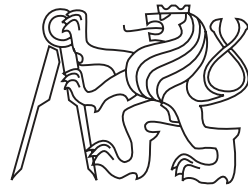


České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra inženýrství pevných látek
Obor: Inženýrství pevných látek



**Analýza elastických konstant třetího
řádu multiferroických látek z výsledků
měření rychlostí šíření povrchových
vln**

An analysis of the third order elastic constants of
multiferroic materials from surface acoustic wave
measurements

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracovala: Kristýna Zoubková
Vedoucí práce: doc. Ing. Hanuš SEINER, Ph.D.
Rok: 2016

Před svázáním místo téhle stránky

vložíte zadání práce

 s podpisem děkana.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracovala samostatně a použila jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v příloženém seznamu.

Nemám závažný důvod proti použití tohoto školního díla ve smyslu § 60 Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne

.....
Kristýna Zoubková

Poděkování

Děkuji doc. Ing. Hanuši SEINEROVI, Ph.D. za veškerý čas, který mi věnoval při vedení této práce, a především za jeho neuvěřitelně trpělivé odpovědi na všechny moje dotazy.

Kristýna Zoubková

Název práce:

Analýza elastických konstant třetího řádu multiferroických látek z výsledků měření rychlostí šíření povrchových vln

Autor: Kristýna Zoubková

Obor: Inženýrství pevných látek

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Hanuš SEINER, Ph.D.

Ústav termomechaniky Akademie věd ČR

Konzultant: Ing. Petr SEDLÁK, Ph.D.

Ústav termomechaniky Akademie věd ČR

Abstrakt: Cílem této práce je vypočítat pro monokrystal Fe-Pd elastické konstanty třetího řádu. Jako vstupní data slouží výsledky měření provedených v Laboratoři ultrazvukových metod ÚT AVČR. V Fe-Pd, podrobeném vnějšímu napětí ve směru krystalografické osy z , byly prostřednictvím laseru excitované povrchové akustické vlny, jejichž fázové rychlosti se snímaly. S pomocí numerické Ritz-Rayleighovy metody byly odvozeny hodnoty kompletního tenzoru elastických konstant druhého řádu v závislosti na působení vnějšího napětí. Bylo tedy možné zjistit elastické konstanty třetího řádu c_{111} , c_{112} , c_{123} , c_{144} a c_{155} . Pro výpočet c_{456} chyběly informace o smykových deformacích.

Klíčová slova: Laserově-ultrazvukové metody, elastické konstanty třetího řádu, povrchové akustické vlny, Fe-Pd

Title:

An analysis of the third order elastic constants of multiferroic materials from surface acoustic wave measurements

Author: Kristýna Zoubková

Abstract: The aim of this thesis is to calculate third-order elastic constants of monocrystalline Fe-Pd. As the source of input data, the results of measurements, which have been carried out in the Laboratory of ultrasonic methods IoT ASCR, were used. Fe-Pd was submitted to prestress in the direction of crystallographic axis z . At the same time, surface acoustic waves were excited in the crystal using a pump-laser line-like source. Phase velocities of these waves were measured and afterwards the Ritz-Rayleigh numerical method was used to evaluate the complete tensor of second-order acoustic constants and its evolution with the applied prestress. It was therefore possible to calculate third-order elastic constants c_{111} , c_{112} , c_{123} , c_{144} and c_{155} . Determination of c_{456} was found impossible due to lack of information about shear deformation behavior of the material.

Key words: Laser-ultrasound methods, third-order elastic constants, surface acoustic waves, Fe-Pd

Obsah

Úvod	8
1 Teorie	10
1.1 Elastodynamika	10
1.1.1 Deformace	10
1.1.2 Napětí	13
1.2 Hookův zákon	14
1.3 Krystalografické soustavy	16
1.3.1 Kubická soustava	16
1.3.2 Tetragonální soustava	16
1.4 Christoffelova rovnice	17
1.4.1 Řešení pro kubickou soustavu	19
1.4.2 Řešení pro tetragonální soustavu	20
2 Povrchové vlny	22
2.1 Měření elastických konstant	23
2.2 Měření elastických konstant pod vnějším napětím	25
3 Fe-Pd	28
4 Elastické konstanty třetího řádu	30
Diskuze	35
Závěr	36
Seznam použitých zdrojů	37

Seznam obrázků

1.1	Složky tenzoru napětí [8]	14
1.2	Křivka závislosti deformace na napětí [1]	14
2.1	Výpočetní doména [19]	24
2.2	Schéma uspořádání experimentu [19]	25
2.3	Příklady vlnových křivek [19]	26
2.4	Experimentální uspořádání a geometrie vzorku [17]	27
2.5	Závislost napětí na deformaci a relativní změně objemu krystalu Fe-Pd [17]	27
2.6	Závislost hodnot elastických konstant Fe-Pd na působícím napětí [17]	27
3.1	Schematická ilustrace závislosti mřížkových parametrů na teplotě a napětí na deformaci při MT prvního a druhého řádu [22]	28
3.2	Schéma průběhu bezdifúzní martensitické transformace	29
4.1	Závislost elastických konstant třetího řádu na deformaci	33

Úvod

V klasické teorii elasticity je chování materiálů z hlediska deformací považováno za lineární v závislosti na aplikovaném napětí. Tento vztah platí pro malé hodnoty napětí a deformace a nazývá se Hookův zákon. Koeficienty úměrnosti lineární závislosti se nazývají elastické konstanty druhého řádu c_{ijkl} .

Akustoelastický jev nastává, pokud se fázové rychlosti vln šířících se materiálem, změni s aplikací vnějšího napětí. Tehdy je nutné přejít k nelineární teorii elasticity a započítat zanedbané vyšší členy rozvoje vztahu mezi napětím a deformací. S tím souvisí zavedení elastických konstant třetího a vyššího řádu (c_{ijklmn} , $c_{ijklmnop}$, ...). Tyto konstanty poskytují informace o míře anharmonicity v krystalové mřížce.

Jako zkoumaný materiál byla pro tuto práci zvolena multiferoická slitina Fe-Pd, neboť její elastické konstanty druhého řádu v závislosti na vnějším napětí jsou známy [17], ale konstanty vyššího řádu zatím naměřeny nebyly. Navíc některé specifické vlastnosti Fe-Pd naznačují, že výpočet těchto konstant by mohl přinést zajímavé výsledky.

V první kapitole této práce se nachází přehled teorie elastodynamiky včetně Hookova zákona. Je rozebrán vliv kubické a tetragonální symetrie krystalů na nezávislost elastických konstant druhého řádu. Pro tyto symetrie je posléze odvozen tvar Christoffelovy rovnice a její řešení pro objemové vlny. Je zjištěno, že analytická řešení jsou možná jen ve význačných směrech šíření vln a navíc jen pro určité symetrie materiálů. V obecných případech se výsledky získávají numerickou cestou, například pomocí FEM nebo Ritz-Rayleighovy metody.

Následující kapitola představuje povrchové akustické vlny a jejich specifika. Ačkoliv je při práci s povrchovými vlnami nutné řešit soustavu šesti nelineárních sekulárních rovnic, ukáže se, že mohou být využity jako prostředek k výpočtu elastických konstant druhého řádu, bez ohledu na symetrii zkoumaných materiálů nebo směry šíření vln. Jako konkrétní příklady slouží měření provedená v Laboratoři ultrazvukových metod ÚT AVČR. První z nich zkoumá kubický krystal InP a další se zaměřuje na multiferoikum Fe-Pd. V obou případech jsou v materiálu laserem excitované povrchové akustické vlny, jejichž fázové rychlosti se snímají. Pro Fe-Pd je navíc zkoumán vývoj elastických konstant s působením vnějšího napětí ve směru krystalografické osy z .

Předposlední kapitola se zabývá některými zvláštními vlastnostmi Fe-Pd, jako je například anomálně nízký koeficient teplotní roztažnosti. Ten umožňuje materiálu udržet si téměř konstantní objem pro velmi širokou škálu teplot. Dalším významným jevem je tvarová paměť. Nejzásadnějším pro tuto práci se ale jeví bezdifúzní mar-

tensitický fázový přechod z plošně centrované kubické (fcc) do plošně centrované tetragonální (fct) soustavy. Ten může být vyvolán mimo jiné působením vnějšího napětí. Ačkoliv martensitické transformace bývají obvykle prvního řádu, Fe-Pd vykazuje některé znaky typické spíše pro transformace druhého řádu, jako například nízké hodnoty transformační deformace a kontinuální změnu mřížkových parametrů elementární buňky.

V poslední kapitole bylo využito výsledků výše zmiňovaných měření elastických konstant druhého řádu Fe-Pd k výpočtu elastických konstant třetího řádu. Konkrétně se podařilo získat hodnoty c_{111} , c_{112} , c_{123} , c_{144} a c_{155} . Výpočet c_{456} bohužel nebyl možný, neboť vstupní data neobsahovala informace o chování materiálu z hlediska smykových deformací.

Kapitola 1

Teorie

1.1 Elastodynamika

V této kapitole budou shrnuty základní poznatky z elastodynamiky kontinua. Zavedené značení i struktura podkapitol je přejata z klasické učebnice [1].

1.1.1 Deformace

Aby bylo možné popsat deformace fyzikálně, přiřadí se každé částici zkoumaného tělesa vektor referenční polohy \mathbf{L} a polohy po deformaci tělesa $\mathbf{l}(\mathbf{L}, t)$. Nyní lze definovat vektor posunutí

$$\mathbf{u}(\mathbf{L}, t) = \mathbf{l}(\mathbf{L}, t) - \mathbf{L}, \quad (1.1)$$

což je spojitá veličina, určující jakým směrem a o jakou vzdálenost se částice vychýlila z původní polohy.

Popis deformace tělesa pouze pomocí vektoru posunutí se ale v řadě situací ukáže být nedostačující. Problém se nejlépe demonstruje na prosté translaci tělesa. Při ní každá částice změní svojí polohu, ale relativní vzdálenosti mezi částicemi se nezmění. Tudíž ačkoliv k deformaci tělesa nedojde, vektor posunutí bude mít nenulovou hodnotu.

Proto se přechází od vektoru posunutí k jeho diferenciální formě

$$d\mathbf{u}(\mathbf{L}, t) = d\mathbf{l}(\mathbf{L}, t) - d\mathbf{L} \quad (1.2)$$

v konstantním čase t . V kartézské soustavě souřadnic má x-ová složka takové diferenciální formy tvar

$$du_x(d\mathbf{L}, t) = \frac{\partial u_x}{\partial L_x} dL_x + \frac{\partial u_x}{\partial L_y} dL_y + \frac{\partial u_x}{\partial L_z} dL_z. \quad (1.3)$$

Ani tento popis ale není vhodný, neboť $d\mathbf{u}(\mathbf{L}, t)$ nebude mít nulovou hodnotu v případě prosté rotace tělesa. Nejlépe se osvědčilo definovat deformaci jako skalární veličinu

$$\Delta = d\mathbf{l}^2(\mathbf{L}, t) - (d\mathbf{L})^2, \quad (1.4)$$

kteřá je nenulová opravdu jen tehdy, když dojde ke změně tvaru tělesa. V případě rotace a translace se bude rovnat nule. Při odvozování předpisu pro Δ se využije rovnosti

$$dl_x = dL_x + du_x, \quad (1.5)$$

plynouce z (1.2). Pro jednoduchost je vhodné se omezit na dvoudimenzionální deformace ve směru kolmém na osu z . Pro tento případ platí

$$\begin{aligned} \Delta &= (dl_x)^2 + (dl_y)^2 - (dL_x)^2 - (dL_y)^2 \\ &= \left(2\frac{\partial u_x}{\partial L_x} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial L_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial L_x}\right)^2 \right) dL_x^2 \\ &\quad + \left(2\frac{\partial u_y}{\partial L_y} + \left(\frac{\partial u_y}{\partial L_y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_x}{\partial L_y}\right)^2 \right) dL_y^2 \\ &\quad + \left(2\frac{\partial u_x}{\partial L_y} + 2\frac{\partial u_y}{\partial L_x} + 2\frac{\partial u_x}{\partial L_x}\frac{\partial u_x}{\partial L_y} + 2\frac{\partial u_y}{\partial L_x}\frac{\partial u_y}{\partial L_y} \right) dL_x dL_y. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Toto lze vyjádřit pomocí maticového zápisu

$$\begin{aligned} \Delta &= 2 \begin{pmatrix} dL_x & dL_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{yx} & S_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dL_x \\ dL_y \end{pmatrix} \\ &= 2S_{xx} dL_x^2 + 2S_{yy} dL_y^2 + 2(S_{xy} + S_{yx}) dL_x dL_y, \end{aligned} \quad (1.7)$$

kde

$$\begin{aligned} S_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial L_x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial L_x}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial L_x}\right)^2 \\ S_{yy} &= \frac{\partial u_y}{\partial L_y} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial L_y}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial L_y}\right)^2 \\ S_{xy} = S_{yx} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial L_y} + \frac{\partial u_y}{\partial L_x} + \frac{\partial u_x}{\partial L_x}\frac{\partial u_x}{\partial L_y} + \frac{\partial u_y}{\partial L_x}\frac{\partial u_y}{\partial L_y} \right). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Matice S_{ij} je bez újmy na obecnosti zvolena symetrická, neboť v (1.7) se vyskytuje pouze součet nediagonálních prvků S_{xy} a S_{yx} .

Po rozšíření na tří-dimenzionální deformace bude platit

$$\Delta(\mathbf{L}, t) = 2S_{ij}(\mathbf{L}, t) dL_i dL_j, \quad (1.9)$$

přičemž

$$S_{ij}(\mathbf{L}, t) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial L_j} + \frac{\partial u_j}{\partial L_i} + \frac{\partial u_k}{\partial L_i}\frac{\partial u_k}{\partial L_j} \right) \quad i, j, k \in \{x, y, z\}. \quad (1.10)$$

Matice $S_{ij}(\mathbf{L}, t)$ tvoří takzvaný deformační tenzor, jehož prvky jsou bezrozměrné.

Na tomto místě je vhodné zmínit, že v celé práci se dodržuje Einsteinova sumační konvence. Pokud se v rovnici nachází dva stejné indexy, vždy se přes ně sčítá.

Ve většině případů se hodnoty prvků $S_{ij}(\mathbf{L}, t)$ pohybují v rozmezí od 10^{-4} do 10^{-3} , což představuje oblast, kde deformace materiálu obvykle nebývá permanentní. Jestliže

je jejich velikost ještě menší, je možné zanedbat v (1.10) kvadratický člen a přejít k linearizované deformaci

$$S_{ij}(\mathbf{L}, t) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial L_j} + \frac{\partial u_j}{\partial L_i} \right) \quad i, j \in \{x, y, z\}. \quad (1.11)$$

V tomto případě není nutné rozlišovat vektor referenční polohy \mathbf{L} a polohy po deformaci \mathbf{l} , neboť jsou téměř totožné. Tudíž

$$\mathbf{r} := \mathbf{L} \approx \mathbf{l}. \quad (1.12)$$

Pokud je dále zavedeno

$$v_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial r_j}, \quad (1.13)$$

platí pro linearizované deformace

$$S_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} (v_{ij} + v_{ji}) \quad i, j \in \{x, y, z\}. \quad (1.14)$$

I tento zápis lze ještě více zjednodušit, konkrétně použitím Voigtovy notace. Ta přidělí každému prvku matice S_{ij} jeden index místo původních dvou podle následujícího schématu

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} & S_{xz} \\ S_{xy} & S_{yy} & S_{yz} \\ S_{xy} & S_{yz} & S_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1 & \frac{1}{2}S_6 & \frac{1}{2}S_5 \\ \frac{1}{2}S_6 & S_2 & \frac{1}{2}S_4 \\ \frac{1}{2}S_5 & \frac{1}{2}S_4 & S_3 \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Přidání faktoru $\frac{1}{2}$ před mimodiagonální prvky se ukáže být velmi výhodné, neboť se tím znatelně zjednoduší tvar klíčových rovnic (například Christofellovy), které budou zavedeny později. Díky této notaci lze tenzor deformace nahradit vektorem

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Kvůli přehlednosti budou složky vektorů, vzniklých zkrácením indexů matic, značeny velkými písmeny. Například i -tá složka vektoru \mathbf{A} , odvozeného od matice A_{ij} , se zapíše jako A_I . S použitím zkrácených indexů přejde vztah deformace a vektoru

posunutí do tvaru

$$\begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} \\ \frac{\partial u_y}{\partial y} \\ \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \\ \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \\ \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

neboli

$$S_I = \nabla_{Ij} u_j. \quad (1.18)$$

1.1.2 Napětí

V této sekci bude probráno, jak se těleso chová pod vlivem působení vnějších sil. Takové síly mohou být dvojího druhu - objemové a plošné. Objemové síly působí na všechny částice v objemu tělesa. Obvykle mají jednotku N/m^3 . Klasickým příkladem je gravitační síla. Plošné síly naopak působí pouze na povrch tělesa a efekt, který vyvolají uvnitř, je způsoben interakcí sousedících částic. Měří se v jednotkách N/m^2 . Tyto síly budou nyní rozebrány detailněji.

Mějme krychli jednotkového objemu vloženou do kartézské soustavy souřadnic. Každá stěna této krychle je podrobena silovému působení. Pro účely popisu napětí, které tyto síly vyvolají, rozložíme sílu působící na každou ze stěn do tří složek. Síla \mathbf{T}_y působící na jednotkovou stěnu krychle, ležící kolmo k ose y (viz obr. 1.1), bude mít složky

$$\mathbf{T}_y = (T_{xy}, T_{yy}, T_{zy}) \quad (1.19)$$

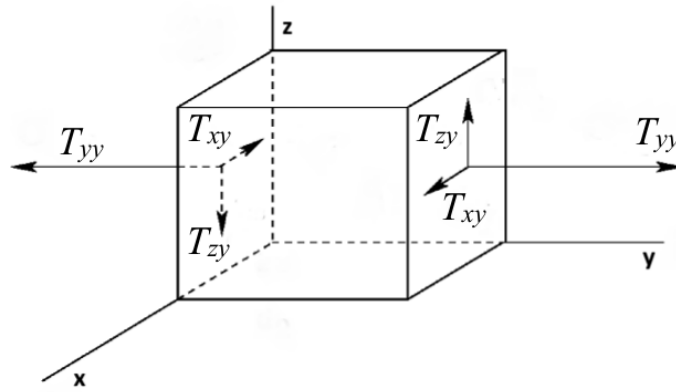
a obdobně platí

$$\mathbf{T}_x = (T_{xx}, T_{yx}, T_{zx}), \quad \mathbf{T}_z = (T_{xz}, T_{yz}, T_{zz}) \quad (1.20)$$

i pro stěny kolmé na směry x a z . Hodnoty T_{ij} závisejí na tom, kde v tělese se částice nachází. Těmito úvahami jsme dospěli k definici tenzoru napětí

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_1 & T_6 & T_5 \\ T_6 & T_2 & T_4 \\ T_5 & T_4 & T_3 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

kde $T_{ij}(\mathbf{r}, t)$ představuje i -tou složku síly, působící na stěnu krychle infinitesimálního objemu, kolmou k j -té souřadnicové ose. Je vhodné si všimnout, že při aplikaci Voigtovy notace nebyly v tomto případě přidávány k nedigonálním prvkům matice žádné koeficienty.

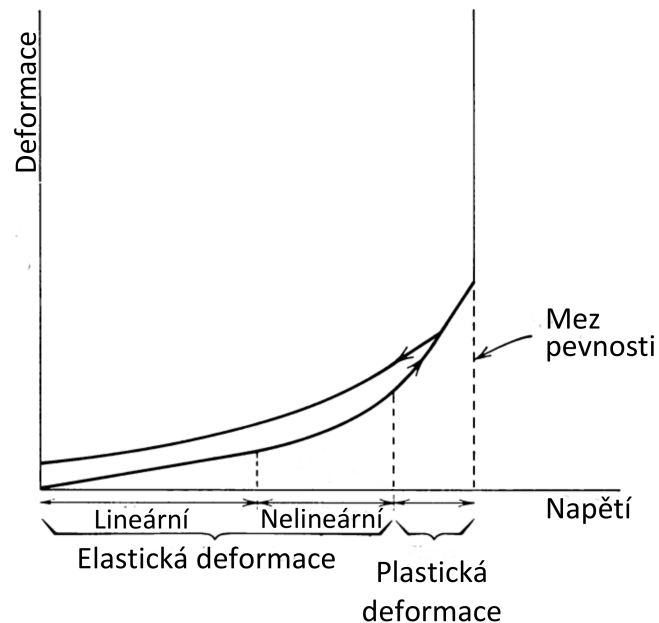


Obr. 1.1: Složky tenzoru napětí působící na rovinu kolmou k ose y [8]

1.2 Hookův zákon

Deformace je přímo úměrná napětí materiálu. Tento výrok je znám jako Hookův zákon. Platí ovšem pouze pro velmi malá napětí a deformace. Po překročení určité hodnoty začne být závislost nelineární, ačkoliv těleso je stále schopno se ve chvíli, kdy přestane napětí působit, vrátit do původního stavu. Takovéto vratné deformace nazýváme elastické.

Pokud napětí zvyšujeme až do stavu, ve kterém je těleso zdeformované nevratně, mluvíme o plastické deformaci. Situace je znázorněna na obrázku 1.2.



Obr. 1.2: Křivka závislosti deformace na napětí [1]

Jelikož je tento zákon velmi významný pro pozdější kapitoly, bude nyní probrán důkladněji.

Matematicky lze Hookův zákon vyložit tak, že každý prvek tenzoru napětí představuje lineární kombinací prvků tenzoru deformace. Neboli například

$$\begin{aligned} T_{xx} &= c_{xxxx}S_{xx} + c_{xxxy}S_{xy} + c_{xxxz}S_{xz} \\ &+ c_{xxyx}S_{yx} + c_{xxyy}S_{yy} + c_{xxyz}S_{yz} \\ &+ c_{xxzx}S_{zx} + c_{xxzy}S_{zy} + c_{xxzz}S_{zz}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Obecně tedy

$$\begin{aligned} T_{ij} &= c_{ijkl}S_{kl} \\ i, j, k &\in \{x, y, z\}, \end{aligned} \quad (1.23)$$

přičemž platí, že přes stejné indexy se sčítá. Koefficienty c_{ijkl} se nazývají elastické konstanty (druhého řádu). Měří se v jednotkách Pa . Pro snadno deformovatelná tělesa mají malé hodnoty a naopak.

Vzhledem k tomu, že (1.23) reprezentuje 9 rovnic, z nichž každá obsahuje 9 různých koeficientů c_{ijkl} , existuje celkem 81 elastických konstant, tvořících dohromady tenzor čtvrtého řádu. Ne všechny složky tenzoru jsou ovšem nezávislé. Platí

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{jilk}, \quad (1.24)$$

což snižuje jejich počet na 36. Navíc

$$c_{ijkl} = c_{klij}. \quad (1.25)$$

Neboli maximální počet nezávislých elastických konstant c_{ijkl} je 21. Toto číslo může být ještě dále sníženo, pokud se v tělese nachází určité prvky symetrie.

V některých případech může být výhodné vyjádřit deformaci jako funkci napětí

$$\begin{aligned} S_{ij} &= s_{ijkl}T_{kl} \\ i, j, k &\in \{x, y, z\}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Konstanty s_{ijkl} pak tvoří tenzor poddajnosti. Reprezentují deformovatelnost tělesa a měří se v jednotkách Pa^{-1} . Jejich hodnoty se obvykle pohybují v řádech $10^{-9}Pa^{-1}$ pro materiály vlastnostmi podobné gumě a $10^{-11}Pa^{-1}$ pro materiály tvrdé. Elasticita mívá oproti tomu hodnoty v rozmezí od 10^7 do 10^8Pa .

V praxi se ukazuje, že práce s veličinami, jenž mají čtyři indexy, je velmi náročná. Opět se k usnadnění použije vhodná konvence, určená pravidly, zanesenými v tabulce 1.1. Obecně tedy platí

$$c_{IJ} = c_{ijkl} \quad (1.27)$$

a

$$s_{IJ} = s_{ijkl} \cdot \begin{cases} 1 & \text{pro } I \text{ a zároveň } J \in \{1, 2, 3\} \\ 2 & \text{pro } I \text{ nebo } J \in \{4, 5, 6\} \\ 4 & \text{pro } I \text{ a zároveň } J \in \{4, 5, 6\}. \end{cases} \quad (1.28)$$

Rozdíl mezi c_{ijkl} a s_{ijkl} je způsoben nestejným zavedením redukovaných indexů u S_{ij} a T_{ij} . Hookův zákon má nyní tvar

$$T_I = c_{IJ}S_J \quad (1.29)$$

nebo

$$S_I = s_{IJ}T_J \quad (1.30)$$

$$I, J \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}. \quad (1.31)$$

ij	I
xx	1
yy	2
zz	3
yz, zy	4
xz, zx	5
xy, yx	6

Tabulka 1.1: Voigtova notace pro indexaci tenzorů

1.3 Krystalografické soustavy

Všechny krystalické látky jsou rozděleny do krystalografických soustav. O příslušnosti k určité soustavě rozhodují prvky symetrie, které daný krystal po provedení operace symetrie převedou do ekvivalentní polohy.

Vzhledem k tomu, že tato práce se zabývá především materiály s kubickou, případně tetragonální symetrií, je vhodné ukázat, jak se pro tyto případy změny koeficienty elasticity.

1.3.1 Kubická soustava

Tuto soustavu charakterizuje přítomnost čtyř trojčetných rotačních os, rovnoběžných s tělesovými uhlopříčkami krychle. Je vysoce symetrická a má řadu ekvivalentních směrů. Proto u materiálů s kubickou symetrií dochází ke značnému snížení počtu nezávislých elastických koeficientů. Konkrétně platí následující rovnosti

$$\begin{aligned}
 c_{11} &= c_{22} = c_{33} \\
 c_{12} &= c_{21} = c_{13} = c_{31} = c_{23} = c_{32} \\
 c_{44} &= c_{55} = c_{66}.
 \end{aligned} \tag{1.32}$$

Z toho plyne, že matice c_{IJ} bude mít tvar

$$\begin{pmatrix}
 c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44}
 \end{pmatrix}. \tag{1.33}$$

1.3.2 Tetragonální soustava

Tato soustava je význačná tím, že krystaly, které do ní náležejí, mají právě jednu osu čtyřčetnou (rotační nebo inverzní). Vzhledem k tomu, že nedosahují symetrie kubických krystalů, počet nezávislých elastických konstant je u nich snížen pouze na 6, případně 7, v závislosti na bodové grupě.

Pro účely této práce je postačující zabývat se grupou D_{4h} neboli $4/m m m$, která má 6 nenulových konstant

$$\begin{aligned}
 c_{12} &= c_{21} \\
 c_{13} &= c_{31} = c_{23} = c_{32} \\
 c_{11} &= c_{22} \\
 c_{33} \\
 c_{44} &= c_{55} \\
 c_{66}
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

a matici c_{IJ} ve tvaru

$$\begin{pmatrix}
 c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66}
 \end{pmatrix}. \tag{1.35}$$

1.4 Christoffelova rovnice

Při odvozování Christoffelovy rovnice se vychází ze vztahu pro rovnováhu sil

$$\begin{aligned}
 \nabla_{iK} T_K &= \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - F_i \\
 K &\in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \\
 i &\in \{1, 2, 3\},
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

kde

$$\nabla_{iK} = \begin{pmatrix}
 \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\
 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\
 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0
 \end{pmatrix}. \tag{1.37}$$

Člen $\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$ představuje setrvačné a F_i objemové síly. Je vhodné přepsat Hookův zákon do tvaru

$$T_K = c_{KL} S_L = c_{KL} \nabla_{Lj} u_j, \tag{1.38}$$

přičemž

$$\nabla_{Lj} = \begin{pmatrix}
 \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\
 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\
 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\
 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\
 \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\
 \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0
 \end{pmatrix}. \tag{1.39}$$

Po dosazení (1.38) do (1.36) získáme

$$\nabla_{iK} c_{KL} \nabla_{Lj} u_j = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - F_i. \quad (1.40)$$

V dalších krocích bude v rámci zjednodušení uvažováno bezzdrojové prostředí, které umožňuje klást $\mathbf{F} = 0$.

Předpokládejme, že vektor posunutí lze zapsat ve tvaru rovinné vlny šířící se materiálem v obecném směru $\mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z)$, pro kterou platí

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} e^{i(\omega t - k \mathbf{l} \cdot \mathbf{r})}. \quad (1.41)$$

Tudíž je možno nahradit operátory ∇_{iK} a ∇_{Lj} výrazy $-ikl_{iK}$ respektive $-ikl_{Lj}$, přičemž

$$l_{iK} = \begin{pmatrix} l_x & 0 & 0 & 0 & l_z & l_y \\ 0 & l_y & 0 & l_z & 0 & l_x \\ 0 & 0 & l_z & l_y & l_x & 0 \end{pmatrix}, \quad l_{Lj} = \begin{pmatrix} l_x & 0 & 0 \\ 0 & l_y & 0 \\ 0 & 0 & l_z \\ 0 & l_z & l_y \\ l_z & 0 & l_x \\ l_y & l_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.42)$$

Vlnová rovnice (1.40) tímto přejde do tvaru

$$k^2 \Gamma_{ij} u_j = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \rho \omega^2 u_i, \quad (1.43)$$

kde matici

$$\Gamma_{ij} = l_{iK} c_{KL} l_{Lj} \quad (1.44)$$

nazýváme Christoffelova matice. Po zadefinování fázové rychlosti vlny

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} \quad (1.45)$$

a vynásobením (1.43) faktorem k^{-2} získáváme

$$\Gamma_{ij} u_j = \rho v_\varphi^2 u_i, \quad (1.46)$$

neboli soustavu rovnic

$$\begin{aligned} \Gamma_{11} U_1 + \Gamma_{12} U_2 + \Gamma_{13} U_3 &= \rho v_\varphi^2 U_1 \\ \Gamma_{21} U_1 + \Gamma_{22} U_2 + \Gamma_{23} U_3 &= \rho v_\varphi^2 U_2 \\ \Gamma_{31} U_1 + \Gamma_{32} U_2 + \Gamma_{33} U_3 &= \rho v_\varphi^2 U_3. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Tu lze přepsat kompaktněji do tvaru

$$(\mathbf{\Gamma} - \rho v_\varphi^2 \mathbf{1}) \mathbf{U} = 0, \quad (1.48)$$

který se nazývá Christoffelova rovnice. Představuje úlohu na výpočet vlastních čísel ρv_φ^2 a vlastních vektorů \mathbf{U} , řešitelnou sekulární rovnicí

$$\det(\mathbf{\Gamma} - \rho v_\varphi^2 \mathbf{1}) = 0. \quad (1.49)$$

Pro ilustraci složitosti úlohy je vhodné explicitně vypsát Christoffelovu matici pro případ nejméně symetrické (triklinické) soustavy

$$\begin{aligned}
\Gamma_{11} &= c_{11}l_1^2 + c_{66}l_2^2 + c_{55}l_3^2 + 2c_{56}l_2l_3 + 2c_{15}l_3l_1 + 2c_{16}l_1l_2 \\
\Gamma_{22} &= c_{66}l_1^2 + c_{22}l_2^2 + c_{44}l_3^2 + 2c_{24}l_2l_3 + 2c_{46}l_3l_1 + 2c_{26}l_1l_2 \\
\Gamma_{33} &= c_{55}l_1^2 + c_{44}l_2^2 + c_{33}l_3^2 + 2c_{34}l_2l_3 + 2c_{35}l_3l_1 + 2c_{45}l_1l_2 \\
\Gamma_{12} &= c_{16}l_1^2 + c_{26}l_2^2 + c_{45}l_3^2 + (c_{46} + c_{25})l_2l_3 + (c_{14} + c_{56})l_3l_1 + (c_{12} + c_{66})l_1l_2 \\
\Gamma_{13} &= c_{15}l_1^2 + c_{46}l_2^2 + c_{35}l_3^2 + (c_{45} + c_{36})l_2l_3 + (c_{13} + c_{55})l_3l_1 + (c_{14} + c_{56})l_1l_2 \\
\Gamma_{23} &= c_{56}l_1^2 + c_{24}l_2^2 + c_{34}l_3^2 + (c_{44} + c_{23})l_2l_3 + (c_{36} + c_{45})l_3l_1 + (c_{25} + c_{46})l_1l_2.
\end{aligned} \tag{1.50}$$

1.4.1 Řešení pro kubickou soustavu

Po dosazení podmínek kubické symetrie do (1.50) se matice redukuje na

$$\begin{aligned}
\Gamma_{11} &= c_{11}l_1^2 + c_{44}l_2^2 + c_{44}l_3^2 \\
\Gamma_{22} &= c_{44}l_1^2 + c_{11}l_2^2 + c_{44}l_3^2 \\
\Gamma_{33} &= c_{44}l_1^2 + c_{44}l_2^2 + c_{11}l_3^2 \\
\Gamma_{12} &= (c_{12} + c_{44})l_1l_2 \\
\Gamma_{13} &= (c_{12} + c_{44})l_3l_1 \\
\Gamma_{23} &= (c_{12} + c_{44})l_2l_3.
\end{aligned} \tag{1.51}$$

Počítat (1.49) s touto maticí je možné obecně pouze numericky. Řešením jsou nejčastěji kvazi-příčné a kvazi-pódné vlny. Je ovšem vhodné zkoumat některé speciální případy, pro které se situace zjednoduší.

Nejprve lze uvažovat směr šíření vlny podél libovolné krystalové osy. Bez újmy na obecnosti zvolíme směr [100]. Rovnice (1.49) pro tento případ přejde do tvaru

$$\begin{vmatrix} c_{11} - \rho v_\varphi^2 & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} - \rho v_\varphi^2 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} - \rho v_\varphi^2 \end{vmatrix} = 0, \tag{1.52}$$

čemuž odpovídá podélná vlna s fázovou rychlostí $v_{\varphi_1} = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$ a dvě příčné vlny s

$$v_{\varphi_{2,3}} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}.$$

Dále uvažujme vlnu šířící se stěnou krychle - například kolmou na osu y . Do (1.49) stačí dosadit podmínku $l_2 = 0$, čímž vznikne

$$\begin{vmatrix} c_{11}l_1^2 + c_{44}l_3^2 - \rho v_\varphi^2 & 0 & (c_{12} + c_{44})l_1l_3 \\ 0 & c_{44}(l_1^2 + l_3^2) - \rho v_\varphi^2 & 0 \\ (c_{12} + c_{44})l_1l_3 & 0 & c_{44}l_1^2 + c_{11}l_3^2 - \rho v_\varphi^2 \end{vmatrix} = 0. \tag{1.53}$$

Platí $l_1^2 + l_3^2 = 1 - l_2^2$, neboli pro $l_2 = 0$ dostáváme z (1.53) rovnosti

$$\begin{aligned}
\left(c_{11}l_1^2 + c_{44}l_3^2 - \rho v_{\varphi_{1,2}}^2 \right) \left(c_{44}l_1^2 + c_{11}l_3^2 - \rho v_{\varphi_{1,2}}^2 \right) &= (c_{12} + c_{44})^2 l_1^2 l_3^2, \\
\rho v_{\varphi_3}^2 &= c_{44}.
\end{aligned}$$

Odtud již snadno vypočítáme

$$\begin{aligned}
v_{\varphi_1} &= (2\rho)^{-1/2} \left[c_{11} + c_{44} - \sqrt{(c_{11} - c_{44})^2 \cos^2 2\phi + (c_{12} + c_{44})^2 \sin^2 2\phi} \right]^{1/2} \\
v_{\varphi_2} &= (2\rho)^{-1/2} \left[c_{11} + c_{44} + \sqrt{(c_{11} - c_{44})^2 \cos^2 2\phi + (c_{12} + c_{44})^2 \sin^2 2\phi} \right]^{1/2} \\
v_{\varphi_3} &= \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}},
\end{aligned} \tag{1.54}$$

kde $\cos \phi = l_x$ a $\sin \phi = l_z$. Z (1.53) je patrné, že k vlastnímu číslu v_{φ_3} náleží vlastní vektor $\mathbf{U} = (0 \ 1 \ 0)^T$, jenž je kolmý k rovině, kterou se vlna šíří. Třetímu řešení tedy odpovídá čistě příčná vlna polarizovaná ve směru y . První řešení představuje obecně kvazi-příčné a druhé kvazi-podélné vlny. Čistými módy se stávají jen pro specifické směry šíření. Těmi jsou $\phi = 0$ ($l_z = 0$) a $\phi = \pi/2$ ($l_x = 0$), případně $\phi = \pi/4, 3\pi/4$.

1.4.2 Řešení pro tetragonální soustavu

Obdobně jako v předchozím případě je vhodné nejprve uvést Christoffelovu matici (1.50) s elastickými koeficienty tetragonální soustavy

$$\begin{aligned}
\Gamma_{11} &= c_{11}l_1^2 + c_{66}l_2^2 + c_{44}l_3^2 \\
\Gamma_{22} &= c_{66}l_1^2 + c_{11}l_2^2 + c_{44}l_3^2 \\
\Gamma_{33} &= c_{44}l_1^2 + c_{44}l_2^2 + c_{33}l_3^2 \\
\Gamma_{12} &= (c_{12} + c_{66})l_1l_2 \\
\Gamma_{13} &= (c_{13} + c_{44})l_1l_3 \\
\Gamma_{23} &= (c_{13} + c_{44})l_2l_3
\end{aligned} \tag{1.55}$$

a dosadit jí do sekulární rovnice (1.49). Opět je obecné řešení velmi komplikované, proto bude věnována pozornost pouze dvěma speciálním případům. Prvním z nich je vlna šířící se rovinou, jejíž normála je osa z . Získáme rovnici

$$\begin{vmatrix}
c_{11}l_1^2 + c_{66}l_2^2 - \rho v_\varphi^2 & (c_{12} + c_{66})l_1l_2 & 0 \\
(c_{12} + c_{66})l_1l_2 & c_{66}l_1^2 + c_{11}l_2^2 - \rho v_\varphi^2 & 0 \\
0 & 0 & c_{44}(l_1^2 + l_2^2) - \rho v_\varphi^2
\end{vmatrix} = 0, \tag{1.56}$$

která je na první pohled velmi podobná (1.53). Proto lze rovnou napsat výsledné fázové rychlosti pro kvazi-příčné vlny

$$v_{\varphi_1} = (2\rho)^{-1/2} \left[c_{11} + c_{66} - \sqrt{(c_{11} - c_{66})^2 \cos^2 2\phi + (c_{12} + c_{66})^2 \sin^2 2\phi} \right]^{1/2},$$

kvazi-podélné vlny

$$v_{\varphi_2} = (2\rho)^{-1/2} \left[c_{11} + c_{66} + \sqrt{(c_{11} - c_{66})^2 \cos^2 2\phi + (c_{12} + c_{66})^2 \sin^2 2\phi} \right]^{1/2}$$

a čistě příčné vlny polarizované ve směru osy z

$$v_{\varphi_3} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}},$$

kde tentokrát $\cos \phi = l_x$ a $\sin \phi = l_y$.

Další zkoumanou situací je vlna šířící se rovinou s normálou x nebo y (výsledky pro oba případy jsou ekvivalentní). Pro první z těchto případů má (1.49) tvar

$$\begin{vmatrix} c_{11}l_1^2 + c_{44}l_3^2 - \rho v_\varphi^2 & 0 & (c_{13} + c_{44})l_1l_3 \\ 0 & c_{66}l_1^2 + c_{44}l_3^2 - \rho v_\varphi^2 & 0 \\ (c_{13} + c_{44})l_1l_3 & 0 & c_{44}l_1^2 + c_{33}l_3^2 - \rho v_\varphi^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (1.57)$$

z něž lze pro $\cos \theta = l_z$ a $\sin \theta = l_x$ získat řešení v podobě kvazi-příčné vlny s fázovou rychlostí

$$v_{\varphi_1} = (2\rho)^{-1/2} \left[A - \sqrt{B^2 + C} \right]^{1/2},$$

čistě příčné vlny polarizované ve směru osy y s fázovou rychlostí

$$v_{\varphi_2} = \rho^{-1/2} \left[c_{66} \sin^2 \theta + c_{44} \cos^2 \theta \right]^{1/2}$$

a kvazi-podélné vlny s fázovou rychlostí

$$v_{\varphi_3} = (2\rho)^{-1/2} \left[A + \sqrt{B^2 + C} \right]^{1/2},$$

přičemž platí

$$\begin{aligned} A &= c_{11} \sin^2 \theta + c_{33} \cos^2 \theta + c_{44} \\ B &= (c_{11} - c_{44}) \sin^2 \theta + (c_{44} - c_{33}) \cos^2 \theta \\ C &= (c_{13} + c_{44})^2 \sin^2 2\theta. \end{aligned}$$

Kapitola 2

Povrchové vlny

V předchozí kapitole byly v souvislosti s elastickými konstantami uvažovány vždy objemové vlny. Často ale mohou být užitečným nástrojem i vlny povrchové. Pro popis jejich šíření uvažujme materiál mající volný povrch s vnější normálou \mathbf{m} . Okrajovou podmínku volného povrchu lze matematicky vyjádřit jako

$$T_{ij}m_j = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} m_j = 0. \quad (2.1)$$

Z elastodynamické rovnice

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \quad (2.2)$$

s okrajovou podmínkou (2.1) lze získat hodnoty vektoru posunutí $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Předpokládáme řešení je ve tvaru rovinné harmonické vlny

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U} \exp[-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})], \quad (2.3)$$

kde tentokrát vlnový vektor $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^3$. Aby mohlo být řešení prohlášeno za povrchovou vlnu, musí mít směr šíření \mathbf{n} kolmý k normále \mathbf{m} a imaginární část vlnového vektoru \mathbf{k} naopak rovnoběžnou s \mathbf{m} . K typickým vlastnostem povrchových vln totiž patří to, že se zvyšující se hloubkou (vzdáleností od povrchu) dochází k exponenciálnímu útlumu výchylek. Dále musí platit, že projekce reálné části \mathbf{k} do volného povrchu je nenulová a rovnoběžná s \mathbf{n} . Pak lze vlnové číslo definovat jako $k = \text{Re}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}$.

Po dosazení (2.3) do (2.2) je patrné, že až na okrajové podmínky se výsledná nelineární sekulární rovnice neliší od Christoffelovy rovnice (1.48) z minulé kapitoly. Obecně je výsledek možné získat pouze numerickou cestou.

Řešením problému povrchových vln v anizotropních látkách se podrobně zabývají Royer a Dieulesaint [15]. Ukazují, že výpočet lze za podmínek probraných níže značně zjednodušit.

Nahrazují původní sekulární rovnici šestého řádu implicitní rovnicí

$$c_{22}c_{66}\chi^2(c_{11} - \chi) = (c_{66} - \chi) [c_{22}(c_{11} - \chi) - c_{12}^2]^2, \quad (2.4)$$

kde

$$\chi = \rho v_\varphi^2. \quad (2.5)$$

Hlavní výhodou rovnice (2.4) je možnost vypočítat její řešení analyticky a získat tak přesný výsledek. Ovšem jak bylo již řečeno, při jejím odvození byly uvažovány omezující předpoklady. Striktnost těchto omezení zamezuje například využití rovnice pro experimenty zahrnující méně symetrické materiály (triklinické, monoklinické, rombické a trigonální).

V článku [15] je pro všechny následující úvahy bez újmy na obecnosti definován materiál s volným povrchem, jehož normála leží podél osy y a povrchová vlna, jež se jím šíří ve směru osy x (příčemž souřadnicové osy x , y a z nemusí být nutně totožné s krystalografickými).

Prvním uvažovaným předpokladem je přítomnost dvojčetné osy (rotační nebo inverzní) rovnoběžné s osou z . Ta zajistí, že všechny elastické koeficienty c_{ijkl} s jedním indexem 3 (např.: c_{1113} , c_{1123} , ...) budou nulové, tudíž i prvky Christoffelovy matice Γ_{13} a Γ_{23} budou nulové, což zásadně sníží složitost výpočtu determinantu (1.49). Tento předpoklad nemůže být nikdy splněn pro materiál náležící do triklinické soustavy.

Dále je nezbytné diskutovat platnost okrajových podmínek

$$c_{i211} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + c_{i212} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) + c_{i222} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0. \quad (2.6)$$

Podmínka pro $i = 3$ je splněna identicky a v ostatních případech ($i \in \{1, 2\}$) je za účelem zjednodušení vyžadováno, aby $c_{1211} = c_{1222} = 0$. To je možné zajistit pro materiály, u kterých vede osa dvojčetná (rotační nebo inverzní) podél osy x nebo y . Tudíž je vyžadováno konkrétní natočení krystalu vůči daným souřadnicovým osám. Po rozsáhlé analýze lze dojít k závěru, že existuje pouze 16 kombinací krystalografických soustav, do kterých může látka patřit, a konkrétních směrů přípustných pro šíření vlny v této látce, které splní požadované předpoklady a dají vzniknout povrchové vlně řešitelné analyticky.

Je zřejmé, že pokud mají být povrchové vlny použity jako univerzální prostředek k měření elastických koeficientů, je vhodné nejprve nalézt metodu schopnou řešit daný problém numericky. Jedním z možných přístupů je použití metody konečných prvků (FEM)[6]. Bohužel získat řešení touto cestou zabere mnoho výpočetního času a výstupy budou i tak zatíženy relativně velkou chybou.

Alternativní numerická metoda se nazývá Ritz-Rayleighova. Využívá diskretizaci prostoru funkcí. Hlavní myšlenka této metody spočívá v rozložení vektoru posunutí $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ do fixní ortogonální funkční báze. To umožní transformovat původně nelineární sekulární rovnici na lineární, která je již snadno řešitelná. V článku [19] je podrobně popsán průběh konkrétního experimentu, který využívá Ritz-Rayleighovu metodu jako prostředek k výpočtu elastických konstant kubického krystalu InP.

2.1 Měření elastických konstant

Základem výpočtu je řešení takzvané inverzní procedury, která spočívá v minimalizaci funkce

$$F(c_{ijkl}) = \sum_p \left(v_{\varphi_p}^{\text{teor}}(c_{ijkl}) - v_{\varphi_p}^{\text{exp}} \right)^2, \quad (2.7)$$

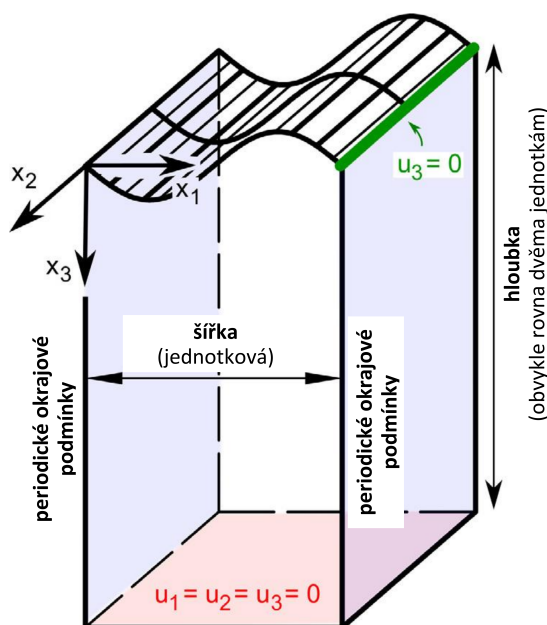
kde $v_{\varphi_p}^{\text{exp}}$ udává experimentálně změřenou fázovou rychlost povrchových vln. Funkce $v_{\varphi_p}^{\text{teor}}$ představuje fázovou rychlost jako funkci elastických konstant, kterou lze získat provedením takzvané přímé procedury.

Přímá procedura slouží v první řadě k výpočtu fázové rychlosti u materiálů, jejichž elastické konstanty jsou známy. V tomto případě je ale úkolem je změřit. Použije se proto pouze jejich hrubý odhad \tilde{c}_{ijkl} . Nepřesnost odhadu by neměla minimalizaci $F(c_{ijkl})$ ztlačněji ovlivnit.

V přímé proceduře v souladu s Hamiltonovým variačním principem hledáme takovou úhlovou frekvenci ω , aby byla splněna podmínka

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{u}} \Lambda(\mathbf{u}, \tilde{c}_{ijkl}, \omega) = 0, \quad (2.8)$$

kde $\Lambda(\mathbf{u}, \tilde{c}_{ijkl}, \omega)$ je Lagrangeovská energie výpočetní domény (viz obrázek 2.1).

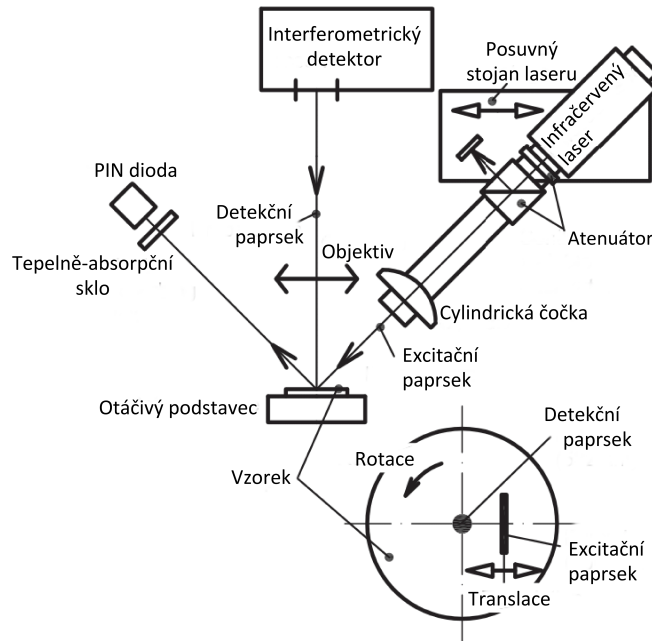


Obr. 2.1: Výpočetní doména s okrajovými podmínkami [19]

Aplikací Ritz-Rayleighovy metody je úloha převedena na lineární sekulární rovnici pro vlastní čísla $\omega(\tilde{c}_{ijkl})$. Fázovou rychlost lze poté jednoduše získat ze vzorce

$$v_{\varphi}^{\text{teor}}(\tilde{c}_{ijkl}) = \frac{1}{2\pi} \omega(\tilde{c}_{ijkl}). \quad (2.9)$$

Za účelem experimentálního zjištění fázové rychlosti $v_{\varphi_p}^{\text{exp}}$ byl krystal InP seříznut tak, aby vznikly dvě přibližně kolmé roviny (volné povrchy). K excitaci povrchové vlny byl použit laser, jehož původně kruhový průřez paprsku byl zfokusován do úsečky cylindrickými čočkami. Další laser byl následně použit k detekci postupující povrchové vlny v několika různých vzdálenostech od zdroje. Měřený vzorek se navíc nacházel na otáčivé platformě což umožnilo skenování v různých směrech s celkovým rozsahem 180°(viz obrázek 2.2). V některých z nich bylo možné naměřit i kvazi-příčné, kvazi-podélné nebo pseudo-povrchové vlny. Amplituda povrchových vln byla



Obr. 2.2: Schéma uspořádání experimentu. Horní část představuje pohled na aparaturu shora, spodní část zobrazuje detailně zkoumaný vzorek v bočním pohledu. [19]

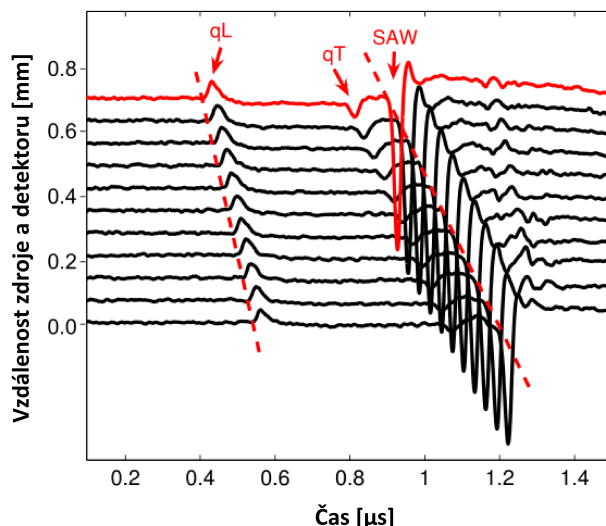
však v porovnání s nimi vždy výrazně vyšší a umožňovala přesné určení fázových rychlostí. Výsledky jsou zaznamenané v grafu 2.3.

Z výše popsaného postupu je zřejmé, že metoda použitá v článku [19] má univerzální použití - nejsou zde žádná omezení na symetrii zkoumaného materiálu nebo směr šíření vln.

2.2 Měření elastických konstant pod vnějším napětím

Dalším příkladem využití povrchových vln je měření elastických konstant materiálů, na které působí vnější přiložené napětí. V článku [17] je toto demonstrováno na krystalu slitiny Fe-31.2at.%Pd. Ten byl nejprve ořezán do požadovaného tvaru (viz obr. 2.4(a)) a poté podroben silovému působení ve směru [001] (viz obr. 2.4(b)), spojenému s měřením elastických konstant stejným způsobem jako v kapitole 2.1. Článek [19] podrobně rozebírá fakt, že při zjišťování kompletního tenzoru elastických konstant může být měření fázových rychlostí povrchových vln nedostatečné, neboť tyto vlny jsou citlivé spíše na smykové konstanty. Podélné mohou vycházet s relativně velkou chybou. Proto je vhodné provést i měření fázových rychlostí qL vln se směru rovnoběžném a kolmém k působícímu napětí. Tyto vlny byly generovány a následně i detekovány piezoelektrickými snímači (viz obr. 2.4(c)).

Při nulovém vnějším silovém působení bylo předpokládáno, že materiál vykazuje kubickou symetrii a tudíž má tři nezávislé elastické koeficienty c_{11} , c_{12} a c_{44} . Se zvyšováním vnějšího napětí se symetrie postupně změnila v tetragonální s čtyřčetnou osou orientovanou shodně se směrem komprese. Počet nezávislých elastických kon-



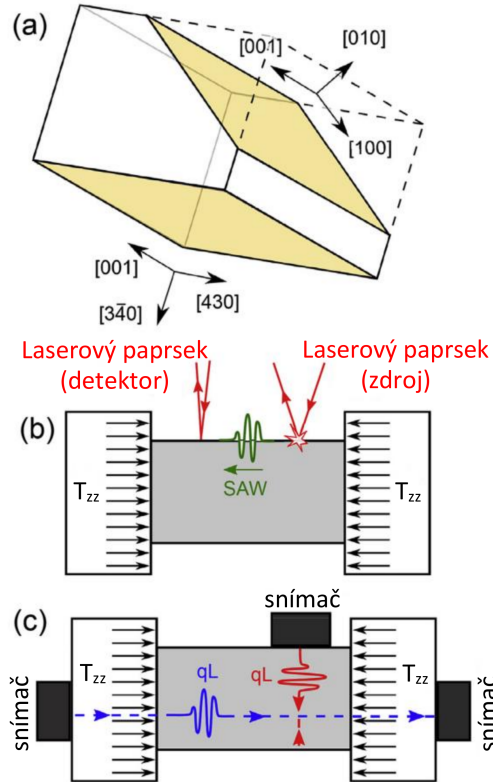
Graf 2.3: Příklady vlnových křivek (qL - kvazi-podélné, qT - kvazi-příčné, SAW - povrchové vlny) získaných měřením v pevně daném směru pro 11 různých vzdáleností zdroje od detektoru (naznačeno přerušovanou čarou). [19]

stant vzrostl na 6 (c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} , c_{44} , c_{66}).

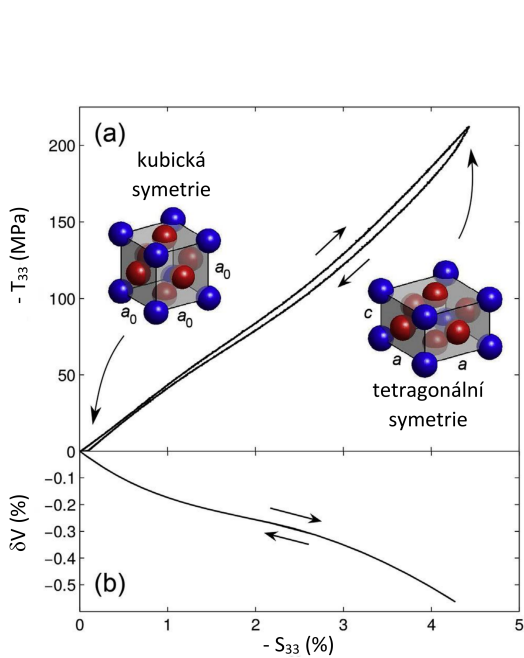
Analogicky k postupu v kapitole 2.1 byl minimalizací funkce $F(c_{ijkl})$ získán tenzor elastických konstant pro několik hodnot napětí v intervalu od 0 do 210 MPa s krokem 25 MPa. Tento rozsah byl zvolen tak, aby bylo zajištěno, že napětí nedosáhne meze pevnosti materiálu a deformace zůstane elastická.

Graf 2.5 ukazuje jak se v průběhu měření v závislosti na napětí mění hodnoty deformace a s deformací i celkový objem tělesa. Z horní části (a) je patrné, že tetragonizace materiálu proběhla postupně bez jakýchkoliv ostrých přechodů, v dolní části (b) lze pak pozorovat téměř dokonalé zachování objemu (pokles nejvýše o $\sim 0.6\%$). Za povšimnutí stojí také samotný průběh obou křivek, jenž nevykazuje téměř žádnou hysterezi.

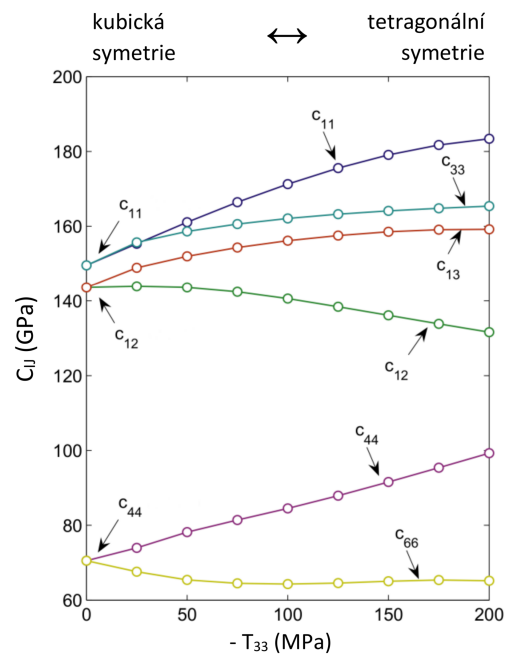
V celém intervalu hodnot napětí a ve všech směrech šíření se fázové rychlosti vln, získané při zvyšování napětí, lišily od rychlostí získaných při snižování o méně než $0.07 \text{ mm}/\mu\text{s}$, což odpovídá přesnosti měření. Díky tomu bylo možné předpokládat nehysterézní vývoj fázové rychlosti a tudíž i elastických konstant. Za fázovou rychlost pro dané napětí byl stanoven průměr z rychlostí získaných při zvyšování a snižování napětí. Výsledky měření jsou zanesené v grafu 2.6.



Obr. 2.4: (a) geometrie vzorku; (b) experimentální uspořádání pro měření SAW; (c) experimentální uspořádání pro měření qL vlnění [17]



Graf 2.5: (a) závislost napětí na deformaci u zkoumaného krystalu Fe-Pd; (b) relativní změna objemu [17]



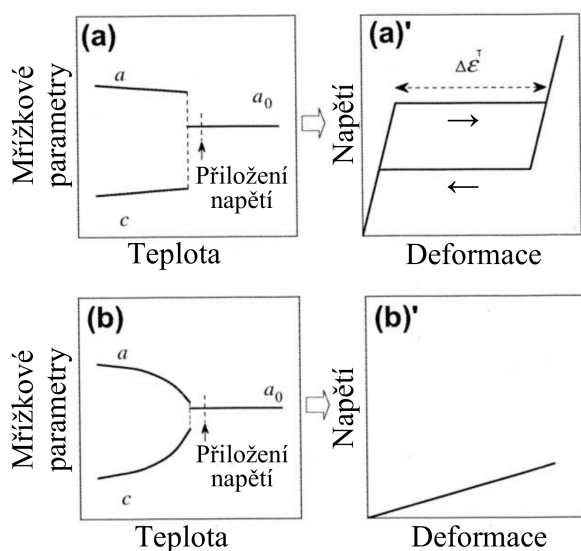
Graf 2.6: Závislost hodnot elastických konstant Fe-Pd na působícím napětí [17]

Kapitola 3

Fe-Pd

Slitina železa a paladia je významný materiál, neboť vykazuje několik velmi zajímavých vlastností. První z nich je anomálně nízký koeficient teplotní roztažnosti [18]. Ten umožňuje materiálu udržet si téměř konstantní objem ve velmi širokých intervalech teplot. Další zajímavou vlastností je tvarová paměť. V souvislosti s ní by bylo vhodné zmínit, že slitina Fe-Pd má neuspořádanou strukturu. Tvarová paměť bývá totiž obvykle spojována s látkami uspořádaného charakteru [20].

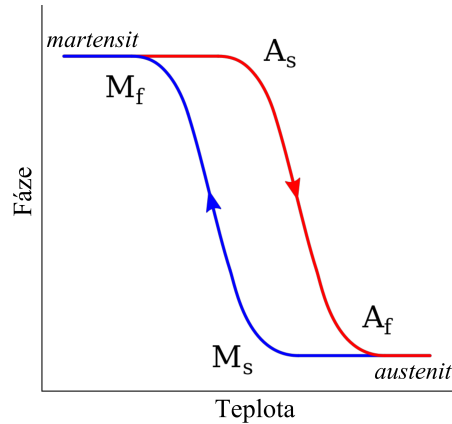
Pro tuto práci je ovšem nejzásadnější poslední vlastnost - bezdifúzní fázový přechod z plošně centrované kubické (fcc) do plošně centrované tetragonální (fct) soustavy. Tento typ martensitické transformace (MT) bývá obvykle prvního řádu. Probíhá proces nukleace, tj. existuje stav, kdy se v materiálu nachází zároveň původní fcc fáze (zvaná austenit) i zárodky vznikající fct fáze (martensit) [9]. Mřížkové parametry se při přechodu změni nespojitě a ve fázi martensitu zůstávají již téměř konstantní (obr. 3.1 (a)).



Obr. 3.1: Schematická ilustrace závislosti mřížkových parametrů na teplotě a napětí na deformaci při MT prvního řádu (a, a') a MT druhého řádu (b, b') [22]

Lze určit počáteční (A_s , M_s) a konečné (A_f , M_f) teploty tak, že při ochlazování

dochází mezi M_s a M_f k transformaci materiálu v martensit. Při následném zahřátí mezi A_s a A_f probíhá přechod zpět na původní austenit (obr. 3.2).



Obr. 3.2: Schéma průběhu bezdifúzní martensitické transformace

Aplikací vnějšího napětí při teplotě větší než A_f dochází k nelineární vratné deformaci, schematicky znázorněné na obrázku 3.1 (a)'. Příčinou tohoto jevu je transformační deformace ε^T , vznikající z důvodu diskontinuity strukturálních změn při MT, ke které dochází při zvyšování napětí. Po snížení vnějšího napětí na nulovou hodnotu se materiál vrátí do původní fáze austenitu. Křivka závislosti napětí na deformaci vykazuje vysokou míru hystereze.

Dalším jevem typicky provázejícím MT je tzv. měknutí elastických konstant, projevující se značným poklesem koeficientu

$$C' = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \quad (3.1)$$

v okolí teploty M_s . Obvykle se jeho hodnota pohybuje v rozmezí 5 až 7 GPa, přičemž může být i mírně nižší.

Mnohé experimenty potvrdily, že u slitiny Fe-Pd probíhá výše popsáný fázový přechod nestandardně. U mřížkových parametrů je pozorován v okamžiku transformace z austenitu pouze malý skok a ve fázi martensitu se jejich hodnota se snižující se teplotou mění kontinuálně (viz obr. 3.1(b)). Velikost skoku naznačuje velmi nízkou hodnotu transformační deformace ε^T . Při vyvolání fázového přechodu působením napětí tak sice vznikne očekávaná rozsáhlá elastická deformace, nebude ale vykazovat hysterezní průběh (obr. 3.1(b)').

Navzdory tomu, že koeficient C' v okolí M_s klesá, neprobíhá ani jev měknutí elastických konstant přesně tak, jak bylo popsáno u fázovému přechodu prvního řádu. Pozorovány byly totiž hodnoty C' v řádu 1 GPa, ale i výrazně nižší.

Z důvodu těchto anomalit je fázový přechod fcc-fct v Fe-Pd považován spíše za přechod druhého řádu [17, 22]. Je ovšem možné se setkat i s autory, kteří se přiklánějí k tzv. slabě prvnímu řádu [5, 14]. Definitivnímu zařazení bude nejspíše předcházet ještě rozsáhlý výzkum a diskuse.

Kapitola 4

Elastické konstanty třetího řádu

Výpočtem elastických konstant třetího a vyššího řádu pro krystaly různých tříd symetrie se podrobně zabývají Liakos a Saunders v článku [11]. Využívají Landauovu teorii fázových přechodů, která předpokládá, že v okolí přechodu může být Gibbsova volná energie rozvedena do Taylorovy řady podle termodynamické proměnné η

$$\phi(P, T, \eta) = \phi_0 + \alpha\eta + A(P, T)\eta^2 + B(P, T)\eta^3 + C(P, T)\eta^4 + \dots \quad (4.1)$$

Volná energie krystalu jednotkové hmotnosti rozvedená do Taylorovy řady podle jednotlivých prvků tenzoru deformace bude mít tvar

$$\begin{aligned} \rho_0 F(T, S) - \rho_0 F(T, 0) = & \frac{1}{2!} c_{ijkl} S_{ij} S_{kl} + \frac{1}{3!} c_{ijklmn} S_{ij} S_{kl} S_{mn} + \\ & + \frac{1}{4!} c_{ijklmnop} S_{ij} S_{kl} S_{mn} S_{op} + \dots \end{aligned} \quad (4.2)$$

Pro Laueho grupy kubických krystalů lze rozepsat

$$\begin{aligned} \frac{1}{3!} c_{ijklmn} S_{ij} S_{kl} S_{mn} = & \frac{1}{6} c_{111} (S_{11}^3 + S_{22}^3 + S_{33}^3) + \\ & + \frac{1}{2} c_{112} (S_{11}^2 S_{22} + S_{11} S_{22}^2 + S_{11}^2 S_{33} + S_{11} S_{33}^2 + S_{22}^2 S_{33} + S_{22} S_{33}^2) + \\ & + c_{123} S_{11} S_{22} S_{33} + \frac{1}{2} c_{144} (S_{11} S_{23}^2 + S_{22} S_{13}^2 + S_{33} S_{12}^2) + \\ & + \frac{1}{2} c_{155} (S_{11} S_{13}^2 + S_{11} S_{12}^2 + S_{22} S_{23}^2 + S_{22} S_{12}^2 + S_{33} S_{23}^2 + S_{33} S_{13}^2) + \\ & + c_{456} S_{12} S_{13} S_{23}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Z tohoto vzorce vyplývá, že například pro c_{111} platí

$$c_{111} = \frac{\partial^3 F}{\partial S_{11}^3}, \quad (4.4)$$

což lze přepsat jako

$$c_{111} = \frac{\partial^2}{\partial S_{11}^2} \left(\frac{\partial F}{\partial S_{11}} \right) = \frac{\partial^2}{\partial S_{11}^2} T_{11} = \frac{\partial}{\partial S_{11}} \left(\frac{\partial T_{11}}{\partial S_{11}} \right), \quad (4.5)$$

přičemž z Hookova zákona (1.22) je patrné, že

$$\frac{\partial T_{11}}{\partial S_{11}} = c_{11}, \quad (4.6)$$

tudíž

$$c_{111} = \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{11}}. \quad (4.7)$$

Stejným způsobem je z (4.3) možné získat rovnosti

$$c_{111} = \frac{\partial c_{22}}{\partial S_{22}} \quad \text{a} \quad c_{111} = \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{33}}. \quad (4.8)$$

Řadou analogických úvah bylo zjištěno, že hodnoty elastických konstant třetího řádu obecně odpovídají derivacím elastických konstant druhého řádu podle deformace, což bude v následující části kapitoly využito k jejich výpočtu pro monokrystal Fe-Pd. Jako zdroj vstupních dat poslouží experiment popsáný v podkapitole 2.2.

Hodnoty elastických konstant $c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}, c_{44}, c_{66}$ v závislosti na vnějším napětí T_{33} jsou zakresleny v grafu 2.6. Je tedy možné zjistit derivace $\frac{\partial c_{ij}}{\partial T_{33}}$. Například pro c_{11} platí (s využitím řetězového pravidla)

$$\frac{\partial c_{11}}{\partial T_{33}} = \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{ij}} \frac{\partial S_{ij}}{\partial T_{33}}. \quad (4.9)$$

Je vhodné vzít v úvahu, že na krystal nepůsobí smyková napětí. Z toho vyplývá, že smykové deformace S_{12}, S_{13} a S_{23} budou nulové. Hodnoty S_{33} v závislosti na T_{33} lze získat z grafu 2.5. Ten zároveň ukazuje i relativní změnu objemu krystalu δV , čehož bude využito k výpočtu S_{11} a S_{22} . V rovnovážném stavu totiž platí

$$S_{11} + S_{22} + S_{33} = \delta V. \quad (4.10)$$

U monokrystalu Fe-Pd byla zjištěna kubická symetrie, která ve stavu jednoosé napjatosti ve směru krystalografické osy z kontinuálně přechází v tetragonální. Směry $[100]$ a $[010]$ jsou tudíž v krystalu ekvivalentní a je opodstatněné uvažovat, že

$$S_{11} = S_{22} = \frac{1}{2} (\delta V - S_{33}). \quad (4.11)$$

Nyní je již možné napsat kompletní soustavu rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_{11}}{\partial T_{33}} &= \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{11}} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{22}} \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{33}} \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{12}}{\partial T_{33}} &= \frac{\partial c_{12}}{\partial S_{11}} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{12}}{\partial S_{22}} \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{12}}{\partial S_{33}} \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{13}}{\partial T_{33}} &= \frac{\partial c_{13}}{\partial S_{11}} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{13}}{\partial S_{22}} \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{13}}{\partial S_{33}} \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{33}}{\partial T_{33}} &= \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{11}} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{22}} \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{33}} \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{44}}{\partial T_{33}} &= \frac{\partial c_{44}}{\partial S_{11}} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{44}}{\partial S_{22}} \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{44}}{\partial S_{33}} \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{66}}{\partial T_{33}} &= \frac{\partial c_{66}}{\partial S_{11}} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{66}}{\partial S_{22}} \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial c_{66}}{\partial S_{33}} \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Do rovnic dosadíme vztahy pro elastické konstanty třetího řádu (viz (4.3))

$$\begin{aligned}
c_{111} &= \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{11}} = \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{33}} \\
c_{112} &= \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{22}} = \frac{\partial c_{11}}{\partial S_{33}} = \frac{\partial c_{12}}{\partial S_{11}} = \frac{\partial c_{12}}{\partial S_{22}} = \frac{\partial c_{13}}{\partial S_{11}} = \frac{\partial c_{13}}{\partial S_{33}} = \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{11}} = \frac{\partial c_{33}}{\partial S_{22}} \\
c_{123} &= \frac{\partial c_{12}}{\partial S_{33}} = \frac{\partial c_{13}}{\partial S_{22}} \\
c_{144} &= \frac{\partial c_{44}}{\partial S_{11}} = \frac{\partial c_{66}}{\partial S_{33}} \\
c_{155} &= \frac{\partial c_{44}}{\partial S_{22}} = \frac{\partial c_{44}}{\partial S_{33}} = \frac{\partial c_{66}}{\partial S_{11}} = \frac{\partial c_{66}}{\partial S_{22}}
\end{aligned} \tag{4.13}$$

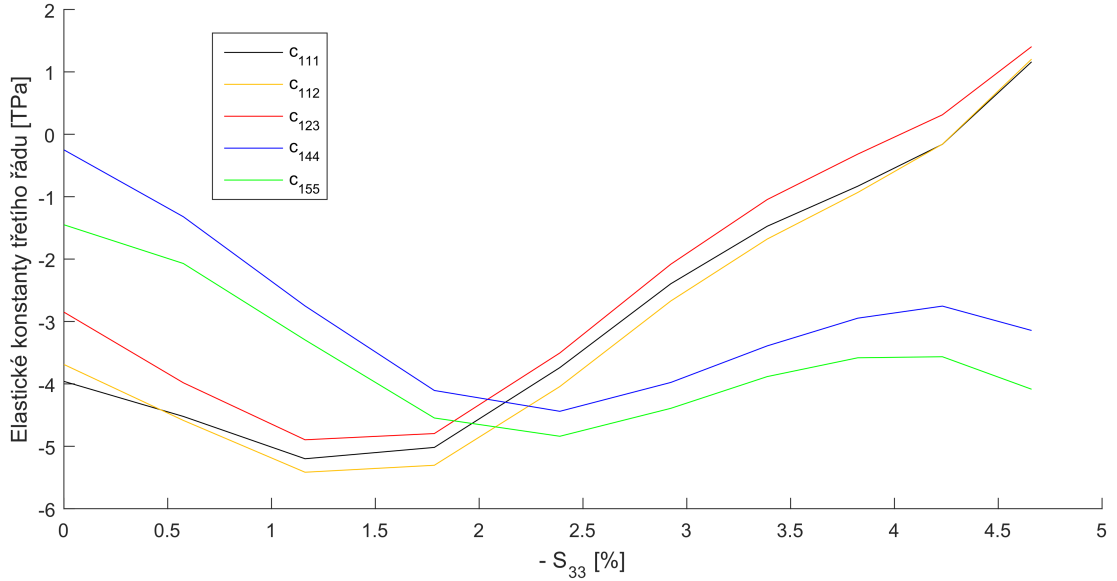
a dostáváme soustavu v maticovém tvaru

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial c_{11}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{12}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{13}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{44}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{66}}{\partial T_{33}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{111} & c_{112} & c_{112} \\ c_{112} & c_{112} & c_{123} \\ c_{112} & c_{123} & c_{112} \\ c_{112} & c_{112} & c_{111} \\ c_{144} & c_{155} & c_{155} \\ c_{155} & c_{155} & c_{144} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial S_{22}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \end{pmatrix}, \tag{4.14}$$

jenž může být s využitím rovnosti $S_{11} = S_{22}$ dále přepsán na

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial c_{11}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{12}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{13}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{33}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{44}}{\partial T_{33}} \\ \frac{\partial c_{66}}{\partial T_{33}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} & \left(\frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} & \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \right) & \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} & 2 \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} & \left(\frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} + \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} \right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}} & 2 \frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{111} \\ c_{112} \\ c_{123} \\ c_{144} \\ c_{155} \end{pmatrix}. \tag{4.15}$$

Numericky vypočtené hodnoty parciálních derivací, vystupujících v této soustavě, ukazuje tabulka 4.1.



Graf 4.1: Závislost elastických konstant třetího řádu monokrystalu Fe-Pd na deformaci ve směru [001]

Řešení je následně vypočteno v programu MATLAB prostřednictvím funkce `pinv`. Tato funkce umožňuje řešit soustavu rovnic

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.16)$$

převedením do tvaru

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b}, \quad (4.17)$$

kde $\mathbf{A}^+ = \text{pinv}(\mathbf{A})$ představuje Moore–Penroseovou pseudoinverzi matice \mathbf{A} .

Obecně pro matici \mathbf{A} řádu $m \times n$ a její pseudoinverzi \mathbf{A}^+ řádu $n \times m$ platí následující rovnosti

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} &= \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ &= \mathbf{A}^+ \end{aligned} \quad (4.18)$$

$\mathbf{A}\mathbf{A}^+$ je hermitovská
 $\mathbf{A}^+\mathbf{A}$ je hermitovská.

Vektor \mathbf{x} je pak řešením soustavy (4.16) ve smyslu nejmenších čtverců. Má-li matice \mathbf{A} lineárně závislé sloupce, pak je to navíc řešení s minimální normou (viz dokumentace programu MATLAB). Hlavní výhodou použití této metody je fakt, že pseudoinvertovat lze libovolnou matici.

Výsledné hodnoty elastických konstant třetího řádu, získané metodou pseudoinverze, jsou zakresleny v grafu 4.1.

T_{33} [MPa]	0	25	50	75	100	125	150	175	200	225
$\frac{\partial S_{11}}{\partial T_{33}}$ [TPa ⁻¹]	68,1	98,6	111,9	112,2	103,8	90,6	76,8	66,7	64,4	74,0
$\frac{\partial S_{33}}{\partial T_{33}}$ [TPa ⁻¹]	-195,2	-233,2	-247,2	-243,0	-226,7	-204,2	-181,5	-164,5	-159,1	-171,2
$\frac{\partial c_{11}}{\partial T_{33}}$ [-]	234,9	231,6	221,7	205,7	183,9	156,6	124,0	86,6	44,6	-1,6
$\frac{\partial c_{12}}{\partial T_{33}}$ [-]	41,1	-1,2	-34,9	-60,5	-78,5	-89,6	-94,2	-92,9	-86,3	-74,9
$\frac{\partial c_{13}}{\partial T_{33}}$ [-]	238,6	164,0	112,7	79,4	58,7	45,3	33,8	18,9	-4,8	-42,6
$\frac{\partial c_{33}}{\partial T_{33}}$ [-]	282,8	175,6	105,0	63,4	43,0	36,3	35,5	33,0	21,2	-7,6
$\frac{\partial c_{44}}{\partial T_{33}}$ [-]	167,2	148,4	137,6	133,5	134,4	139,1	145,8	153,3	159,9	164,3
$\frac{\partial c_{66}}{\partial T_{33}}$ [-]	-148,8	-100,3	-57,9	-23,2	2,3	16,8	18,7	6,5	-21,4	-66,7

Tabulka 4.1: Hodnoty parciálních derivací deformací a elastických konstant v závislosti na aplikovaném napětí

Diskuze

V první řadě je nutné vysvětlit, proč nebyla zjištěna hodnota konstanty c_{456} . Podle (4.3) platí

$$c_{456} = \frac{\partial^3 F}{\partial S_{12} \partial S_{13} \partial S_{23}}. \quad (4.19)$$

Data, která jsou k dispozici, ale neposkytují informace o smykových deformacích. Výpočet proto není možný bez dodatečných měření.

Při interpretaci výsledků ostatních konstant je třeba brát v potaz několik faktorů, vnášejících do výpočtů nepřesnosti. Především se jedná o předpoklad kubické symetrie krystalu Fe-Pd a následného použití vzorce (4.3) k výpočtu elastických koeficientů třetího řádu. V průběhu zvyšování napětí totiž dochází k fázové transformaci a materiál kontinuálně přechází v tetragonálně symetrický. Proto lze předpokládat, že nejvíce odpovídají skutečnosti výsledky z oblasti deformací nepřekračujících 1 až 1,5%. Po přesáhnutí těchto hodnot začne být snížení symetrie materiálu nezanedbatelné. Zároveň dochází i k relativnímu poklesu objemu tělesa, což je ve sporu s předpokladem lineární elastické deformace.

Mezi další zdroje nepřesností se zařazují jednak chyby měření, ale také chyby vnesené numerickými metodami použitými k řešení soustavy lineárních rovnic (4.15). Porovnání získaných výsledků s hodnotami naměřenými pro některé kovy [7] a slitiny s tvarovou pamětí Cu-Al-Zn [21] a Cu-Al-Ni [4] je zobrazeno v tabulce 4.2.

	Fe-Pd	Cu-Al-Zn	Cu-Al-Ni	Ag	Cu	Au
c_{111}	-40	-20,8	-16,5±1,7	-8,43±0,37	-12,71±0,22	-17,29±0,21
c_{112}	-37	-10,6	-6,2±1,3	-5,29±0,18	-8,14±0,09	-9,22±0,12
c_{123}	-29	-9,2	-4,8±0,8	1,89±0,37	-0,50±0,18	-2,33±0,49
c_{144}	-3	-10,2	-6,0±0,8	0,56±0,26	-0,03±0,09	-0,13±0,32
c_{155}	-15	-10,2	-6,9±0,1	-6,37±0,13	-7,80±0,05	-6,48±0,17

Tabulka 4.2: Hodnoty elastických konstant třetího řádu v jednotkách 10^{11} Pa pro Fe-Pd, Cu-Al-Zn [21], Cu-Al-Ni [4], Ag, Cu a Au [7] ve stavu bez působení vnějšího napětí

Je patrné, že hodnoty elastických konstant Fe-Pd odpovídají řádem i znaménkem konstantám Cu-Al-Zn a Cu-Al-Ni. To je v souladu s očekáváním, neboť se všechny tři materiály vyznačují tvarovou pamětí.

Závěr

Cílem této práce bylo vypočítat hodnoty elastických konstant třetího řádu pro multiferoikum Fe-Pd, podrobené působení vnějšího napětí. Za předpokladu kubické symetrie bylo dosaženo výsledků, zanesených v grafu 4.1. Mezi vypočítanými konstantami chybí c_{456} . K jejímu zjištění by bylo zapotřebí znát chování materiálu při smykové deformaci. Taková data ale nejsou v současné době k dispozici.

Výpočet podle vzorce pro tetragonální materiály (viz [11] strana 223) by přinesl zpřesnění výsledků ve formě zvýšení počtu nezávislých elastických konstant třetího řádu, ovšem za cenu znatelného nárůstu složitosti výpočtů. Konkrétně by přibylo následujících šest konstant: c_{113} , c_{133} , c_{333} , c_{334} , c_{166} , c_{366} . Zjišťování jejich hodnot by mohlo být jedním z možných směřování dalšího studia Fe-Pd.

Tabulka 4.2 umožňuje porovnat hodnoty elastických konstant třetího řádu Fe-Pd ve stavu bez působení vnějšího napětí, s hodnotami pro některé již prozkoumané materiály. Dle předpokladů je největší shoda nalezena u slitin s tvarovou pamětí Cu-Al-Ni a Cu-Al-Zn, jejichž konstanty jsou stejného řádu a odpovídají i zápornými znaménky. Společným znakem s kovy Cu, Au a Ag je pak hodnota c_{144} , jež je ve srovnání s ostatními konstantami až o řád nižší.

Obecně lze říci, že multiferoikum Fe-Pd vykazuje velmi výjimečné vlastnosti, mezi něž patří například anomálně nízký koeficient teplotní roztažnosti nebo tvarová paměť, která jej přímo předurčuje k budoucímu využití v praxi. S přihlédnutím k tomu, jak málo je tento materiál zatím prozkoumaný, se další snahy o pochopení příčin jeho chování jeví jako hodnotný směr výzkumu, jež téměř jistě přinese zajímavé výsledky.

Literatura

- [1] B. A. AULD, *Acoustic Fields and Waves in Solids*, vol. 1, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1973. ISBN 0-471-03700-1.
- [2] M. BRDIČKA, L. SAMEK, AND B. SPOKO, *Mechanika kontinua*, Academia, Praha, 2005. ISBN 80-200-1344-X.
- [3] J. M. CARCIONE, *Wave Fields in Real Media: Wave Propagation in Anisotropic, Anelastic, Porous and Elastomagnetic Media*, Elsevier, Amsterdam, 2007. ISBN 978-0080464084.
- [4] T. ČERNOCH, M. LANDA, V. NOVÁK, P. SEDLÁK, AND P. ŠITTNER, *Acoustic characterization of the elastic properties of austenite phase and martensitic transformations in CuAlNi shape memory alloy*, J. Alloys Compd., 378 (2004), pp. 140–144.
- [5] F. E. FUJITA, *A Statistical Thermodynamic Theory of Pre-martensitic Tweed Structure*, Mater. Sci. Eng. A, (1990), pp. 243–248.
- [6] B. GRACZYKOWSKI, B. MROZ, S. MIELCAREK, T. BRECZEWSKI, M. L. NÓ, AND J. S. JUAN, *Surface acoustic waves and elastic constants of Cu14%Al4%Ni shape memory alloys studied by Brillouin light scattering*, J. Phys. D: Appl. Phys., 44 (2011).
- [7] Y. HIKI AND A. V. GRANATO, *Anharmonicity in Noble Metals; Higher Order Elastic Constants*, Phys. Rev., 144 (1966), pp. 411–419.
- [8] A. KASELOW, *The Stress Sensitivity Approach: Theory and Application*, PhD thesis, FU Berlin, 2004.
- [9] G. KOSTORZ, ed., *Phase Transformations in Materials*, WILEY-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2001.
- [10] I. KRAUS, *Struktura a vlastnosti krystalů*, Academia, Praha, 1993. ISBN 80-200-0372-X.
- [11] J. K. LIAKOS AND G. A. SAUNDERS, *Application of the Landau theory to elastic phase transitions*, Philos. Mag. A, 46 (1982), pp. 217–242.
- [12] B. LÜTHI, *Physical Acoustics in the Solid State*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2005. ISBN 3-540-22910-8.

- [13] M. MATSUI, H. YAMADA, AND K. ADACHI, *A New Low Temperature Phase (fct) of Fe-Pd Invar*, J. Phys. Soc. Jpn., 48 (1980), pp. 2161–2162.
- [14] S. MUTO, R. OSHIMA, AND F. E. FUJITA, *Elastic softening and elastic strainenergy consideration in the f.c.c.-f.c.t. transformation of Fe-Pd alloys*, Acta Metall. Mater., 38 (1990), p. 685/694.
- [15] D. ROYER AND E. DIEULESAINT, *Rayleigh wave velocity and displacement in orthorhombic, tetragonal, hexagonal, and cubic crystals*, J. Acoust. Soc. Am., 76 (1984), pp. 1438–1444.
- [16] E. SCHREIBER, O. L. ANDERSON, AND N. SOGA, *Elastic Constants and Their Measurements*, McGraw-Hill, Inc., 1973. ISBN 0–07–055603–2.
- [17] H. SEINER, P. STOKLASOVÁ, P. SEDLÁK, M. ŠEVČÍK, M. JANOVSKÁ, M. LANDA, T. FUKUDA, T. YAMAGUCHI, AND T. KAKESHITA, *Evolution of soft-phonon modes in Fe-Pd shape memory alloy under large elastic-like strains*, Acta Mater., 105 (2016), pp. 182–188.
- [18] T. SOHMURA, R. OSHIMA, AND F. E. FUJITA, *Thermoelastic fcc-fct martensitic transformation in Fe-Pd alloy*, Scr. Metall., 14 (1980), pp. 855–856.
- [19] P. STOKLASOVÁ, P. SEDLÁK, H. SEINER, AND M. LANDA, *Forward and inverse problems for surface acoustic waves in anisotropic media: A Ritz-Rayleigh method based approach*, Ultrasonics, 56 (2015), pp. 381–389.
- [20] M. SUGIYAMA, R. OSHIMA, AND F. E. FUJITA, *Martensitic Transformation in the Fe-Pd Alloy System*, Trans. Jpn. Inst. Met., 25 (1984), pp. 585–592.
- [21] B. VERLINDEN, T. SUZUKI, L. DELAEY, AND G. GUENIN, *Third order elastic constants of β Cu-Zn-Al as a function of temperature*, Scr. Metall., 18 (1984), pp. 975–979.
- [22] F. XIAO, T. FUKUDA, AND T. KAKESHITA, *On the physical nature of high reversible strain in Fe-Pd single crystals exhibiting lattice softening*, Acta Mater., 61 (2013), pp. 4044–4052.