В-кварц

Монокристалльні елементи (зерна, кристаліти, ін.) в ідеальному полікрісталі орієнтовані хаотично. Неможливо виділити якусь переважну орієнтацію окремих елементів-монокристалів. Такий полікрістал є однорідний та ізотропний. Його властивості однакові в усіх напрямках.

Найчастіше у полікрісталі є кілька груп елементів, кожна з яких характеризується своєю середньою орієнтацією. Такий стан полікрісталу називається

текстурованим. Почнемо ж із розгляду характеристик та властивостей твердих тіл у монокристалльному стані.

1.2. Елементи монокристалу

У кристалі частки (атоми, іони, молекули) розташовані періодично, тому в ньому можна виділити систему еквівалентних точок – вузлів (рис.1.5а). Подумки з'єднуємо вузли лініями і отримуємо якусь просторову решітку кристала (решітку Браве). З кожним вузлом просторових решіток пов'язана однакова група атомів — атомний базис (рис. 1.4).

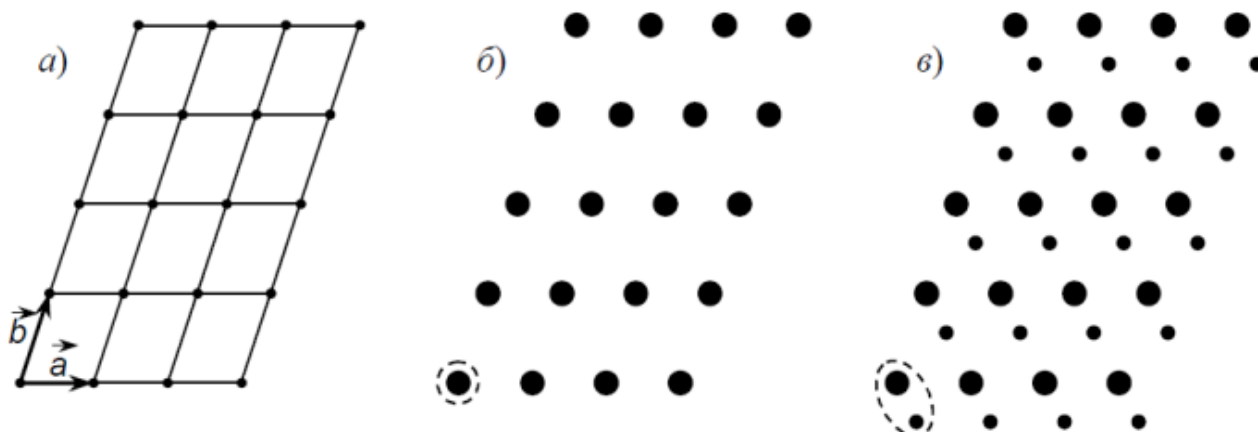


Рис.1.4. Атомні базиси решіток Браве

Таким чином, виходячи з характеру впорядкованості частинок, кристал стало можливим представляти у вигляді абстрактної моделі – просторової решітки, під якою мають на увазі тривимірну сукупність матеріальних частинок, розташованих у відповідних точках нескінченної множини паралелепіпедів, які націло заповнюють простір (рис. 1.5).

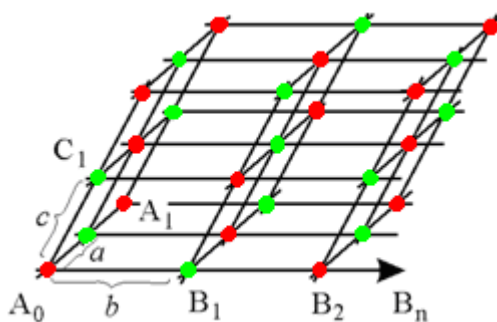


Рис. 1.5. Просторові решітки. a, b, c - базисні вектори (постійні решітки); A, B, C - вузли решітки

При переміщенні (трансляції) з одного вузла просторових решіток в інший ми потрапляємо в абсолютно ідентичну точку - тобто кристал має трансляційну симетрію. Вектор, що з'єднує два вузли просторової решітки, називається трансляційним. При переміщенні на будь-який трансляційний вектор решітка поєднується сама з собою.

Трійка некопланарних векторів $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, що з'єднують один із вузлів решітки з трьома іншими (рис.1.5), називаються базисними векторами. Елемент просторової решітки, паралелепіпед, побудований на базисних векторах, розглядається як елементарна комірка просторової решітки. Це фігура найменшого розміру, послідовним перенесенням якої можна збудувати весь кристал. Просторові, тобто об'ємні елементарні комірки – це "цеглинки", прикладенням яких одна до одної в просторі будується кристал. Таким чином, в описі просторових решіток виділені наступні елементи:

- вузли – матеріальні частинки, розташовані у певних точках просторових решіток (вершини, центри паралелепіпедів або їх граней);
- ряди – сукупність вузлів, що розташовані вздовж прямої та повторюються через рівні проміжки (рис. 1.6);

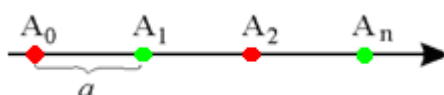


Рис.1.6. Ряд просторових решіток

- **елементарна комірка** – елементарний паралелепіпед, закономірна повторюваність якого утворює просторову решітку (рис. 1.7).

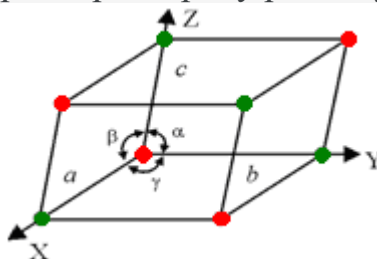


Рис. 1.7. Елементарний об'єм: кути α, β, γ , періоди ряду a, b, c – постійні елементарної комірки

1.3. Основні властивості кристалічних речовин

Внутрішня будова кристалів зумовлює низку загальних характерних властивостей кристалічних речовин. Найважливішими є: однорідність, анізотропність, здатність самоогранятися (здатність до зростання у вигляді правильних багатогранників). Кристалічні тіла мають певні фізичні константи. Це постійні температури плавлення при нагріванні, границя міцності при силовому впливі та ін.

Однорідність означає, що властивості кристала (колір, питома вага, твердість, теплопровідність, електропровідність та ін.) однакові у всіх його точках. Слід мати на увазі, що в кристалі можуть зустрічатися атоми різних елементів за властивостями, що відрізняються один від одного. Тому в кристалографії прийнято вважати, що кристал можна вважати однорідним, якщо для будь-якої точки, взятої всередині кристала, є абсолютно аналогічна за властивостями точка, віддалена від першої на відстані, яка не перевищує 50 \AA ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$). Слід зазначити, що реальні кристалічні речовини дуже часто містять постійні домішки та включення, що спотворюють їх кристалічні ґрати, тому абсолютної однорідності в реальних кристалах часто немає.

Анізотропність кристалів проявляється у нерівнозначності фізичних властивостей у різних напрямках. У речовин, що характеризуються ізотропністю, фізичні властивості у всіх напрямках виявляються однаково. Аморфні тіла, зазвичай, ізотропні; більшість же кристалічних речовин відрізняються анізотропністю. У деяких кристалічних речовинах ті чи інші властивості проявляються ізотропно. Так, при дослідженні механічних властивостей (наприклад, міцності та твердості) анізотропність, як правило, виявляється у всіх кристалах, тоді як фізичні властивості (електричні, оптичні, теплові) можуть мати деякі особливості, хоча загалом анізотропність спостерігається. Наприклад, кристали кубічної сингонії оптично ізотропні, тобто світло в них поширюється за різними напрямками з тією самою швидкістю.

Здатність самоогранятися залежить від здатності кристалічних речовин утворювати правильні багатогранники, тобто це властивість кристалів

утворювати грані при вільному зростанні в відповідному середовищі. Так, наприклад, якщо змінити форму кристала кам'яної солі (NaCl) і помістити його в пересичений розчин, через деякий час даний кристал набуде форму куба. Необхідно відзначити, що здатність самоогранятися характерна лише для кристалічних речовин.

Постійна точка плавлення характерна для кристалічних речовин. Температура, за якої починається плавлення, називається температурою плавлення. Якщо зобразити криву нагрівання аморфного та кристалічного тіл, то для аморфної речовини тіл дана крива нагрівання має монотонний характер, для кристалічного – ламаний характер, де горизонтальна ділянка відповідає температурі плавлення.

1.4. Симетрія кристалів

Явище симетрії добре відоме у живій природі. Це пелюстки та листя різних квітів та рослин, крила метеликів та птахів, і людина теж. У неживій природі яскравими представниками симетричних тіл є кристалічні багатогранники, від яких і походить назва «кристали». Зовнішнє ограновування чи симетрія кристалів зобов'язана їх внутрішній структурі, у якій матеріальні частинки закономірно орієнтовані. Внутрішня симетрія кристалів, отже, проявляється в їхній зовнішній формі. Під симетрією кристалів розуміється закономірна повторюваність однакових граней, ребер та вершин щодо деяких допоміжних геометричних образів (пряма лінія, площина, точка).

Допоміжні геометричні образи, за допомогою яких виявляється симетрія кристала, називаються елементами симетрії. До елементів симетрії кристала відносяться вісь симетрії, площина симетрії, центр симетрії. У сучасній кристалографічній літературі прийняті такі символи для їх позначення: вісь симетрії – L, площина симетрії – P, центр симетрії – C.

1.4.1. Вісь симетрії

Віссю симетрії (L) називається пряма лінія, при повороті навколо якої на 360° кристал кілька разів поєднується зі своїм вихідним положенням. Кут при повороті, на якому відбувається поєднання кристала з вихідним положенням, називається елементарним кутом повороту. Він має цілком певне значення: 180° , 120° , 90° , 60° . Отже, число повторень однакових елементів кристала при обертанні його на повний оборот може дорівнювати 2, 3, 4, 6.

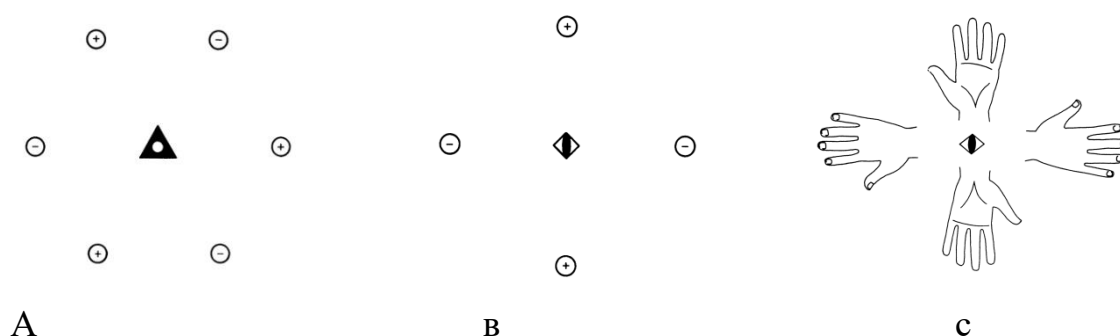


Рис.1.8. Вісь симетрії: А- L_3 ($L_3=3$), В- L_4 ($L_4=4$), с-ефект дії осі четвертого порядку

Число поєднань кристала зі своїм вихідним положенням при обертанні на 360° називається порядком осі симетрії. У кристалі можливі осі симетрії другого, третього, четвертого та шостого порядків. Порядок вісей симетрії позначається такими символами: L_2 , L_3 , L_4 , L_6 . Кількість вісей одного й того ж порядку вказується коефіцієнтом перед символом осі симетрії. Наприклад, $3L_4$ – читається: три осі симетрії четвертого порядку.

Таким чином, підкреслимо, у кристалах осі симетрії п'ятого порядку та вище шостого не існують. Осі першого порядку не відзначаються, оскільки вони є у будь-якому багатограннику. Можлива кількість осей симетрії одного й того ж порядку така: L_2 - 0, 1, 2, 3, 4, 6; L_3 - 0, 1, 4; L_4 - 0, 1, 3; L_6 - 0, 1. Вісі симетрії можуть виходити в центрі граней, у середині ребер та у вершинах багатогранних кутів (рис. 1. 9).

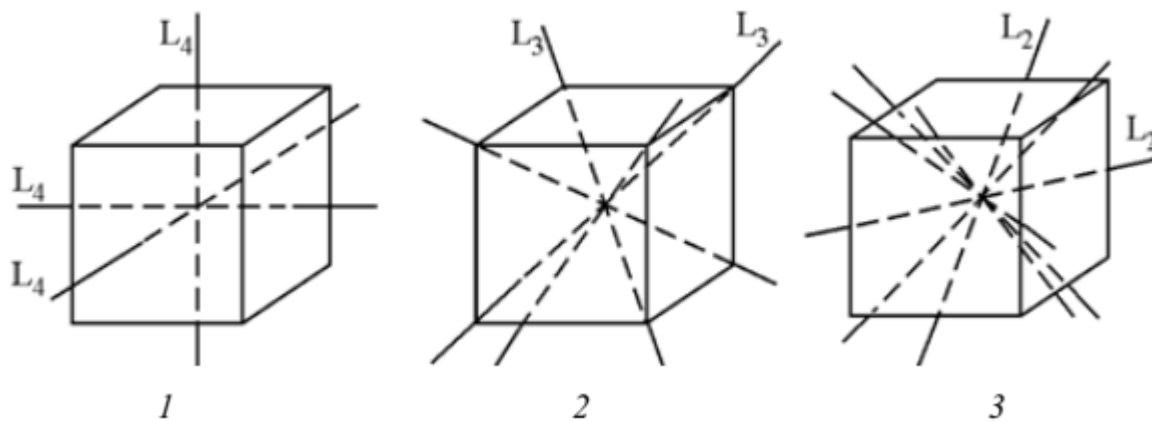


Рис. 1.9. Вихід осей симетрії у кубі: $3L_4$ – у центрі протилежних граней (1); $4L_3$ – у протилежних вершинах тригранних кутів (2); $6L_2$ – у середині протилежних ребер (3)

1.4.2. Площина симетрії

Площиною симетрії (P) називається така площина, яка ділить кристал на дві дзеркально-рівні частини. Площина симетрії представляється як двостороннє дзеркало, в якому одна половина кристала шляхом відбиття поєднується з другою. Для того, щоб зробити відображення, необхідно з кожної точки грані, наприклад з точки А та В (рис. 1.10), опустити на площину симетрії (P) перпендикуляри (Aa, Bb) і продовжити ці перпендикуляри на рівні відстані.

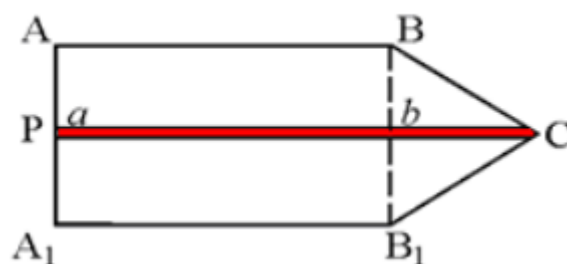


Рис. 1.10. Площина P ділить грань на дві дзеркально-рівні частини

Таким чином, точка А поєднується з точкою A_1 і точка В - з точкою B_1 ; відображення прямої АВ поєднується з прямою A_1B_1 . На рис. 1.11 зображено грань кристала у вигляді прямокутника ABCD, який розсічений площинами симетрії P_1 і P_2 , що проходять паралельно до його сторін.

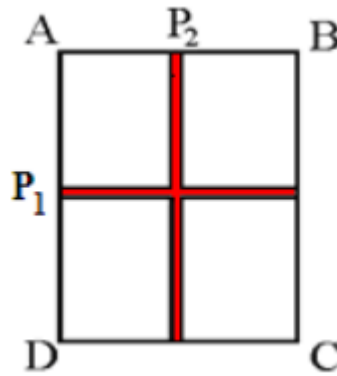


Рис. 1.11. P_1 та P_2 – площини симетрії грані ABCD

Діагональ AC (рис. 1.10) ділить прямокутник на два рівні трикутники, але не є площиною симетрії, тому що трикутники ADC і ABC не мають дзеркальної рівності. Площини симетрії проходять перпендикулярно до граней і ребрів (через їх середини) і вздовж ребер. У кристалах вони можуть бути відсутні або їх число дорівнює 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9. Вісім площин симетрії та більш ніж дев'ять у кристалах неможливі. Наприклад, у кубі число площин симетрії – 9, з яких 3P – проходять перпендикулярно ребрам та граням кристала, через їх середини (рис. 1.12.1),

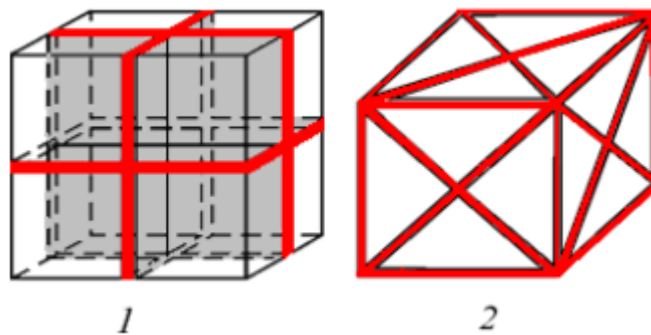


Рис.. 1.12. Набір площин симетрії в кубі.

1.4.3. Центр симетрії

Центр симетрії (C) – точка всередині кристала, у якій перетинаються і діляться навпіл лінії, що з'єднують протилежні однакові грані, ребра чи вершини кристала. З цього визначення слід правило: якщо в кристалі центр симетрії є, кожна грань його повинна мати собі протилежну рівну, паралельну і назад спрямовану грань. Наприклад, у кубі, квадратній призмі C є, в тетраедрі –

відсутня, тому що кожній грані його відповідає протилежна вершина (рис. 1.13).

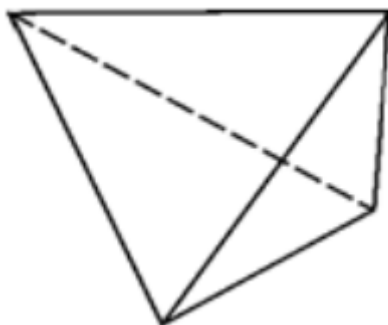


Рис. 1.13. Тетраедр немає центру симетрії; кожній грані його відповідає протилежна вершина

Для визначення наявності центру симетрії є наступний практичний прийом. Кристал кладемо гранню на якусь горизонтальну поверхню (наприклад, на стіл), і якщо їй відповідає протилежна рівна, паралельна та назад спрямована грань, то центр симетрії можливий; якщо на кристалі хоча б одна з граней немає собі протилежну рівну, паралельну і назад спрямовану грань, то центр симетрії відсутня.

Таким чином, кожен кристалічний багатогранник може містити один з елементів симетрії або сукупність кількох елементів симетрії. Поєднання кількох елементів симетрії в кристалі може бути довільним і підпорядковуватися строгій геометричній закономірності.

Сукупність всіх наявних елементів симетрії прийнято записувати в рядок, без будь-яких розділових знаків між ними, при цьому спочатку вказуються осі симетрії, починаючи з вищого порядку, потім площини симетрії і на останньому місці, якщо є, записується центр симетрії. Наприклад, елементи симетрії куба: $3L44L36L29PC$; тетрагональні призми: $L44L25PC$; гексагональної призми: $L66L27PC$.

1.5. Комірки кристалічних решіток

1.5.1. Види елементарних комірок

Елементарна комірка, в якій вузли знаходяться лише на вершинах, називається примітивною. Кожен із цих восьми вузлів належить одночасно восьми сусіднім коміркам, тому на примітивну комірку припадає $8 \cdot (1/8) = 1$ вузол (комірка а на рис.1.14). Якщо елементарна комірка містить кілька вузлів, вона називається непримітивною чи складною.

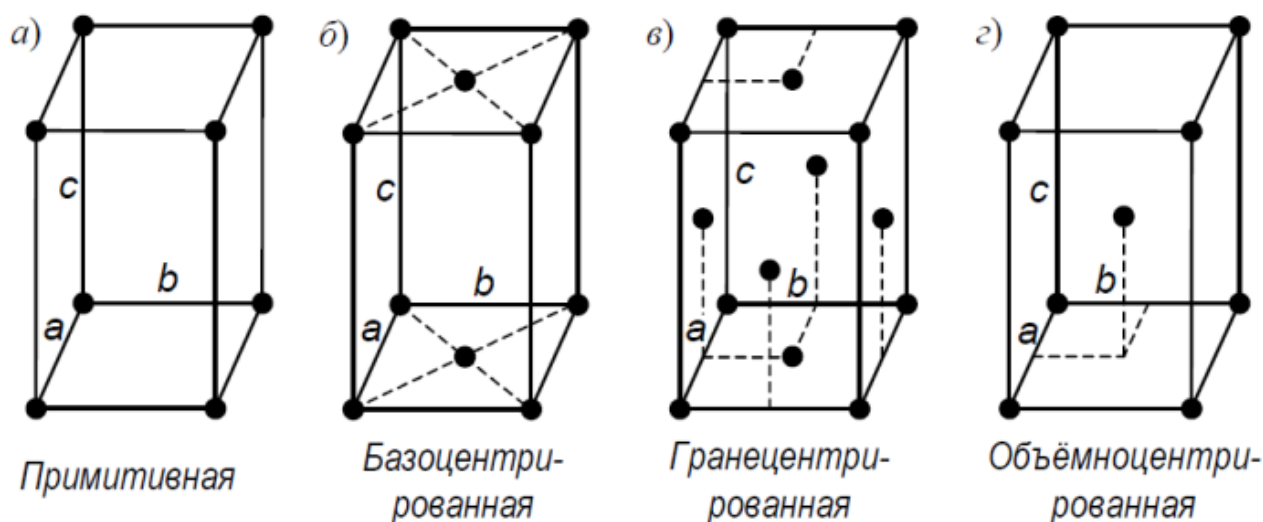
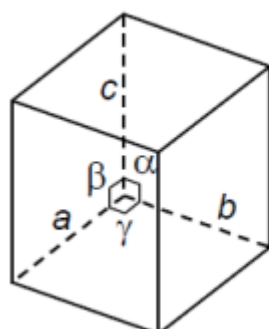


Рис. 1.14. Види елементарних комірок кристалічних решіток

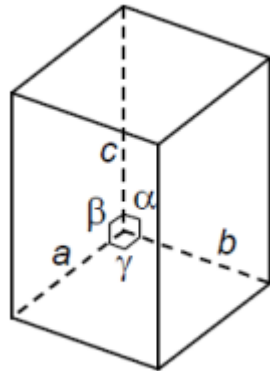
Елементарні комірки відрізняються також формою. Залежно від форми елементарного паралелепіпеда кристалічні структури поділяються на сім систем, які називаються сингоніями. До них відносяться: 1) кубічна сингонія - елементарна комірка є кубом (рис.1.15); Для цієї сингонії можливі три типи решіток Браве: П, ГЦ, ОЦ.



$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Рис.1.15. Кубічна сингонія кристалічних решіток

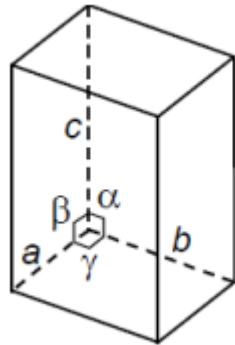
2) тетрагональна, що є кубом, розтягнутим уздовж вісі c (рис. 1.16); Тут можливі типи решіток Браве: П, ОЦ.



$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Рис. 1.16. Тетрагональна сингонія кристалічних ґрат

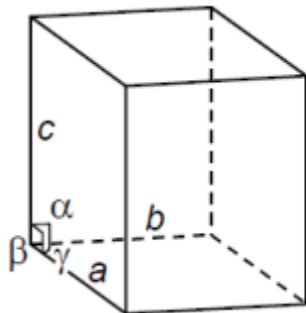
3) ромбічна або орторомбічна це прямокутний паралелепіпед з різними довжинами сторін (рис. 1.17); Тут можливі типи решіток Браве: П, БЦ, ГЦ, ОЦ.



$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Рис. 1.17. Ромбічна або орторомбічна сингонія кристалічних ґрат

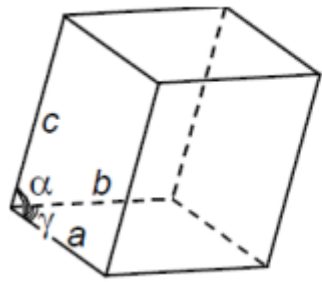
4) моноклінна - паралелепіпед з одним відмінним від прямого кутом (рис. 1.18). Можливі типи ґрат Браве: П, БЦ



$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta \neq \gamma = 90^\circ$$

Рис. 1.18. Моноклінна сингонія кристалічних решіток

5) триклінна - довільний паралелепіпед (рис. 1.19). Можливий 1 тип решітки Браве: П

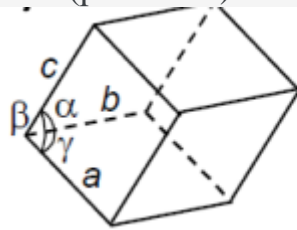


$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

Рис. 1.19. Триклінна сингонія кристалічної решітки б) тригональна

б) Ромбоєдрична (тригональна) - куб, розтягнутий вздовж просторової діагоналі (рис. 1.20). Можливий 1 тип ґрат Браве: П.

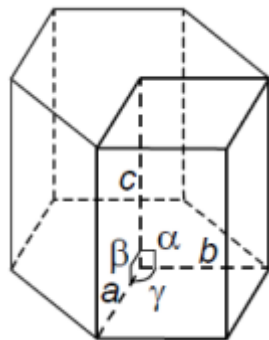


$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

Рис. 1.20. Ромбоєдрична сингонія кристалічної решітки

7) Гексагональна – правильна шестигранна призма (рис. 1.21). Можливий тип ґрати Браве: П.



$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ;$$

$$\gamma = 120^\circ$$

Рис. 1.21. Гексагональна сингонія кристалічних решіток

Більше типів решіток Браве немає. У кристалах можливі лише 7 сингоній і 14 типів решіток Браве!

Симетрію гексагональної решітки, що має поворотну вісь 6 порядку, відображає комірка у формі правильної шестигранної призми. Однак така комірка не має властивості трансляційності: при переносі вздовж ребра на один параметр призма не збігається сама з собою.

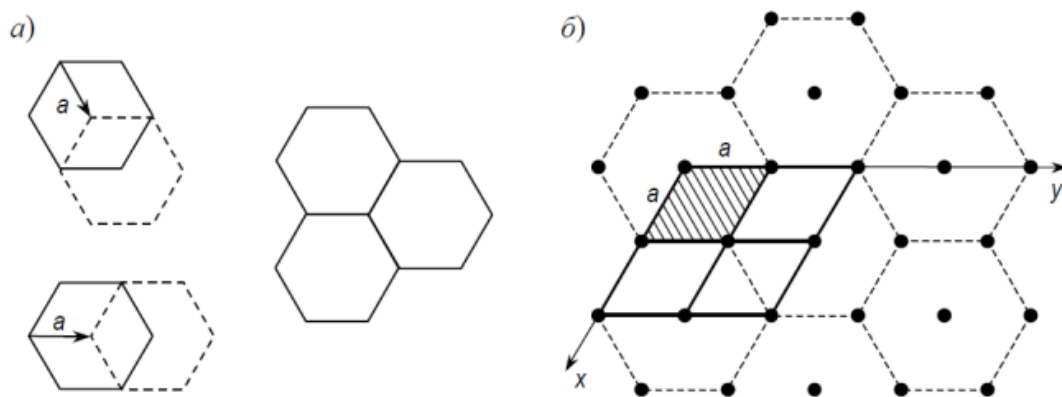


Рис.1.22. Особливості гексагональної сингонії кристалічних решіток

Тому як елементарну комірку вибирають одну третину від повної шестигранної призми; така комірка при паралельному перенесенні вздовж координатних осей повністю відтворює просторову решітку кристала.

1.6. Системи кристалографічних вісей

При вивченні кристалічних тіл часто доводиться визначати положення вузлів, граней, ребер (напрямів) кристала. Для цього в кристалографії, як і в геометрії, користуються системами координатних вісей.

Напрямки в кристалі, паралельні його ребрам прийняті координатні вісі і називаються кристалографічними вісями. Позначення вісей наступні: перша вісь I (X), друга вісь II (Y), третя вісь III (Z); чи x_1 , x_2 , x_3 . Напрями кристалографічних вісей збігаються з рядами просторових решіток або паралельні їм. У зв'язку з цим у літературі нерідко кристалографічні вісі I, II, III ототожнюють з вісьовими відрізками a , b , c з відповідними проміжками ряду просторової решітки.

Залежно від симетрії кристалів використовуються такі системи кристалографічних вісей (КВ).

1.6.1. Прямокутна (ортогональна) тривісна система КВ.

Застосовується в кристалах кубічної, тетрагональної та ромбічної сингоній. Осьові відрізки a , b , c з кожної сингонії різняться, як це показано на рис.1.23.

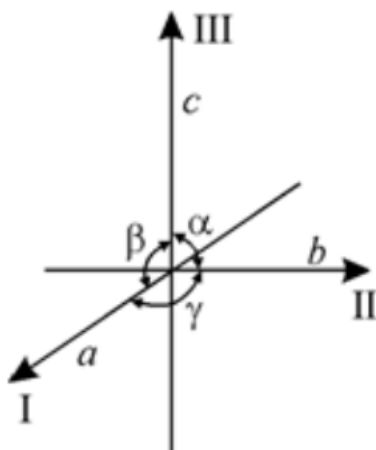


Рис. 1.23. Прямокутна система КВ: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

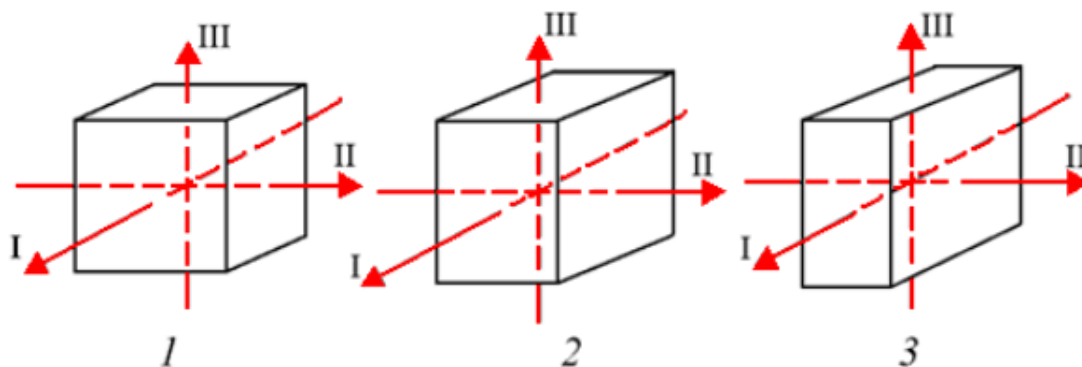


Рис. 1.24. Встановлення кристалів у прямокутній системі КВ: 1 – кубічна сингонія ($a = b = c$); 2 – тетрагональна сингонія ($a = b \neq c$); 3 – ромбічна сингонія ($a \neq b \neq c$)

1.6.2. Чотирьохвісна система КВ.

Використовується для встановлення кристалів гексагональної та тригональної сингоній. Четверта вісь (IV) – вертикальна, три інші – знаходяться у площині, перпендикулярній IV осі, позитивні кінці їх чергуються між собою через 120° , при цьому негативний кінець III вісі спрямований до спостерігача (рис.1.25)

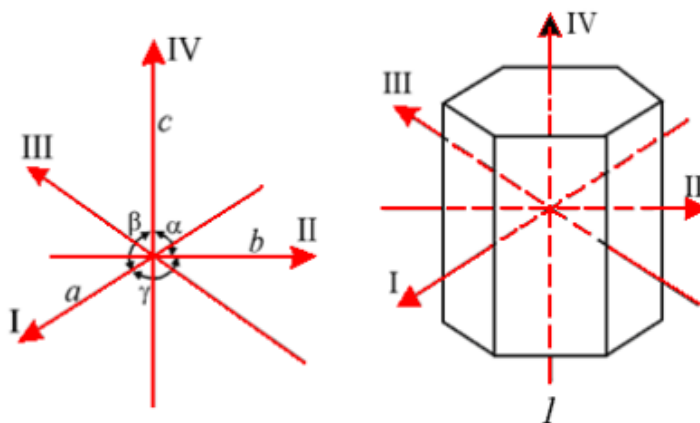


Рис. 1.25. Чотирьохвісна система КВ: $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$; $a = b \neq c$ і встановлення кристалів гексагональної сингонії в чотиривісній системі КВ

Для кристалів моноклінної та триклінної сингонії застосовують похилу та косокутну системи КВ, відповідно. Вісі КВ проводяться паралельно найрозвиненішим ребрам кристала.

1.7. Індування вузлів, площин та напрямків у кристалі

1.7.1. Індеси Міллера

Введення системи кристалографічних вісей відкриває можливості визначення основних елементів кристала. Вузли, напрями та площини в кристалічній решітці стає можливим позначати трійками чисел. Систему індексації кристалів розробив Міллер, іменем якого названо індеси вузлів, напрямів і площин у кристалах.

Індеси вузла є його координати, виражені в одиницях параметрів ґрат. Індеси вузлів укладають у подвійні квадратні дужки $[[100]]$ (рис.1.26) або наводять без дужок.

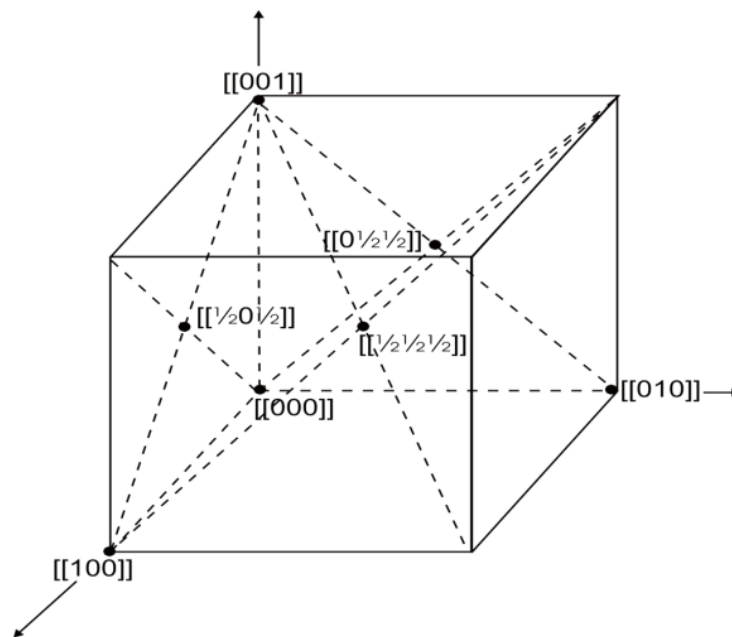


Рис. 1.26. Індеси вузлів у кубічних решітках

За індеси напрямку, що проходить через початок координат, приймають координати першого вузла, що лежить на цьому напрямі. Індеси напрямів укладають у одинарні квадратні дужки, $[111]$. Якщо якийсь із індесів негативний, то мінус ставлять над цифрою $[1\bar{1}1]$. Часто зручніше буває взяти будь-яку точку, що лежить на напрямі, і привести її координати до трьох найменших цілих чисел.

Індекси напрямку завжди є три взаємно простих цілих числа: пишуть не $\left[01\frac{1}{2}\right]$, а $[021]$. Не $[224]$, а $[112]$.

Якщо напрямок не проходить через нульовий вузол, то потрібно перенести (паралельним перенесенням) або початок координат так, щоб воно лежало на напрямку, або сам напрямок так, щоб воно проходило через початок координат (рис.1.27).

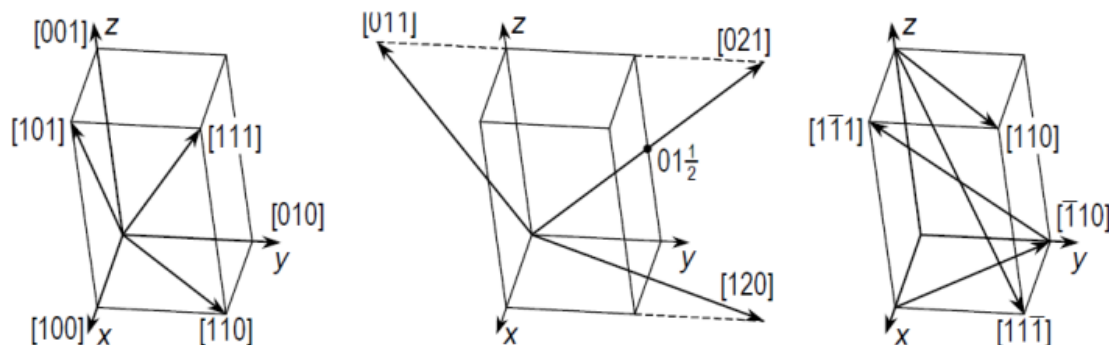


Рис.1.27. Індекси напрямів у тетрагональній решітці

Індекссами площини, що не проходить через початок координат, є числа, обернені до величин відрізків, які площину відсікає на координатних вісях.

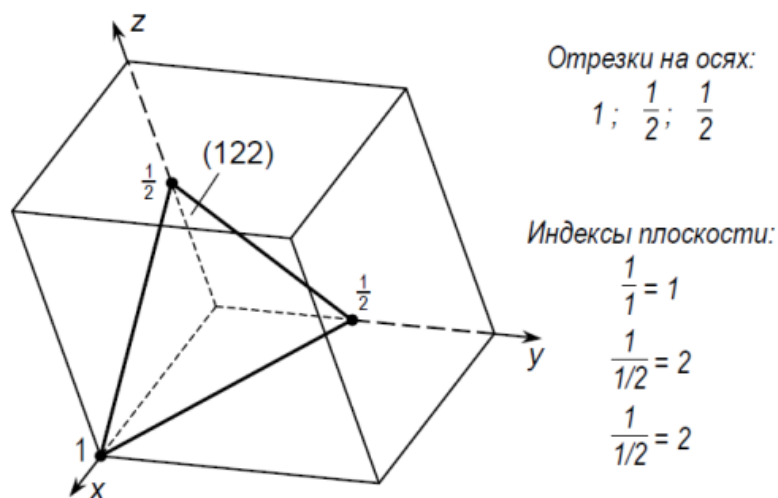


Рис. 1.28. Індекси площини в тетрагональній решітці

Індекси площини укладають у круглі дужки. Якщо площина паралельна до однієї з осей («перетинається в нескінченності»), то її індекс дорівнює нулю ($1/\infty = 0$).

Якщо початок координат лежить у площині, то або саму площину, або нульовий вузол необхідно перенести так, щоб вона не проходила через нього. Як і для напрямів, індекси площин завжди призводять до трьох найменшим (взаємно простим) цілим числам.

На рис. 1.29 наведено спосіб індексації деяких площин кубічних решіток. Індекси площини куба (100) відповідають правилу зворотних величин, що відсікаються на

відповідних КВ. Індeksi площини отримані в результаті перенесення КВ на одну трансляцію по осі x . Так само отримані і індeksi площин октаедра (111) і $(\bar{1}\bar{1}1)$.

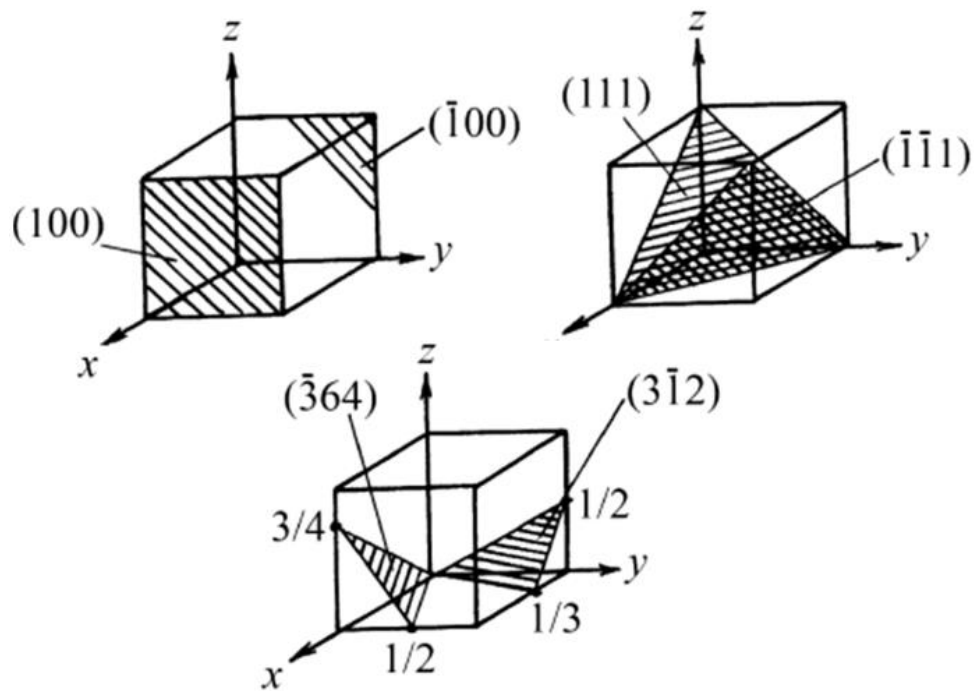


Рис.1.29. Індeksi деяких площин куба

Для довільної площини, що відсікає по осях Y та Z відрізки $\frac{1}{2}$ та $\frac{3}{4}$ постійної решітки, а початок координат лежить у самій площині, здійснюємо перенесення КВ на одну постійну решітки по осі X . Тоді зворотні величини відрізків, що відсікаються, запишемо у вигляді: $-1; 2; \frac{4}{3}$.

Індeksi Міллера цієї площини: $(\bar{3}64)$

На рис. 1.30 наведено індeksi Міллера основних кристалографічних площин кубічного кристала.

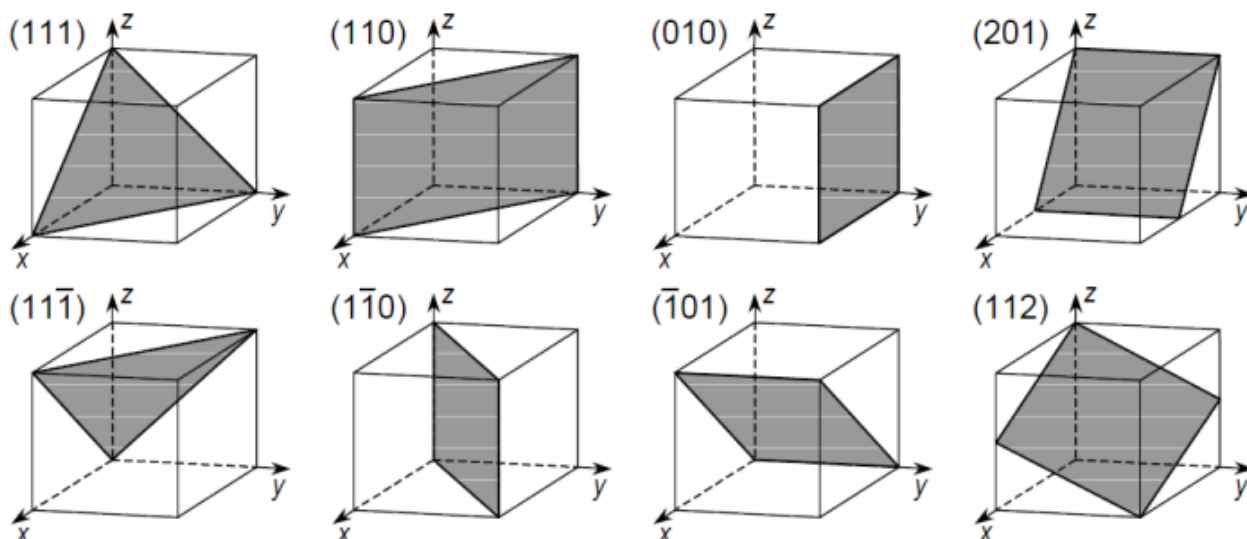


Рис.1.30. Індекси основних площин кубічного кристала

При переміщенні початку координат на інший вузол решітки індекси решітки вузлів змінюються, а індекси напрямів і площин залишаються незмінними. Інакше кажучи, трійка індексів задає не одну пряму чи площину, а все безліч паралельних прямих (площин) кристала. Деякі непаралельні площини та напрямки є кристалологічно еквівалентними. Наприклад, усі ребра елементарної комірки кубічної сингонії фізично ідентичні, хоча мають різні індекси: $[100]$, $[100]$, $[010]$ і $[001]$; те саме можна сказати і про її грані (100) , (010) і (001) .

Сукупність кристалографічно еквівалентних напрямів чи площин називається сімейством. Індекси сімейства напрямків укладають у кутові дужки: $\langle 100 \rangle$, а сімейства площин - у фігурні: $\{100\}$. Усі напрями (площини), які входять у сімейство, можуть бути переведені один в другий шляхом симетричних перетворень, притаманних цій решітці. Для кубічних кристалів до сімейства входять всі напрямки (площини), які можна отримати з даного набору індексів шляхом їх перестановки чи заміни знаків.

Приклад: для кубічної сингонії символ $\{100\}$ відповідає площинам (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$, пов'язаних між собою перетвореннями симетрії.

Множник повторюваності – число площин у кристалічній формі.

Наприклад, у кубічній сингонії для

$\{100\} \quad p = 6, \quad \{110\} \quad p = 12,$
 $\{111\} \quad p = 8, \quad \{123\} \quad p = 24.$

1.7.2. Особливості індексування у гексагональній сингонії

У кристалах гексагональної сингонії поряд з індексами Міллера використовується й інша система позначень площин та напрямків – індекси Міллера – Браве. У цьому випадку вводять четверту, додаткову координатну вісь t (рис.1.31), що лежить у площині xOy і спрямовану під кутом 120° до осей x та y . У гексагональній сингонії будь-яка площина характеризується чотирма індексами $(hkil)$.

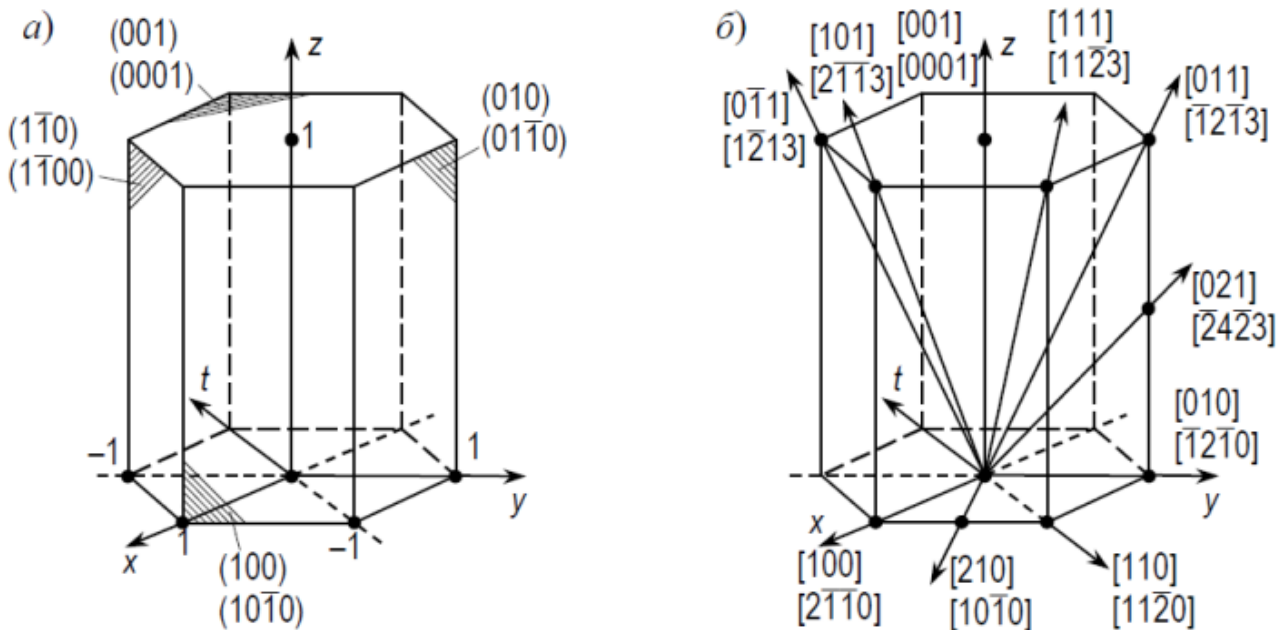


Рис. 1.31. Індекси основних площин та напрямків гексагонального кристала в 3-х та 4-х індексному представленні.

Індекси ж напрямків при переході від 3-індексного запису до 4-х індексного змінюються повністю, і визначати їх за проєкціями вузла, що лежить на напрямку, на чотири координатні осі стає неможливо.

Якщо напрямок має індекси Міллера $[uvw]$ то його індекси Міллера – Браве $[rstn]$ розраховуються за

$$r = 2u - v; \quad s = 2v - u; \quad t = -(u + v); \quad n = 3w.$$

Для зворотного переходу:

$$u = \frac{2r+s}{3}; v = \frac{r+2s}{3}; w = \frac{n}{3}.$$

Як і в площин, індекси напрямку підпорядковуються співвідношенню $r + s + t = 0$.

1.8. Кристалографічна зона.

Кристалографічна зона - сукупність площин кристала, паралельних одному кристалографічному напрямку.

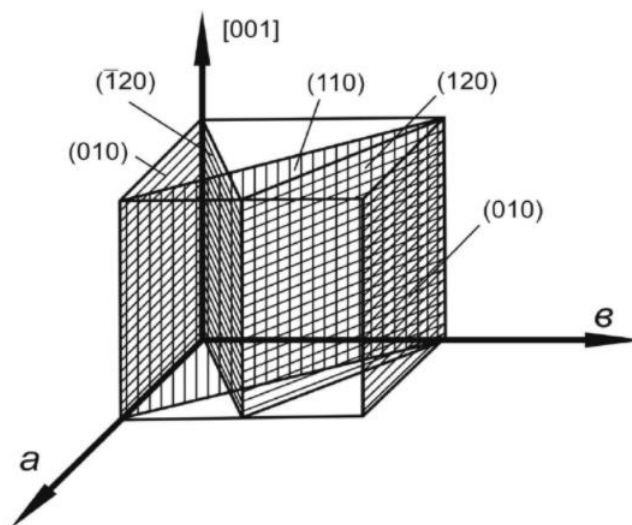


Рис. 1.32 . Напрямок $[001]$ є віссю зони площин (010) , (120) , (110) , (120) , (010) ,

Вузлова пряма, якою перетинаються всі площини зони, називається віссю зони. Умова паралельності прямої та площини виражається рівнянням

$$uh + vk + wl = 0 \quad (3)$$

яке називається рівнянням зони та умовою зональності використовуючи рівняння зони (3) можна визначити: •індекси осі зони $[uvw]$, якщо відомі індекси 2-х площин, що належать цій зоні; •індекси площини, що належить 2-м зонам, якщо відомі осі цих зон; • ін. варіанти

Приклад 1: Знайти індекси (hkl) площини, що належить одночасно 2-м зонам $[u_1v_1w_1]$ та $[u_2v_2w_2]$.

$$\vec{n}_{hkl} \perp \begin{cases} \vec{l}_1 [u_1, v_1, w_1] \\ \vec{l}_2 [u_2, v_2, w_2] \end{cases} \quad (4)$$

Визначимо вектор, скориставшись поняттям векторного добутку:

$$\vec{c} = [\vec{a} \times \vec{b}]$$

$$\vec{n} = [\vec{l}_1 \times \vec{l}_2] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} =$$

$$\vec{i}(v_1 w_2 - w_1 v_2) - \vec{j}(u_1 w_2 - w_1 u_2) + \vec{k}(u_1 v_2 - v_1 u_2)$$

h
 k
 l

Завдання вирішено, знайдені індекси площини.

Практично в кристалографії використовують прийом:

(6)

u_1	v_1	w_1	u_1	v_1	w_1	$\begin{matrix} + & - \\ \swarrow & \searrow \end{matrix}$
u_2	v_2	w_2	u_2	v_2	w_2	

$$h : k : l = (v_1 w_2 - w_1 v_2) : (w_1 u_2 - u_1 w_2) : (u_1 v_2 - v_1 u_2)$$

Приклад 2: Знайти індекси (hkl) площини, що належить одночасно двом зонам [100] і [110].

Рішення

$$\begin{array}{l} 1 \\ 1 \end{array} \left| \begin{array}{cccc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right| \begin{array}{l} 0 \\ 0 \end{array}$$

$$h : k : l = 0 : 0 : 1 \quad (hkl) = (001)$$

Приклад 3: Знайти індекси прямої перетину 2-х площин ($h_1 k_1 l_1$) та ($h_2 k_2 l_2$), тобто знайти індекси осі зони, що містить ці площини.

Рішення.

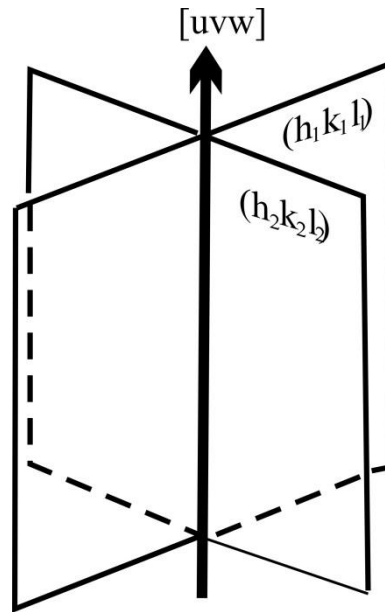


Рис. 1.33. Дві площини з індексами $(h_1k_1l_1)$ та $(h_2k_2l_2)$ належать зоні з індексами $[uvw]$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{n}_1 [h_1k_1l_1] \perp (h_1k_1l_1) \\ \vec{n}_2 [h_2k_2l_2] \perp (h_2k_2l_2) \end{array} \right\} \rightarrow \begin{cases} \vec{n}_1 \perp \vec{l} \\ \vec{n}_2 \perp \vec{l} \end{cases}$$

$$\begin{array}{l} (\vec{n}_1, \vec{l}) = 0 \\ (\vec{n}_2, \vec{l}) = 0 \end{array} \left\{ \begin{array}{l} h_1u + k_1v + l_1w = 0 \\ h_2u + k_2v + l_2w = 0 \end{array} \right. \longrightarrow \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix}$$

$$(7) \quad \begin{array}{c|ccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \end{array} \quad \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagup \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} \quad \begin{array}{c} l_1 \\ l_2 \end{array}$$

$$u : v : w = (k_1l_2 - l_1k_2) : (l_1h_2 - h_1l_2) : (h_1k_2 - k_1h_2)$$

Приклад 4: Знайти індекси прямого перетину 2-х площин (130) та (111) .

Рішення.

$$\begin{array}{c|ccc|c} 1 & 3 & 0 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

$$u : v : w = 3 : \bar{1} : 2$$

$$\vec{l} = [3 \bar{1} 2]$$

Приклад 5: Знайти індекси прямого перетину 2-х площин (100) та (211) .

Рішення.

$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 \end{array}$$

$$u : v : w = 0 : \bar{1} : 1$$

$$\vec{l} = [0\bar{1}1]$$

1.9. Координаційне число (КЧ)

Число найближчих до цього атома (іону) сусідніх атомів (іонів) у структурі кристала незалежно від того, є вони атомами того ж сорту, що і центральний, чи іншого.

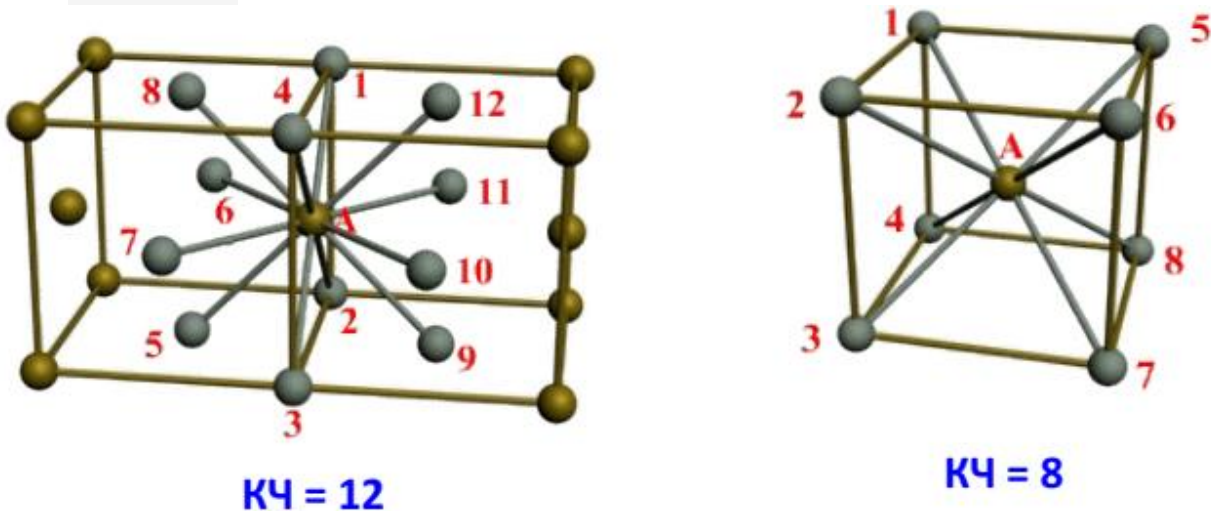


Рис.1.34. Визначення координаційного числа комірки Браве

1.10. Зображення кристалів

1.10.1. Сферичні проєкції

Працюючи з кристалами основними завданнями є визначення кутів між площинами, напрямками, кутів поворотів. Сам кристал також має власну орієнтацію щодо зовнішніх систем координат, якщо він є складовим елементом тіла, конструкції та ін. Тому важливим завданням є зображення кристала на площині, з видимими параметрами його об'ємної фігури. У кристалографії при цьому користуються в одному випадку методом прямого зображення (образне або перспективне зображення), як це робиться в геометрії, у вигляді ортогональних або аксонометричних проєкцій. В іншому випадку користуються графічним методом. У цьому випадку основні параметри

кристала (площини, напрями, елементи симетрії) проектується на поверхню сфери (сферична проекція), на екваторіальну площину чи площину дотичну до північного полюса сфери. Проекція на екваторіальну площину називається стереографічною або гномостереографічною, залежно від розташування точки спостереження. Проекція на дотичну площину називається гномонічною. Образне зображення ускладнює оцінку кутів між гранями та напрямками (ребрами). Графічні проекції дозволяють це зробити із досить високою точністю.

Для графічного зображення кристал представляється у вигляді прямого комплексу, тобто у вигляді набору кристалографічних площин (рис. 1.35 а,в) або у вигляді полярного або зворотного комплексу (рис. 1.35 с). В цьому випадку кожна грань або кристалографічна площина замінюється на нормаль (поліус) до неї, що проектується на вибрану сферу проекцій.

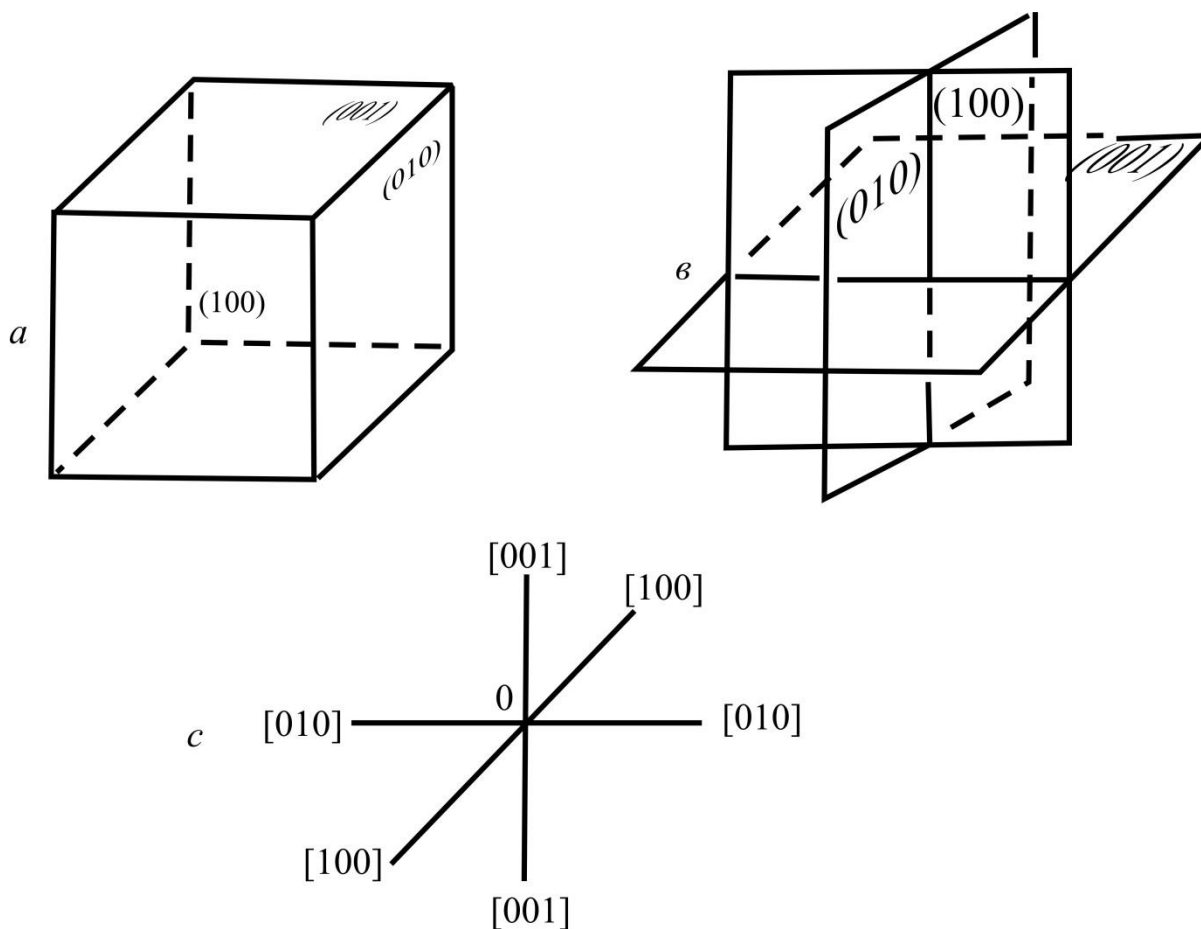


Рис.1.35. Кристал в (а)-прямому та (б)- кристалічному та (с)-полярному представленні.

Точку перетину полюсів кристалографічних площин приймемо за початок сферичної системи координат (точка 0). Вихід нормалі на сфері є точкою. Сукупність точок виходу нормалей до площин (граней) кристала фактично зображують кристал, задаючи орієнтацію його площин у вибраній системі координат. Таке уявлення кристала називається його сферичною проекцією. Сферичну проекцію кристала будують іншим шляхом. Слід зобразити сліди перетину рис. 1.36 у сфері. Вони матимуть вигляд великих кіл, на перетині яких перебувають виходи полюсів інших площин (рис.1.36).

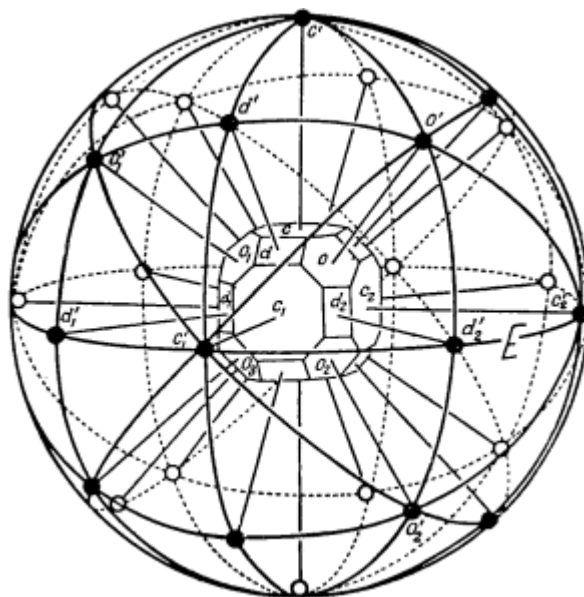


Рис.1.36. Сферична проекція кристала: ● –виходи полюсів на передню півсферу, а ○ -на задню півсферу

Положення точки на сфері одиничного радіусу визначається двома сферичними координатами, довготою і широтою (рис.1.37). У рентгенографії ці кути позначаються буквами α (азимутальний кут) та β – меридіанний кут.

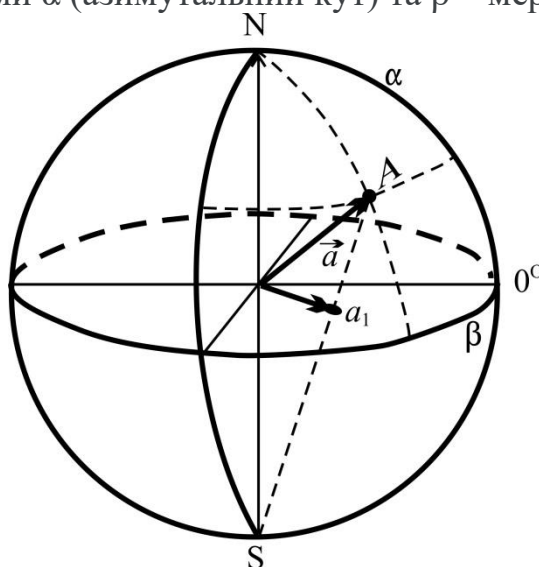


Рис.1.37. Сферична проекція кінця вектора (точка A) та його стереографічна проекція (точка)

Сферична проекція кристала зручна для демонстрації, але не практична щодо розрахунків кутів між площинами і напрямками. Тому вдаються до методу проектування кристала (його елементів симетрії та граней) на деяку площину. У кристалографії найбільш поширений стереографічний метод проектування, у якому всі елементи кристала проектуються на екваторіальну площину сфери проекцій.

Точку зору розташовують в одному з полюсів сфери проекцій: на «південному полюсі» S, якщо сферична проекція точки перебуває у північній півкулі (рис. 1.38), тобто $0^\circ < \alpha < 90^\circ$, і «північному полюсі» N, якщо точка або напрямок проектується у південній півкулі, тобто $90^\circ < \alpha < 180^\circ$.

Вибраний полюс (наприклад, точку S) з'єднують променем SA зі сферичною проекцією напрямку - точкою A. Тоді точка перетину променя SA з екваторіальною площиною (площиною проекцій) буде стереографічною проекцією даного напрямку (вектора).

Неважко переконатися в тому, що вертикальний вектор SON потрапить при стереографічному проектуванні в центр кола проекцій, горизонтальні вектори будуть лежати в площині креслення, тобто будуть діаметрами кола, а похилі (наприклад, вектор) - виявляться всередині нього.

Для побудови стереографічної проекції площини всі точки її сферичної проекції (кола ANB) з'єднують променями зору з полюсами S (для дуги ANB) (рис. 1.38а) та N (для дуги ASB) відповідно. Результатом перетину цих променів з екваторіальною площиною (площиною проекцій) будуть дві симетричні дуги великих кіл, тобто дуги, що спираються на діаметр (рис. 1.38в).

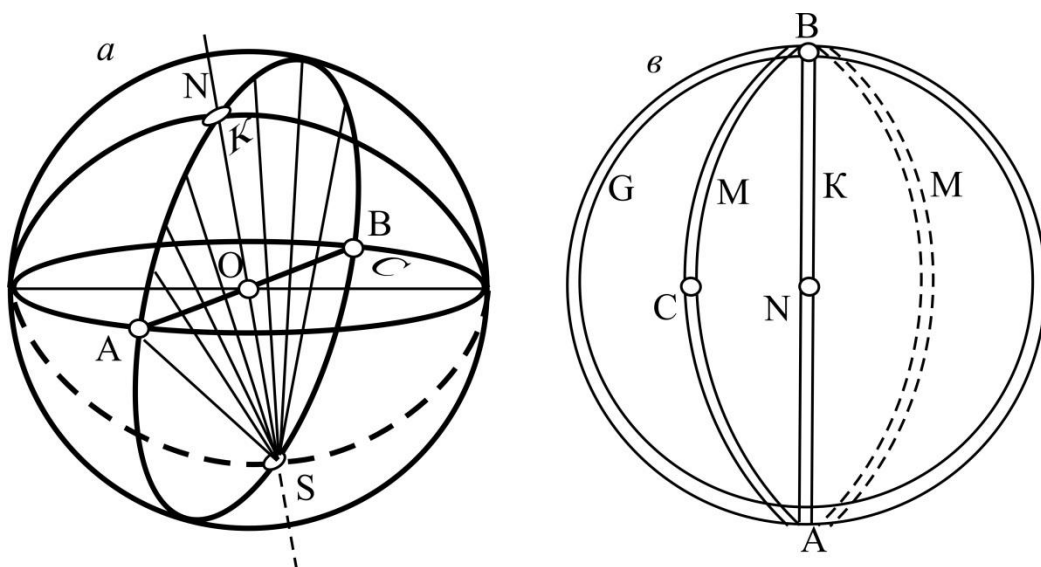


Рис 1.38. Сферичні проекції площин сфери проекцій

На стереограмі залишається лише одна дуга великого кола. Таким чином, стереографічною проекцією площини, що проходить через центр сфери проекцій (O), буде дуга великого кола. Стереографічна проекція горизонтальної площини збігається з колом основного кола проекцій. При збільшенні кута нахилу площини крутість дуг буде зменшуватися, і у випадку вертикальної площини отримаємо діаметр кола проекцій.

Щоб проекції дзеркальних площин симетрії графічно відрізнялися на стереограмі від проекцій осей, площини позначаються подвійними (або жирними) лініями. Проеціювати грані кристала, тобто площини, як дуги великих кіл незручно, тому що стереограма виявиться в цьому випадку перевантаженою, особливо для багатогранних кристалів, і недостатньо інформативною за рахунок перекривання дуг верхніх та нижніх граней та елементів симетрії кристала.

Тому грані кристала зазвичай замінюють нормаллями, опущеними із центру кристала. Проекції граней носять назву гномостереографічних проекцій (від грецьк. *усорсов* (гномон) — перпендикуляр), які накладаються на стереографічні проекції елементів симетрії кристалів. Таке проектування граней, засноване на законі сталості кутів, дозволяє зафіксувати як положення кожної грані (її нормалі) сферичними координатами α і β , так і розташування граней кристала щодо його елементів симетрії.

Дійсно, при зародженні та зростанні кристала грані пересуваються паралельно самим собі. При цьому змінюється розмір грані, що росте. Постійним при зростанні залишається лише напрямок її зростання, тобто напрямок нормалі до грані. Нормаль до грані та фіксує її при побудові гномостереографічної проекції.

У результаті гномостереографічною проекцією кожної грані виявиться точка. Однак для того, щоб відрізнити грані верхньої півсфери від граней нижньої півсфери, верхні грані, для яких $\alpha < 90^\circ$, прийнято зображати кружками (о), нижні ж, з $\alpha > 90^\circ$, відповідно хрестиками (х). При цьому горизонтальні грані (нормалі до них вертикальні!) проектується в центр кола проекцій ($\alpha = 0^\circ$ і 180°), вертикальні грані (нормалі до них горизонтальні!) - на коло, проекції похилих граней розташовуються всередині кола. Незавжно зрозуміти, що чим грань ближче до вертикальної вісі ($\alpha > 90^\circ$), тим точка (проекція грані) виявляється ближче до кола; і навпаки, чим границя більш полого ($\alpha > 0^\circ$), тим її проекція виявиться ближче до центру кола.

Слід зазначити, що вертикальні грані (вони верхні, ні нижні!) позначаються лише кружками. Крім того, якщо проекції верхньої та нижньої граней опиняються в одній точці, то кожна з них позначається відповідним значком: верхня – кружком, нижня – хрестиком. Таким чином, проектування кристалів проводиться у два етапи: спочатку будується стереографічна проекція його елементів симетрії, а потім на неї наносяться гномостереографічні проекції граней.

1.10.2. Стереографічні сітки

Для побудови стереографічних проекцій елементів симетрії кристала і гномостереографічних проекцій граней для вимірювання кутів між ними, кутових відстаней у їх розташуванні, розроблені спеціальні трафарети – сітки, які дозволяють вирішувати зазначені завдання графічно, без додаткових розрахунків.

Найпростішу полярну сітку можна отримати, спроектувавши стереографічним методом градусну мережу сфери (рис. 1.39а) на екваторіальну площину при точці зору в одному з полюсів (рис.1.39б). Меридіани зображені прямими лініями, що радіально розходяться від центру проєкції, паралелі – концентричними колами, північний полюс N – у центрі проєкції. Проєкція екватора збігається з колом, що обмежує коло проєкції. Координата β (довгота) відраховується від проєкції одного з меридіанів (наприклад, АВ), прийнятого за нульовий ($\beta = 0$), за годинниковою стрілкою по колу.

Полярна відстань p (широта) відраховується вздовж проєкції меридіана від центру сітки (NS) (якщо точка знаходиться в інтервалі $0 < \alpha < 90^\circ$) і потім у зворотному напрямку - від кола до центру (якщо $90^\circ < \alpha < 180^\circ$).

Ця сітка має ім'я свого творця, проф. А. К. Болдирєва. Вона широко використовується в текстурному аналізі для побудови полюсних фігур, визначення величин координат точки на стереограмі, побудови проєкцій напрямку (наприклад, осі симетрії або нормалі до грані) та ін.

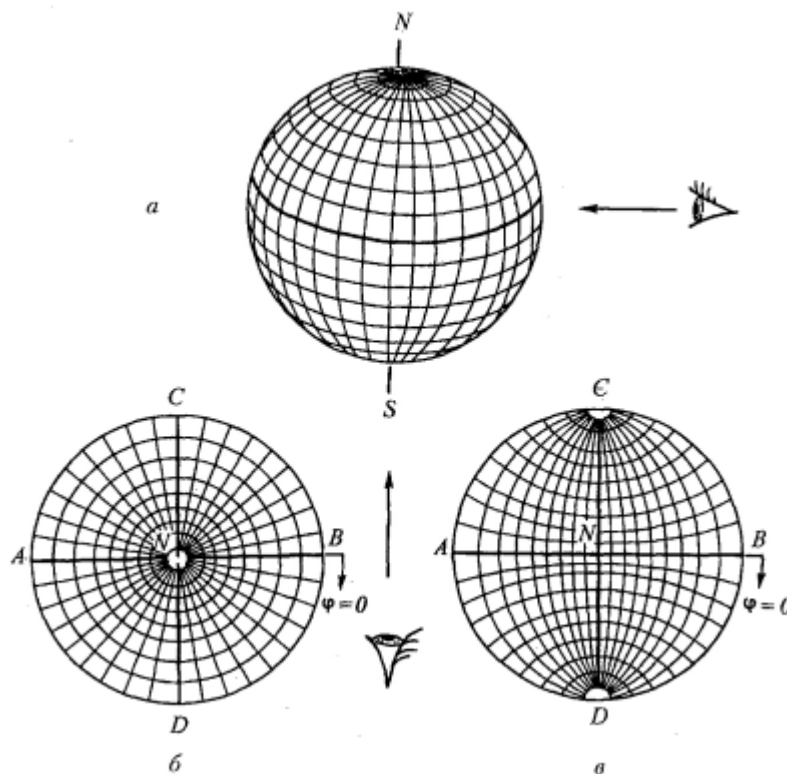


Рис. 1.39. До побудови градусних сіток: а - на сфері з меридіанами та паралелями; б - сітка Болдирєва - проєкція паралелей і меридіанів на екваторіальну площину; в - сітка Вульфа - проєкція градусної сітки на одну з меридіональних площин (прямі лінії - проєкції екватора та одного з меридіанів)

Для вимірювань різних кутових величин кристалів зручно користуватися іншою сіткою, запропонованою Г. В. Вульфом, сіткою Вул'фа (рис. 1.39с), за допомогою якою можна побудувати стереографічні проєкції граней та ребер кристалів.

Основна ідея Г. В. Вульфа також зводилася до побудови стереографічної проєкції спрямування за його координатами α та β . Для цього він скористався стереографічними проєкціями системи меридіональних дуг сфери. Особливість сітки Вульфа полягає в тому, що площиною стереографічної проєкції він вибрав не екваторіальний переріз сфери, як це зробив А. К. Болдирєв, а її меридіональний переріз, що проходить через полюси N і S. Кожна дуга сітки Вульфа (рис. 1.39с) – стереографічна проєкція меридіана – градуйована через 2° . Самі ж дуги також проведені через 2° . Крім того, на сітку нанесена система, що грають допоміжну роль, паралелей, проведених через 2° , а також вертикальний (CD) і горизонтальний (AB) діаметри, що перетинаються в центрі (NS) кола проєкції, якими відраховується координата α — полярна відстань. Інша координата - β - відраховується за контуром сітки за годинниковою стрілкою, який теж проградуйований через 2° . Похибка за такого розбиття становить 1° .

Всі побудови на сітці Вульфа проводяться за умови, що його центр (N) - початок відліку координати $\alpha = 0^\circ$ з невизначеним значенням β і точка перетину горизонтального нульового меридіана з колом сітки ($\beta = 0^\circ$ та $\alpha = 90^\circ$) - початок відліку координати β . Зазвичай сітки Вульфа і Болдирєва мають розмір 200 мм за зовнішнім діаметром.

Сітка Болдирєва

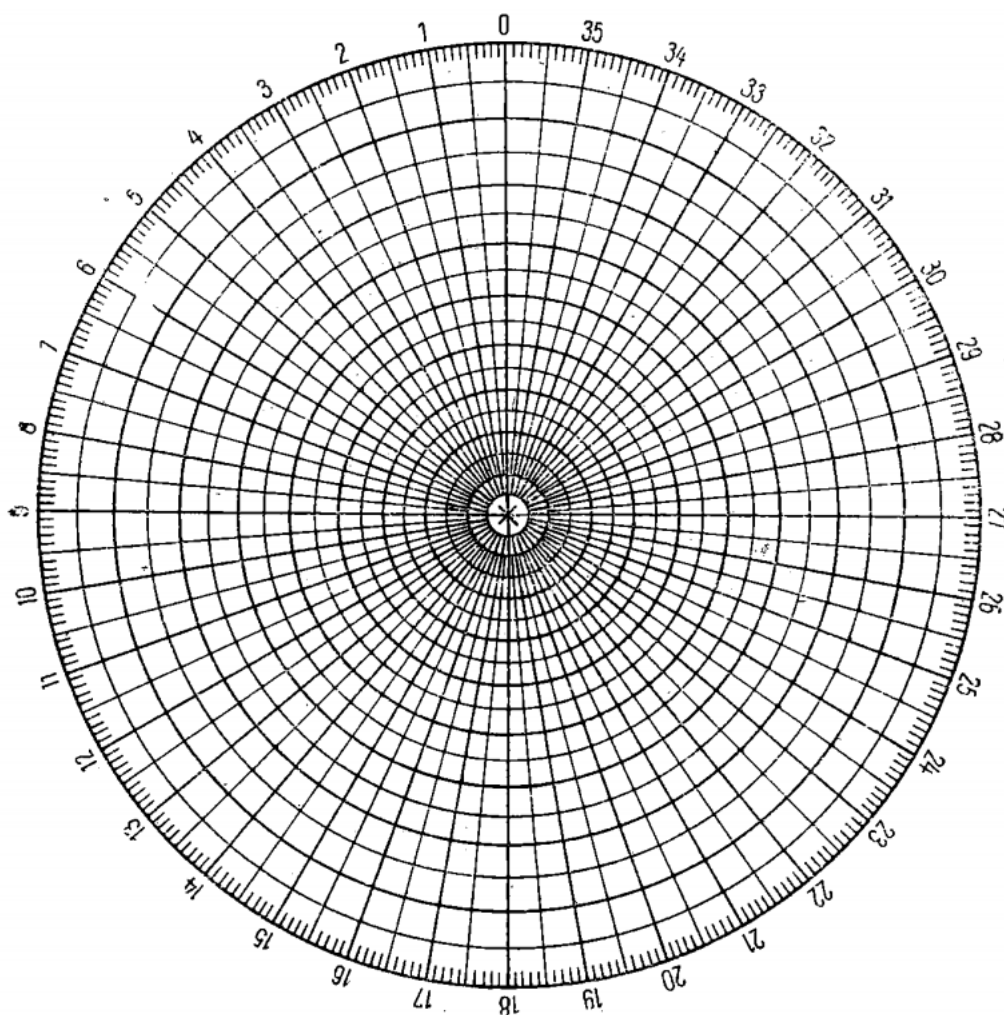


Рис.1.40. Сітка Болдирева

За головну точку прийнято один із полюсів сфери. Концентричні кола в ній (широти) є лініями однакових p , прямі лінії (радіуси кола) — лініями однакових ϕ .

За початковий меридіан приймається радіус, що йде від центру проєкції праворуч. Точки, що лежать на початковому меридіані, мають координату

$0 < p < 90^\circ$. Центру сітки відповідає координата $p = 0^\circ$. Усі точки кола проєкцій мають $p = 90^\circ$.

За допомогою сітки Болдирева легко і швидко можна знайти будь-яку точку, що відповідає тим чи іншим сферичним координатам, але не можна виміряти кут між будь-якими довільно взятими прямими, проєкціями яких є точки. Це важливе для кристалографії завдання вирішується за допомогою сітки Вульфа.

Сітка Вульфа будується аналогічно сітці Болдирева, але при проектуванні широтних і меридіональних ліній сфери за очну точку приймається точка

перетину екватора з одним із меридіанів. Віссю проєкцій служить діаметр сфери, на якому лежить очна точка, а площиною проєкцій — центральний переріз сфери, перпендикулярний до вісі проєкцій. Права половина екватора сітки Вульфа відповідає початковому меридіану сітки Болдирєва.

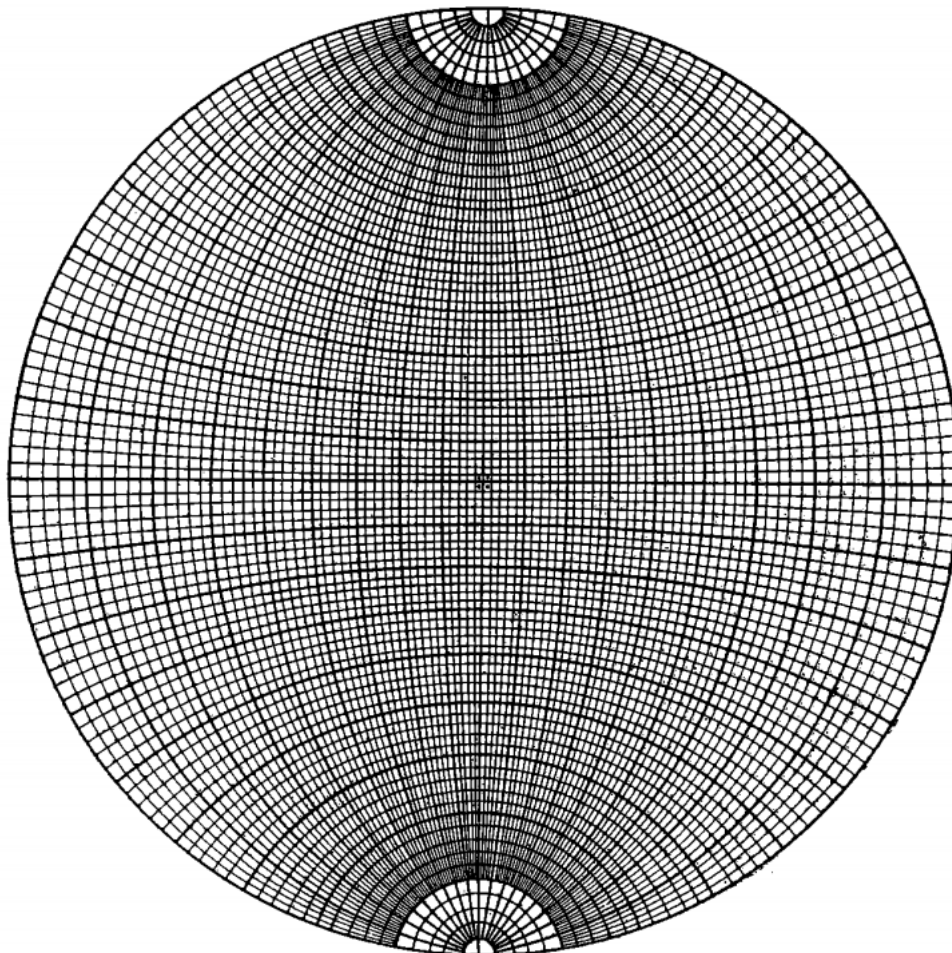


Рис.1.41. Сітка Вульфа

Для зручності відліків меридіани та паралелі які відповідають на сітках 10, 20, 30° і т. д., проведені товстими лініями.

Кожна з описаних сіток має свої переваги, але сітка Вульфа для вирішення кристалографічних завдань більш універсальна, ніж сітка Болдирєва.

Е. Флінтом запропонована сітка, складена з половинок сітки Болдирєва та сітки Вульфа (Рис. 1.42). У кристалографічну практику стереографічні сітки було введено Є. З. Федоровим. Їм використовувалася, крім того, складна сітка, що складається з двох екваторіальних та однієї центральної. На рисунках зображені сітки зменшеного розміра.

Для роботи виготовляються сітки з радіусом 10 см

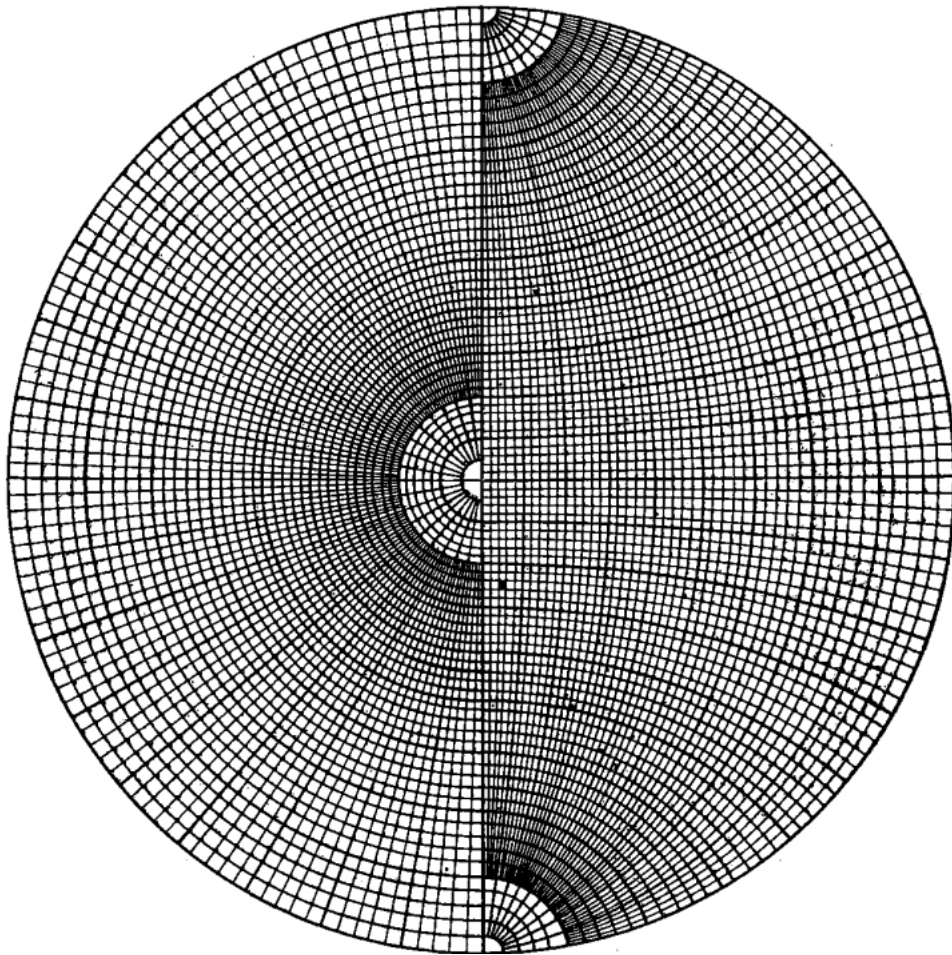


Рис.1.42 . Сітка Флінта

1.10.3. Побудова стереографічних проєкцій прямих та площин за сферичними координатами за допомогою стереографічних сіток

Робота виконується з максимально можливою точністю. На кальці ставиться точка в центрі сітки. Потім проводиться коло, що обмежує коло проєкцій. На великому колі наносимо короткі рисочки на вертикальному і горизонтальному діаметрах.

Користуватися голкою для закріплення кальки на сітці не слід, тому що в іншому випадку сітка скоро стане непридатною для роботи. Нехай потрібно нанести на кальку стереографічну проєкцію прямої або, що теж саме, гномостереографічну проєкцію площини по сферичним координатам φ і ρ .

Від початкового меридіана по колу проєкцій відраховують кут φ . Потім калька повертається на сітці так, щоб проведена рисочка збіглася з продовженням будь-

якого з радіусів кола. Центр сітки та центр кальки при цьому мають бути поєднані. По радіусу сітки від центру в напрямку рисочки відраховують кут ρ і ставлять точку (P). Вона і буде стереографічною проекцією прямою з координатами ϕ і ρ .

Виконання цього завдання за допомогою сітки Болдирєва аналогічно. Різниця зводиться до того, що на сітці Вульфа є тільки чотири радіуси, за якими відраховуються кути ρ , а на сітці Болдирєва радіусів набагато більше.

Нанесення стереографічних проекцій площин по сферичним координатам ϕ і ρ виконується за допомогою сітки Вульфа простіше, ніж за допомогою сітки Болдирєва. Сферичні координати характеризують положення перпендикуляра до площини. Описаним вище способом отримують його стереографічну проекцію. Не зміщуючи зазначеного на кальці центру з центру сітки Вульфа, калькують так, щоб проекція перпендикуляра (P) розполюгалась на горизонтальному діаметрі.

Від проекції перпендикуляра відраховують за діаметром у напрямку до центру і за нього 90° і ставлять точку (T), через цю точку проводять меридіан, який і буде стереографічною проекцією площини з координатами ϕ і ρ .

Читання сферичних координат перпендикуляра до площини* його проекції за допомогою сітки Вульфа проводиться наступним чином. Проекція перпендикуляра до площини ставиться на горизонтальний чи вертикальний діаметр сітки. Від центру до проекції відраховується кут ρ . Но кінці діаметра на кальку наносять риску. Кут, що відповідає дузі кола проекцій від початкового меридіана до заданої риски, буде кутом ρ .

Запитання для повторення

1. Куди ляжуть на сітці проекції грані: а) які мають однакові ϕ , б) з ρ , які відмінні на 180° , в) мають однакові ρ .
2. Завдання: за сферичними координатами, отриманими в результаті вимірювання кристала на гоніометрі, побудувати стереограму та встановити симетрію

№ грани	φ	ρ	№ грани	φ	ρ
1	—	0°	9	129	72
2	0°	90	10	231	72
3	51	90	11	309	72
4	129	90	12	51	56
5	180	90	13	129	56
6	231	90	14	231	56
7	309	90	15	309	56
8	61	72	16	0	62
			17	180	62

1.10.4. Вимірювання кутів між прямими та площинами за допомогою сітки Вульфа

На гномостереографічній проекції граней кристала за допомогою сітки Вульфа можна просто і швидко виміряти кут між будь-якими напрямками та площинами. Стереограма має бути розташована на сітці так, щоб її центр збігався із центром сітки, а стереографічні проекції напрямків, між якими потрібно визначити кут, щоб знаходилися на одному меридіані. Поворотом стереограми на сітці будь-які дві точки можна встановити на один меридіан. Кут між двома напрямками дорівнює кутовий величині дуги меридіана, укладеної між проекціями цих напрямів. Кут між гранями є додатковий. Якщо потрібно визначити кут між перпендикулярами до верхньої та нижньої граней, то проекції цих граней встановлюються на симетричні меридіани, і визначається кутова величина дуги по меридіану від однієї грані до полюса сітки і від цього ж полюса по симетричному меридіану до іншої грані.

Використовуючи стереограму кристала, виконайте таке:

1. Визначити кут між гранями 2 та 3, 8 та 12, 13 та 15, 14 та 17 (129° , 164° , 68° , 43°).
2. Провести зону, полюс якої має координати: $\varphi = 141^\circ$ і $\rho = 34^\circ$.

3. Визначити координати полюса зони 13-17 ($\rho = 32^\circ$, $\rho = 35^\circ$).
4. Визначити кут між вісями зон 9-10 та 7-11 (68°).
5. Визначити кут між гранню 10 та нижньою гранню, проекція якої збіглася з проекцією грані 16 (48°).

1.10.5. Побудова лінійних та гномонічних проекцій за сферичними координатам

Найпростіше це завдання виконується за допомогою спеціальної гномонічної сітки (рис. 1.43). На краях сітки завдано 360 поділів, що відповідають кутам ϕ . Будь-який радіус сітки - це місце точок, що мають однакові ϕ . Кожне коло сітки - місце точок з однаковими ρ . Нанесення на проекцію точки з даними ϕ і ρ проводять так само, як по сітці Болдирева. При відсутності гномонічної сітки кути ϕ відкладаються за допомогою транспортира або стереографічної сітки, а для визначення відстаней проекцій від центру площини проекцій виготовляється лінійка з поділками, розрахованими за формулою:

$$OG = R / \operatorname{tg} \rho.$$

На рис. 1.44 видно, що знаючи кут ρ відстань OG легко визначити графічним шляхом. При цьому кут ρ або $\rho / 2$ відкладається транспортиром або стереографічній сітці. Якщо радіуси гномонічної проекції та стереографічної сітки дорівнюють і кут ρ не перевищує 45° , то OG дорівнює відстані від центру сітки до точки, що відповідає 2ρ стереографічній сітці.

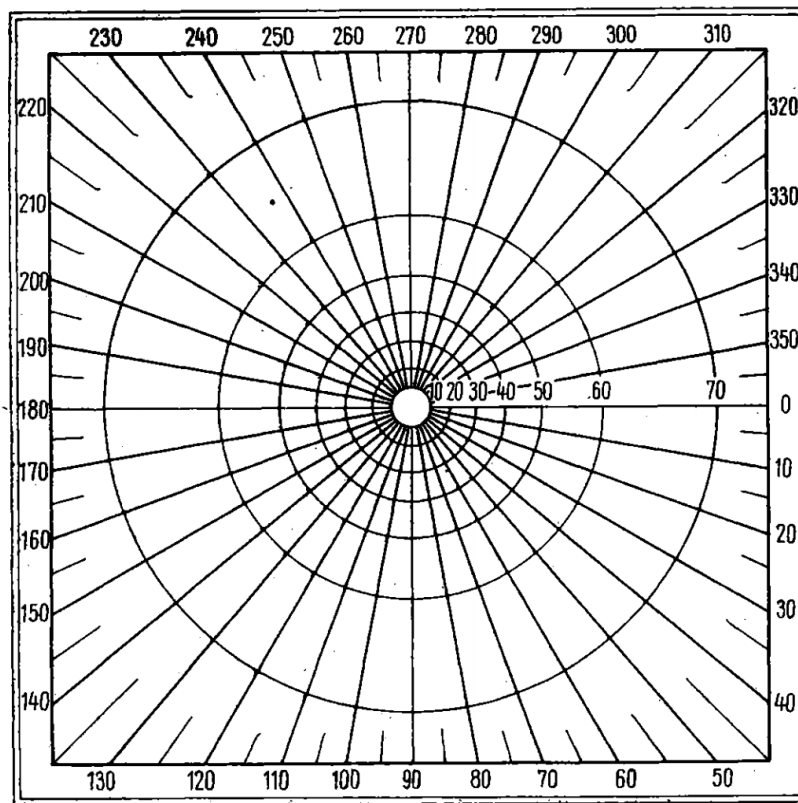


Рис.1.43. Гномонічна сітка.

На рис.1 .43 зображені гностереографічна та гномонічна проєкції площини LJ.

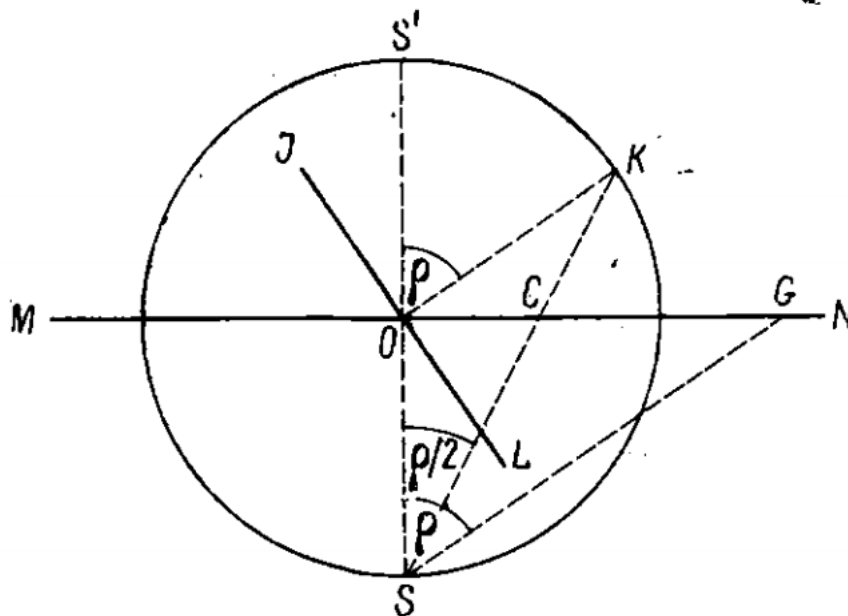


Рис 1.44. Гномонічна (G) та гностереографічна (C) проєкції площини LJ

1.11. Двійники

Під час виникнення та зростання кристалів часто утворюються зростки, закономірні та незакономірні. Кристали, що зрослися один з одним у випадкових взаємних орієнтуваннях, називаються незакономірними зростками.

Якщо кристали одного і того ж складу та будови зростаються не у випадкових положеннях, то вони утворюють закономірний зросток. Кристали, що зрослися один з одним у паралельних положеннях, називаються паралельним зростком. В паралельних зростках решітка кожного кристала є продовженням решітки іншого чи інших кристалів, що у зрощенні. Тому паралельний зросток можна розглядати як монокристал.

Особливо важливе значення мають закономірні зростки, які названі **двійниками**

Двійником називається такий зріст двох кристалів однакового складу та будови, в якому один кристал є зеркальним відображенням іншого або один кристал є повернутий щодо іншого на 180° .

Площина, відображенням у якій один індивід двійника совміщається з іншим або стає в паралельне положення відносно другого, називається **двійниковою площиною**.

На рис. 1.45 зображено двійник мінералу гіпсу ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$).



Рис. 1.45. Двійник зростання кристалів гіпсу ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$).

У нього двійниковою площиною є площина АВС. Двійниковою віссю називається напрямок, при повороті навколо якого на 180° один індивід двійника поєднується з іншим або стає в паралельне положення щодо іншого.

Серед двійників розрізняють двійники зрощення (рис. 1.45) та двійники проростання (рис. 1.46, 1.47). У двійниках зрощення один індивід відмежовується від іншого площиною зрощення. У двійниках проростання кристали частково обростають один одного (1.46) або пронизують один одного наскрізь (1.47 а,б). У двійниках проростання поверхня зрощення може бути складною, ступінчастою та звивистою (рис.1.47)

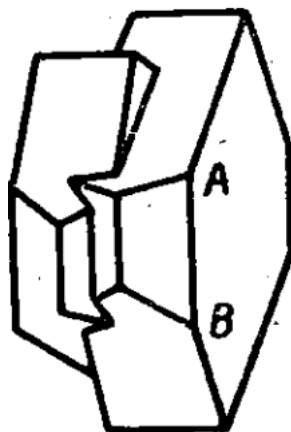


Рис.1.46.. Двійник проростання кристалів ортоклазу (KAlSi_3O_8). Двійникова вісь паралельна АВ. Двійникова площина перпендикулярна до двійникової вісі та не збігається з площиною зрощення.

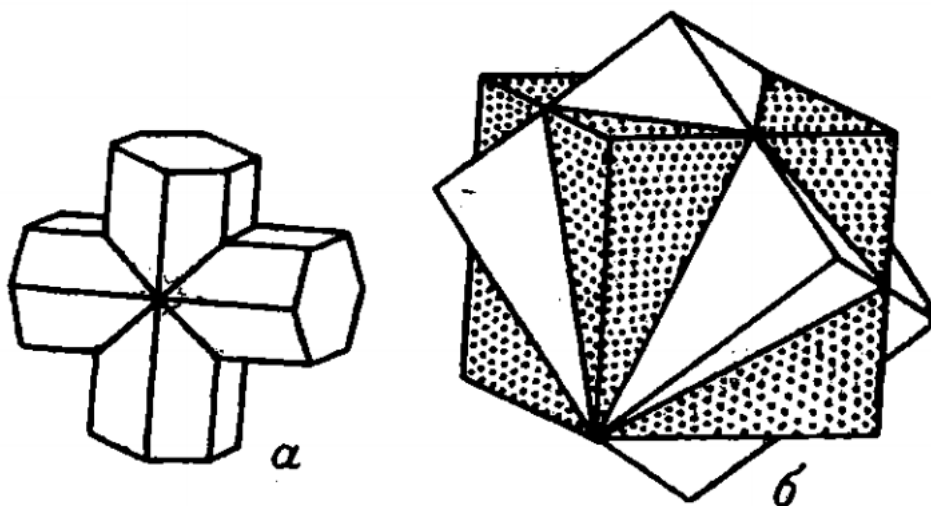


Рис.1.47. Двійники проростання:
а) ставроліт, б) флюоріт.

Двійники утворюються не тільки при виникненні та зростанні кристалів. У багатьох випадках вони утворюються в результаті механічних деформацій кристалів. Причини, що зумовлюють виникнення двійників, вивчені ще недостатньо.

Запитання для повторення

1. Що називається двійниковою віссю, двійниковою площиною, площиною зрощення?
2. Які існують типи двійників?

1.12. Літературні джерела першого розділу

1. Л. О. Бірюкович КРИСТАЛОГРАФІЯ, КРИСТАЛОХІМІЯ ТА МІНЕРАЛОГІЯ Підручник/ Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського 2018.-.234 с.
2. Шаскольская М. П. Кристаллография : учеб. для вузов / Шаскольская М. П. – М. : Высшая школа, 1982. – 375 с
3. Современная кристаллография : в 4 т. / под ред. Б. К. Вайнштейна. – М. : Наука, 1979–1981.
4. Розин К. М. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических многогранников : учеб. пособие для вузов / К. М. Розин, Э. Б. Гусев. – М. : Metallurgia, 1982. – 164 с
5. Куровець М. І. Кристаллографія і мінералогія : навч. посіб. для студ. вузів : в 2 ч. / М. І. Куровець. – Львів : Світ, 1996.
6. Сколодра О. Є. Кристаллографія, кристаллохімія та мінералогія : навч. посіб. / О. Є. Сколодра. – Луцьк : Вид. центр ЛНТУ, 2010. – 240 с.
7. Розин К. М. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических структур : учеб. пособие для вузов / К. М. Розин, Э. Б. Гусев. – М. : Metallurgia, 1985. – 167с.
8. Бакуменко І.Т. Матеріали до курсу “Кристаллографія”. Вип. 1. – Львів: Вид. центр ЛНУ ім. Івана Франка, 2000. – 78 с

9. Пинес Б.Я. Лекции по структурному анализу. – Х.: Изд.-во Харьк. гос. ун-та, 1957. – 455 с.
10. Попов Г.М., Шафрановський І.І. Кристалографія: підручник. – Львів: Вид-во Львів. ун-ту, 1959. – 338 с
11. Borchardt-Ott W. Kristallographie. – Berlin: Springer, 2009. – 372 S. Kleber W. Einführung in die Kristallographie. Lehrbuch nach den Hochschulstudienplänen. – Berlin: VEB Verlag Technik, 1967. – 407 S.

Розділ 2

ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ У МЕХАНІЦІ СУЦІЛЬНИХ СЕРЕДОВИЩ

2.1. Основні поняття у механіці суцільних середовищ

Механіка суцільних середовищ (МСС), як і будь-яка наука, починається з понять та визначень, якими вона оперує, встановлюючи між ними зв'язок у різних умовах на тверде тіло. Такими поняттями є напруга та деформація. Напруга – векторна величина, що є рівномірно розподіленою за елементом поверхні навантаження. Деформація – це зміна форми тіла під впливом цього навантаження. Зв'язок між цими величинами вивчає МСС. Таким чином, до поняття абсолютного твердого тіла, відомого із загального курсу фізики, додаються нові поняття: такі як напруга та деформація.

Зовнішні сили діють на машини різними способами. Тим не менш, при всьому різноманітті видів силового впливу на тіла виділяють невелику кількість основних форм. Всі інші форми виявляються як поєднання основних форм. Такими основними формами силового впливу є 1 - Стиснення; 2 - розтяг; 3 - зсув; 4 - вигин; 5 - кручення; 6 - знакозмінна напруга.

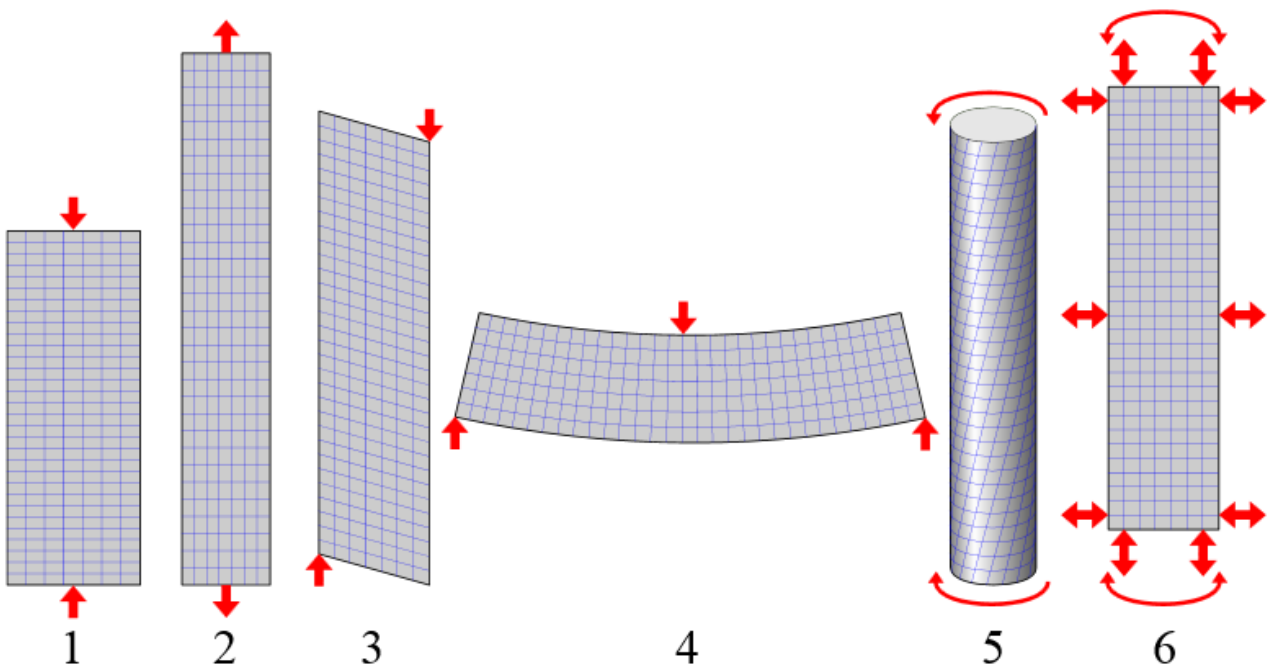


Рис.2. 1. Види механічної напруги: 1 - Стиснення; 2 - розтяг; 3 - зсув; 4 - вигин; 5 - кручення; 6 - знакозмінна напруга.

Ці прості види напруги можуть утворювати між собою різні комбінації (складний напружено-деформований стан).

2.1.1. Зовнішні та внутрішні сили

Напруги у твердому тілі виникають під дією сил, які розглядають як зовнішні, так і внутрішні. Розглянемо тіло, що у рівновазі під впливом деякої системи зовнішніх сил P_i (рис.2). Розділимо його за допомогою довільного перерізу $s-s$ на дві частини і подумки видалимо одну з частин.

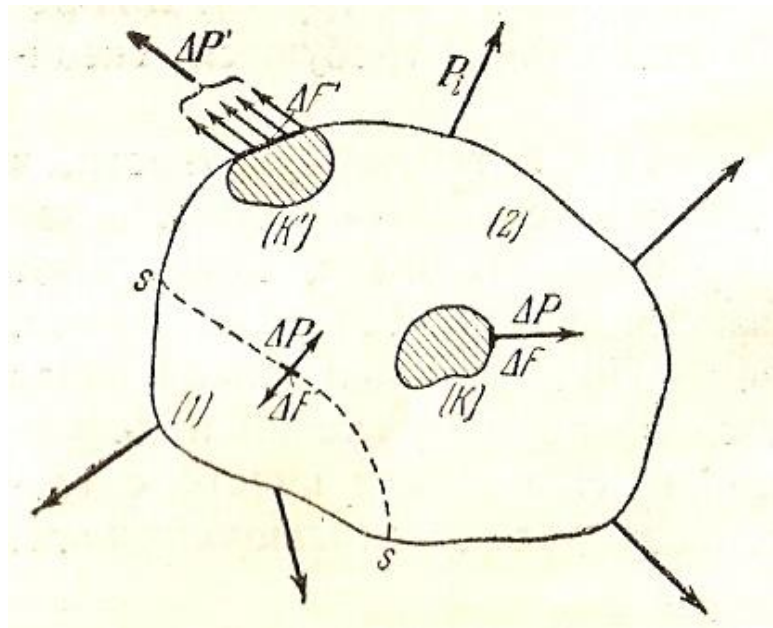


Рис.2.2. Тверде тіло під впливом зовнішніх сил

Для збереження частини, що залишилася, в рівновазі до неї необхідно прикласти таку систему сил, розподілених по поверхні перерізу, яка врівноважувалася б із зовнішніми силами, що діють на частину, що залишилася. Ця система сил замінює собою дію віддаленої частини тіла разом із прикладеними до неї силами.

Відповідно до закону про рівність дії та протидії, сума сил, що передаються від частини 2 на частину 1, дорівнює модулю і протилежна за напрямом сумі сил, що передаються від частини 2 на частину 1.

Т.ч. за кожен елемент поверхні перерізу $s - s$ діє деяка сила. Величина цієї сили залежить від положення елемента поверхні, а напрямок її утворює деякий кут з елементом поверхні. Тобто. сила є вектор.

Межа відношення сили до елемента поверхні при його безмежному зменшенні називається напругою:

$$p = \lim_{\Delta F \rightarrow 0} \frac{\Delta P}{\Delta F}$$

Іншими словами, напруга можна розглядати як силу, що припадає на одиницю площі, і орієнтовану в просторі, так само як елемент поверхні F ; при цьому передбачається, що сила, що передається через цю одиничну площу, розподілена на ній рівномірно.

Напруга має розмірність сили, поділеної на площу. Одиницею виміру напруги є Па.(Паскаль), $1 \text{ МПа} = 10 \text{ кгс/см}^2$. кгс/см^2 – технічна одиниця вимірювання напруги. На противагу зовнішнім силам, тобто. активним силам і силам реакції, напруги називаються внутрішніми силами. Ці сили, що передаються через граничну поверхню кожного елемента об'єму тіла, зумовлені фізичною природою будови тіла.

2.1.2. Нормальна та дотична напруга

Напруга p , відповідне елементу поверхні F можна розкласти на два компоненти (рис.2.3.): нормальна напруга σ і дотична напруга τ .

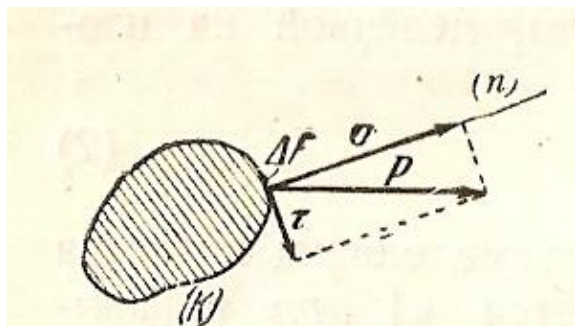


Рис.2.3. Нормальна та дотична напруга

Нормальна напруга спрямована нормалі до елемента поверхні ΔF , а дотична напруга діє в площині елемента ΔF . Нормальна напруга називається стискаючою напругою, якщо вона стискає частинки, прилеглі до ΔF і прагне зблизити елементи тіла, що стикаються вздовж ΔF .

Нормальна напруга називається розтягуючим, якщо вона розтягує частинки тіла, прилеглі до ΔF , і прагне видалити один від одного елементи тіла, що стикаються вздовж ΔF .

Розтягуюча напруга зображується вектором спрямованим назовні від виділеного об'єму тіла, і вважається позитивним. Стискаюча напруга зображується вектором спрямованим всередину виділеного об'єму тіла, і вважається негативним.

Дотична напруга прагне викликати зсув частинок щодо один одного в площині їхнього дотику. Для визначення дотичної напруги необхідно задати два його компоненти в площині, що проходить через F . Ці два компоненти дотичної напруги та нормальна напруга повністю визначають повний вектор напруги.

Розглянемо циліндричний стрижень, що розтягується у протилежні сторони силами P і $-P$. Подумки розріжемо його перетином $s - s$ у поперечному напрямі (рис.3). Тоді допускаючи, що внутрішні сили розподілені по поперечному перерізу рівномірно, отримаємо вираз величини нормальної напруги, що розтягує:

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

Растягивающие напряжения, действующие на отдельные элементы площади поперечного сечения, приводятся при сложении для каждой части стержня к одной единственной силе, которая уравновешивается соответствующей нагрузкой

Растягивающие напряжения, действующие на отдельные элементы площади поперечного сечения, приводятся при сложении для каждой части стержня к одной единственной силе, которая уравновешивается соответствующей нагрузкой

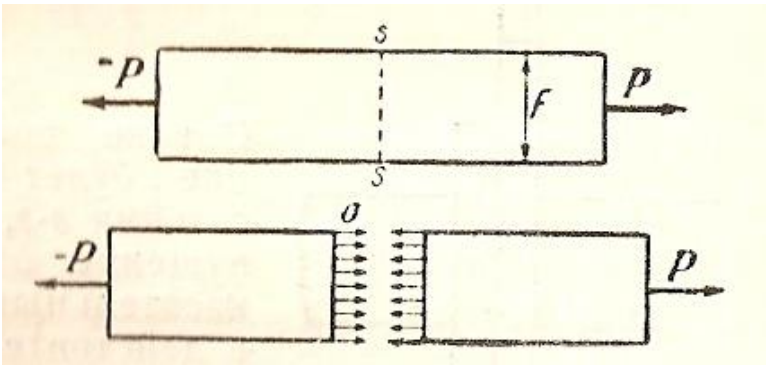


Рис.2.4. Розтягуюча напруга в стрижні

2.1.3.Лінійний (одновісний) напружений стан

Відповідно до сказаного вище, можна говорити про напругу лише у поєднанні з тим елементарним майданчиком, на якому діє напруга. Сукупність напруги на всіх елементарних майданчиках, які можна провести через якусь точку тіла, називається напруженим станом у цій точці. Розглянемо лінійний або одновісний напружений стан, відмітною ознакою якого є однаковий напрямок векторів всіх повних напруг. Такий напружений стан має місце при розтягуванні стрижня двома протилежними силами. Вище ми визначили напруги лише у перерізі, нормальному до осі стрижня. Визначимо напруги у всіх косих перерізах $s - s$, що перетинають вісь стрижня і мають спільну точку s з перерізом $s - s'$, перпендикулярним до осі стрижня (рис.4а)

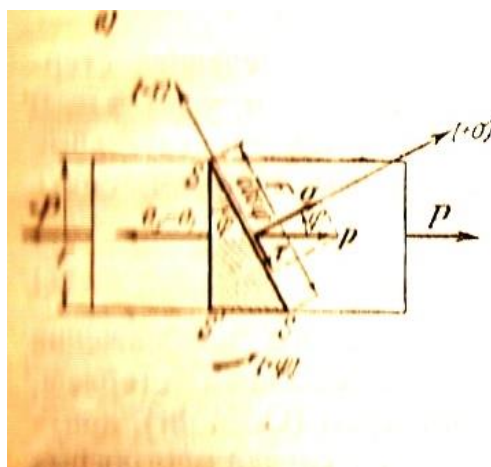


Рис.2.5. Напруження у всіх косих перерізах стрижня при розтягуванні

Позначимо нормальну напругу, що діє в перерізі $s - s'$, перпендикулярному до осі стрижня через $\sigma_x = \sigma_1$. Воно буде рівним:

$$\sigma_x F = \frac{pF}{\cos \varphi}$$

Звідки

$$p = \sigma_x \cos \varphi$$

Встановимо позитивний напрямок у площині перерізу $s - s'$. Нормальна напруга вважається позитивною, якщо вона спрямована назовні від елемента поверхні, що розглядається. Кут φ , що визначає положення косоного перерізу $s - s'$, вважатимемо позитивним, якщо для переведення перерізу $s - s'$, перпендикулярного до осі стрижня, у положення $s - s$ найкоротшим шляхом, треба його повернути проти годинникової стрілки. Відповідно вважатимемо позитивним напрямком для дотичних напруг, той напрямок, який виходить поворотом нормалі до перерізу $s - s'$ на 90° проти годинникової стрілки.

Позначимо нормальну напругу, що діє в перерізі $s - s'$, перпендикулярному до осі стрижня через $\sigma_x = \sigma_1$. Воно буде рівним:

$$\sigma_x F = \frac{pF}{\cos \varphi}$$

Звідки

$$p = \sigma_x \cos \varphi$$

Встановимо позитивний напрямок у площині перерізу $s - s'$. Нормальна напруга вважається позитивною, якщо вона спрямована назовні від елемента поверхні, що розглядається. Кут φ , що визначає положення косоного перерізу $s - s'$, вважатимемо позитивним, якщо для переведення перерізу $s - s'$, перпендикулярного до осі стрижня, у положення $s - s$ найкоротшим шляхом, треба його повернути проти

годинникової стрілки. Відповідно вважатимемо позитивним напрямом для дотичних напруг, той напрямок, який виходить поворотом нормалі до перерізу s – s на 90^0 проти годинникової стрілки.

2.1.4. Коло Мора

Існує простий спосіб графічного зображення напруги, що відповідають різним перерізам стрижня. Він був уперше запропонований О. Мором і припускає узагальнення на випадок багатівісних напружених станів. Візьмемо прямокутну систему координат σ і τ (рис.5) і відкладатимемо в ній значення σ і τ , що відповідають певному куту φ , як координати точки S . Ця точка буде служити зображенням повної напруги в перерізі, проведеному під кутом φ . Очевидно, що всі точки, що відповідають усім можливим значенням кута φ , розташовані на колі, що має центр на осі σ і проходить через початок координат.

Перетворимо значення нормальної та дотичної напруги у вигляді:

$$\sigma = \sigma_x \cos^2 \varphi = \sigma_x \frac{1 + \cos 2\varphi}{2}$$

$$\tau = -\sigma_x \frac{\sin 2\varphi}{2}$$

Виключивши із цих рівнянь параметр φ , отримаємо рівняння геометричного місця точок S :

$$\sigma - \frac{\sigma_x}{2} = \frac{\sigma_x}{2} \cos 2\varphi$$

$$\left(\sigma - \frac{\sigma_x}{2}\right)^2 + \tau^2 = \left(\frac{\sigma_x}{2}\right)^2 (\cos^2 2\varphi + \sin^2 2\varphi) = \frac{\sigma_x^2}{4}$$

Тобто. це геометричне місце буде являти собою коло з радіусом рівним $\frac{\sigma_x}{2}$

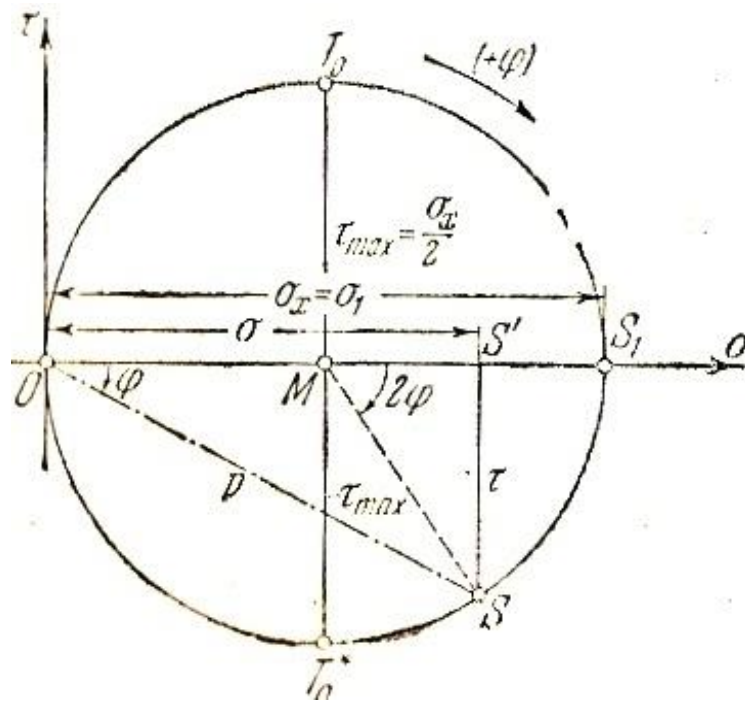


Рис.2.6. Кругова діаграма Мора.

Далі з цих рівнянь отримаємо:

$$\operatorname{tg} 2\varphi = -\frac{\tau}{\sigma - \frac{\sigma_x}{2}}$$

Координати точки S дорівнюють σ , τ . Тоді кут $S_1MS = 2\varphi$, а $S_1OS = \varphi$.

Отже, знаючи напруги σ і τ , можна знайти кут φ , що визначає нахил перерізу, в якому діє напруга p з компонентами σ і τ . При користуванні круговою діаграмою Мора необхідно мати на увазі таку обставину. На схемі напруги рис.4 ми прийняли за позитивний напрямок відліку кутів напрям обертання проти годинникової стрілки. У колі Мора з встановлення однозначного відповідності між напругами і точками кола необхідно надходити навпаки, тобто. позитивні кути відлічувати за годинниковою стрілкою.

Таке становище можна було б уникнути, відкладаючи дотичні напруги у напрямку вниз (змінивши їх знак на зворотний). Але таке зображення дотичних напруг недоцільне. З рис.5 видно, що найбільші значення, які може набувати дотичної напруги, рівні:

$$\tau_{max} = \pm \frac{\sigma}{2}$$

Цим значенням τ відповідають кути $2\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$ або $\varphi = \pm \frac{\pi}{4}$. Тобто, найбільші дотичні напруги виникають у перерізах, нахилених до осі стрижня на кути $\pm \frac{\pi}{4}$.

Міркування та висновки розглянуті у наближенні рівнонапруженості, тобто. якщо напруги однакові в усіх точках кінцевого за розмірами перерізу. Такий напружений стан називається однорідним. Загалом напруги у різних точках тіла різні. Отже, вони є функціями положення точки в просторі, і тому наші міркування треба застосовувати не до всього тіла в цілому, а до окремих його елементів.

2.2. Основні відомості тензорного злічення

Всі оточуючі нас тіла мають властивості. Властивості може бути загальними, тобто. однаковими в якісному відношенні для цілих груп об'єктів, можуть бути індивідуальними в кількісному відношенні для кожного з них. Наприклад, всі тіла мають об'єм, масу і, отже, щільність. Це фізичні властивості. Але їх кількісні величини суто індивідуальні стосовно кожного тіла. Окрему властивість називають фізичною величиною.

Тіла можуть бути гарячими, напруженими, намагніченими, деформованими тощо, тобто. бути у різних станах. Стани також мають властивості. Властивості мають і процеси, що протікають в тілах, наприклад, процеси загартування та відпустки, деформації та релаксації та ін. Властивості описуються співвідношеннями між вимірними величинами. Наприклад, щільність речовини (ρ) визначається із співвідношення між масою (m) тіла та її об'ємом (V). Маса тіла та його об'єм не

залежать від напрямку вимірювання. Отже, і щільність – величина ізотропна, яка залежить від напрямку виміру.

Однак, існує багато фізичних властивостей, які суттєво залежать від напрямку виміру в кристалічних тілах. Для кристалічних тіл це насамперед властивості пружності, які відображають сили взаємодії між частинками, складовими кристал, електричні, магнітні, теплові, оптичні властивості, величини яких виміряні в різних напрямках в кристалі значно відрізняються. Описувати такі властивості за допомогою звичайних чисел не вдасться. Тому потрібно знайти спосіб опису таких властивостей кристалів не тільки з урахуванням симетрії цієї властивості, але й з урахуванням симетрії самих кристалів.

Крім того, завдання числових значень фізичних величин при обраній системі одиниць містить у собі свавілля, обумовлене вибором тієї чи іншої координатної системи.

Однак між величинами існують об'єктивні зв'язки, які не залежать від цих суб'єктивних способів опису.

Математичний інструмент, за допомогою якого формулюються співвідношення між величинами об'єктів, що вивчаються, які не залежать від вибору системи координат являє собою тензорне обчислення. Такі співвідношення називаються інваріантними.

Скаляр є найпростішим тензором і є фізичною. величину, яка повністю характеризується завданням одного речового числа, не залежить від вибору системи координат (одним і тим же у всіх системах координат). Такими є об'єм, маса, щільність, температура, робота. Тобто. скаляр – інваріант за визначенням.

Объекты, полностью определяемые заданием тройки чисел ($3^1 = 3$)

– координат, меняющихся при замене системы координат по предписанному закону, называются векторами или **тензорами первого ранга**.

Об'єкти, що повністю визначаються завданням дев'яти чисел ($3^2 = 9$) – координат, що змінюються за вказаним законом при заміні системи координат, називаються

тензорами другого рангу тощо. Ланцюжок визначень можна продовжити індукцією до нескінченності.

Розглянемо три типи введених величин 1) Тензор нульового рангу-скаляр, визначається завданням одного числа, не залежить від вибору осей координат.

$$M = \begin{bmatrix} m \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

2) Тензор першого рангу, вектор визначається завданням трьох чисел (компонент), проєкціями на відповідні осі координат.

$$\vec{F} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Якщо порівнювати вектор зі скаляром, то відмінність тензорів, що їх описують, полягає в тому, що скаляр не має компонент і тому не має індексів. Вектор вимагає для опису трьох компонентів з трьома індексами.

3) Тензор другого рангу визначає зв'язок між двома векторами, кожен із яких задається трьома компонентами. Кожна з компонентів пов'язана в певному порядку з парою осей координат. Тобто. загальна кількість чисел, що задають цей зв'язок, дорівнює дев'яти і, відповідно завдання кожної компонент вимагає двох індексів. Число індексів дорівнює рангу тензора. Останнє розглянемо докладніше.

2.2.1. Тензор другого рангу. Форми запису

Є два вектори та відповідні їм проєкції на осі координат $0x_1x_2x_3$: $\vec{p} = [p_1, p_2, p_3]$ і $\vec{q} = [q_1, q_2, q_3]$ (рис.2.8).

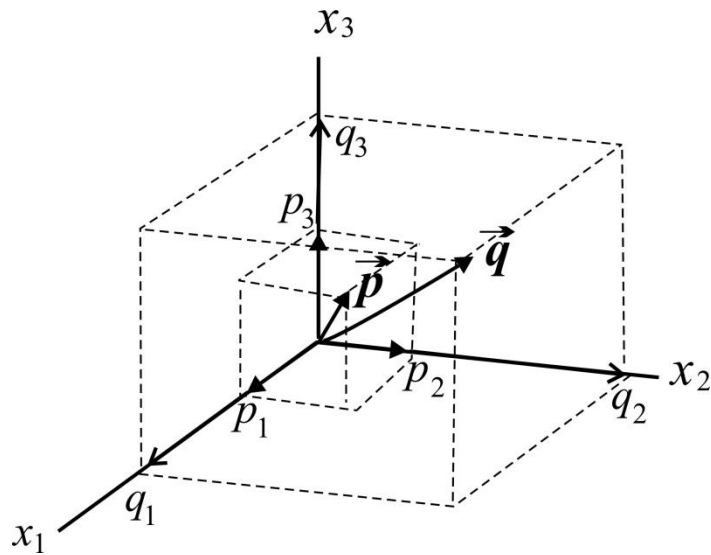


Рис.2.7.

Якщо середовище анізотропне, то зв'язок, який здійснюється властивістю T між векторами буде такий, що кожна з компонентів вектора \vec{p} залежатиме від усіх трьох компонентів вектора \vec{q} і для встановлення цього зв'язку потрібно дев'ять значень компонент властивості T :

$$\left. \begin{aligned} p_1 &= T_{11}q_1 + T_{12}q_2 + T_{13}q_3 \\ p_2 &= T_{21}q_1 + T_{22}q_2 + T_{23}q_3 \\ p_3 &= T_{31}q_1 + T_{32}q_2 + T_{33}q_3 \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

де константи $T_{11}, T_{12}, \dots, T_{22}, \dots, T_{33}$ є компонентами тензора другого рангу

$$[T_{ij}] = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

а T - властивість другої тензорної розмірності.

Рівняння (2.3) можна записати у більш компактній формі:

$$\left. \begin{aligned} p_1 &= \sum_{j=1}^3 T_{1j} q_j \\ p_2 &= \sum_{j=1}^3 T_{2j} q_j \\ p_3 &= \sum_{j=1}^3 T_{3j} q_j \end{aligned} \right\}$$

Або коротше:

$$p_i = \sum_{j=1}^3 T_{ij} q_j \quad (i=1,2,3), \quad (2.5)$$

а опустивши знак підсумовування -

Ейнштейн запропонував наступне правило підсумовування компонентів, яке корисно запам'ятати. Якщо в одному і тому ж члені суми індекс повторюється двічі, то автоматично мається на увазі підсумовування цього індексу.

Відповідно до цього правила індекс j - індекс підсумовування. Індекс i називається вільним індексом.

2.2.2. Перетворення тензорів

У рівняннях (2.3) ми визначали орієнтацію системи координат щодо якої записані зазначені рівняння. У кристалофізиці завжди доводиться системи координат прив'язувати або до кристала, або до зразка, або до якогось іншого репера (гоніометр і т.п.). Виникає необхідність переходу від однієї системи координат до іншої. Тобто знайти іншу сукупність коефіцієнтів T_{ij} для рівнянь (2.3).

Таким чином, при переході від системи координат $Ox_1x_2x_3$ до системи $Ox'_1x'_2x'_3$ нова сукупність коефіцієнтів T'_{ij} буде представляти ту ж фізичну величину.

Отже, між обома системами коефіцієнтів має існувати певний зв'язок. Тому

головним завданням є встановити, як змінюється набір коефіцієнтів T_{ij} при переході від однієї системи координат до іншої.

Перетворення системи координат $Ox_1x_2x_3$ до системи $Ox'_1x'_2x'_3$ здійснюється за допомогою напрямних косінусів (a_{ik}), де перший індекс при a відноситься до осей нової системи координат ($Ox'_1x'_2x'_3$), а другий – до осей старої системи ($Ox_1x_2x_3$).

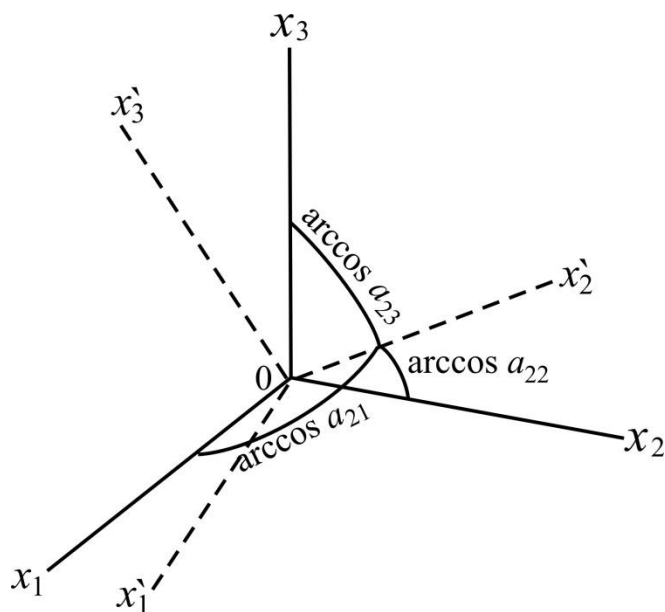


Рис.2.8. Зв'язок систем координат

Таблиця косинусів (a_{ik}) записується у вигляді матриці:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Вектор $\vec{p} = [p_1, p_2, p_3]$ перетворюється при переході від системи $Ox_1x_2x_3$ до системи $Ox'_1x'_2x'_3$ так, що кожна компонента в новій системі вийде проектуванням всіх трьох компонентів p_1, p_2, p_3 (це проекції соннаправленні з осями x_1, x_2, x_3) на нову вісь x'_1 :

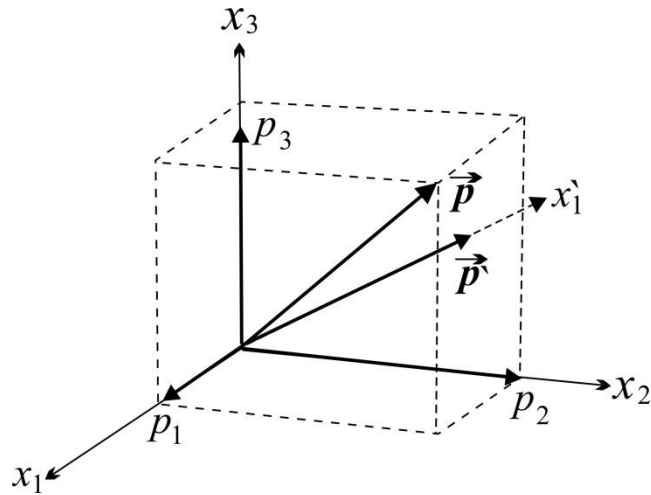


Рис. 2.9.Перетворення векторів

$$p'_1 = a_{11}p_1 + a_{12}p_2 + a_{13}p_3$$

Аналогічно,

$$p'_2 = a_{21}p_1 + a_{22}p_2 + a_{23}p_3$$

$$p'_3 = a_{31}p_1 + a_{32}p_2 + a_{33}p_3$$

або

$$p'_i = a_{ij}p_j \quad (2.8)$$

Зворотнє перетворення від нової системи координат до старої виглядатиме за аналогією:

$$p_i = a_{ji}p'_j \quad (2.8a)$$

Для вектора \vec{q} пряме перетворення:

$$q'_i = a_{ij}q_j \quad (2.9)$$

А звернене -

$$q_i = a_{ji}q'_j \quad (2.9a)$$

При переході від старої системи координат до нової індекси підсумовування стоять поруч, а за зворотному переході вони відокремлені один від одного.

Координати точки, наприклад точки p , є одночасно компонентами вектора \vec{p} .
Отже, рівняння перетворення координат точки при переході від старої системи координат до нової буде:

$$x'_i = a_{ij} x_j \quad (2.10)$$

Проведемо тепер перетворення компонент тензора другого рангу під час переходу від старої системи координат $0x_1x_2x_3$ до нової $0x'_1x'_2x'_3$. Вектори \vec{p} і \vec{q} в новій системі координат будуть мати нові компоненти (p'_1, p'_2, p'_3) та (q'_1, q'_2, q'_3) .

Відповідно, зв'язок між старими та новими компонентами векторів здійснюватимуться компонентами тензора $[T'_{ij}]$. Для того щоб прийти від тензора $[T_{ij}]$ до $[T'_{ij}]$ необхідно здійснити ланцюжок перетворень:

Перетворити вектор \vec{p} у старій системі координат до \vec{p}' нової системи за формулами (2.8). Далі зв'язати вектор \vec{p} із вектором \vec{q} через тензор $[T_{ij}]$. Потім провести перетворення компонентів вектора \vec{q} в старій системі координат до \vec{q}' нової за формулою (2.9а). Цей ланцюжок запишеться:

$$p'_i = a_{ik} p_k = a_{ik} T_{kl} q_l = a_{ik} T_{kl} a_{jl} q'_j \quad (2.11)$$

або

$$p'_i = T'_{ij} q'_j \quad (2.11a)$$

Тут T'_{ij} - коефіцієнт при q'_j в i -тому рівнянні. Таким чином -

q'_i в i - том уравнении.

$$T'_{ij} = a_{ik} a_{jl} T_{kl}. \quad (2.12)$$

Співвідношення (2.12) виражає закон перетворення тензора другого рангу до нової системи координат. Цей закон є ознакою тензорності якості на відміну матриці.

Індекси k та l у (2.12) – індекси підсумовування, а i та j – вільні індекси.

Розгорнемо (2.12) по l :

$$T'_{ij} = a_{ik} a_{j1} T_{k1} + a_{ik} a_{j2} T_{k2} + a_{ik} a_{j3} T_{k3}$$

Далі розгортаємо за другим індексом підсумовування, по k :

$$T'_{ij} = a_{i1} a_{j1} T_{11} + a_{i1} a_{j2} T_{12} + a_{i1} a_{j3} T_{13} + a_{i2} a_{j1} T_{21} + a_{i2} a_{j2} T_{22} + a_{i2} a_{j3} T_{23} + a_{i3} a_{j1} T_{31} + a_{i3} a_{j2} T_{32} + a_{i3} a_{j3} T_{33}$$

Кожній парі індексів i, j відповідає одне таке рівняння. Таким чином, система (2.12) є сукупністю дев'яти рівнянь, кожне з яких має дев'ять членів підсумовування. Зворотне перетворення від нової системи координат до старої має вигляд:

$$T_{ij} = a_{ki} a_{lj} T'_{kl} \quad (2.12a)$$

Формули перетворення тензорів (2.12, 2.12a) демонструють подібність до формул перетворення векторів (2.8, 2.8a) при переході до інших систем координат. Якщо вважати скаляр тензором нульового рангу, то за законом перетворення можна побудувати такий ланцюг:

властивість	Ранг тензора	Перетворення	
		пряме	Зворотне
скаляр	0	$\varphi' = \varphi$	$\varphi = \varphi'$
вектор	1	$p'_i = a_{ij} p_j$ (2.11)	$p_i = a_{ji} p'_j$
тензор	2	$T'_{ij} = a_{ik} a_{jl} T_{kl}$ (2.12)	$T_{ij} = a_{ki} a_{lj} T'_{kl}$ (2.12a)
тензор	3	$T'_{ijk} = a_{il} a_{jm} a_{kn} T_{lmn}$ (2.13)	$T_{ijk} = a_{li} a_{mj} a_{nk} T'_{lmn}$ (2.13a)

тензор 4 $T'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} T_{mnop} \quad T_{ijkl} = a_{mi} a_{nj} a_{ok} a_{pl} T'_{mnop} \quad (2.14a)$
(2.14)

Вектор це фізична величина, яка у системі координат $0x_1x_2x_3$ має три компоненти p_1, p_2, p_3 . При переході до іншої системи координат ці три компоненти перетворюються за правилом (2.11). Причому та фізична величина, що у старій системі координат, що у новій – залишається однієї й тієї ж.

Аналогічно для тензора другого рангу.

Він також описує деяку фізичну величину, яка залежить від вибору системи координат. Він має 9 компонент, які перетворюються на нову систему координат рівняннями (2.12). Тензор як і вектор описує фізичну величину, яка залежить від вибору системи координат.

Ці міркування можна продовжити стосовно тензорів і вищих рангів.

Отже, якщо у довільній системі координат дев'ять коефіцієнтів T_{ij} лінійно пов'язують компоненти векторів p_i і q_i , то при переході від однієї системи координат до іншої T_{ij} перетворюються за правилом (2.12). Вони утворюють тензор другого рангу.

Якщо довільній системі координат 81 коефіцієнтів T_{ijkl} лінійно пов'язують компоненти тензорів T_{mn} і T_{op} , то при переході від однієї системи координат до іншої перетворюються за правилом (2.14). Вони утворюють тензор четвертого рангу.

Матриця (a_{ij}) і тензор $[T_{ij}]$ є однаковими наборами коефіцієнтів, але це по суті різні поняття. Матриця (a_{ij}) пов'язує дві системи координат. Тензор $[T_{ij}]$ -

фізична величина, яка представлена у конкретній системі координат 9 числами.
Говорити про перетворення матриці безглуздо.

2.2.3. Симетричні та асиметричні тензори

Тензор, для якого $T_{ij} = T_{ji}$ називається симетричним:

$$\begin{bmatrix} 14 & 3 & -7 \\ 3 & 8 & 5 \\ -7 & 5 & 14 \end{bmatrix} - \text{симетричний тензор.}$$

Якщо $T_{ij} = -T_{ji}$, то тензор називається асиметричним. Це означає, що

$$T_{11} = T_{22} = T_{33} = 0.$$
$$\begin{bmatrix} 0 & -\alpha & \varepsilon \\ \alpha & 0 & -\chi \\ -\varepsilon & \chi & 0 \end{bmatrix} - \text{асиметричний тензор.}$$

Слід зазначити, що властивість симетричності антисиметричності не залежить від вибору системи координат. Якщо $T_{ij} = \pm T_{ji}$, то й $T'_{ij} = \pm T'_{ji}$.

2.1.4. Симетрія кристала та його властивостей

В основі встановлення симетрії властивостей кристалів лежить принцип Неймана: *Елементи симетрії будь-якої фізичної властивості кристала повинні містити елементи симетрії кристала.*

Симетрія властивості може бути вищою за симетрію кристала, але не може бути нижче. Ті елементи симетрії, якими володіє кристал, повинні бути притаманні фізичній властивості. Фізична властивість може мати власну симетрію, яка проявляється незалежно від того, яку симетрію має кристал. Одночасно фізична властивість кристала повинна мати всі елементи симетрії самого кристала.

З аналітичної геометрії, загальне рівняння поверхні другого порядку з центром на початку координат має вигляд:

$$S_{11}x_1^2 + S_{22}x_2^2 + S_{33}x_3^2 + 2S_{23}x_2x_3 + 2S_{31}x_3x_1 + 2S_{12}x_1x_2 = 1$$

Це рівняння може бути записано скорочено:

$$S_{ij}x_i x_j = 1 \quad \text{за умовою } (S_{ij} = S_{ji}) \quad (2.15)$$

Це рівняння може бути перетворено на нову систему координат $Ox'_1x'_2x'_3$ за

правилами перетворення координат (2.10):

$$x_i = a_{ki}x'_k \quad \text{и} \quad x_j = a_{lj}x'_l$$

В результаті виходить рівняння:

$$S_{ij}a_{ki}a_{lj}x'_k x'_l = 1$$

або

$$S'_{ij}x'_k x'_l = 1,$$

де

$$S'_{ij} = a_{ki}a_{lj}S_{ij} \quad (2.16)$$

Порівняємо (2.16) з (2.12). Вони ідентичні. Звідси випливає, що закони перетворення коефіцієнтів поверхні другого порядку аналогічні законам перетворення компонентів тензорів другого рангу. Щоб розглянути, як перетворюються компоненти тензора, достатньо розглянути перетворення відповідної поверхні другого порядку. Така поверхня **називається характеристичною поверхнею тензора S_{ij}** .

Цей факт дає можливість геометрично аналізувати анізотропію властивостей кристалів, тому що для опису будь-якого симетричного тензора може бути використана характеристична поверхня. Відомо, що поверхні другого порядку мають головні осі. При перетворенні до цих осей загальне рівняння поверхні другого порядку (2.15) набуває найпростішої форми:

$$S_1x_1^2 + S_2x_2^2 + S_3x_3^2 = 1 \quad (2.17)$$

Симетричний тензор другого рангу при приведенні до головних осей теж набуває найпростішої форми:

$$[S_{ij}] = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} \end{bmatrix},$$

Канонічне рівняння поверхні другого порядку:

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^2}{c^2} = 1$$

Отже, півосі характеристичної поверхні другого порядку дорівнюють $\frac{1}{S_1}, \frac{1}{S_2},$

$$\frac{1}{S_3}. \quad (2.17a)$$

Якщо всі три S позитивні, то характеристична поверхня – еліпсоїд (рис. 2.5); якщо два з них позитивні, а один негативний, то характеристична поверхня односмуговий гіперболоїд; якщо два S негативні, а одна S позитивна, то характеристична поверхня – двосмуговий гіперболоїд.

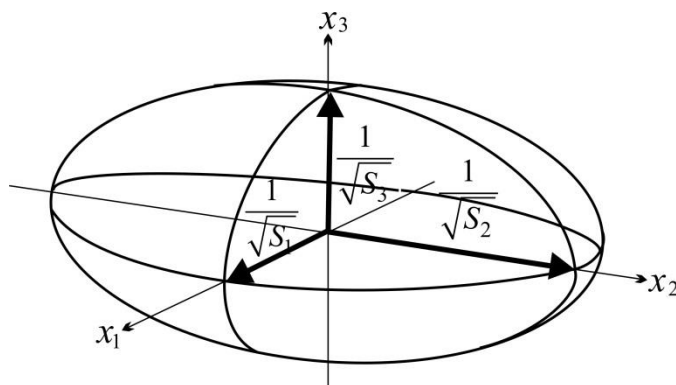


Рис.2.10. Характеристична поверхня симетричного тензора другого рангу $[S_{ij}]$ с позитивними S_1, S_2, S_3 .

При переході до основних вісей рівняння зв'язку векторів значно спрощуються. Наприклад, тензор $[T_{ij}]$ пов'язує вектор \vec{p} та \vec{q} . Якщо $[T_{ij}]$ симетричний тензор, замінимо його на $[S_{ij}]$ Тоді

$$p_i = S_{ij} q_j \quad (2.18)$$

Приводимо до головних осей. Отримуємо у розгорнутому вигляді: ,

$$p_1 = S_1 q_1, \quad p_2 = S_2 q_2, \quad p_3 = S_3 q_3 \quad (2.19)$$

Тут S_1, S_2, S_3 - основні компоненти властивості другої тензорної розмірності.

Звернемося до симетричних властивостей другої тензорної розмірності. Такі тензори мають дев'ять компонентів, з яких лише шість є незалежними. Симетрія кристала ще знижує кількість незалежних компонентів тензора. Найпростіше досліджувати це питання, розглядаючи характеристичну поверхню тензора.

Симетрія поверхні збігається із симетрією даної властивості кристала.

При цьому характеристична поверхня другого порядку має всі елементи симетрії орторомбічної системи. З принципу Неймана можна дійти невтішного висновку, що характеристична поверхню властивостей другий тензорної розмірності кубічного кристала має форму сфери. Відповідно властивість визначається радіусом сфери, тобто. кубічні кристали ізотропні щодо таких властивостей.

Тобто. тензор якості, наведений до основних осей має вигляд:

$$[s_{ij}] = \begin{bmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{bmatrix}$$

Анізотропія властивостей другої тензорної розмірності групи одновісних кристалів тетрагональної, гексагональної, тригональної виражається характеристичною поверхнею обертання другого порядку навколо осі симетрії x_3 або z , а тензор властивості, наведений головним осям має вигляд:

$$[s_{ij}] = \begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}$$

Властивості другої тензорної розмірності орторомбічних кристалів мають довільну характеристичну поверхню другого порядку. Тензор якості, наведений до основних осей має вигляд:

$$[s_{ij}] = \begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}$$

2.1.5. Величина, що характеризує властивість у заданому напрямку

Практичні завдання, пов'язані з використанням тензорного опису властивостей кристалів, зазвичай спрямовані визначення значення тієї чи іншої властивості в заданому напрямку. Розглянемо таке завдання. Нехай в анізотропному середовищі кристала властивість S пов'язує два вектори.

Один з них назвемо тим, хто задає, інший – індукованим. Наприклад, вектор напруженості електричного поля \vec{E} прикладено до металевого провідника. У провіднику індукується електричний струм векторна величина щільності якого \vec{j} визначається тензорною властивістю провідності σ .

Напрямок задамо напрямними косинусами l_1, l_2, l_3 . Це косинуси напрямку одиничної довжини. Тоді вектор напруженості в цьому напрямку набуде вигляду:

$$\vec{E} = [l_1 E, l_2 E, l_3 E].$$

Згідно з диференціальним законом Ома отримаємо:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = [\sigma_1 l_1 E, \sigma_2 l_2 E, \sigma_3 l_3 E,]$$

Компонента вектора \vec{j} , паралельна \vec{E} дорівнює сумі компонент \vec{j} , спроектованих на напрямок \vec{E} :

$$\vec{E}:$$

$$j_0 = l_1^2 \sigma_1 E + l_2^2 \sigma_2 E + l_3^2 \sigma_3 E.$$

Таким чином, значення електропровідності в напрямку l_i має вигляд:

$$\sigma = l_1^2 \sigma_1 + l_2^2 \sigma_2 + l_3^2 \sigma_3 \tag{2.20}$$

Для одновісних кристалів рівняння (2.20) набуде вигляду:

$$\sigma = \sigma_1(l_1^2 + l_2^2) + \sigma_3 l_3^2$$

або

$$\sigma = \sigma_1 \sin^2 \vartheta + \sigma_3 \cos^2 \vartheta \quad (2.21)$$

2.1.6. Інтерпретація характеристичної поверхні властивості другої тензорної розмірності

Розглянемо попередній приклад із електропровідністю. Випадок зображення якості еліпсоїдом. Рівняння еліпсоїда (рис.2.6):

$$\sigma_{ij} x_i x_j = 1 \quad (2.22)$$

Нехай P – точка еліпсоїда, а l_i – напрямні косинуси напрямку \overrightarrow{OP} . Тоді $x_i = r l_i$, де $r = OP$. Підставимо в (22):

$$r^2 \sigma_{ij} l_i l_j = 1$$

За аналогією з (17а):

$$\sigma = \frac{1}{r^2}; \quad r = \frac{1}{\sqrt{\sigma}}$$

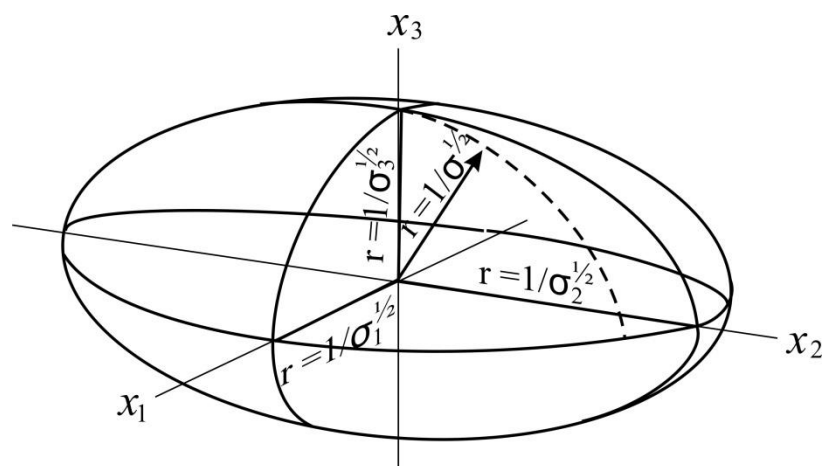


Рис.2.11. Характеристичний еліпсоїд питомої електропровідності.

Такий висновок справедливий до будь-якої властивості, яка може бути описана симетричним тензором другого рангу. У загальному випадку

$$S = \frac{1}{r^2} \quad \text{и} \quad r = \frac{1}{\sqrt{S}}. \quad (2.23)$$

Довжина будь-якого радіус-вектора характеристичної поверхні другого порядку чисельно дорівнює одиниці, поділеній на квадратний корінь з величини S , що характеризує фізичну властивість в тому ж напрямку.

Подібні висновки справедливі і для випадків, коли характеристичні поверхні є односмуговими та двосмуговими гіперболоїдами. або уявний еліпсоїд.

З'являються лише знаки мінус перед 1 , r^2 або $\sqrt{-S}$

Властивості кристалів, що характеризують зв'язок між вектором впливу (що задає) на кристал і результуючим (індукованому) носять тензорний характер. Це питома електропровідність (σ), яка пов'язує вектор напруженості електричного поля (\vec{E}) та густина електричного поля (\vec{j}); коефіцієнт теплопровідності, що зв'язує вектор температурного градієнта та щільність теплового потоку; діелектрична проникність (κ) пов'язує \vec{E} та вектор індукції електричного поля (\vec{D}); магнітні проникність (μ) і магнітна сприйнятливність (χ), що зв'язують вектор напруженості магнітного поля (\vec{H}) та магнітну індукцію (\vec{B}) та намагніченість (\vec{I}).

Проте тензорами описують як властивості тіл, а й їх стан. Такими станами є напружений стан та деформований стан. На такі характеристики не поширюється принцип Неймана. Тобто. якщо властивість другої тензорної розмірності для кубічного кристала є ізотропним, то стан другої тензорної розмірності має свою внутрішню симетрію для кристалів будь-якої симетрії.

2.2. Тензор напруження

Якщо тіло перебуває під впливом зовнішніх сил, те й кожна його частина перебуває під впливом його сусідніх частин. Тобто. тіло перебуває у напруженому стані. На кожний елемент об'єму тіла діють два види сил. Це об'ємні сили. Їх величина пропорційна обсягу елемента. Крім того, на поверхню елемента з боку частин

тіла, що його оточують, діють сили, пропорційні площі поверхні елемента. Така сила, наведена до одиниці площі, називається напругою.

2.2.1. Напружений стан тіла

Напруга називається однорідним, якщо сили, що діють на поверхню елемента, не залежить від його положення в тілі. Розглянемо всередині тіла одиничний куб з ребрами вздовж осей координат Ox_1, Ox_2, Ox_3 . Об'ємні сили відсутні, всі частини тіла перебувають у статичній рівновазі. На кожну грань куба діє поверхнева сила, яку можна розкласти втричі компоненти.

Позначимо компоненту сили, що діє у напрямку $+Ox_1$ на грань, перпендикулярну Ox_i через σ_{ij} . За цим принципом наносяться позначення всіх інших компонентів (рис.2.7). Слід зазначити, що сила σ_{12} , що діє в напрямку Ox_1 на грань, перпендикулярну до напрямку Ox_2 з боку зовнішніх по відношенню до куба частин тіла на внутрішню її частину. Вважаємо напругу однорідною. Тоді сили, що діють на три задні грані, повинні бути рівними і протилежними силам передніх граней. Сили $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, - нормальні компоненти напруження, а $\sigma_{12}, \sigma_{21}, \sigma_{23}$ зсувні компоненти.

$\sigma_{12}, \sigma_{21}, \sigma_{23}$ сдвиговые компоненты.

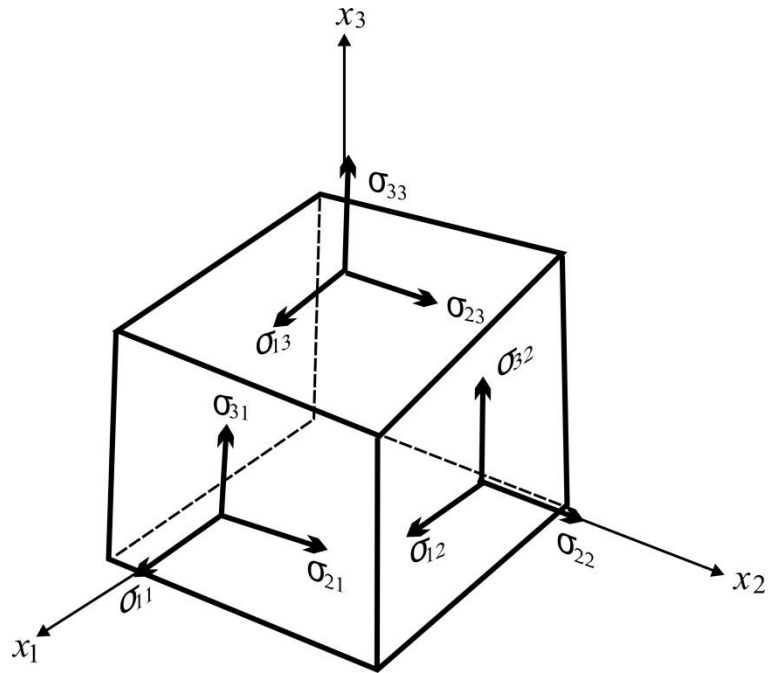


Рис.2.12. Сили, які діють межі одиничного куба в однорідно напруженому тілі.

Якщо довільно обраний одиничний куб перебуває у статичному рівновазі під впливом внутрішніх сил, то кажуть, що тіло перебуває у напруженому стані. Так як напруга однорідна, всі лінії дії всіх трьох компоненти сили, прикладені до будь-якої грані, проходять через середню точку цієї грані. Отже, нормальні та зсувні компоненти не створюють моменту на гранях, перпендикулярних Ox_i та умова рівноваги виразиться у вигляді:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \quad (2.24)$$

Якщо σ_{ij} тензор, він повинен виражати зв'язок між двома векторними величинами і перетворюватися під час переходу від однієї системи координат до іншої за правилом перетворення тензорів (2. 12). Виділимо всередині напруженого тіла елемент поверхні площе δS .

Елемент перебуває під тиском p .

Сила тиску $\overrightarrow{p\delta S}$ спрямована у бік нормалі \vec{l}

(не обов'язково паралельно до площини в точці P)

Тут δS можна вважати вектором, орієнтація якого задана нормаллю \vec{l} (рис.2.8).

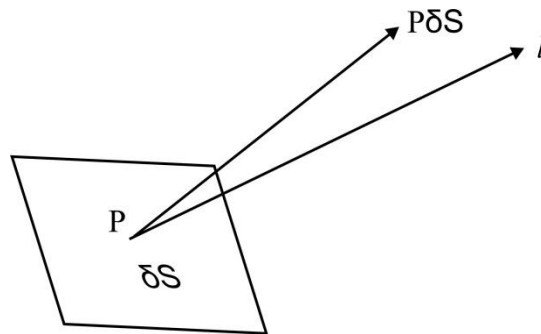


Рис.2.13. Сила, що діє елемент поверхні в напруженому тілі.

Знайдемо умови рівноваги деякого обсягу в тілі у вигляді тетраедра OABC (рис.2.9)

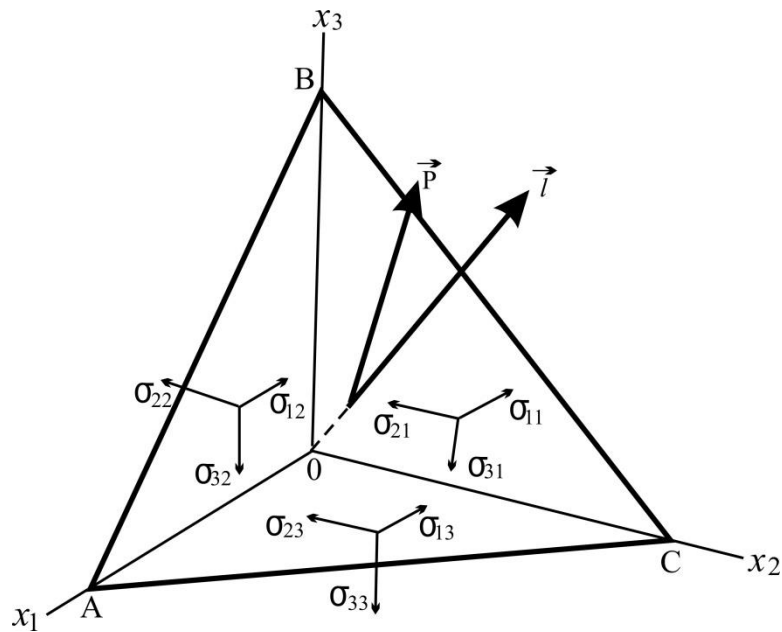


Рис.

2.14. Сили, які діють межі тетраедра, утвореного на координатних площинах гранню ABC

Сила, що діє через грань ABC, дорівнює тиск \cdot площа ABC. Ця сила діє у напрямку нормалі. Сили, що діють три іншi взаємно перпендикулярні грані

тетраедра, визначимо через компоненти напруг аналогічно рис. . Сили, паралельні Ox_1 (площі ABC, BOC та AOB рівні між собою):

$$p_1 = \sigma_{11}l_1 + \sigma_{12}l_2 + \sigma_{13}l_3.$$

аналогічно

$$p_2 = \sigma_{21}l_1 + \sigma_{22}l_2 + \sigma_{23}l_3,$$

$$p_3 = \sigma_{31}l_1 + \sigma_{32}l_2 + \sigma_{33}l_3.$$

Таким чином

Оскільки два вектори \vec{p} та \vec{l} пов'язані лінійними співвідношеннями, то напруга утворює тензор. Цей тензор є симетричним (2.24) і може бути приведений до головних осей.

Перейдемо до головних осей:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

де $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ – **главные напряжения**.

2.2.2. Поверхня напруг

Як і для будь-якого тензора другого порядку, для σ_{ij} може бути побудована характеристична поверхня (поверхня напруги) відповідно до рівняння:

$$\sigma_1 x_1^2 + \sigma_2 x_2^2 + \sigma_3 x_3^2 = 1.$$

Довжини півосей дорівнюють $1/\sqrt{\sigma_1}, 1/\sqrt{\sigma_2}, 1/\sqrt{\sigma_3}$.

Кажде из напряжений может быть либо положительным, либо отрицательным. Поверхность может быть действительным, мнимым эллипсоидом или гиперboloидом .

Для эллипсоида длина вектора \vec{r} определяет нормальное напряжение σ , действующее на элемент поверхности, а именно $\sigma = \frac{1}{r^2}$ або рівнянням:

$\sigma = \sigma_{ij}l_i l_j$, а в головних вісях -

$$\sigma = \sigma_{11}l_1^2 + \sigma_{22}l_2^2 + \sigma_{33}l_3^2 \quad (2.26)$$

2.2.3. Поняття про матеріальні та польові тензори

Тензори можуть описувати властивості кристалів. Можуть тензори описувати і стан або процеси, що протікають в кристалах. Тензори, що описують властивості кристалів і відповідні їм характеристичні поверхні другого порядку мають певну орієнтацію в кристалі. Відповідно до принципу Неймана такі тензори повинні мати всі елементи симетрії кристала. Такі тензори називаються матеріальними.

Тензор напруги, як і тензор деформацій, може мати будь-яку орієнтацію в кристалі. Він буде однаковий і в склі (аморфне тіло), і кристалі. Він подібний до сили, яка може мати будь-який довільний напрямок у твердому тілі. Такі тензори називаються польовими тензорами.

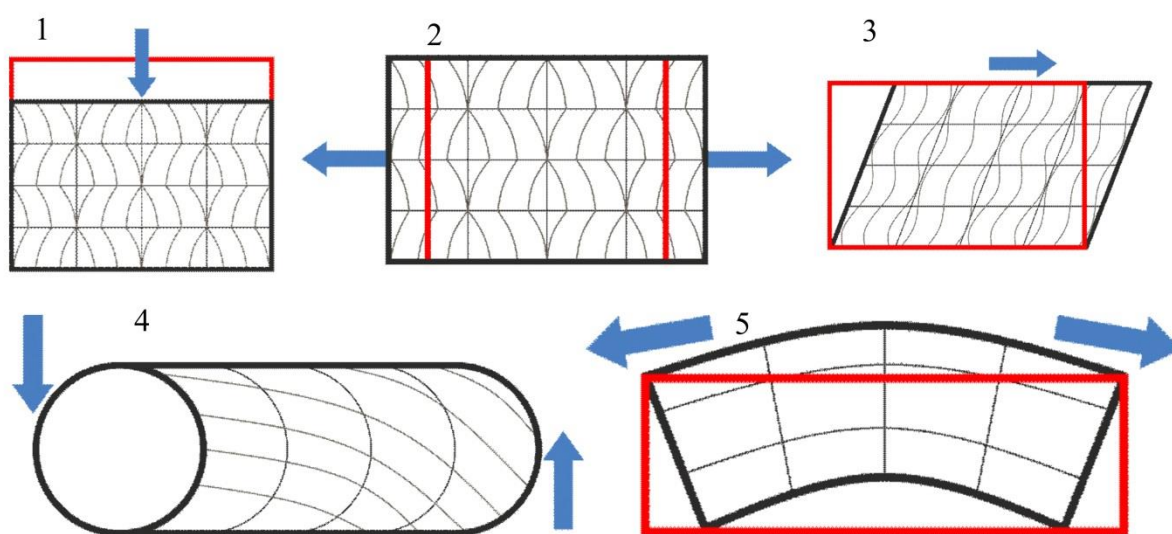
2.3. Тензор деформації

Деформація (від латів. *deformatio* - "Спотворення") - зміна взаємного положення частинок тіла, пов'язане з їх переміщенням один щодо одного за рахунок докладання зусилля, при якому тіло спотворює свої форми. Зазвичай деформація супроводжується зміною величин міжатомних сил, мірою якого є пружна механічна напруга.

Деформації поділяють на оборотні (пружні) та незворотні (пластичні, повзучості). Оборотні деформації зникають після закінчення дії прикладених сил, а незворотні — залишаються.

В основі оборотних деформацій лежить усунення атомів тіла від положення рівноваги, в основі незворотних - незворотні переміщення атомів на відстані від вихідних положень рівноваги (після зняття навантаження відбувається переорієнтація в нове рівноважне положення). Деформація визначається як відношення зміни довжини деформованого об'єкта до початкової довжини.

Деформація немає фізичної розмірності. Види деформації: стиск, розтяг, зсув, кручення, вигин.



Мал. 2.15. Види деформації: 1 – стиск; 2 – розтяг; 3 – зсув; 4 – кручення; 5 - вигин

У більшості практичних випадків спостерігається деформація є поєднанням кількох одночасних простих деформацій. У кінцевому рахунку, будь-яку деформацію можна звести до двох найпростіших: розтягування (або стиснення) та зсуву. Деформаціям можуть піддаватися одномірні тіла, плоскі об'єкти та об'ємні тіла. Відповідно, і деформації розрізняють як одномірні (наприклад, розтягування струни), двовимірні (розтягування пластин) та тривимірні (розтягування, стиск, зсув, кручення) кристалічного тіла.

2.3.1. Одновимірна деформація

Одновимірну деформацію зручно розглядати на прикладі струни, закріпленої в точці O , яка розтягується вздовж координатної осі Ox (рис.2.10).

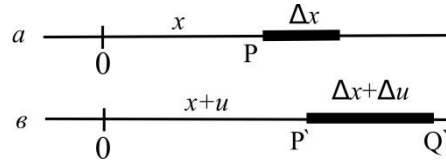


Рис.2.10 Деформація струни: а – до розтягування: в – після розтягування

Деформація відрізка – відношення збільшення відрізка для його первісної довжини

Під впливом розтягування точки P і Q перейде в положення P' і Q' .

$$OP = x, \quad OP' = x + u.$$

Відповідно,

$$PQ = \Delta x, \quad P'Q' = \Delta x + \Delta u.$$

$$\frac{P'Q' - PQ}{PQ} = \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

межі отримаємо деформацію у точці:

Деформація є похідною за координатою і є безрозмірною величиною.

Для однорідної деформації ϵ – константа. Інтегрування (2.27) дає:

$$u = u_0 + \epsilon x \tag{2.28}$$

де u_0 - Зміщення точки на початку координат.

2.4.2. Двовимірна деформація

Двовимірна деформація наочно демонструється на прикладі розтягування прямокутної пластинки, закріпленої у точці початку координат (рис.2.1

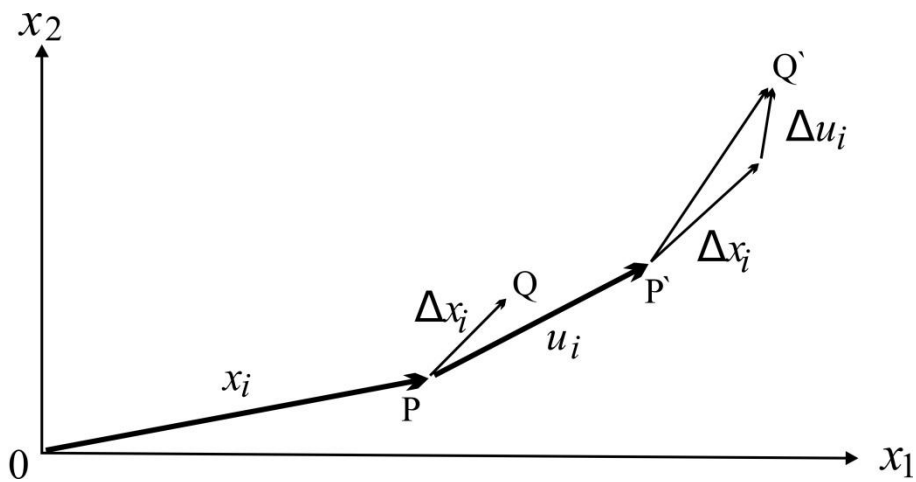


Рис.2.16. Зміщення точок при двовимірній деформації

Розглянемо дві точки пластини. Одна точка P має координати (x_1, x_2) і після розтягування перетворюється на положення P' $(x_1 + u_1, x_2 + u_2)$. Інша точка Q знаходиться біля точки P на відстані $PQ = |\Delta x_i|$. Приватні деформації у точці P рівні:

$$e_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad e_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \quad e_{21} = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}, \quad e_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}$$

або

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2). \quad (2.29)$$

Після деформації точка Q перетворюється на точку Q'.. Тоді вектор P'Q' дорівнює:

$$\overrightarrow{P'Q'} = \left| \overrightarrow{\Delta x_i} \right| + \left| \overrightarrow{\Delta u_i} \right|$$

Тут $\left| \overrightarrow{\Delta x_i} \right|$ - Різниця зміщень двох точок P і Q. Знаходимо збільшення:

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2$$

(*)

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2$$

або

$$\Delta u_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Delta x_j = e_{ij} \Delta x_j \quad (2.30)$$

$[\Delta u_i]$ та $[\Delta x_j]$ - вектори, отже $[e_{ij}]$ є тензором. Розглянемо тепер дві орієнтації

вектора $[\vec{\Delta x}_1]$: паралельно Ox_1 (вектор PQ_1) і паралельно Ox_2 (вектор PQ_2)

(Рис.2.12) і тим самим способом знайдемо, як спотвориться прямокутний елемент

з вершиною в точці Р. Для PQ_1 ми покладемо $\Delta x_2 = 0$; тоді рівняння (*)

набувають вигляду

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 = e_{11} \Delta x_1$$

(**)

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 = e_{21} \Delta x_1$$

Сенс величин Δu_i і та Δu_i зрозумілий з рис.2.12.

Неважко бачити, що e_{11} визначає розтяг на одиницю довжини відрізка PQ_1 , спроектованого на Ox_1 , бо

$$\frac{\Delta u_1}{\Delta x_1} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = \varepsilon_{11}$$

Розмір e_{21} визначає поворот відрізка PQ_1 проти годинникової стрілки. Насправді, тангенс кута цього повороту визначається виразом

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1 + \Delta u_1}.$$

Оскільки ми розглядаємо лише малі зміщення, то u_1 і u_2 малі проти x_1 , тому Δu_i і Δu_2 малі проти Δx_1 .

Тобто

$$\theta = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = e_{21}.$$

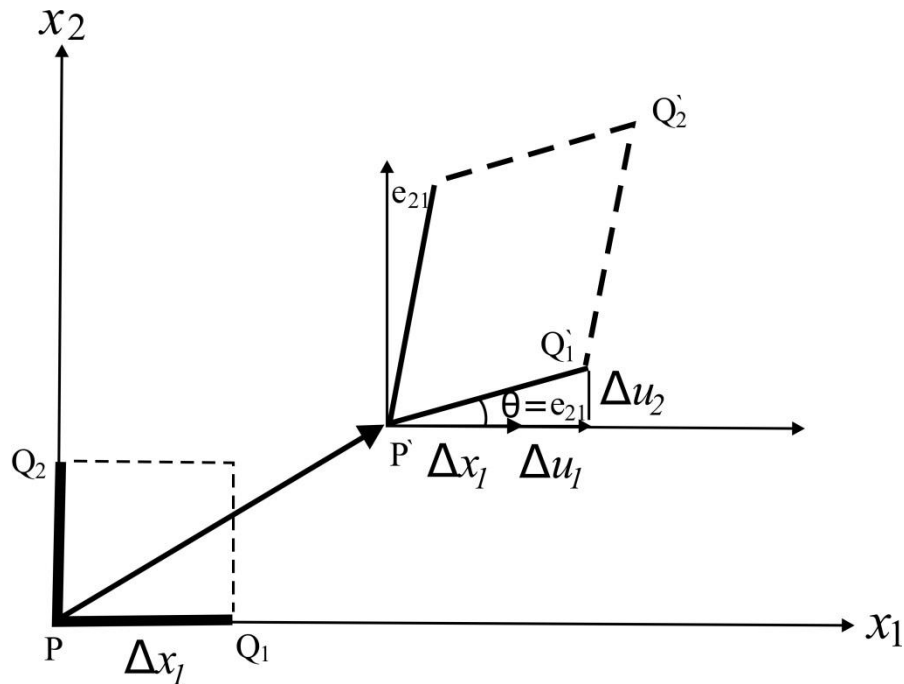


Рис.2.17 Визначення компонентів деформацій при двовимірній деформації.

Аналогічно, величина e_{22} дорівнює розтягу PQ_2 на одиницю довжини в напрямку Ox_2 , а e_{12} визначає (малий) поворот за годинниковою стрілкою PQ_2 і $P'Q_2'$.

Чи можна тепер запитати: чи правильно описує тензор $[e_{ij}]$ деформацію в точці P ? Ствердну відповідь на це питання можна дати лише в тому випадку, якщо за відсутності спотворень усі компоненти $[e_{ij}]$ дорівнюють нулю. Насправді ж це немає місця. Розглянемо простий поворот пластинки як жорсткого тіла у його площині проти годинникової стрілки на малий кут φ (Рис. 2.13).

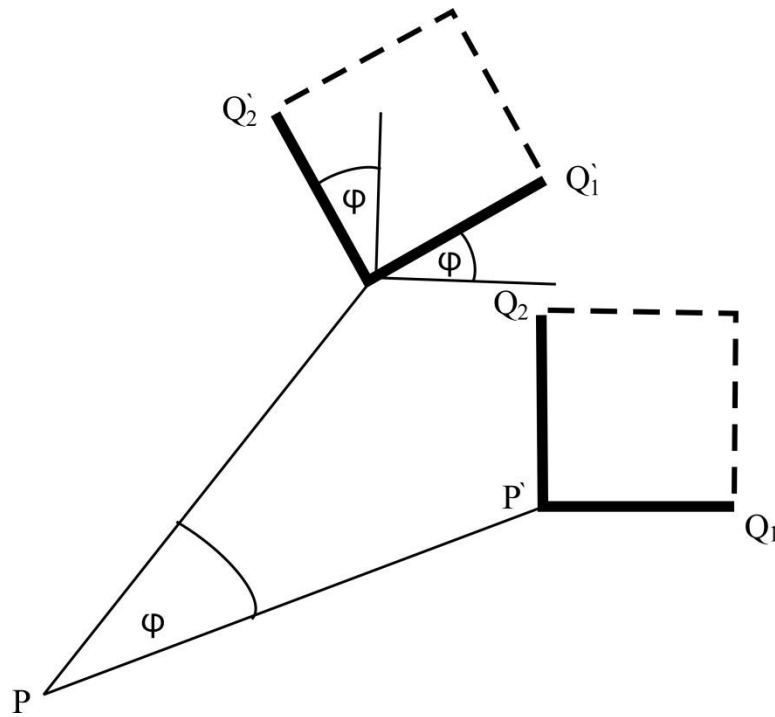


Рис.2.18. Усунення при малому повороті пластинки як одного цілого в її площині.

При цьому як PQ_1 , так і PQ_2 повертаються проти годинникової стрілки на кут φ і тому відповідно до геометричного змісту e_{ij} , встановленого вище, можна написати

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -\varphi \\ \varphi & 0 \end{bmatrix}.$$

Форма платівки не спотворюється, але $[e_{ij}]$ не перетворюється на нуль. Щоб обійти цю труднощі, ми маємо знайти спосіб обчислення частини $[e_{ij}]$, що відповідає повороту тіла як цілого.

Будь-який тензор другого рангу може бути представлений як сума симетричного та антисиметричного тензорів; тому тензор $[e_{ij}]$ можна записати у вигляді

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}$$

де

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji})$$

i

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}).$$

Легко бачити, що тензор $[\varepsilon_{ij}]$, заданий у такий спосіб, є симетричним, бо

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}) = e_{ji},$$

а отже введений тензор антисиметричний, бо

$$\omega_{ij} = -\frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}) = -\omega_{ji}$$

Вище ми бачили, що у разі чистого обертання тензор $[\varepsilon_{ij}]$ виявляється антисиметричним. Звідси укладаємо, що симетрична частина $[\varepsilon_{ij}]$, тобто тензор $[\varepsilon_{ij}]$ описує деформацію. Отже, загалом

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) \\ \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) & e_{22} \end{bmatrix}$$

Такий поділ $[\varepsilon_{ij}]$ на частини ілюструється рис.2.14. Діагональні компоненти тензора $[\varepsilon_{ij}]$ є розтягнуттями на одиницю довжини вздовж осей Ox_1 і Ox_2 . Компонента ε_{12} вимірює тензорну деформацію зсуву (тензорну деформацію зсуву).

Якщо в недеформованому тілі два лінійні елементи розташовані паралельно Ox_1 та Ox_2 , то після деформації кут між ними дорівнюватиме (рис.2.14):

$$\frac{1}{2}\pi - 2\varepsilon_{12}.$$

ауважимо, зокрема, що тензорна деформація зсуву ϵ_{12} дорівнює половині зміни кута між двома вказаними елементами.

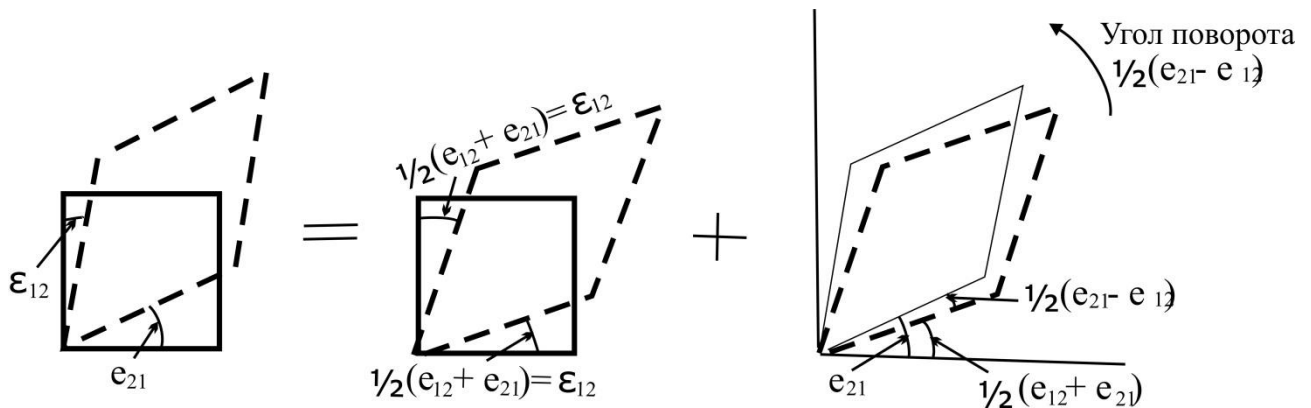


Рис. 2.19. Схема показує, що довільна деформація (ліворуч) дорівнює власне деформації (у середині) плюс поворот (праворуч)

2.3.3. Однорідна двовимірна деформація.

Якщо деформація однорідна, всі компоненти є константами і рівняння (2.29)

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2)$$

може бути проінтегровано: $u_i = (u_0)_i + e_{ij}x_j \quad (i, j=1, 2)$

Якщо на недеформованій пластині накреслити криву $f(x_1, x_2) = 0$, то після деформації вона перетворюється на $f(x'_1, x'_2) = 0$, де

$$x'_i = x_i + u_i = (u_0)_i + x_i + e_{ij}x_j.$$

Ця заміна змінних лінійна і, отже, при однорідній деформації:

- 1) пряма залишається прямою; 2) паралельні лінії залишаються паралельними; 3) усі прямі лінії подовжуються або скорочуються однаковою мірою; 4) еліпс перетворюється на еліпс.

2.3.4. Тривимірна деформація

Визначення деформації тривимірного тіла, наприклад, кристала, вводиться аналогічно визначенням, розглянутим у двох попередніх параграфах. Зміна усунення u_i з координатами x_j використовується для визначення дев'яти компонентів тензора

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

Якщо деформація однорідна, то всі компоненти є константами, як і в двовимірному випадку, і ми можемо записати:

$$u_{ij} = (u_0)_i + e_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2, 3), \quad (2.33)$$

де $(u_0)_i$ - зміщення точки, яка знаходиться на початку координат.

Розбиваємо e_{ij} на дві частини, отримуємо:

$$u_i = (u_0)_i + \omega_{ij}x_j + \varepsilon_{ij}x_j \quad (2.34)$$

При зображенні деформації зручно відокремити частину усунення, викликану переміщенням або обертанням тіла як цілого і описувати першими двома членами у правій частині рівняння (2.34), від тієї частини, яка викликається власне деформацією та описується останнім членом. Тому ми записуємо:

$$\vec{u}_i = \varepsilon_{ij}x_j$$

Ця рівність показує, що ε_{ij} пов'язує зсув u_i точки, викликане деформацією, з положенням вектора цієї точки. Так як тензор деформацій є симетричним тензором, його можна привести до головних осей. Зсувні компоненти при цьому зникають, і ми отримуємо:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{bmatrix}$$

Геометричний зміст головних деформацій ε_1 , ε_2 та ε_3 можна зрозуміти, взявши одиничний куб (рис.2.15) з ребрами, паралельними головним осям; при деформації прямі кути між ребрами зберігаються, а довжини ребер стають рівними $(1+\varepsilon_1)$, $(1+\varepsilon_2)$, $(1+\varepsilon_3)$.

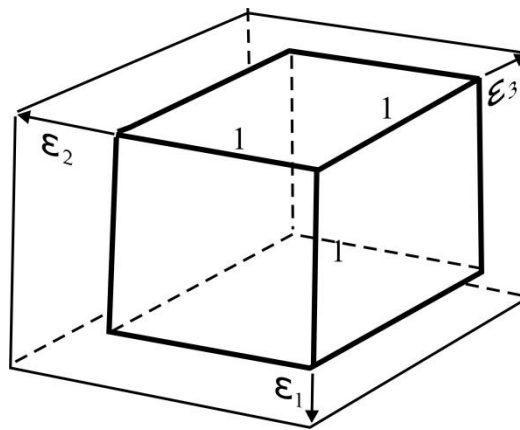


Рис.2.20. Деформація одиничного куба

Не слід думати, головні осі деформації лежать у напрямках, які залишаються незмінними при деформації. Це було б справедливо лише у разі рівності нулю обертання ω_{ij} .

Визначальною властивістю головних осей є те, що є трьома взаємно перпендикулярними напрямками у тілі, які за деформації залишаються взаємно перпендикулярними.

Зміна об'єму одиничного куба, зображеного на рис. 2.15 називається об'ємним розширенням і, якщо вважати ε_i малим (тобто твори $\varepsilon_i \varepsilon_i=0$), одно

$$\Delta = (1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3) - 1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$$

У довільній системі координат об'ємне розширення визначається виразом $\Delta = \varepsilon_{ij}$ є інваріантом.

2.4.5. Поверхня деформацій, еліпсоїд деформацій, подовження у довільному напрямку.

Рівняння характеристичної поверхні деформацій має вигляд:

$$\varepsilon_{ij} x_i x_j = 1.$$

Ця поверхня ідентична поверхні другого порядку

$$e_{ij} x_i x_j = 1,$$

що можна бачити, записавши рівняння у розгорнутому вигляді.

Таким чином, характеристична поверхня для тензора $[\varepsilon_{ij}]$ зображує лише його симетричну частину.

Деформація в довільному напрямку є розтягуванням на одиницю довжини, або подовження відрізка, що спочатку мав цей напрямок. Вектор \vec{l} на рис.2.16 є відрізком одиничної довжини в недеформованому тілі. При деформації він змінюється як у довжині, і у напрямку.

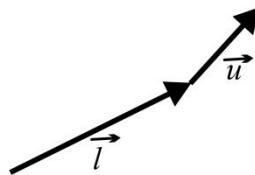


Рис.2.21. Зміна одиничного вектора за довжиною та напрямком при деформації тіла

Усунення його кінця внаслідок деформації є

$$\vec{u}_i = \varepsilon_{ij} x_j$$

Подовження є дорівнює компоненті i в напрямку i , отже,

$$\varepsilon = \vec{u}_i l_i = \varepsilon_{ij} l_i l_j$$

або, якщо висловити його через основні деформації,

$$\varepsilon = \varepsilon_1 l_1^2 + \varepsilon_2 l_2^2 + \varepsilon_3 l_3^2$$

Отриманий результат можна подати також поверхнею деформацій, наведеною на рис. 2.17

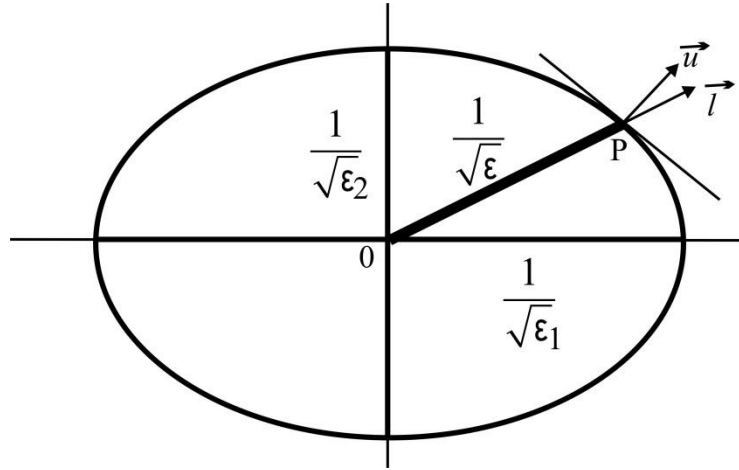


Рис.2.22. Двовимірне уявлення поверхні деформацій

Радіус-вектор OP у напрямку \vec{l} має довжину $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$, а напрям \vec{u} збігається з напрямком нормалі у точці P (рис.2.17). Для порівняння з формою поверхні деформацій па рис.2.18 показана деформація одиничної сфери з тими ж самими значеннями ε_1 і ε_2 .

\vec{u} совпадає с направлением нормали в точке P (рис.2.17).

Для сравнения с формой поверхности деформаций па рис.2.18, показана деформация единичной сферы с теми же самими значениями ε_1 и ε_2 .

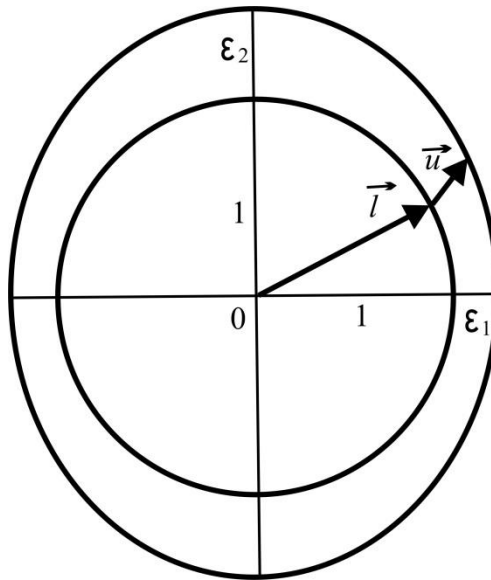


Рис.2.23. Деформація одиничної сфери зі значеннями ϵ_1 та ϵ_2

\vec{u} совпадає з напрямком нормалі в точці P (рис.2.17).

Для сравнення з формою поверхності деформаций па рис.2.18, показана деформація одиничної сфери с теми же самими значеннями ϵ_1 и ϵ_2 .

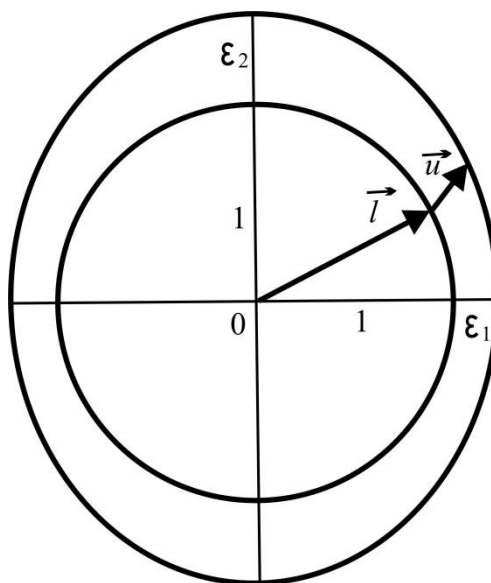


Рис.2.24. Деформація одиничної сфери со значеннями ε_1 и ε_2

Щоб знайти рівняння деформованої сфери, підставляємо її рівняння

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$$

$$x'_1 = x_1 (1 + \varepsilon_1),$$

$$x'_2 = x_2 (1 + \varepsilon_2),$$

$$x'_3 = x_3 (1 + \varepsilon_3)$$

Одержимо

$$\frac{x_1'^2}{(1 + \varepsilon_1)^2} + \frac{x_2'^2}{(1 + \varepsilon_2)^2} + \frac{x_3'^2}{(1 + \varepsilon_3)^2} = 1 \quad (2.35)$$

Цей еліпсоїд зазвичай називається еліпсоїдом деформацій; його не слід плутати з характерною поверхнею деформацій. Так як головні деформації $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ можуть бути і позитивними та негативними, поверхня деформацій

$$\varepsilon_1 x_1^2 + \varepsilon_2 x_2^2 + \varepsilon_3 x_3^2 = 1 \quad (2.36)$$

може бути дійсним або уявним еліпсоїдом або гіперболоїдом. Поверхня ж, що задається рівнянням (2.35), завжди є еліпсоїд.

2.3.5. Деформація та симетрія кристала

Деформація кристала не є його властивістю у тому сенсі, в якому ϵ , наприклад, теплопровідність. Деформація – це реакція кристала на вплив. Таким впливом може бути напруга (явище пружності) або електричне поле (п'єзоелектричний ефект). В обох випадках величина та напрямок головних деформацій визначаються як фізичними властивостями та симетрією кристала, так і величиною та напрямком впливу.

Отже, тензор деформацій, подібно до тензора напруги, не повинен узгоджуватися з симетрією кристала (якщо не узгоджується сама дія). Однак деформація може бути викликана зміною температури (теплове розширення

В цьому випадку дія є ненаправленою (воно описується скаляром), внаслідок чого результуюча деформація повинна узгоджуватися із симетрією кристала.

2.5. Пружність як властивість четвертої тензорної розмірності

2.5.1. Закон Гука

Якщо величина напруги нижче певного граничного значення, що називається межею пружності, то деформація є оборотною, тобто при знятті напруги тіло набуває початкової форми. Закон Гука свідчить, що в межах пружних деформацій (нижче межі пружності) деформація пропорційна величині прикладеної напруги. Наприклад, якщо на ізотропний твердий стрижень діє чисте розтягування σ , а поздовжня деформація ε дорівнює $\Delta l/l$, де Δl - збільшення довжини і l - первісна довжина, закон Гука має вигляд:

$$\varepsilon = s\sigma \quad (2.37)$$

де s - константа, звана константою пружною податливості, або податливістю для даної конкретної системи напруг і деформацій.

Використовується та інша форма запису:

$$\varepsilon = c\sigma, \quad c = \frac{1}{s} \quad (2.38)$$

де c - константа пружної жорсткості, або просто жорсткість, c називається також модулем Юнга.

Однак, однорідна напруга та однорідна деформація визначаються у загальному випадку тензорами другого рангу. Якщо до кристала прикладена довільна однорідна напруга σ_{ij} , то однорідна деформація, що виникає, така, що кожна її

компонента ε_{ij} лінійно пов'язана з усіма компонентами напруги. Так, наприклад, для ε_{11} :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} = & s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1112}\sigma_{12} + \\ & s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122}\sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} + \\ & s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{11} + s_{1133}\sigma_{33} \end{aligned} \quad (2.40)$$

для інших восьми компонентів ε_{ij} є вісім аналогічних рівнянь, де s -константи. Отже, закон Гука в узагальненій формі запишеться так:

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (2.41)$$

тут ε_{ijkl} - податливості кристала. Рівняння (2.41) замінює дев'ять рівнянь, у кожному з яких справа стоїть дев'ять членів. Всього 81 коефіцієнт ε_{ijkl} .

Якщо прикладена лише одна компонента напруги, скажімо σ_{11} , то з рівняння (8.1) (2.41) видно, що можуть бути відмінні від нуля всі компоненти деформації, а не тільки ε_{11} .

Звідси випливає, що й прямокутний стрижень, вирізаний з кристала, піддати одноосному розтягуванню паралельно чотирьом його ребрам, то стрижень як подовжуватиметься у напрямі розтягування, а й зазнавати зрушення. При цьому всі кути між ребрами стають відмінними від прямих кутів. Звичайно, що, якщо ми намагатимемося зігнути кристалічний стрижень, прикладаючи суто згинальну напругу до його кінців, то стрижень у загальному випадку не тільки згинатиметься, а й закручуватиметься.

Відповідно, якщо закрутити стрижень з кристала, додаючи до його кінців напруга, що чисто крутить, то в загальному випадку стрижень буде закручуватися і згинатися. Можна зробити інакше і висловити напруги через деформації за допомогою рівнянь

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl} \quad (2.42)$$

де s_{ijkl} - константи жорсткості кристала, число яких дорівнює 81. Фізичний зміст можна зрозуміти, уявивши собі, що на кристал діють різні прості напруги. Якби була прикладена зсувна напруга σ_{12} , а, без об'ємних моментів, σ_{12} не може бути прикладена без σ_{21} , ми отримали б:

$$\varepsilon_{11} = s_{1112}\sigma_{12} + s_{1121}\sigma_{21} = (s_{1112} + s_{1121})\sigma_{12}$$

Коефіцієнти s_{1112} та s_{1121} , завжди з'являються разом; якщо не брати до уваги об'ємні моменти, то в принципі неможливо уявити експеримент, при якому можна було б відокремити s_{1112} від s_{1121} або, в більш загальному випадку, s_{ijkl} від s_{ijlk}

Тому, щоб уникнути появи довільних постійних, вважатимемо рівними дві компоненти:

$$\varepsilon_{11} = s_{1133}\sigma_{33}, \quad \varepsilon_{22} = s_{2233}\sigma_{33} \text{ и т. д.}$$

Зокрема,

$$\varepsilon_{12} = s_{1233}\sigma_{33} \quad \text{и} \quad \varepsilon_{21} = s_{2133}\sigma_{33}$$

Але з визначення компонентів тензора деформації випливає, що $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$.

Тому $s_{1233} = s_{2133}$ и взагалі

$$s_{ijkl} = s_{jikl} \tag{2.44}$$

Завдяки співвідношенням (2.43) і (2.44) тільки 36 з 81 компонент s_{ijkl}

$$\varepsilon_{12} = s_{1233}\sigma_{33} \quad \text{и} \quad \varepsilon_{21} = s_{2133}\sigma_{33}$$

є незалежними.

Для визначення конкретного фізичного сенсу коефіцієнтів s_{ijkl} у рівнянні (2.42) уявімо сукупність компонент напруг, прикладених до кристала і обраних таким чином, щоб усі компоненти деформацій зникали, за винятком однієї нормальної або пари зсувних компонентів. Таким чином, щоб виникли компоненти тензорних зсувних деформацій ε_{12} і ε_{21} необхідно задати напруги

$$\sigma_{ij} = c_{ij12} \varepsilon_{12} + c_{ij21} \varepsilon_{21} = (c_{ij12} + c_{ij21}) \varepsilon_{12}$$

Вважаємо, що коефіцієнти, які завжди з'являються разом, попарно рівні один одному. Тоді в загальному випадку

$$c_{ijkl} = c_{jilk} \quad (2.45)$$

Розглядаючи окремі випадки, як це робилося раніше для s_{ijkl} , можна знайти, що

$$c_{ijkl} = c_{jikl}. \quad (2.46)$$

Завдяки співвідношенням (2.45) та (2.46) число незалежних компонентів s_{ijkl} також зменшується від 81 до 36.

Покажемо тепер, що 81 коефіцієнт утворюють тензор четвертого рангу. Тензор четвертого рангу, подібно до тензорів нижчих рангів, визначається його законом перетворення. Сукупність з 81 числа, що описує деяку фізичну величину, утворює тензор четвертого рангу, якщо ці числа при зміні системи координат перетворюються на T'_{ijkl} , де

$$T'_{ijkl},$$

де

$$T'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} T_{mnop} \quad (2.47)$$

Щоб довести, що утворюють такий тензор, надійде так. Очевидно:

$$\varepsilon'_{ij} = a_{ik} a_{jl} \varepsilon_{kl}, \text{ но} \quad (2.48)$$

$$\varepsilon_{kl} = s_{klmn} \sigma_{mn}, \text{ а} \quad (2.49)$$

$$\sigma_{mn} = a_{om} a_{pn} \sigma'_{op} \quad (2.50)$$

Виходить, що в першому рівнянні ε_{ij}' у штрихованій системі координат виражається через ε_{mn} у старій, нештрихованій системі координат. Друге

рівняння пов'язує деформацію та напругу в нештрихованій системі координат згідно із законом Гука.

Третье уравнение выражает напряжение σ_{mn} в старой системе координат (нештрихованной) через напряжение σ'_{op} в новой штрихованной системе координат.

Таким образом, эти три уравнения выражают преобразование закона Гука от нештрихованной системы координат к штрихованной

$$\varepsilon' \xrightarrow{(2.48)} \varepsilon \xrightarrow{2.49} \sigma \xrightarrow{2.50} \sigma'$$

$$\varepsilon'_{ij} = a_{ik} a_{jl} s_{klmn} a_{om} a_{pn} \sigma'_{op}.$$

$$\varepsilon'_{ij} = s'_{ijop} \sigma'_{op}$$

$$s'_{ijop} = a_{ik} a_{jl} a_{om} a_{pn} s_{klmn}$$

$$s'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} s_{mnop} \quad (2.51)$$

обто це і є закон перетворення тензора четвертого рангу. Щоб ще раз показати, наскільки полегшується запис при використанні індексів підсумовування, зауважимо, що рівняння (2.51) відповідає 34 рівнянням, у кожному з яких є 34 членів з правого боку, тобто рівняння (2.51) містить лише $38 = 6561$ членів.

Наведений вище доказ має загальний характер. Якщо два тензори другого рангу A_{ij} та B_{kl} пов'язані рівнянням

$$A_{ij} = C_{ijkl} B_{kl}$$

то величини C_{ijkl} утворюють тензор четвертого рангу. Звідси випливає, що коефіцієнти жорсткості c_{ijkl} утворюють тензор четвертого рангу.

2.5.2. Матричні позначення

Завдяки симетричності S_{ijkl} і C_{ijkl} за першими двома та останніми двома індексами ми можемо використовувати матричні позначення, введені раніше. Компоненти напруги та компоненти деформацій, як і вище, записуються з одним індексом, що пробігає значення від 1 до 6:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{12} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \frac{1}{2}\varepsilon_5 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_5 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

У S_{ijkl} та C_{ijkl} два перші індекси можна об'єднати в один, що пробігає значення від 1 до 6; два останніх можна об'єднати тим самим способом; в результаті виходить наступна схема заміни індексів:

Тензорні позначення: 11 22 33 23,32 31,13 12,21

Матричні позначення: 1 2 3 4 5 6

При цьому вводяться множники 2 та 4 наступним чином:

$$S_{ijkl} = S_{mn} \quad \text{у випадках, коли } m \text{ і } n \text{ дорівнюють } 1,2 \text{ або } 3;$$

$2s_{ijkl} = s_{mn}$ у випадках, коли m або n дорівнюють 4,5 або 6;

$4s_{ijkl} = s_{mn}$ у випадках, коли m і n дорівнюють 4,5 або 6;

Розглянемо тепер рівняння (2.41) для деяких ε_{ij} у розгорнутому вигляді:

ε_{ij} в розвернутому виді:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{11} = & s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1113}\sigma_{13} + \\ & + s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122}\sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} + \\ & + s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{32} + s_{1133}\sigma_{33}\end{aligned}$$

У матричному позначенні це рівняння набуде вигляду:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 = & s_{11}\sigma_1 + \frac{1}{2}s_{16}\sigma_6 + \frac{1}{2}s_{15}\sigma_5 + \\ & + \frac{1}{2}s_{16}\sigma_6 + s_{12}\sigma_2 + \frac{1}{2}s_{14}\sigma_4 + \\ & + \frac{1}{2}s_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}s_{14}\sigma_4 + s_{13}\sigma_3\end{aligned}$$

Для компоненти ε_{23} :

$$\begin{aligned}\varepsilon_{23} = & s_{2311}\sigma_{11} + s_{2312}\sigma_{12} + s_{2313}\sigma_{13} + \\ & + s_{2321}\sigma_{21} + s_{2322}\sigma_{22} + s_{2323}\sigma_{23} + \\ & + s_{2331}\sigma_{31} + s_{2332}\sigma_{32} + s_{2333}\sigma_{33}\end{aligned}$$

У матричному позначенні це рівняння набуде вигляду:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\varepsilon_4 = & \frac{1}{2}s_{41}\sigma_1 + \frac{1}{4}s_{46}\sigma_6 + \frac{1}{4}s_{45}\sigma_5 + \\ & + \frac{1}{4}s_{46}\sigma_6 + \frac{1}{2}s_{42}\sigma_2 + \frac{1}{4}s_{44}\sigma_4 + \\ & + \frac{1}{4}s_{45}\sigma_5 + \frac{1}{4}s_{44}\sigma_4 + \frac{1}{2}s_{43}\sigma_3\end{aligned}$$

У скороченому записі:

$$\varepsilon_i = s_{1j} \sigma_j \quad \text{и} \quad \varepsilon_4 = s_{4j} \sigma_j \quad (2.53)$$

Отже, у випадку рівняння (2.41) можна записати коротше так:

$$\varepsilon_i = s_{ij} \sigma_j \quad (i,j= 1,2,3,\dots,6)$$

Множники 2 і 4 вводяться у визначення ε тому, що таким шляхом вдається уникнути появи цих множників у рівнянні (2.53) і можна записати в компактній формі .

Для C_{ijkl} множники 2 та 4 вводити не потрібно. Тому, якщо ми запишемо просто

$$C_{ijkl} = \sigma_{mn} \quad (i,j= 1,2,3,\dots,6; m,n =,2,3,\dots,6)$$

то, розгортаючи деякі члени, можна показати, що рівняння (2.52) набувають форми

$$\sigma_i = s_{ij} \varepsilon_j \quad (i,j= 1,2,3,\dots,6) \quad (2.54)$$

Таблиці S_{ij} та C_{ij} , записані у вигляді квадратів

$$\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{51} & s_{52} & s_{53} & s_{54} & s_{55} & s_{56} \\ s_{61} & s_{62} & s_{63} & s_{64} & s_{65} & s_{66} \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \quad (2.55)$$

утворюють матриці (s_{ijkl}) та (c_{ijkl}) . Зауважимо, що тут, незважаючи на наявність двох індексів, не є компонентами тензора другого рангу і тому не перетворюються на такі компоненти. Для перетворення їх до інших осей координат необхідно повернутись до тензорних позначень.

2.5.3. Енергія деформованого кристала

Розглянемо кристал, що має у недеформованому стані форму одиничного куба, і припустимо, що він відчуває малу однорідну деформацію з компонентами ε_i . Нехай тепер усі компоненти деформації зростуть до $\varepsilon_i + d\varepsilon_i$; Доведемо, що робота, виконана при цьому компонентами напруги σ_i , що діють на межі куба, виражається у вигляді

$$dW = \sigma_i d\varepsilon_i, \quad (i=1,2,3,\dots,6) \quad (2.56)$$

Спочатку припустимо, що компонент деформації ε_1 зростає до $\varepsilon_1 + d\varepsilon_1$, тоді як інші компоненти деформації та положення центру куба залишаються незмінними. При цьому кожна з двох граней перпендикулярних Ox_1 зміститься у напрямку від центру куба на $\frac{1}{2} d\varepsilon_1$; інші чотири грані просто збільшаться площею, а становища їх центрів не зміняться. Таким чином, робота, зроблена силами, що діють на останні чотири грані, дорівнюватиме нулю. Робота, вироблена силою, що діє на межі, перпендикулярні до Ox_1 дорівнює їх зсуву, помноженому на нормальну компоненту сили, тобто.

$$2\sigma_1 \frac{1}{2} d\varepsilon_1 = \sigma_1 d\varepsilon_1.$$

Ми отримали член з $l=1$ у рівнянні (8.16); члени з $l=2$ та $l=3$ знаходяться аналогічно.

Нехай тепер розглянутий нами куб зазнає деформації зсуву. Будемо вважати, що дві грані, перпендикулярні Ox_2 , зміщуються в протилежних напрямках паралельно Ox_3 так, що компонент деформації ε_4 зростає до $\varepsilon_4 + d\varepsilon_4$. При цій деформації (простий зсув) центри граней, перпендикулярних до Ox_2 , зсуваються на відстань $\frac{1}{2} d\varepsilon_4$

Компонента сили, що діє на межі цих напрямків, є σ_4 . Отже, робота, зроблена розглянутими силами, записується у вигляді

$$\frac{1}{2} d\varepsilon_4.$$

Компонента силы, действующая на грани в этих направлениях, есть σ_4 .

Следовательно, работа, произведенная рассматриваемыми силами, записывается в виде

$$2\sigma_4 \cdot \frac{1}{2} d\varepsilon_4 = \sigma_4 d\varepsilon_4$$

Члены с $l = 5$ и $l = 6$ в уравнении (8.16) выводятся аналогичным путем. В результате мы получим, что уравнение (8.16) в тензорном обозначении принимает вид

$$dW = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

Если процесс деформации протекает изотермически и обратимо, то произведенная работа равна возрастанию свободной энергии $d\Psi$ и для **единичного объема** можно написать

$$d\Psi = dW = \sigma_i d\varepsilon_i \tag{2.57}$$

Если выполняется закон Гука (2.54), то это уравнение принимает вид

$$d\Psi = c_{ij} \varepsilon_j d\varepsilon_{ij} \tag{2.58}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_i} c_{ij} \varepsilon_j$$

Дифференцируя обе части уравнения по ε_j , получим

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_j} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_i} \right) = c_{ij}$$

А так как Ψ - это функция только состояния тела, что определяется компонентами деформации, то порядок дифференцирования не имеет значения и левая сторона этого соотношения симметрична по i и j . Поэтому

$$c_{ij} = c_{ji} \quad (2.59)$$

З форми співвідношення між (c_{ij}) та (s_{ij}) , (див. гл. IX, § 4, п. 2) випливає, що

$$s_{ij} = s_{ji} \quad (2.60)$$

Завдяки симетричності матриць (c_{ij}) і (s_{ij}) , яка визначається співвідношеннями (2.59) і (2.60), число незалежних жорсткостей і податливостей зменшується ще більше - від 36 до 21.

Інтегруючи рівняння (2.58) та використовуючи співвідношення (2.59), знаходимо, що віднесена до одиниці об'єму кристала робота ψ , необхідна для створення деформації в 1 і звана енергією деформації, дорівнює

$$\psi = \frac{1}{2} c_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j \quad (2.61)$$

2.5.4. Вплив симетрії кристала

Внаслідок симетрії кристала число незалежних c_{ij} та s_{ij} зменшується ще більше. Слід зазначити від початку, що пружність є центросиметричним властивістю. Це означає, якщо осі координат перетворені дією центру симетрії, то компоненти c_{ijkl} і s_{ijkl} залишаються незмінними.

Доказ цього становища дуже простий. Елементи a_{ij} матриці перетворення дорівнюють у разі δ_{ij} . Тому, згідно з рівнянням (2.51), ми маємо

$$s'_{ijkl} = \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{ko} \delta_{lp} s_{mnop}$$

Для c_{ijkl} доказ є аналогічним. Однак інші елементи симетрії накладають на пружні константи певні обмеження, які слід розглянути.

а) Метод аналізу симетрії кристала.

Умови, що накладаються на s_{ij} і s_{ji} , можна отримати безпосередньо шляхом розгляду симетрії без застосування будь-яких аналітичних методів. Розглянемо, наприклад, податливість s_{34} для орторомбічного класу 222. Вона характеризує розтяг у напрямку осі Ox_3 , коли до кристала прикладені зсувні сили в площині, перпендикулярній Ox_1 , як показано на рис. 2.19а.

Подіємо тепер на всю систему (кристал плюс зсувні сили) віссю другого порядку, паралельної Ox_2 . Кристал у своїй залишається незмінним, оскільки його симетрія включає вісь другого порядку; те саме буде і з розтягненням, паралельним Ox_3 . Проте сили, прикладені до граней, заміняться сили, показані на рис. 2.19b.

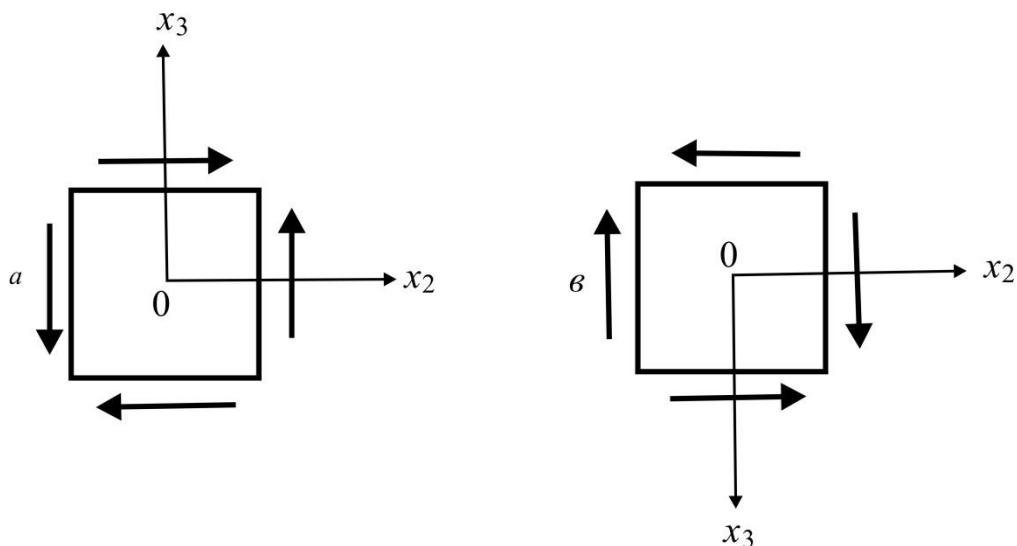


Рис 2.25. Для симетрії класу 222 податливість $s_{34}=0$

Отже, ми маємо той же кристал, як і раніше, розтягнутий вздовж напрямку Ox_3 , але під дією протилежних сил. Це можливе лише в тому випадку, якщо розтягнення дорівнює нулю. Таким чином, $s_{34}=0$. Аналогічний розгляд можна застосувати до більшості податливостей у різних кристалографічних класах.

б) Метод прямої перевірки.

За допомогою методу прямої перевірки можна найшвидше визначити незалежні пружні константи для всіх класів, за винятком класів, що належать до тригональної та гексагональної систем. Для ілюстрації цього досить одного прикладу.

Виберемо, скажімо, клас 4^- (вісь четвертого порядку). Так як вісь 4^- паралельна x_3 , осі координат перетворюються наступним чином:

вісь x_1 переходить у вісь x_2 , а x_2 переходить у вісь $(-x_1)$, вісь x_3 переходить у вісь $(-x_3)$.

Отже, при чотирьохендексовому позначенні пари індексів перетворюються за правилом:

$$11 \rightarrow 22; 22 \rightarrow 11; 33 \rightarrow 33; 23 \rightarrow -13; 31 \rightarrow -32;$$

При двоіндексному позначенні перетворення індексів мають вигляд

$$1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 3, 4 \rightarrow 5, 5 \rightarrow -4, 6 \rightarrow -6$$

Таблиця індексів, виписана у вигляді матриці у звичайному порядку (2.55), перетворюється тоді так:

$$\begin{pmatrix} 22 & 21 & 23 & 25 & -24 & -26 \\ 21 & 11 & 13 & 15 & -14 & -16 \\ 23 & 13 & 33 & 35 & -34 & -36 \\ 25 & 15 & 35 & 55 & -54 & -36 \\ -24 & -14 & -34 & -54 & 44 & 46 \\ -26 & -16 & -36 & -36 & 46 & 66 \end{pmatrix}$$

Матриця симетрична. Прирівнюючи цю таблицю компоненту за компонентою до початкової,

$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{bmatrix}$$

можна відразу бачити всі співвідношення між компонентами (рис. 2.21):

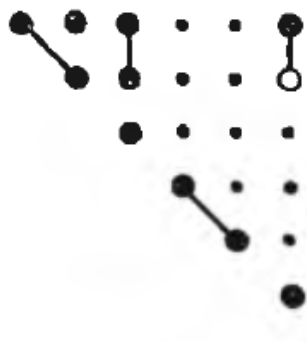


Рис. 2.26. Побудова схеми компонентів тензора з урахуванням їх рівності щодо один одного

Тут використовували такі позначення: малі точки означають компоненти, рівні нулю; жирні - компоненти, відмінні від нуля; лінії, що з'єднують дві жирні точки, означають, що відповідні компоненти дорівнюють один одному; жирна точка та світлий кружок, з'єднані лінією, відповідають чисельно рівним, але протилежним за знаком компонентам.

З наведеної схеми результатів порівняння матриць видно, що число незалежних і не рівних нулю компонент тензора податливості для тетрагонального кристала класу дорівнює 7.

в) Результати всім кристалографічних класів.

Для тригональної та гексагональної систем необхідно застосовувати аналітичний метод. Метод прямої перевірки можна використовувати в інших випадках. Число незалежних компонентів може бути також встановлено також за допомогою теорії груп. Результати для матриць (s_{ij}) та (c_{ij}) наведені у вигляді схем для деяких класів кристалів (рис. 2.22 – 2.24).

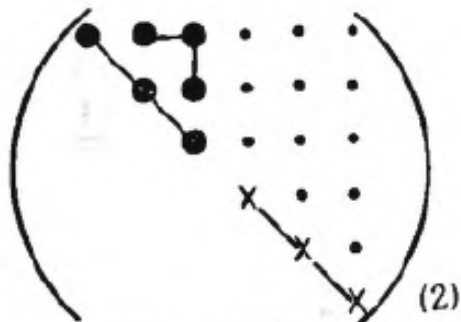


Рис. 2.27. Схема співвідношення компонентів матриці тензора податливості для ізотропного об'єкту. ● — компоненти, відмінні від нуля; • — компоненти, що дорівнюють нулю; Н - компоненти рівні

$2(s_{11} - s_{12})$ (2) — число незалежних компонент



Рис. 2.28. Схема співвідношення компонентів матриці тензора податливості для кубічного кристала (3)-число незалежних компонент

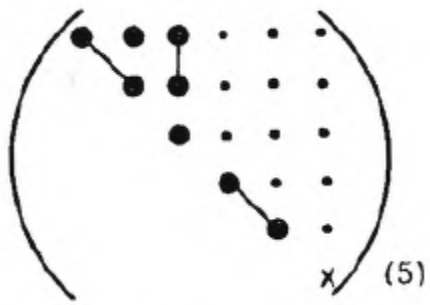


Рис. 2.29. Схема співвідношення компонентів матриці тензора податливості для гексагонального кристала Н - компоненти рівні $2(s_{11} - s_{12})$; (5)-число незалежних компонентів



Рис.2.30. Схема співвідношення компонентів матриці тензора податливості для орторомбічного кристала (9)-число незалежних компонентів

Приклад.

Як чисельний приклад наведемо матрицю тензора податливості кристала дигідрофосфату амонію, що належить до класу 42т.

Компоненти матриць (s_{ij}) і (c_{ij}) в СІ (Па) при 0° для цього кристала були вимірювані Мезоном і опубліковані в Physical Review, 69, 173 (1946).

$$(s_{ij}) = \begin{vmatrix} 1.8 & 0.7 & -1.1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.7 & 1.8 & -1.1 & 0 & 0 & 0 \\ -1.1 & -1.1 & 4.3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 11.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 11.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 16.2 \end{vmatrix} \times 10^{-11}$$

$$(c_{ij}) = \begin{vmatrix} 0.71 & -0.20 & 0.13 & 0 & 0 & 0 \\ -0.20 & 0.71 & 0.13 & 0 & 0 & 0 \\ 0.13 & 0.13 & 0.30 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.088 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.088 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.070 \end{vmatrix} \times 10^{11}$$

2.5.5. Додаткові обмеження, що накладаються на пружні константи.

Кристали – тіла стійкі. Отже, енергія деформації кристала, що задається формулою (2.61), має бути позитивною, інакше кристал буде нестійким. Це означає, що квадратична форма (2.61) повинна бути суттєво позитивною, тобто бути більшою за нуль для будь-яких дійсних значень s_{ij} , за винятком випадку, коли всі ε_{ij} дорівнюють нулю. Ця умова накладає на s_{ij} і c_{ij} додаткові обмеження, які можна знайти звичайними методами алгебри. Для гексагональних кристалів ці обмеження для c_{ij} такі:

$$c_{44} > 0, \quad c_{11} > |c_{12}|, \quad (c_{11} + c_{12})c_{33} > 2c_{13}^2$$

Для кубічних кристалів вони записуються як:

$$c_{44} > 0, \quad c_{11} > |c_{12}|, \quad c_{11} + 2c_{12} > 0$$

На податливості накладаються такі ж обмеження.

2.5.6. Напружено-деформований стан ізотропних середовищ

На рис. наведено матрицю (s_{ij}) для ізотропних матеріалів. Виразимо s_{ij} через звичні величини: модуль Юнга і модуль зсуву. Спочатку ми випишемо рівняння, що виражають компоненти деформацій через компоненти напруги, і для порівняння запишемо поряд ті самі величини у формі, що часто використовується в підручниках з теорії пружності:

$$\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3,$$

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{E}[\sigma_1 - \nu(\sigma_2 + \sigma_3)],$$

$$\varepsilon_2 = s_{12}\sigma_1 + s_{11}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3,$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{E}[\sigma_2 - \nu(\sigma_3 - \sigma_1)],$$

$$\varepsilon_3 = s_{12}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{11}\sigma_3,$$

$$\varepsilon_3 = \frac{1}{E}[\sigma_3 - \nu(\sigma_1 + \sigma_2)],$$

$$\varepsilon_4 = 2(s_{11} - s_{12})\sigma_4,$$

$$\varepsilon_5 = \frac{1}{G}\sigma_5,$$

$$\varepsilon_5 = 2(s_{11} - s_{12})\sigma_5,$$

$$\varepsilon_6 = \frac{1}{G}\sigma_6,$$

$$\varepsilon_6 = 2(s_{11} - s_{12})\sigma_6,$$

$$\varepsilon_4 = \frac{1}{G}\sigma_4,$$

де E модуль Юнга, G - модуль зсуву ν - коефіцієнт Пуассона. Порівнюючи коефіцієнти у виразів, виписаних ліворуч і праворуч, отримуємо:

$$s_{11} = \frac{1}{E}, \quad s_{12} = -\frac{\nu}{E}, \quad 2(s_{11} - s_{12}) = \frac{1}{G}, \quad (2.62)$$

звідки випливає співвідношення

$$G = \frac{1}{2(1+\nu)}.$$

Аналогічно для констант жорсткості c_{ij} , запишемо рівняння, що виражають напруги через деформації, і порівняємо їх з аналогічними рівняннями, які зазвичай використовуються в теорії пружності:

$$\sigma_1 = c_{11}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{12}\varepsilon_3,$$

$$\sigma_1 = (2\mu + \lambda)\varepsilon_1 + \lambda\varepsilon_2 + \lambda\varepsilon_3,$$

$$\sigma_2 = c_{12}\varepsilon_1 + c_{11}\varepsilon_2 + c_{12}\varepsilon_3,$$

$$\sigma_2 = \lambda\varepsilon_1 + (2\mu + \lambda)\varepsilon_2 + \lambda\varepsilon_3,$$

$$\sigma_3 = c_{12}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{11}\varepsilon_3,$$

$$\sigma_3 = \lambda\varepsilon_1 + \lambda\varepsilon_2 + (2\mu + \lambda)\varepsilon_3,$$

$$\sigma_4 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})\varepsilon_4,$$

$$\sigma_4 = \mu\varepsilon_4,$$

$$\sigma_5 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})\varepsilon_5,$$

$$\sigma_5 = \mu\varepsilon_5,$$

$$\sigma_6 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})\varepsilon_6,$$

$$\sigma_6 = \mu\varepsilon_6.$$

Звідси

$$c_{11} = 2\mu + 1 \quad \text{и} \quad c_{12} = \lambda. \quad (2.63)$$

μ и λ - константи Ламе

2.5.7. Характеристичні поверхні та модуль Юнга

Пружні властивості кристала не можна повністю уявити однією поверхнею.

Насправді використовують поверхню, що зображує анізотропію модуля Юнга з напрямом. Припустимо, що із кристала вирізаний стрижень, довжина якого паралельна довільному напрямку Ox_1^{\wedge} . Якщо до цього стрижня прикласти напругу розтягування, то в загальному випадку воно викликає не лише поздовжню та поперечну деформацію,

Спостерігається також деформації зсуву.

Модуль Юнга у напрямі розтягування визначається як відношення поздовжньої напруги до поздовжньої деформації, тобто дорівнює $1/(x_1^{\wedge})$. Зазвичай використовуються характеристичні поверхні, радіус-вектор яких у напрямку Ox_1^{\wedge} пропорційний s_{11}^{\wedge} або $1/(s_{11}^{\wedge})$. Як приклад візьмемо кристал цинку, що належить до гексагональної системи. Записуємо загальний вираз

$$s'_{11} = a_{1m}a_{1n}a_{1p}a_{1q}s_{mnpq}.$$

Використовуючи відповідну матрицю податливостей, наведену на рис.2.23, знаходимо, переходячи після деяких спрощень до скорочених позначень:

$$s'_{11} = s_{11}(1 - a_{13}^2)^2 + s_{33}a_{13}^2 + (s_{44} + 2s_{13})(1 - a_{13}^2)a_{13}^2$$

або

де θ -кут між довільним напрямом Ox_i і кристалографічної віссю z (віссю Ox_3).

Поверхня s'_{11} або $(\frac{1}{s'_{11}})$ є у разі поверхнею обертання навколо Ox_3 . Податливості кристала мають такі значення [45]:

$$s_{11} = 8.4, s_{12} = 1.1, s_{13} = -7.8, s_{33} = 28.7, s_{44} = 26.4 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{Н}$$

Перетин одержуваної у своїй поверхні показано на рис. 2.25.

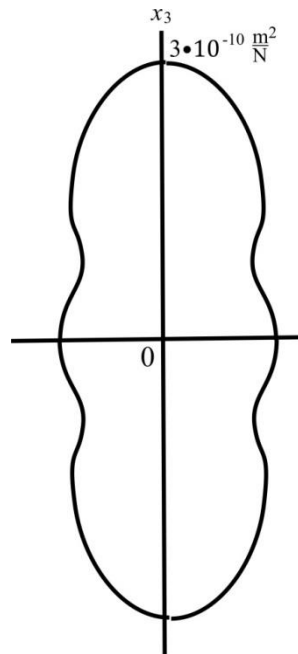


Рис.2.31. Центральне переріз характеристичної поверхні для модуля Юнга цинку [45]. Довжина радіуса-вектора пропорційна $1/s_{11}$, тобто обернено пропорційна модулю Юнга.

Ми наведемо тепер вираз для s'_{11} — величини, зворотної модулю Юнга, у напрямку одиничного вектора l_1 для деяких кристалографічних систем.

Орторомбічна система:

$$l_1^4 s_{11} + 2l_1^2 l_2^2 s_{12} + 2l_1^2 l_3^2 s_{13} + l_2^4 s_{22} + 2l_2^2 l_3^2 s_{23} + l_3^4 s_{33} + l_2^2 l_3^2 s_{44} + l_1^2 l_3^2 s_{55} + l_1^2 l_2^2 s_{66}.$$

Кубічна система-

$$s_{11} - 2 \left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{44} \right) (l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2).$$

Гексагональна система:

$$(1 - l_3^2)^2 s_{11} + l_3^4 s_{33} + l_3^2 (1 - l_3^2) (2s_{13} + s_{44})$$

Зазначимо, що з кубічної системи модуль Юнга перестав бути ізотропним. Його зміна з напрямом залежить від

$$(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2).$$

Ця величина дорівнює нулю у напрямках осей куба $\langle 100 \rangle$ і має максимальне значення, що дорівнює $1/3$, у напрямках $\langle 111 \rangle$. Отже, його величина

$$\left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{44} \right)$$

позитивна, як це має місце для всіх кубічних металів, за винятком молібдену, і найбільше значення модуля Юнг відповідає напрямкам $\langle 111 \rangle$. а найменше — напрямки $\langle 100 \rangle$. Поверхня, радіуси-вектори якої прямо пропорційні модулю Юнга, буде мати форму куба з округленими кутами і заглибленнями в центрах граней. Її центральні перерізи, перпендикулярні $\langle 111 \rangle$, будуть колами. Рівність

$$\left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{44} \right) = 0$$

є умовою пружної ізотропії. Якщо

$$\left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2} s_{44} \right) < 0,$$

то модуль Юнга має найменше значення у напрямках $\langle 111 \rangle$ та найбільше — у напрямках $\langle 100 \rangle$. Поверхня модулів Юнга має опуклості в центрах граней.

5.7. Об'ємна та лінійна стисливість кристала

а) Об'ємна стисливість. Обчислимо відносне зменшення обсягу кристала під дією одиничного гідростатичного тиску, зване об'ємною стисливістю. У рівнянні (2.5) покладемо

$$\sigma_{kl} = -p\delta_{kl}$$

тоді

$$\varepsilon_{ij} = -ps_{ijkl}\delta_{kl} = ps_{ijkl} \quad (2.65)$$

Для об'ємного стиснення Δ (див. рис. 2.15) маємо

$$\Delta = \varepsilon_{ii} = -ps_{iikk};$$

таким чином, об'ємна стисливість

$$-\frac{\Delta}{p} = s_{iikk}.$$

Це новий приклад інваріанту, який утворюється з тензора. У матричному позначенні об'ємна стисливість має вигляд:

$$s_{11} + s_{22} + s_{33} + 2(s_{12} + s_{23} + s_{31}), \quad (2.26)$$

тобто являє собою суму дев'яти коефіцієнтів, що стоять у лівому верхньому куті матриці податливості. Вочевидь, що з кубічних кристалів об'ємна стисливість дорівнює $3(s_{11} + 2s_{12})$; це справедливо й у ізотропних матеріалів. Проте в останньому випадку зазвичай на підставі співвідношень (8.22) вводять величину, обернену до об'ємної стисливості — об'ємний модуль

$$K = \frac{1}{3(s_{11} + 2s_{12})} = \frac{E}{3(1 - 2\nu)}.$$

б) Лінійна стисливість.

Лінійна стисливість кристала є відносним зменшенням довжини деякого відрізка, взятого в кристалі, при дії на кристал одиничного гідростатичного тиску. У випадку лінійна стисливість змінюється з напрямом. Подовження відрізка, що лежить у напрямку одиничного вектора l_i (див. рис. 2.16), під дією тиску p можна, використовуючи (8.24), записати у вигляді

тиску p можна, використовуючи (8.24), записати у вигляді

$$\varepsilon_{ij} l_i l_j = -p s_{ijkl} l_i l_j$$

таким чином, лінійна стисливість

$$\beta = s_{ijkl} l_i l_j.$$

Орторомбічна система:

$$\beta = (s_{11} + s_{12} + s_{13}) l_1^2 + (s_{12} + s_{22} + s_{23}) l_2^2 + (s_{13} + s_{23} + s_{33}) l_3^2.$$

Тетраганальна, тригональна и гексагональна системи

$$\beta = (s_{11} + s_{12} + s_{13}) - (s_{11} + s_{12} - s_{13} - s_{33}) l_3^2.$$

Кубічна система:

$$\beta = s_{11} + 2s_{12}$$

Для кубічної системи лінійна стисливість ізотропна: сфера із кубічного кристала при гідростатичному стиску залишається сферою.

2.5.9. Співвідношення між податливістю та жорсткістю

Між компонентами жорсткості та податливості існує однозначний зв'язок. Для кубічної системи всіх класів вони мають вигляд [17]:

$$c_{11} = \frac{s_{11} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})},$$

$$c_{12} = \frac{-s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})},$$

$$c_{44} = \frac{1}{s_{44}}.$$

Зворотний перехід від констант жорсткості до константів податливості здійснюється за тими ж формулами із заміною s_{ij} на c_{ij} .

$$S_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} - s_{12})(c_{11} + 2c_{12})},$$

$$S_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})},$$

$$S_{44} = \frac{1}{c_{44}}.$$

Для гексагональної системи всіх класів:

$$c_{11} + c_{12} = \frac{s_{33}}{s}, \quad c_{11} - c_{12} = \frac{1}{s_{11} - s_{12}},$$

$$c_{13} = -\frac{s_{13}}{s}, \quad c_{33} = \frac{s_{11} + s_{12}}{s}$$

$$c_{44} = \frac{1}{s_{44}}, \quad s = s_{33}(s_{11} + s_{12}) - 2s_{13}^2$$

2.5.10. Чисельні значення пружних констант

Чисельні значення пружних констант деяких кристалів наведено у табл. 1 і 2.

Кубічні кристали міді, молібдену, інших металів мають помітну анізотропію пружних властивостей, тоді як вольфрам і алюміній слабо анізотропні.

Константи жорсткості при кімнатній температурі деяких кристалів кубічної системи (сингонії)

№	кристал	Модулі пружності $c_{ij} \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$		
		c_{11}	c_{12}	c_{44}
1	Ag	12.40	4.61	9.31
2	Al	10.68	2.82	6.07
3	Au	18.6	4.20	15.7
4	Cr	35.00	10.08	6.78
5	Cu	16.84	7.54	12.14
6	Fe	23.31	11.78	13.54
7	Ge	12.84	6.67	4.83
8	Ir	60.0	27.0	26
9	K	0.37	0.188	0.314
10	Li	1.35	0.88	1.44
11	Mo	44.08	12.17	17.24
12	Na	0.73	0.42	0.63
13	Nb	24.6	2.87	13.4
14	Ni	25.08	12.35	15/00
15	Pb	4.95	1.40	4.23
16	Pd	22.7	7.2	17.6
17	Si	16.57	7.96	6.39
18	Ta	26.09	8.18	15.74
19	Th	7.53	4.78	4.89
20	V	22.8	4.26	11.9
21	W	52.33	16.07	20.45
22	$\beta - \text{CuZn}(51.1\% \text{Cu})$	12.79	8.22	10.91
23	$\beta - \text{CuZn}(54.1\% \text{Cu})$	11.90	7.44	10.23
24	Fe-Si{2.5%Si}	21.98	12.22	13.46
25	Fe-Si{3.1%Si}	21.86	12.15	13.60
26	AlSb	8,94	4.15	4.42
27	ZnS	9.76	4.51	5.90
28	Mg ₂ Si	12.1	4.64	2.2
29	Cu ₃ Au	19.07	6.63	13.83
30	TiC	38.9	20.3	4.3

Константи жорсткості за кімнатної температури деяких кристалів гексагональної системи (сингонії)

№	кристал	Модулі упругості $c_{ij} \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$				
		c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{12}	c_{13}
1	Be	29.25	33.64	16.25	2.67	1.4
2	C	116	4.7	0.23	29.0	1.4
3	Cd	11.52	5.12	2.03	3.97	4.05
4	Co	30.7	35.81	7.53	6.15	10.03
5	Hf	18.11	19.69	5.57	7.72	6.61
6	Mg	5.85	6.10	1.66	2.50	2.08
7	Re	61.36	68.27	16.25	27.0	20.6
8	Ti	16.24	18.07	4.67	9.20	6.90
9	Tl	4.08	5.28	0.73	3.54	2.9
10	Y	7.79	7.69	2.43	2.86	2.1
11	Zn	16.1	6.19	3.83	3.42	5.01
12	Zr	14.34	16.48	3.20	7.28	6.53
13	CaMg ₂	5.623	6.163	1.805	1.59	1.50

Анізотропія деяких властивостей гексагональних кристалів є досить великою; наприклад, лінійна стисливість цинку дорівнює $1,31 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{н}$ у напрямку, паралельному осі z, та $0,175 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{н}$ у напрямках, перпендикулярних осі z (ці значення можна обчислити з виразу для β , наведеного вище).

У кадмію лінійні стисливості дорівнюють $1,69$ і $0,15 \cdot 10^{-13}$. У телуру, що має ланцюжкову структуру, лінійна стисливість у напрямку, паралельному осі ланцюжка, негативна.

2.6. Анізотропія властивостей кристалографічних площин кубічної та гексагональної симетрії

Тензорний аналіз властивостей пружності кристалів (Розділ 2.2) демонструє, що навіть кристали з високим рівнем симетрії мають відносно цих властивостей істотну анізотропію. Пружні властивості монокристалів повністю задаються набором пружних констант. Число цих незалежних констант залежить від симетрії кристала. Для кубічних кристалів їх три, гексагональних – п'ять, тригональної – шість тощо.

2.6.1. Анізотропія пружності кристалографічних площин кубічного кристала (першоджерело [1])

Орієнтацію кубічного кристала задамо осями координат $Ox_1x_2x_3$, що збігаються з кристалографським напрямками $[100]$, $[010]$, $[001]$. Розглянемо довільну кристалографічну площину (hkl) . Її положення задаємо двома кутами (Рис. 1). Кут задає напрям лінії BC перетину площини (hkl) з координатною площиною (001) , яка є віссю зони площин (hkl) , (100) , (001) . Індокси осі зони - (див. Приклад 3 розділ 1,) Кут α дорівнює куту нахилу площини (hkl) до площини (100) .

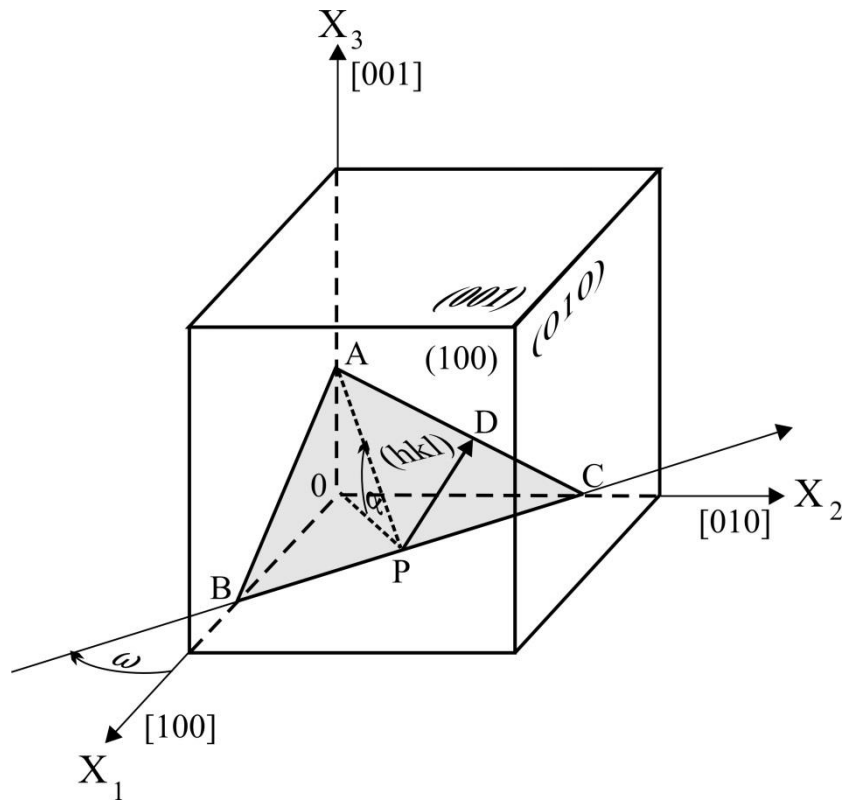


Рис.2.32.. Завдання положення площини (hkl) кутами ω та α в кубічному кристалі. $[\bar{k}h0]$ - зона площин.

Виберемо в площині (hkl) довільний напрямок PD. Скористаємося рівнянням анізотропії модуля Юнга в кубічному кристалі ():

$$\frac{1}{E} = s_{11} - 2K\psi, \quad (1)$$

де s_{ij} – константи податливості монокристала,

$$K = (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44}), \quad (2)$$

$$\psi = a_1^2 a_2^2 + a_2^2 a_3^2 + a_1^2 a_3^2, \quad (3)$$

α_{ij} , - направляючі косинуси напрямку вимірювання \overrightarrow{PD} .

З (2) і (3) видно, що величина модуля нормальної пружності визначається значенням трьох його монокристалних характеристик (s_{11} , s_{12} , s_{44}), а

$$a_1 = \cos \omega \cos \varphi + \sin \omega \sin \varphi \cos \alpha, \quad (3)$$

$$a_2 = \cos \omega \sin \varphi \cos \alpha - \sin \omega \cos \varphi, \quad (4)$$

$$a_3 = \sin \alpha \sin \varphi. \quad (5)$$

Отримані вирази зводимо у квадрат і підставляємо у вираз (3). Наводимо отриманий вираз до виду, що відповідає ряду Фур'є, яку отримали після всіх перетворень у вигляді:

$$\psi = A_0 + A_2 \cos 2\varphi + A_4 \cos 4\varphi + B_2 \sin 2\varphi + B_4 \sin 4\varphi, \quad (7)$$

де A_i і B_i - амплітуди гармонік ряду Фур'є:

$$A_2 = -\frac{1}{16} \left[(6 \sin^2 \alpha - 7 \sin^4 \alpha) + (2 \sin^2 \alpha - \sin^4 \alpha) \cos 4\omega \right], \quad (9)$$

$$A_4 = -\frac{1}{64} \left[7 \sin^2 \alpha + (8 \cos^2 \alpha + \sin^4 \alpha) \cos 4\omega \right], \quad (10)$$

$$B_2 = -\frac{1}{8} \sin^2 \alpha \cos \alpha \sin 4\omega, \quad (11)$$

$$B_4 = -\frac{1}{16} \cos \alpha (1 + \cos^2 \alpha) \sin 4\omega. \quad (12)$$

В формулах (7) – (12) тригонометрические величини виразим через индексы Миллера:

$$\cos \omega = \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}}$$

Тоді

$$\cos 4\omega = 1 - 8 \frac{h^2 k^2}{(h^2 + k^2)^2}, \quad (13)$$

$$\sin 4\omega = 4 \frac{hk}{(h^2 + k^2)^2} (h^2 - k^2) \quad (14)$$

Кут α дорівнює куту нахилу площини до площини (100). Тоді

$$\cos \alpha = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Звідки

$$\cos^2 \alpha = \frac{l^2}{h^2 + k^2 + l^2}, \quad (15)$$

$$\sin^2 \alpha = \frac{h^2 + k^2}{h^2 + k^2 + l^2}. \quad (16)$$

Індекси Міллера (hkl) задають положення кристалографічної площини кристалі. Орієнтація площини в просторі визначається орієнтацією нормалі до цієї площини, яка прив'язується до конкретного зразка за допомогою сферичних кутів на сфері проєкцій, наприклад, азимутального (α) і меридіанного (β) кутів. Напрямок $[k\bar{h}0]$ лежить у площині (hkl) і є лінією відліку кутів для вимірювання або розрахунку значень функції анізотропії. Завдання орієнтації напрямку $[k\bar{h}0]$ за допомогою сферичних кутів (α_1) та (β_1) визначає орієнтацію набору площин із загальною віссю. Завдання ж орієнтації двох напрямків, нормалі до (hkl) та напрямки $[k\bar{h}0]$, визначає орієнтацію всього кристала щодо обраної системи відліку зразка. Тому така комбінація називається ідеальною орієнтрівкою кристала, з якими ми познайомимося докладніше у розділі «Текстури полікристалів». Насправді часто цікавить орієнтація кристала щодо плоских чи квазіплоских зразків. Це пластини, листи, оболонки, труби та ін. У таких об'єктах як координатна система вибирається площину зразка до якої прив'язуються три взаємно перпендикулярні осі. Тепер орієнтацію кристала щодо такої системи відліку зручно задавати кристалографічною площиною, що збігається з площиною

зразка і напрямком, що лежить у цій кристалографічній площині і збігається з будь-якої з координатних осей зразка.

У таблиці 1 наведено значення амплітуд гармонік функції анізотропії у вигляді рядів Фур'є для ряду кристалографічних площин кубічного кристала, які часто розташовуються в площині листів металів і сплавів з решітками ОЦК і ГЦК. Кут ϕ відраховується від осі зони $[k\bar{h}0]$.

Таблиця 1

Значення амплітуд гармонік рядів Фур'є функцій анізотропії кристалографічних площин деяких орієнтувань кубічного кристала

Орієнтування $(hkl)[\bar{k}h0]$.		Амплітуди гармонік ряду Фур'є				
(hkl)	[uvw]	A_0	A_2	A_4	B_2	B_4
100	010	0,21875	0,125	-0,09375	0	0
011	$\bar{1}00$	0,242188	-0,03125	0,011719	0	0
111	$\bar{1}10$	0,25	0	0	0	0
112	$\bar{1}10$	0,21875	-0,04167	0,048611	0	0
115	$\bar{1}10$	0,151235	-0,01646	0,107725	0	0
121	$\bar{2}10$	0,242188	0,052083	-0,05946	0,204124	0,142887
124	$\bar{2}10$	0,198342	-0,03827	0,070082	0,124696	0,461375
320	$\bar{2}30$	0,21875	0,125	-0,09375	0	0
135	$\bar{3}10$	0,209184	-0,04082	0,059311	0,289767	0,869302
146	$\bar{4}10$	0,216347	-0,04161	0,051431	0,466508	1,221152
236	$\bar{3}20$	0,204693	-0,03993	0,063919	0,262391	0,857816
335	$\bar{3}30$	0,232693	-0,03894	0,029628	0	0
5 $\bar{5}$ 4	550	0,247676	0,025826	-0,04359	0	0
358	$\bar{5}30$	0,221249	-0,0416	0,045567	0,989537	2,357427
$\bar{8}62$	$\bar{6}\bar{8}0$	0,225545	0,106324	-0,08591	1,267212	0,684294
11 $\bar{8}7$	8110	0,24568	0,036743	-0,05053	4,90458	3,751341

Як видно з таблиці основний внесок в анізотропію пружного модуля роблять парні гармоніки ряду Фур'є для площин з малими індексами. Якщо напрямок осі зони не збігається з напрямком симетрії якості, то виникають непарні гармоніки. Це характерно для площин із відносно високими індексами. Якщо положення площини (hkl) задано щодо системи координат зразка (аркуша металу, стрижня, іншого виробу), комбінація (hkl) [k 00] стає способом завдання орієнтації кристала щодо зразка.

Тому комбінацію (hkl) [uvw] за умови, що напрям [uvw] лежить у площині (hkl) і збігається з якимсь напрямом системи координат зразка, називають орієнтуванням кристала. Якщо в полікристалі таке орієнтування є середнім для групи рівноорієнтованих кристалів з невеликою розорієнтацією, то таке орієнтування називається ідеальним орієнтуванням текстури полікристалу.

2.6.2. Анізотропія модуля Юнга у площині основних орентувань кристалів α – заліза Для конкретних металів і сплавів анізотропія властивостей 4-ої тензорної розмірності орієнтувань визначається як функцією анізотропії, а й набором відповідних монокристалъных характеристик. Для пружних властивостей це константи податливості (s_{ij}) у рівняннях (1), (2) чи коефіцієнти жорсткості (c_{ij}) Використовуючи дані таблиці за формулою (7) розраховали анізотропію модуля Юнга для текстурного аналізу, що найчастіше зустрічаються в практиці. орієнтувань кристалів -заліза. Як констант податливості використовували перераховані () – () значення констант жорсткості в таблиці . Результати розрахунку наведено у таблиці 2.

Таблиця 2

Анізотропія модуля Юнга у різних напрямках кристалографічних площин орієнтувань $\{hkl\} \langle \rangle \alpha$ – заліза

Угол φ [$\bar{k}h0$], град.	Модуль Юнга, ГПа									
	Кристаллографическая плоскость ориентировки (hkl) [$\bar{k}h0$]									
	(100)	(011)	(111)	(112)	(122)	(124)	(135)	(146)	(236)	(358)
0	222,7	207,6	222,	209,	207,	211,	210,	209,	210,7	208,

	1	0	72	17	77	53	22	42	5	92
15	242,1 3	206,7 4	222, 72	199, 82	209, 48	196, 66	198, 18	199, 37	197,5 1	200, 32
30	281,2 2	206,5 9	222, 72	185, 07	214, 24	173, 76	179, 32	183, 54	176,9 12	186, 75
45	267,2 9	211,6 9	222, 72	183, 64	220, 89	168, 17	175, 81	181, 55	172,5 1	185, 90
60	198,1 3	223,8 5	222, 72	203, 80	227, 74	188, 68	196, 44	201, 91	193,1 6	205, 80
75	148,9 1	238,6 5	222, 72	241, 36	232, 87	232, 85	237, 95	240, 63	235,9 5	242, 01
90	133,6 9	245,7 3	222, 72	264, 27	234, 78	262, 33	264, 51	264, 57	263,8 6	263, 76
105	148,7 2	238,7 3	222, 72	241, 60	232, 89	233, 14	238, 21	240, 88	236,2 3	242, 23
120	197,7 3	223,9 4	222, 72	203, 99	227, 78	188, 89	196, 65	202, 10	193,3 6	205, 99
135	266,9 5	211,7 4	222, 72	183, 69	220, 94	168, 21	175, 86	181, 61	172,5 6	185, 95
150	281,3 8	206,6 0	222, 72	185, 01	214, 27	173, 65	179, 24	183, 47	176,8 3	186, 69
165	242,3 6	206,7 3	222, 72	199, 73	209, 50	196, 51	198, 05	199, 27	197,3 8	200, 23
180	222,7 2	207,6 0	222, 72	209, 17	207, 77	211, 53	210, 22	209, 42	210,7 5	208, 92
средний	219,5 3	218,1 7	222, 72	208, 49	220, 07	200, 46	204, 67	207, 52	202,9 1	209, 5
	0,305	0,305	0,30 5	0,30 5	0,11 5	0,35 8	0,33 5	0,31 4	0,346	0,29 5

Коефіцієнт	0,525	0,159	0		0,11	0,35	0,33	0,31	0,346	
анізотропії, η				0,30	5	8	5	4		0,295

З таблиці 2 випливає, що кожна з ідеальних орієнтувань має певну анізотропію модуля Юнга, характеризується деяким середнім значенням його та коефіцієнтом

$$\text{анізотропії } (\eta = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{E_{\max}}).$$

Орієнтування типу (100) характерна тим, що E площині (100) приймає максимальне значення у бік +450. Для орієнтувань (112), (124), (135), (146), (236), (358); у цьому напрямку модуль Юнга набуває мінімального значення. Максимальне значення цих орієнтувань модуль Юнга має у напрямі +90°. Максимальне значення середнє E приймає для ІО з кристалографічних площин {111} (табл.2). Для ІО з площинами від {110} до {124} середні значення E монотонно зменшуються до кубічної орієнтування типу {100} < >, на яку середнє значення модуля Юнга різко зростає. Поведінка коефіцієнта анізотропії E має протилежний характер (рис.4). При переході від орієнтувань з площиною {100} до орієнтувань з площиною {111} коефіцієнт анізотропії E зменшується монотонно від 0,525 до 0,295.

Максимальне значення цих орієнтувань модуль Юнга має у напрямі +90°.

Максимальне значення середнє E приймає для ІО з кристалографічних площин {111} (табл.2). Для ІО з площинами від {110} до {124} середні значення E монотонно зменшуються до кубічної орієнтування типу {100} < >, на яку середнє значення модуля Юнга різко зростає. Поведінка коефіцієнта анізотропії E має протилежний характер (рис.4). При переході від орієнтувань з площиною {100} до орієнтувань з площиною {111} коефіцієнт анізотропії E зменшується монотонно від 0,525 до 0,295.

2.6.2. Анізотропія властивостей гексагонального кристала []

Кристали з низькою симетрією виявляють анізотропію щодо властивостей із вищою симетрією. Наприклад, гексагональні кристали виявляють анізотропію як щодо властивостей четвертої тензорної розмірності (модулі Юнга, зсуву, коефіцієнт Пуассона), а й щодо властивостей, описуваних тензорами другого рангу (теплопровідність, електропровідність, теплове розширення та інших.).

Кубічні кристали анізотропні щодо властивостей четвертої тензорної розмірності, але ізотропні щодо властивостей, що описуються тензорами другого рангу.

Ступінь та характер анізотропії властивостей будуть різними для кожної із кристалографічних площин. Кристалографічні площини кристала можна задавати індексами Міллера, а для одновісних кристалів їх положення зручно задавати кутом α - їх нахилу до якоїсь із головних площин, наприклад, площини базису (0001). Розглянемо довільну площину кристала (hkil), положення якої задамо кутом її нахилу α до площини базису (0001). Введемо дві системи координат x_i та із загальним початком у точці 0 (рис. 1). Площина базису лежить у координатній площині, а вісь [0001] збігається з віссю $0x_3$. Площина (hkil) лежить у площині. Напрямок осей і показано малюнку 2.34.

У площині (hkil) виберемо довільний напрямок ON та позначимо кут між ним та віссю через φ .

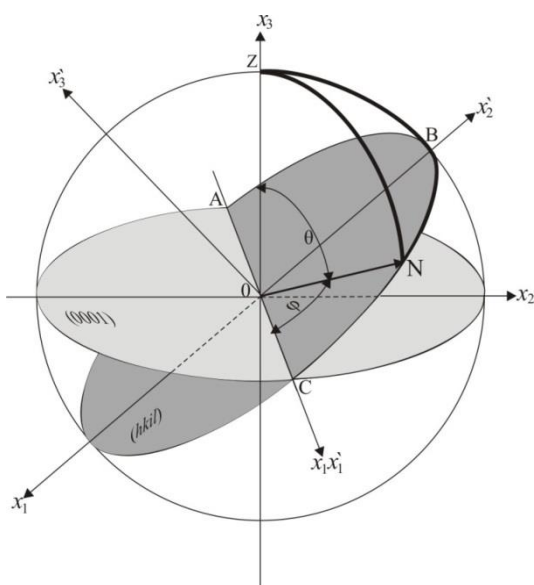


Рис.2.34. До висновку анізотропії модулів пружності у площинах гексагонального кристала

Знайдемо залежність величин властивостей четвертої розміру тензора, модулів Юнга (E) і зсуву (G) від φ для різних кутів α , що визначають положення площини ($hkil$) в кристалі.

Зі сферичного трикутника ZBN отримаємо:

$$\cos \vartheta = \cos(90^\circ - \alpha) \cos(90^\circ - \varphi) \quad (1)$$

або для довільного напрямку, що лежить у площині ($hkil$):

$$\cos \vartheta = \sin \alpha \sin \varphi.$$

використовуємо відомі вирази для залежності пружних модулів від напрямку гексагонального монокристалу [4]:

$$\frac{1}{E} = s_{11} = s_{11} - (2s_{11} - s_{44} - 2s_{13})\alpha_{31}^2 + (s_{11} + s_{33} - s_{44} - 2s_{13})\alpha_{31}^4, \quad (2)$$

$$\frac{1}{G} = s_{44} + \left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44} \right) + \left[2(s_{11} + s_{33} + s_{44} - 2s_{13}) - \left(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44} \right) \right] \alpha_{31}^2 - 2(s_{11} + s_{33} - s_{44} - 2s_{13})\alpha_{31}^4 \quad (3)$$

Останні вирази подаємо у вигляді:

$$\frac{1}{E} = s_{11} - a \sin^2 \alpha \sin^2 \varphi + b \sin^4 \alpha \sin^4 \varphi \quad (4)$$

$$\frac{1}{G} = s_{44} + c + (2b - c) \sin^2 \alpha \sin^2 \varphi - 2b \sin^4 \alpha \sin^4 \varphi \quad (5)$$

де

$$a = 2s_{11} - s_{44} - 2s_{13}, \quad (6)$$

$$b = s_{11} + s_{33} - s_{44} - 2s_{13}, \quad (7)$$

$$c = s_{11} + s_{12} - \frac{1}{2}s_{44}, \quad (8)$$

s_{ij} -компоненти тензора податливості, E, G -- модулі Юнга та зсуву, кут φ відраховується від напрямку.

Далі

$$2 \sin^2 \varphi = 1 - \cos 2\varphi \text{ и}$$

$$\sin^4 \varphi = \frac{3}{8} - \frac{1}{2} \cos 2\varphi + \frac{1}{8} \cos 4\varphi$$

Після підстановки отриманих виразів (4) і (5) отримаємо:

$$\frac{1}{E} = s_{11} - \frac{a}{2} \sin^2 \alpha + \frac{3}{8} b \sin^4 \alpha + \left(\frac{a}{2} \sin^2 \alpha + \frac{3}{8} b \sin^4 \alpha \right) \cos 2\varphi + \frac{b}{8} \sin^4 \alpha \cos 4\varphi,$$

$$\frac{1}{G} = s_{44} + c + (2b - c) \sin^2 \alpha (1 - \cos 2\varphi) + 2b \sin^4 \alpha \left(\frac{3}{8} - \frac{1}{2} \cos 2\varphi + \frac{1}{2} \cos 4\varphi \right).$$

Після спрощень отримуємо

$$E^{-1} = A_0 + A_2 \cos 2\varphi + A_4 \cos 4\varphi, \quad (9)$$

$$G^{-1} = B_0 + B_2 \cos 2\varphi + B_4 \cos 4\varphi, \quad (10)$$

де

$$A_0 = s_{11} - \frac{1}{2} a \sin^2 \alpha + \frac{3}{8} b \sin^4 \alpha, \quad (11)$$

$$A_2 = \frac{1}{2} a \sin^2 \alpha - \frac{1}{2} b \sin^4 \alpha, \quad (12)$$

$$A_4 = \frac{1}{8} b \sin^4 \alpha, \quad (13)$$

$$B_0 = s_{44} + c + (2b - c) \sin^2 \alpha - b \sin^4 \alpha, \quad (14)$$

$$B_2 = -(2b - c) \sin^2 \alpha - b \sin^4 \alpha, \quad (15)$$

$$B_4 = \frac{1}{4} b \sin^4 \alpha. \quad (16)$$

Отримані вирази є гармонійними рядами, що описують анізотропію пружних властивостей гексагонального кристала, що містить лише парні гармоніки, амплітуди яких залежать від монокристалних характеристик і кута нахилу площини (hkil) до площини (0001).

Анізотропія коефіцієнта Пуассона у довільній площині гексагонального кристала розраховується у наближенні [4] за формулою:

$$\nu(\varphi) = -s_{12}E(\varphi).$$

2.6.3. Анізотропія пружних властивостей площин гексагональних металів групи $z/a \geq 1,63$

Метали з міжосьовим співвідношенням c/a менше ідеального, до яких відносяться титан, цирконій, магній та сплави на їх основі, становлять інтерес як конструкційні матеріали, для яких характеристики міцності та пружності мають першорядне значення.

Розрахували анізотропію пружних модулів для кристалографічних площин титану, цирконію та магнію в залежності від їх кута нахилу до площини базису (0001). Значення констант жорсткості c_{ijkl} [6] перерахували в константи податливості s_{ijkl} [4] за формулами:

$$s_{11} = \frac{1}{2(c_{11} - c_{12})} + \frac{S}{2}c_{33}, \quad s_{12} = \frac{S}{2}c_{33} - \frac{1}{2(c_{11} - c_{12})}, \quad s_{33} = S \cdot (c_{11} + c_{12}),$$

$$s_{13} = -S \cdot c_{13}, \quad s_{44} = \frac{1}{c_{44}}, \quad S = \frac{1}{(c_{11} + c_{12})c_{33} - 2c_{13}^2}.$$

Таблиця 1

Константи податливості гексагональних металів

Кристал	c/a	Константи податливості монокристалів та їх комбінації, $\times 10^{-11} \frac{M^2}{H}$							
		S_{11}	S_{12}	S_{44}	S_{33}	S_{13}	a	b	c

Титан	1.59166		-			-		-	-
	4	0,958	0,462	2,141	0,697	0,18	0,153	0,10	0,5748
		1	3	3	9	9	4	6	5
Циркої	1.58612		-					-	
й	1	1,012	0,404		0,797			0,83	
		2	1	3,125	7	-0,24	-0,618	3	-0,9544
Магній	1,61993		-			-		-	-
	8	2,213	0,771	6,024	1,974	0,49		0,85	1,5693
		8	1	1	8	1	-0,612	1	5

Використовуючи значення констант податливості та їх комбінацій (табл.1), розраховали по (11) - (16) амплітуди гармонік рядів Фур'є анізотропії $1/E(\varphi)$ для площин гексагональних кристалів залежно від кута їх нахилу до площини базису в інтервалі $[0 -900]$ через кожні 150 і розраховали для них анізотропії модуля Юнга по (4), а також середні значення властивостей і коефіцієнти анізотропії для кожної з площин кристалів титану, цирконію і магнію. Результати розрахунків наведено на рис.2,3.

Використовуючи значення констант податливості та їх комбінацій (табл.1), розраховали по (11) - (16) амплітуди гармонік рядів Фур'є анізотропії $1/E(\varphi)$ для площин гексагональних кристалів залежно від кута їх нахилу до площини базису в інтервалі $[0 -900]$ через кожні 150 і розраховали для них анізотропії модуля Юнга по (4), а також середні значення властивостей і коефіцієнти анізотропії для кожної з площин кристалів титану, цирконію і магнію. Результати розрахунків наведено на рис.2,3.

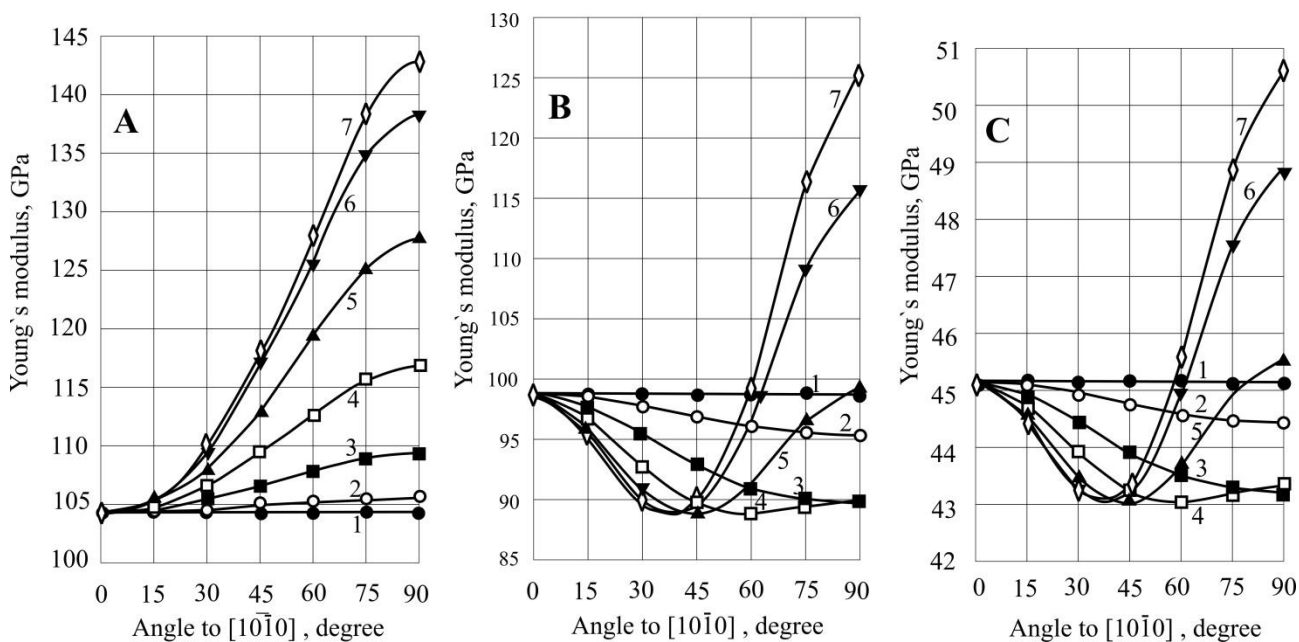


Рис.235. Анізотропія модуля Юнга кристалографічних гексагональних площин А- α -титану, В - цирконію, С - магнію в залежності від кута нахилу їх до площини базису (0001) : 1-0, 2-15, 3-30, 4-45, 5- 60, 6-75, 7-90⁰

Криві $E=f(\varphi)$ для титану відрізняються від кривих цирконію та магнію. У титану модуль Юнга в кожній із кристалографічних площин монотонно зростає від призматичного напрямку до напрямку проєкції вісі з нормаль до цієї площини. Для цирконію та магнію, для кутів $\alpha \leq 45^\circ$ E зменшується, а для $\alpha = 45^\circ$ зростає після мінімуму при $\alpha = 45^\circ$. Подібно поведуться і криві $E=f(\varphi)$ магнію.

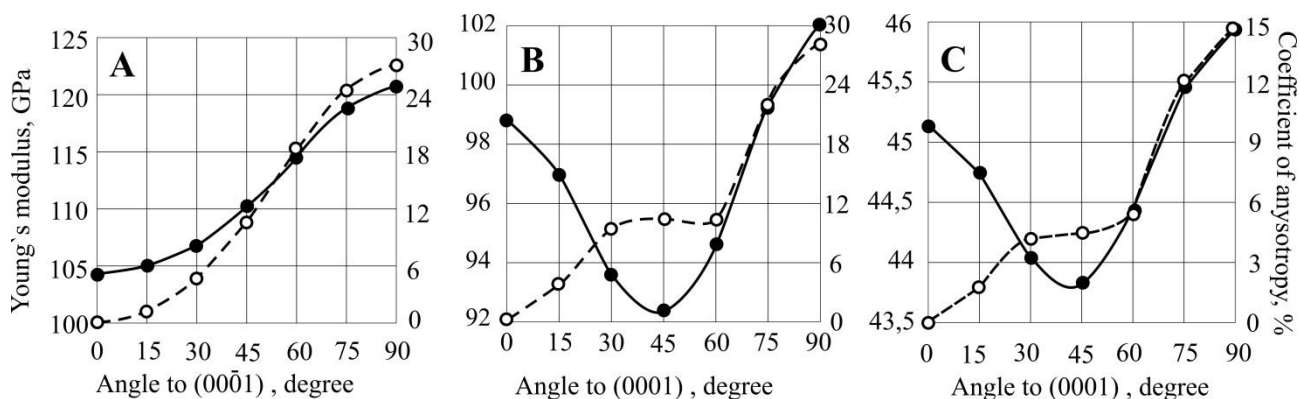


Рис.2.36. Середній модуль Юнга (●) та коефіцієнт анізотропії (○) площин кристалів А – титану, В – цирконію, С – магнію залежно від кута нахилу їх до площини базису (0001)

Середні модулі пружності для різних кристалографічних площин титану зі збільшенням кута між цими площинами і площиною базису монотонно збільшуються. У цирконію і магнію ця характеристика зі збільшенням α змінюється немонотонно, спочатку падає до мінімуму при $\alpha \approx 45^\circ$, а потім зростає до свого максимального значення. Неоднаково поведуться та коефіцієнти анізотропії $\eta = \frac{E_{max} - E_{min}}{E_{max}} 100\%$ для цих металів. Для титану коефіцієнт анізотропії монотонно зростає. Для цирконію та магнію η монотонно ростуть із збільшенням α , але з деякою затримкою в області $\alpha \approx 45^\circ$.

2.7.Окружність Мора

Часто трапляється, що ми хочемо перетворити компоненти симетричного тензора другого рангу від однієї системи координат до іншої, що виходить із першим простим поворотом навколо однієї з осей координат. І тут рівняння перетворення спрощуються. Припустимо, що вісі Ox' виходять з осей Ox , як показано на рис. 14 а, поворотом навколо Ox_3 на кут θ , що вимірюється від Ox_1 у бік Ox_2 .

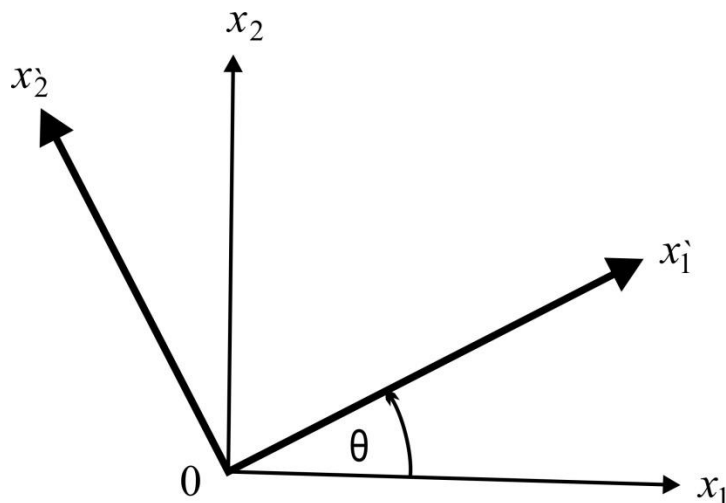


Рис.2.37.. Поворот осей Ox_1 і Ox_2 в положення Ox_1 і Ox_2 обертанням біля вісі Ox_3

Тоді відповідно до визначення напрямних косінусів a_{ij} маємо

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Щоб спростити виклад, розглянемо спочатку випадок, коли Ox_1 , Ox_2 , Ox_3 головні осі тензора $[S_{ij}]$. Тоді маємо

$$[S_{ij}] = \begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}.$$

Компоненти тензора в системі Ox_i' обчислюються за допомогою рівняння (1.22)

Використовуючи значення σ_{ij} і S_{ij} , знаходимо, що перетворений тензор має вигляд

$$S'_{ij} = a_{ik} a_{jl} S_{kl} \quad (S'_{ij} = S'_{ji}) \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} S'_{11} & S'_{12} & 0 \\ S'_{12} & S'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}.$$

де

$$\begin{aligned} S'_{11} &= S_1 \cos^2 \theta + S_2 \sin^2 \theta, \\ S'_{22} &= S_1 \sin^2 \theta + S_2 \cos^2 \theta, \\ S'_{12} &= -S_1 \sin \theta \cos \theta + S_2 \sin \theta \cos \theta \end{aligned} \quad (3)$$

Зауважимо, що змінилися лише чотири компоненти у лівій верхній частині тензора. Рівняння (3) можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} S'_{11} &= \frac{1}{2}(S_1 + S_2) - \frac{1}{2}(S_2 - S_1)\cos 2\theta, \\ S'_{22} &= \frac{1}{2}(S_1 + S_2) + \frac{1}{2}(S_2 - S_1)\cos 2\theta, \\ S'_{12} &= \frac{1}{2}(S_2 - S_1)\sin 2\theta. \end{aligned} \quad (4)$$

Отриманий результат представлений графічно на рис.2.38

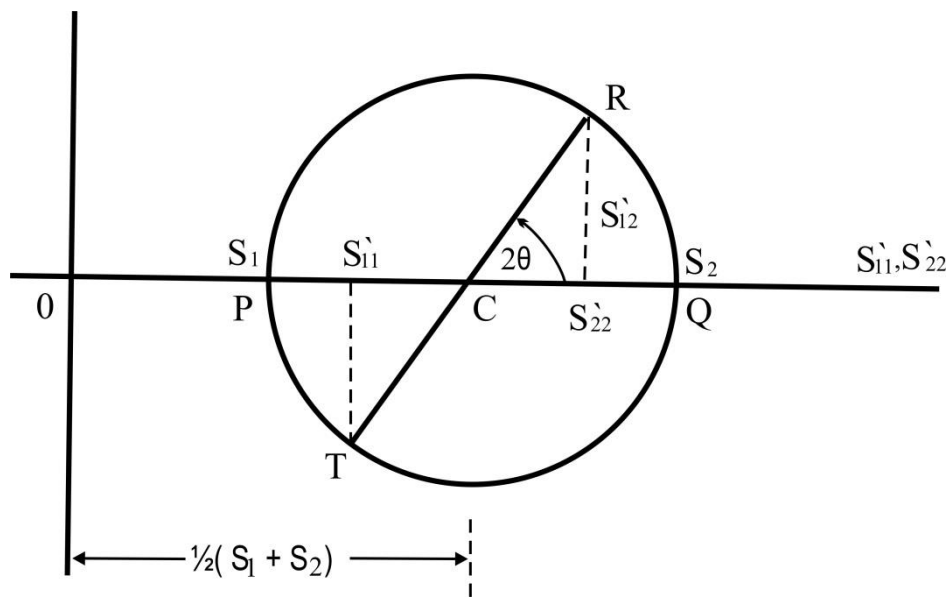


Рис.2.38. Перетворення компонент тензора S_{ij}

Припустимо, що $S_1 < S_2$. Зазначимо на горизонтальній осі дві точки P і Q на відстанях від O, рівних відповідно S_1 і S_2 . Проведемо потім коло з центром C, взявши PB як діаметр (рис. 2.38), побудуємо радіус CR так, щоб кут між CR та CQ, виміряний проти годинникової стрілки, становив 2θ (кут θ визначається так само, як і на рис. 2.37.). Тоді, оскільки $OC = 1/2(S_1 + S_2)$ та $CR = 1/2(S_2 - S_1)$ на підставі рівнянь (4) отримуємо, що координати точки R в системі координат, зображеної на кресленні, дорівнюватимуть S'_{22} і S'_{12} . Якщо продовжити RC до перетину з колом у точці T, то абсциса T дорівнює S'_{11} .

Ця побудова називається побудовою кола Мора.

Така побудова дає наочну картину зміни S_{11}' , S_{22}' та S_{12}' при повороті осей координат. Коли вісь Ox на рис. 2.38, повертається від Ox_1 до Ox_2 , кут θ змінюється від 0 до $1/2 \pi$ і точка R рухається вздовж верхньої половини кола, зображеного на рис., від Q до P .

Очевидно, що S_{11}' і S_{22}' завжди мають проміжні значення між S_{1-} і S_{2-} і досягають своїх екстремальних значень у моменти, коли точка R збігається з P або Q , тобто коли осі Ox збігаються з головними осями.

Легко бачити також, що $(S_{11}' + S_{22}')$ має незмінне значення при будь-якому положенні осей координат; отже, $(S_{11}' + S_{22}')$ є інваріантом цього перетворення

$$S'_{11} + S'_{22} = S_1 + S_2$$

Компонента S_{12}' досягає найбільшого значення, що дорівнює $1/2 (S_2 - S_1)$, коли

$$2\theta = \frac{1}{2} \pi, \text{ или } \theta = \frac{1}{4} \pi.$$

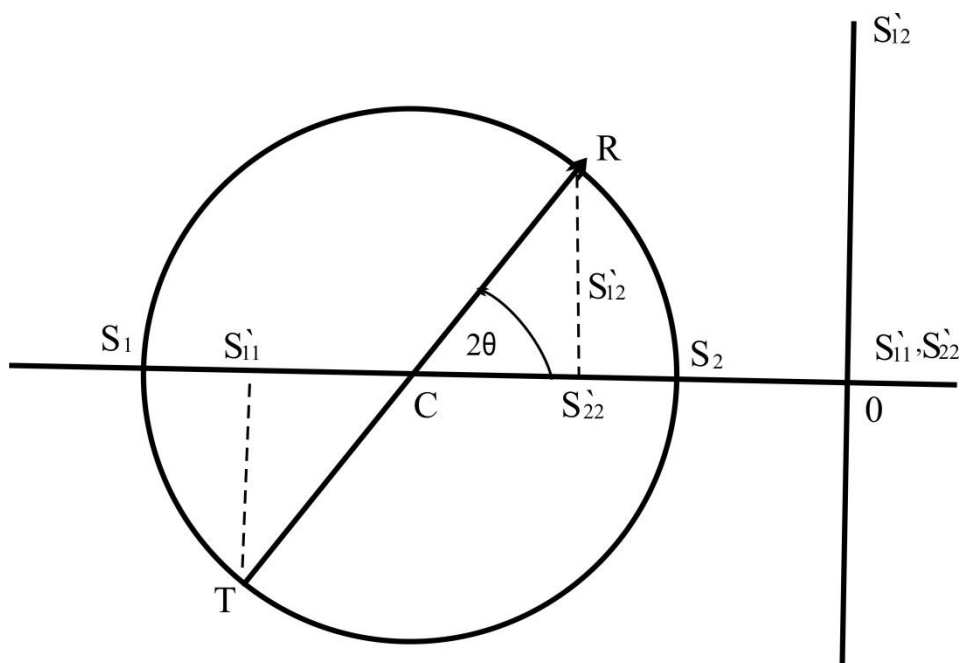


Рис.2.39. Ox_1' обертається у зворотному напрямку

Якщо Ox_1' обертається у зворотному напрямку, то точка R теж рухається у зворотному напрямку. Значення S'_{12} є негативним, коли R лежить нижче Q. На рис. 2 значення S_1 і S_2 позитивні, але побудова залишається справедливою і в тому випадку, коли обидва значення є негативними, як показано на рис. 2.39, а також при протилежних знаках S_1 та S_2 (рис. 2.40).

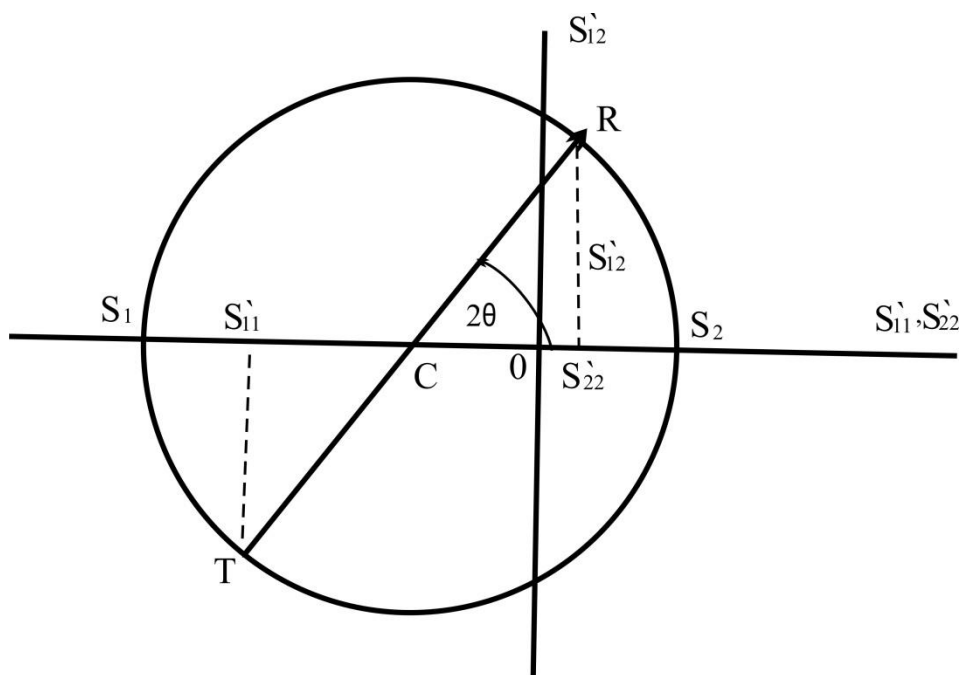


Рис.2.40. протилежні знаки S_1 та S_2

Значення S'_{22} і S'_{12} , як і раніше, є координатами R, а значення S'_{11} — абсцисою T; при цьому завжди необхідно враховувати знаки.

Якщо відомі значення S'_{11} , S'_{22} , S'_{12} , то можна використовувати коло Мора при знаходженні головних компонентів S_1 і S_2 . Рівняння $R=(S'_1, S'_2)$ і $T=(S'_1-S'_2)$ визначають коло; точки P і Q, у яких коло перетинає горизонтальну вісь, дають значення S_1 та S_2 . Насправді це побудова корисно переважно як швидкий спосіб виведення формул. Наприклад, якщо S'_{11} , S'_{22} , S'_{12} задані, то з рис. 2 очевидно, що

$$S_1 = OC - CP = \frac{1}{2}(S'_{11} + S'_{22}) - r \tag{5}$$

$$S_2 = OC + CQ = \frac{1}{2}(S'_{11} + S'_{22}) + r$$

и

$$\operatorname{tg} 2\theta = \frac{2S'_{12}}{S'_{22} - S'_{11}} \quad (6)$$

де

$$r = CR = \sqrt{\frac{1}{4}(S'_{22} - S'_{11})^2 + S'_{12}{}^2}$$

Якщо потрібно розглянути дві системи координат, скажімо "Ox" і "Ox", жодна з яких не є головною, то, користуючись коло Мора, можна написати формули, що пов'язують відповідні компоненти. Крім того, іноді потрібно дізнатися, як швидко змінюється деякий компонент при повороті осей координат.

З рис. 2 ясно, наприклад, що S'_{12} змінюється найповільніше при $\theta = \pi/4$ і найшвидше при $\theta=0$. При побудові рис. 2 -4 ми припускали, що обертання системи відбувається навколо осі Ox_3 і $S_1 < S_2$. Насправді часто доводиться застосовувати цю побудову для випадків, коли порядок осей відповідає розглянутої схемою. Тому пропонується наступний загальний спосіб побудови. З двох головних компонентів, що беруть участь у перетворенні, вибирається найбільша та вертикально вгору проводиться відповідна вісь (див. рис. 1). Праворуч відкладається вісь для меншої компоненти. Потім вводяться будь-які зручні позначення осей і надаються відповідні позначення осей на кресленнях рис. 2, 3 чи 4.

При побудові рис. 2 -4 ми припускали, що обертання системи відбувається навколо осі Ox_3 і що $S_1 < S_2$.

Насправді часто доводиться застосовувати ці побудови для випадків, коли порядок осей не відповідає розглянутої схемою. Тому пропонується наступний загальний спосіб побудови.

З двох головних компонентів, що беруть участь у перетворенні, вибирається найбільша та вертикально вгору проводиться відповідна вісь (див. рис. 1).

Праворуч відкладається вісь для меншої компоненти. Потім вводяться будь-які зручні позначення вісей і надаються відповідні позначення вісей на кресленнях рис. 2, 3 чи 4.

2.8.. Поворот довкола довільної вісі.

На практиці найчастіше використовується побудова кола Мора, описане вище, проте побудова залишається справедливою і в тому випадку, коли вісь обертання Ox_3 не є головною віссю тензора.

Если вспомнить свойства характеристической поверхности второго порядка (см. гл. I), то можно видеть, что рассмотренное выше построение тесно связано с нахождением главных осей одного из главных сечений характеристической поверхности.

Аналогічно ми можемо розглянути довільний центральний переріз і застосувати описану побудову для знаходження його головних осей. У цьому випадку, як і раніше, справедливо перетворення (1), але, оскільки Ox_i не є головними осями, рівняння (2) містять більшу кількість членів. Тензор, наведений до головних осей Ox_1 і Ox_2 розтину, що розглядається, і звичайної осі Ox_3 , має вигляд

$$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & S_{31} \\ 0 & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{23} & S_{33} \end{bmatrix}.$$

компоненти тензора у системі координат Ox' { записуються як

$$S'_{11} = S_{11} \cos^2 \theta + S_{22} \sin^2 \theta$$

$$S'_{22} = S_{11} \sin^2 \theta + S_{22} \cos^2 \theta$$

$$S'_{33} = S_{33} \quad (7)$$

$$S'_{12} = -S_{11} \sin \theta \cos \theta + S_{22} \sin \theta \cos \theta$$

$$S'_{23} = -S_{13} \sin \theta + S_{23} \cos \theta$$

$$S'_{31} = S_{13} \cos \theta + S_{23} \sin \theta$$

Таким чином, для компонентів S_{11} , S_{22} , S_{12} байдуже, чи є Ox_3 головною віссю чи ні, і побудова кола Мора однаково застосовується в обох випадках.

2.9. Літературні джерела другого розділу

1. Най Дж. Физические свойства кристаллов / Дж. Най –М.: ИЛ, 1960.– 385 с.
2. T.D. Shermergor, The Theory of Elasticity of Microinhomogeneous Media Nauka, M., 1977.-400 p.
3. Шаскольская М.П. Кристаллография / М.П Шаскольская.–М.: Высш. Школа.– 1984. – 376 с.
4. **Schulze G.** Metallphysik. Berlin: Akademie-Verlag, (1967), 458 p.
5. Volchok N.A., Dyachok D.A., Briukhanova Z.A., Dyshlov E. Analysis of anisotropy of the Young`s modulus of ideal orientation of α –iron textures // Functional Materials. - 2020.- 27.- №1.-С.170-178.
<https://doi.org/10.15407/fm27.01.170>
6. Volchok N.A., Ya. Klubis, A. Nachev, A. Tarasov та інші. Anisotropy of elastic modules of the planes of a hexagonal crystal and damage of titanium sheets// *Journal «Functional Materials»National Academy of Sciences of Ukraine Department of Physical and Technical Problems of Materials Science: Scientific and Technological Corporation.* «Institute for Single Crystals»Kharkiv, 2021.28(3). P.542-548.