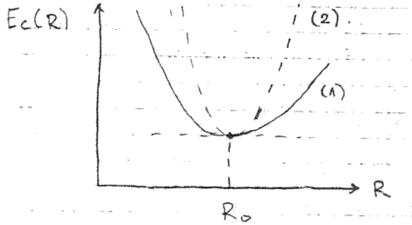
19.12.2001. POSADNO!!!

Do sada smo se bavili kohezivnim svojstvima kristala; razmatrali smo različite tipove veza.

Sada ćemo promotriti još neka svojstva vezana uz kohezivnu energiju, a to su elastična svojstva kristala.

(II) Elastična svojstva kristala

Promatramo funkciju kohezivne energije E_c ovisno o međuatomskoj udaljenosti:



U točki R_0 (min E_c) formira se kristal.

- koh. energija: $E_c|_{R=R_0}$

$\rightarrow \left.\frac{\partial E_c}{\partial R}\right|_{R=R_0} = 0$ ali $\left.\frac{\partial^2 E_c}{\partial R^2}\right|_{R_0} \neq 0$!

Čvrstoća (tvrdoća) kristala $\sim \left.\frac{\partial^2 E_c}{\partial R^2}\right|_{R_0}$

($\left.\frac{\partial^2 E_c}{\partial R^2}\right|_{R_0}$ je to veći što je krivulja strmija prema $E_c(R_0)$ ($\rightarrow$ na slici je to (2) u odnosu na (1)), a to znači da je „dublja jama" tj. R_0 oštrije određen i mogući su to manji pomaci od R_0 - deformacije, što su zidovi jame strmiji.)

Relevantna veličina za opis stabilnosti kristala u prostoru (svemiru $\Rightarrow$ konačna temperatura T^* i tlak p^*) je:

GIBBSOVA ENERGIJA

$$\boxed{G = E_c + p^* V - T^* S}$$

, a ne E_c!

* stoji za svemir

T^*, p^* vanjski

E_c – kohezivna energija; p^* – tlak svemira (okoline); V – volumen kristala; T^* – temp. svemira; S – entropija kristala

- za konačne T^* treba znati i degeneraciju stanja jer to ulazi u S (entropija; pobuđuju se stanja)
- za $T^* = 0$ to se svodi na proračun kohezivne energije ($T^* = 0 \rightarrow E$ je bazična veličina (koo i na niskim T^*))

!) Očigledno G treba minimizirati (ravnoteža: $G = E + p^*V - T^*S = \min$) i tražiti R_0 ili, općenito u 3D, RAVNOTEŽNI VOLUMEN

$$V(R)|_{R_0} \equiv \bar{V}$$

Vidimo da se specijalno za $T^* = P^* = 0$ svodi situacija na $G = E_c$. Za kompletan opis treba znati entropiju kristala S (mjera degeneracije stanja kristala). Ona je dana Boltzmanovom formulom:

$$S = k_B \ln B$$

B ↳ termodinamička vjerojatnost – ukupni broj realizacija određenog stanja koje promatramo

---

Dodatok: O Gibbsovoj energiji iz termodinamike

$$\left.\begin{aligned} đQ &= dU + p\,dV \\ dS &\geq \frac{đQ}{T} \end{aligned}\right\} \quad T\,dS \geq dU + p\,dV \qquad \text{„}T\,dS\text{-relacija"}$$

Imamo 4 para fiksiranih veličina u jednadžbi

$$0 \geq dU + p\,dV - T\,dS$$

1° $T, P = \text{const.}$

$$0 \geq dU + d(pV) - V\cancel{dp}^{\,0} - d(TS) + S\cancel{dT}^{\,0}$$

$$0 \geq d\underbrace{(U + pV - TS)}_{G} \Rightarrow \boxed{G \equiv U + PV - TS \quad \& \quad dG \leq 0}$$

G može samo padati ili biti cte.

[kriterij faznog prijelaza]

2° $T, V = \text{const.}$

$$0 \geq dU + \cancel{p\,dV}^{\,0} - d(TS) + S\cancel{dT}^{\,0}$$

$$0 \geq d\underbrace{(U - TS)}_{\equiv F} \quad \text{(slobodna energija)}$$

$$\boxed{F \equiv U - TS \quad \& \quad dF \leq 0}$$

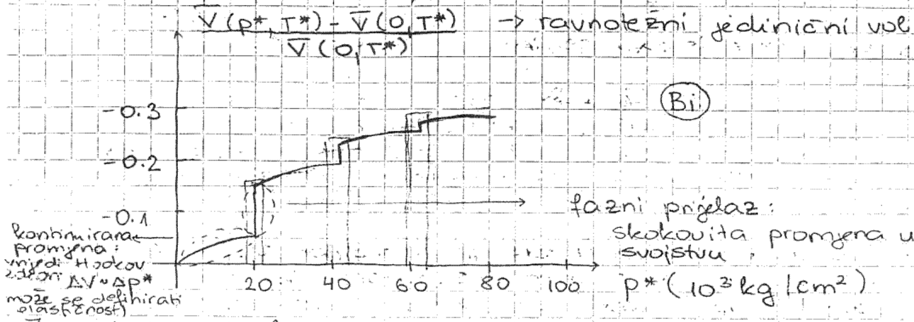
3°, 4° nećemo promatrati.

Minimizacijom G tražimo, dakle, ravnotežni volumen $V(R)|_{R_0} \equiv \bar{V}$ na temperaturi T^* i tlaku p^*.

$\bar{V}(p^*, T^*)$ $\rightarrow$ ravnotežni volumen na tlaku p^* i T^*.

$\dfrac{\bar{V}(p^*, T^*) - \bar{V}(0, T^*)}{\bar{V}(0, T^*)}$ $\rightarrow$ relativni ravnotežni volumen na tlaku p^* u odnosu na vakuumski ($p^* = 0$), sve na temp. T^*.

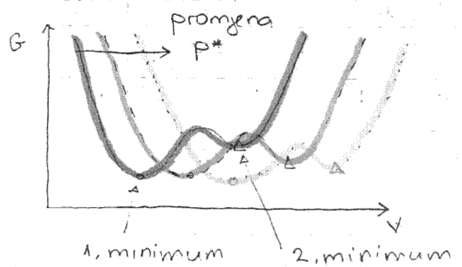
Pogledajmo eksperimentalne podatke za Bi :



∃ područja u kojima se volumen mijenja kontinuirano kao funkcija primijenjenog tlaka, ali ∃ i specijalni (kritični) tlakovi u kojima je ponašanje neanalitičko → tamo dolazi do kristalnih faznih prijelaza (kristalna rešetka se mijenja), promjene simetrije (→ jedine kvalitativne promjene u fizici) → reflektiraju se često u neanalitičkom ponašanju termodinamičkih veličina)

Teorija elastičnosti se bavi područjem u kojem ∃ jednostavna analitička veza između ravnotežnog volumena i primijenjenog tlaka.

Bavit ćemo se samo KONTINUIRANIH PROMJENANA! Ovim drugim bavi se teorija faznih prijelaza. Imamo sljedeću situaciju: promatramo G kao funkciju volumena:



promjenom tlaka p^* krivulja se miče i odjednom se možemo zateći u drugom minimumu - to je fazni prijelaz!

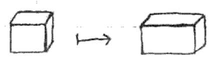
U teoriji elastičnosti mi ćemo se baviti samo jednim od minimuma, a ne prijelazom iz jednog u drugi.

Elastičnost :

Definicija deformacije :

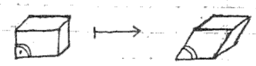
Kristal možemo : 1) rastezati

⇒ mijenja se duljina strane jedinične ćelije



2) posmaknuti

⇒ mijenjaju se kutevi u jedin. ćeliji



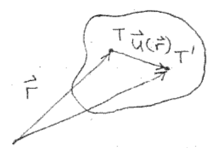
! iz opisa izbacujemo translaciju jer se dobiva jednostavnim pomicanjem tijela, a ne deformiranjem.

Sve to skupa opisujemo preko TENZORA DEFORMACIJE. Deformacije mogu nastati i spontano zbog temperature, tj. zbog fluktuacija oko ravnotežnog položaja. Zanima nas jedinstven opis deformacija, bez obzira na uzrok.

Napuštamo jednostavnu sliku u kojoj se samo V mijenja. Ne možemo se npr. pri stiskanju spužve ograničiti samo na volumne promjene (dovoljno za plinove i tekućine - za čvrsta tijela ne - jave se neke druge mogućnosti npr. smikovi). Bavimo se pritiscima pri kojima ne dolazi do lomova i pri kojima su procesi reverzibilni. Želimo opisati sile i deformacije, odnosno napetosti u kristalu. Dakle, napuštamo prethodnu jednostavnu sliku jer želimo mijenjati i formu kristala, a ne samo volumen.

Tenzor deformacije

↳ pomoću njega možemo potpuno opisati elastični medij (kontinuum koji je homogen). Pretpostavljamo da je tijelo HOMOGENO ⇒ [zanemarili smo zrnatu strukturu kristala uz određene uvjete: dugovalna aprox. - radi za elastične valove većih λ ($\lambda \gtrsim 10^{-6}$ cm ⇒ $\nu \lesssim 10^{12}$ Hz) - elastične valove viših frekvencija proučavamo neelastičnim raspršenjem na rešetci] ⇒ pretpostavljena HOMOGENA DEFORMACIJA.
Izaberemo neku točku u tijelu i definiramo tijelo (homogeno). Gledamo kamo naša točka prijeđe deformacijom.



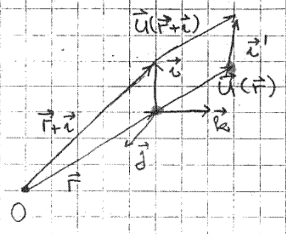
$\lambda \gg a$ ⇒ deformacija ne vidi rešetku (dugovalno!)

Ako je deformacija homogena svaka jedinična ćelija ima istu deformaciju pa nas ne zanima zrnata struktura.

$u(\vec{r})$ - deformacija ; ovisi o položaju točke u tijelu, a određuje kamo se T pomakne.

$$T \xrightarrow{\vec{u}(\vec{r})} T'$$

Iz gore navedenog razloga izbacujemo translaciju ⇒ gledamo samo relativne pomake T' na T.



- pp imamo homogeno sredstvo
- gledamo deformaciju tog homogenog kontinuuma → gledat ćemo što se prilikom deformacije desilo s tim malim sistemom (gledamo micanje malog kartezijevog sustava pri deformaciji)

- dovoljno je poznavati polje pomaka $\vec{u}(\vec{r})$ da bi se opisala deformacija. Ne moramo znati čak niti cijelo polje nego samo polje pomaka vrhova malog kartezijevog sustava.

$\vec{\imath}$ se deformacijom preslika u $\vec{\imath}'$ ↗ u ovom nema apsolutne translacije (poništi se)

$$\vec{\imath}' = \vec{r}+\vec{\imath} + \vec{u}(\vec{r}+\vec{\imath}) - (\vec{r}+\vec{u}(\vec{r})) = \vec{\imath} + \vec{u}(\vec{r}+\vec{\imath}) - \vec{u}(\vec{r})$$

($\vec{\imath}$ je jednako $\vec{\imath}'$ ako se sve točke isto pomiču)

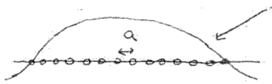
→ količinu informacije možemo smanjiti samo za neke posebne deformacije

Uzmimo da promatramo takve deformacije kod kojih se možemo zaustaviti na prvom članu u Taylorovom razvoju $u(\vec{r}+\vec{\imath})$.

Kada možemo uzeti samo 1. red u razvoju (?!):
LINEARNO PODRUČJE (Hookeov zakon):

1. Ako je $\vec{u}(\vec{r})$ linearna funkcija od $\vec{r}$ tj. $\vec{u}(\vec{r}) = \Lambda\vec{r}$. Tada je razvoj do 1. člana i egzaktan jer sve više derivacije iščezavaju.

2. Ako je $\vec{u}(\vec{r})$ sporo rastuća periodička funkcija od $\vec{r}$ (=> dugovalne promjene u prostoru), pa su više derivacije vrlo male.



$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{u}_0\, e^{i\vec{k}\vec{r}}$$
$$\frac{\partial \vec{u}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} = \vec{u}_0(i\vec{k})\cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$|\vec{k}|\cdot a \ll 1 \quad => \quad \Lambda \gg a$$

Razvoj x-komponente:

$$u_x(\vec{r}+\vec{\imath}) = u_x(\vec{r}) + \frac{\partial u_x}{\partial \vec{r}}\cdot\vec{\imath} + \ldots \qquad = \left[\frac{\partial u_x}{\partial \vec{r}}\cdot\vec{\imath} = \frac{\partial u_x}{\partial x}\right]$$
$$\cong u_x(\vec{r}) + \frac{\partial u_x}{\partial x}$$

↳ jasno već sa slike: translacija ne ulazi u transformaciju (neće se pojaviti u opisu polja $u(\vec{r})$ (deformacije) - **relativni pomaci ulaze u taj opis, a ne apsolutni**)

Relativni pomaci opisuju deformaciju, a ne apsolutni!

Razvoj y-komponente: $\frac{\partial u_y}{\partial \vec{r}}\cdot\vec{\imath} = \frac{\partial u_y}{\partial x}$

$$u_y(\vec{r}+\vec{\imath}) = u_y(\vec{r}) + \frac{\partial u_y}{\partial x} + \ldots$$

Razvoj z-komponente:

$$u_z(\vec{r}+\vec{\imath}) = u_z(\vec{r}) + \frac{\partial u_z}{\partial x} + \ldots$$

$$\vec{\imath}' = \vec{\imath} + \vec{u}(\vec{r}+\vec{\imath}) - u(\vec{r}) = \vec{\imath} + \frac{\partial u_x}{\partial x}\vec{\imath} + \frac{\partial u_y}{\partial x}\vec{j} + \frac{\partial u_z}{\partial x}\vec{k}$$

↳ tenzor:

$$\boxed{\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \qquad \text{TENZOR DEFORMACIJE}}$$

← 9 komponenti (i, j, k – 3)

$$\vec{\imath}' = (1+\varepsilon_{xx})\vec{\imath} + \varepsilon_{yx}\vec{j} + \varepsilon_{zx}\vec{k}$$
$$\vec{j}' = \varepsilon_{xy}\vec{\imath} + (1+\varepsilon_{yy})\vec{j} + \varepsilon_{zy}\vec{k}$$
$$\vec{k}' = \varepsilon_{xz}\vec{\imath} + \varepsilon_{yz}\vec{j} + (1+\varepsilon_{zz})\vec{k}$$

(Interpretacija)

Fizikalno značenje tenzora deformacije ε:

Tražimo normu od $\vec{\imath}'$ (pod pp da su veličine ε_{ij} male - lineariziramo, odbacujemo kvadratne članove u $(*)^2$ ...):

$$\sqrt{(1+\varepsilon_{xx})^2 + \cancel{\varepsilon_{yx}^2} + \cancel{\varepsilon_{zx}^2}} \approx \sqrt{1+2\varepsilon_{xx}} \approx 1 + \tfrac{1}{2}2\varepsilon_{xx} = 1+\varepsilon_{xx}$$

1°) $\sqrt{\vec{\imath}'^2} \approx 1 + \varepsilon_{xx}$ → ε_{xx}: produljenje vektora $\vec{\imath}$ prilikom deformacije (! interpretacija dijagonalne komponente tenzora deformacije)

↳ promjena iznosa vektora

2°) $\vec{\imath}'\cdot\vec{j}' \approx \varepsilon_{yx} + \varepsilon_{xy}$

$= |\vec{\imath}'||\vec{j}'|\cos\vec{\imath}'/\vec{j}'$

($\vec{\imath}$ i $\vec{j}$ su bili ortogonalni na početku $\vec{\imath}\cdot\vec{j} = 0$)

$|\vec{\imath}'| \approx 1+\varepsilon_{xx}$
$|\vec{j}'| \approx 1+\varepsilon_{yy}$ => $|\vec{\imath}'||\vec{j}'| \approx 1 + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \cancel{\varepsilon_{xx}\varepsilon_{yy}}$ (uzmimo $\ll 1$)

$\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}$: **kosinus kuta između $\vec{\imath}'$ i $\vec{j}'$ koji više nisu ortogonalni**

↳ deformirani kartezijev sustav nije više ortogonalan izdeformirao se i po dužini i po kutevima

- **Suma simetričnih vandijagonalnih elemenata tenzora daje promjene kuteva pri deformaciji**

3°) Kako se mijenja volumen razapet osima?
Promijenjeni jedinični volumen deformacijom:

$$\vec{\imath}'\cdot(\vec{j}'\times\vec{k}') = \underbrace{1}_{\text{stari jedinični volumen}} + \overbrace{\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}}^{\mathrm{Tr}\,\varepsilon}$$

↓ nakon linearizacije

(volumen na početku je bio 1)

→ dodava se još trag tenzora deform. (suma dijag. elemenata)

Trag tenzora deformacije → promjena jediničnog volumena oko promatrane točke tj. $\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ →
→ Trag tenz. def. daje promjenu volumena pri deformaciji.

→ iz kombinacija koje se pojavljuju očito je da je tenzor deformacije fizikalno simetričan.

* Napomena:

$\mathcal{E} \Rightarrow \left[\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right]$ može se napisati kao suma simetričnog i antisimetričnog tenzora (uvijek vrijedi):

?

$\mathcal{E} = T_S + T_{AS}$ ⇒ $\mathcal{E}$ je simetričan $\boxed{\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}}$

?

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

samo za homogene def. ?

dilatacija — rotacija kr. tijela

U svim fizikalnim veličinama uvijek će se pojavljivati samo simetrizirane kombinacije elemenata tenzora tj. offdijagonalne komponente će se pojavljivati samo u simetričnim kombinacijama (npr. $\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}$ → jer je to promjena kuta). ⇒
⇒ tenzor simetričan.
Zbog toga je uobičajena definicija tenzora (nova notacija):

(1) $\begin{cases} e_{xy} = e_{yx} \equiv \varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx} \approx \vec{x}' \cdot \vec{y}' \\ e_{xx} \qquad\qquad \equiv \varepsilon_{xx} \end{cases}$

(2) $u_{ij} = e_{ij} \frac{1 + \delta_{ij}}{2}$

na dijagonali je: $u_{ii} = e_{ii}$
a izvan dijagonale $u_{ij} = \frac{e_{ij}}{2}$

Dakle, koristili smo sljedeće pp:

1. Može se zaustaviti na 1. članu u razvoju
2. Te deformacije su male (linearno područje → vrijedi Hookeov zakon; velike def. ⇒ ne vrijedi Hookeov zakon)

Rekli smo da je zaustavljanje na prvom članu (na prvoj derivaciji) moguće u slučajevima:

(1) $\vec{u}(\vec{r}) \sim \vec{A} \cdot \vec{r}$

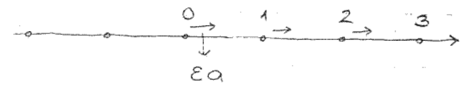
(2) $\vec{u}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$; $|\vec{k}|$ mali — malen: (spram ruba 1. Brillouinove zone)

I. der >> II. der. ↑ npr. parametar koji dolazi der. čini — $|\vec{k}| < 1/a$ (kontinuum homogen)

(1) Kad je apsolutno polje pomaka linearna funkcija opis preko tenzora deformacije je egzaktan. (2. der. iščezava, razvoj do 1. člana je egzaktan)

Ilustrirajmo linearnu ovisnost $\vec{u} \sim \vec{r}$ na primjeru 1D lanca s HOMOGENOM DEFORMACIJOM (svuda je ista)
tj. $\vec{u} \sim \vec{r}$ ⇒ $\varepsilon \sim \frac{\partial u}{\partial r} = cte$

Radi jednostavnosti pp 1 čvorište po ćeliji



$u_n = (na) \cdot \varepsilon$
pozicija čvorišta

– polje pomaka je linearno s radijus vektorom

Udaljenosti čvorišta nakon deformacije: $a(1+\varepsilon)$
(sve udaljenosti su se pomjerile sa a na $a(1+\varepsilon)$)
⇒ ova deformacija opisuje homogeno rastezanje lanca (nakon deformacije opet homogeni medij)

$\frac{u_{n+1} - u_n}{a} = \varepsilon$
diskretna verzija ←

primjetimo analogiju ovog izraza sa definicijom tenzora deformac. $\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ — jer je nakon deform. tijelo i dalje ostalo homogeno tj. rel. udaljenosti među česticama su se jednako promijenile

Dakle: $\vec{u}(\vec{r}) \sim \vec{A} \cdot \vec{r}$ → HOMOGENE DEFORMACIJE tenzor deformacije ih opisuje egzaktno

1. $x' = a + u(a) = a + \varepsilon a = a(1+\varepsilon)$ $\qquad u = \varepsilon \cdot x \qquad x = a, 2a, 3a, ..$
2. $x' = 2a + u(2a) = 2a + 2\varepsilon a = 2a(1+\varepsilon)$

$\vdots$ $\qquad x' = x + u(x) = x(1+\varepsilon)$

n. $x' = na + u(na) = na(1+\varepsilon)$

$T' - T \Rightarrow \begin{cases} u(a) = \varepsilon a \\ \vdots \\ u(na) = n\varepsilon a \end{cases}$ pomaci atoma: svaki atom putuje proporcionalno svojoj koordinati

$\frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon = cte$ → Tenzor elastičnosti ne ovisi o apsolutnim koordinatama u prostoru već samo o relativnim (za homogenu deformaciju)

$\mathcal{E} = cte$ ⇒ radi se o konstantama elastičnosti.

(2) Tenzor deformacije dobro opisuje dugovalne deformacije

$u(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$ $\quad |\vec{k}| < \frac{1}{a}$

- dugovalne deformacije - možemo shvatiti kao lokalno homogene deformacije (tenzor def. ih opisuje dobro)

└ pretpostavka da su komponente tenzora def. male nije bitna, ona nam je samo pomogla da to geometrijski vizualiziramo.
(za hom. def. tenzor def. ne mora biti mali jer egzaktno opisuje def.)

skripta:

↳ **Nehomogena deformacija**

Ako imamo nehomogenu deformaciju (ona koja se mijenja u prostoru različito od $\vec{u} \not\propto \vec{r}$ tj. $\partial\vec{u}/\partial\vec{r} \neq cte$) uvijek možemo $\vec{u}(\vec{r})$ razviti u red (pp periodička funkcija) po ravnim valovima:
└ (potpun skup funkcija)

(Fourierov razvoj): $\quad \vec{u}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \vec{u}_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{r}}$

tj. $\vec{u}(\vec{r}) = \vec{cte},\ \vec{u}_0\, e^{i\vec{k}\vec{r}} \ldots \Rightarrow (\varepsilon =) = \frac{\partial\vec{u}}{\partial\vec{r}} = 0, i\vec{u}_0 \cdot \vec{k}\, e^{i\vec{k}\vec{r}}, \ldots$

→ Fourierovim razvojem gubi se homogena deformacija
Kako je vratiti natrag?

fali nam hom. def.
tj. $\varepsilon = cte (\neq 0) \Rightarrow \vec{u} \sim \vec{r}$

1°) Ako je $u(\vec{r})$ zeznutog (iako periodičkog) oblika (npr. neki  signal), treba nam veliki broj Fourierovih članova za opis. ⇒ k jako raste (0, 2k, 3k, 4k, ...), a $U_{\vec{k}}$ pada.
Zahtjevamo, dakle, deformaciju približno HARMONIČKOG OBLIKA (što sličniju sinusoidi) ⇒ možemo se ograničiti samo na 1. član ako def. sporo raste s $\vec{r}$

↓ $\quad a \to \infty \quad k \to 0$

2°) Dugovalni limes & (Ako je dobra lin. aprox. ($\vec{u}$ ovisi o $\vec{r}$ sporo) ⇒ stvar nam se u dugovalnom limesu svodi na homogenu deformaciju:

Uzeli smo:
$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{u}_0\, e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

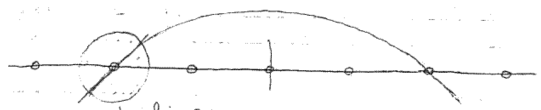
$$(\varepsilon =)\ \frac{\partial\vec{u}(\vec{r})}{\partial\vec{r}} \sim \underbrace{\vec{k}\cdot\vec{u}_0}\, e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot i \quad , \ \vec{k}\cdot\vec{u}_0 \to \varepsilon \ \text{ jer } k \to 0,\ u_0 \to \infty$$

period deformacije

Za harmoničku deformaciju to nam treba težiti u konstantu!

$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{u}_0 \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} \approx cte \cdot \vec{r}$ $\quad$ - hom. def.!

[To je u dugovalnom limesu ispunjeno jer je zahtjev da $k \to 0$ pa ostanu samo neki mali k-ovi koje onda uzmemo kao neki konstantni mali $\vec{k}$. Što je $\vec{k}$ manji to je dugovalna aprox. točnija:
$\vec{k} \to 0 \quad \vec{u}_k \to \infty$ t.d. $\vec{u}_k \cdot \vec{k} = cte$ ⇒ dobivamo hom. def. → trik kojim iz dugovalne prelazimo u hom. deformaciju]



↳ linearna aprox.

$k \to 0,\ u_0 \to \infty$

$\vec{k}\cdot\vec{u}_0 \to \varepsilon$ (cte)

↳ limes koji spaja Fourierove (≈ harmoničke) def. s homogenim

(lokalno)
sin s velikim λ ⇒ ∃ veliko područje gdje se može shvatiti kao lin. f.

$\vec{k} \to 0$ tj. $\lambda \to \infty \Rightarrow \sin\vec{k}\vec{r} \approx \vec{k}\vec{r}$
→ lin. f-ja od $\vec{r}$ (hom. def.)
$u_{\vec{k}} \to \infty$, inače bi funkcija bila 0

$\lambda \to \infty$ → u tom području dobivamo homogenu deformaciju (Bornov trik)

Ovo svođenje (≈ harmoničke) periodičke deformacije (nehomogena) u dugovalnom limesu na homogenu je važno jer se svaka deformacija može razviti po potpunom skupu funkcija (ravni valovi → sin/cos), a za takav skup vrijedi linearna aproksimacija za $\lambda \to \infty$.

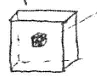
Dakle, tenzor deformacije (za hom. def.) možemo primijeniti i na nehomogene deformacije ako su malog iznosa i periodički sporo promjenjive!

Imamo kontinuitet između periodičkih i homogenih deformacija.

⊛ važna napomena: Kako deformirati kristal?

1. način: SPONTANE DEFORMACIJE (spontano pobuđivanje kristala): na T=0 K u kristalu je strpana energija koja se skladišti u deformacijama kristala. Javljaju se lokalne sile koje ga nastoje vratiti u ravnotežni položaj.

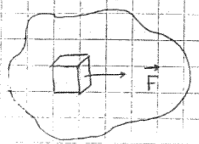
2. način: Deformiramo kristal vanjskom silom. Važno je da se sila primjenjuje dovoljno sporo da se temperatura kristala uvijek stigne izjednačiti s okolinom (IZOTERMNI proces)
(Nasuprot tome bilo bi:



→ ovaj lokalni volumen V promjeni se na $V'(1+\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz})$ i zatim brzo vrati u isti ravnotežni položaj, pa se "entropija ne stigne proširiti" iz svih dijelova

Tenzor napona

Zanimaju nas sile koje uzrokuju deformaciju.



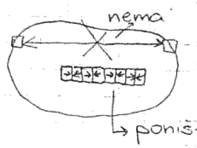
- neka su sile deformacije kao polje sila koje djeluju u nekoj točki
- gledamo silu koja djeluje na taj volumen.

Definirajmo funkciju gustoće sile na tijelo (kristal): $\vec F(\vec r)$. Sila na volumen kristala je onda: $\vec F = \int \vec F(\vec r) d^3r$

Pretpostavimo:
(bar efektivne)
- elastične sile su kratkog dosega
- gledamo situaciju u ravnoteži

→ jedini doprinos integralu $\int \vec F d^3 r$ onaj od površine

- kažemo da su efektivne sile kratkog dosega
- unutar volumena sila ne doprinosi (jer je pp da je volumen u ravnoteži) => integral se mora moći svesti na integral po površini
- na svaku točku u unutrašnjosti zbroj sila je nula
- sile kojim okolina djeluje na volumen su uravnotežene iz volumena



→ sile u volumenu se zbog akcije i reakcije dokidaju (zahtjeva ravnoteže). Ostaju samo one na površini (sve skupa je kratkog dosega, pa ne dira u ono na površini)

↳ To ne vrijedi u piezoelektričnim materijalima (inducirano električno polje je posljedica deformacije čitavog kristala, a ne lokalne deformacije)

Gaussov teorem: $\int_S \vec A\, d\vec S = \int_{V(S)} \mathrm{div}\, \vec A\, dV$

↳ primjenimo ga na našu silu:

$$\int F_i\, dV = \int \mathrm{div}\, \vec\sigma_i\, dV = \int_S \sum_k \sigma_{ik}\, df_k = \int_S \vec\sigma_i \cdot d\vec f$$

ploha okomita na k-tu komponentu $\vec\sigma_i$

↳ površinska gustoća sile

Dakle da bi integral mogli prebaciti u površinski $\vec F$ se mora moći napisati kao divergencija nekog vektora $\vec\sigma$: $F_i = \vec\nabla \cdot \vec\sigma_i$ (kratkodosežnost i ravnoteža)

Po komponentama:

$$F_i = \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

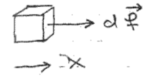
$F_i = \mathrm{div}\, \vec\sigma_i$

uveli smo tenzor σ_{ik} → TENZOR NAPONA

$d\vec f$ = površina tog malog volumena

Fizikalna interpretacija tenzora napona:

$\Delta F_i = \vec\sigma_i\, d\vec f$
(dF_i)

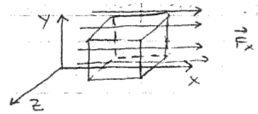


↳ i-ta komponenta sile koja djeluje na izabranu površinu

$\vec\sigma_i \cdot d\vec f = \sum_k \sigma_{ik}\, df_k$ → $dx_i\, dx_j$ $(i, j \neq k)$

σ_{ij} ← smjer sile, smjer $d\vec f$ (okomito na površinu)

Promatramo npr. ΔF_x: $\Delta F_x = \sigma_{xx}\, df_x + \sigma_{xy}\, df_y + \sigma_{xz}\, df_z = \sigma_{xx}\, dy\, dz + \sigma_{xy}\, dx\, dz + \sigma_{xz}\, dx\, dy$



Po komponentama imamo:

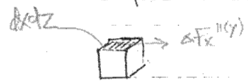
1) $d\vec f \parallel \vec i$ $\qquad \Delta F_x^{\perp} = \sigma_{xx}\, dy\, dz$

$d\vec f = dy\, dz\, \vec i$

sila po jedinici površini koja djeluje okomito na tu površinu ($d\vec f$) → dijagonalne komponente σ_{ik} (uniaksijalni tokovi) => ISTEZANJE!

2) $d\vec f \perp \vec i$ (tangencijalno)

$d\vec f = dx\, dz\, \vec j$ $\qquad \Delta F_x^{\parallel (y)} = \sigma_{xy}\, dz\, dx$

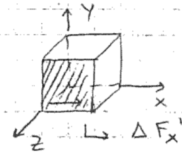


tangencijalna komp. sile duž osi x koja djeluje na površinu duž osi y

↳ u vezi sa smicanjima

Sila po jedinici površine tangencijalna na površinu na koju djeluje (vandijagonalni elementi) (off) => SMIK (posmak)!

Analogno:



$d\vec f \perp \vec i$ $\qquad \Delta F_x^{\parallel (z)} = \sigma_{xz}\, dx\, dy$

$d\vec f = dx\, dy\, \vec k$

↳ imamo kompletan opis deformacija i sila.
Izašli smo iz primitivne slike u kojoj smo mogli opisati samo deformacije volumena (možemo i smikove i tlakove)

Ovaj opis radi samo za kratkodosežne sile (npr. električno polje). Za piezoelektrik opis ne radi, ali već za zasjenjeno Coulombovsko polje radi.

Dalje, idemo proračunati **rad sile**.

↳ [cilj je povezati komponente tenzora deformacije i napona.

Sila je uvedena adijabatski => reverzibilni proces! (izentropski, a ako je $S = cte.$ moguća je reverzibilnost)

F_i - komponente sile
δu_i - komponente deformacije (promjene položaja zbog sile F_i) pomaka

$$F_i = \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

Rad (sile; unutrašnje i vanjske):

$$\delta R = \sum_i \int F_i \, \delta u_i \, dV = \sum_i \int \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \delta u_i \, dV$$

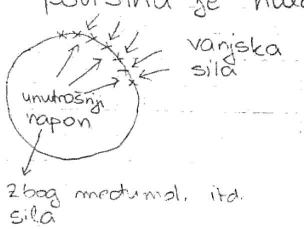
(radi se o minimalnom radu pp adijabatski; promatramo reverzibilni rad, minimalni)

$$u(\vec\nabla \vec v) = \vec\nabla(u \vec v) - \vec v \cdot (\vec\nabla u) \quad \text{(parcijalna integracija)}$$

$$\int_V \vec\nabla (u\vec v)\, dV = \int_S u \vec v \, d\vec S \quad \text{(gauss)}$$

$$\delta R = \sum_{i,k} \Big[\int_S \sigma_{ik} \, \delta u_i \, df_k - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV \Big]$$

[sila koja djeluje iz volumena na površini
- ona je u ravnoteži sa silom izvana (ukupna sila na površinu je nula)
(tj. ukupni rad vanjskih i unutrašnjih sila na površinu je nula → taj integral je 0)



$$dF = \sum \sigma_{ik} \, dS_k = P_i \, dS$$
(sila i $d\vec S$ su paralelni)

situacija u ravnoteži (površina kristala miruje) => unutrašnji napon se poništi s vanjskim silama

rad vanjske sile: $\Rightarrow \int P_i \, \delta u_i \, dS$

$\frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k}$ → promjena tenzora deformacije

$\boxed{\sigma_{ik} = \sigma_{ki}}$ mora biti simetričan tenzor, jer se pod sumom mogu pojaviti samo sume $\partial_k u_i + \partial_i u_k$ (kutevi!) (samo to ima fizikalno značenje)

↳ iz zahtjeva da se rad izrazi preko fizikalnih veličina!

Dakle, ukupni rad koji su napravile vanjske sile:

$$\delta R = \sum_{i,k} \Big[- \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV \Big]$$

Uvažavajući simetričnost tenzora:

$$\delta R = -\frac{1}{2} \sum_{i,k} \int \sigma_{ik} \Big(\delta \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \delta \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \Big) dV$$

def.
$$u_{ik} \doteq \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\Big)$$

$$u_{ii} = e_{ii} = \varepsilon_{ii}$$

$$u_{i\neq k} = \frac{1}{2} e_{ik} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ik} + \varepsilon_{ki})$$

ne ovisi o x_i?

$$\delta R = -\sum_{i,k} \int \sigma_{ik} \, \delta u_{ik} \, dV \quad \rightarrow \quad \frac{d\delta R}{dV} = \delta R'$$

Promjena energije kristala:

$$\delta E = T\,\delta S + \sum_{ik} \sigma_{ik} \, \delta u_{ik}$$

↳ (gustoće → sve veličine S, E, R po jedinici volumena)

(prikladno za opis homogenog kontinuuma)

Napomena: Cijelo vrijeme smo u termodinamičkoj ravnoteži! Na osnovu toga proširujemo termodinamičke relacije:

$$dQ = dE + dW$$
→ mehanički: $dW = p\,dV$
↳ unutrašnja energija

ireverzibilno
$$dS \geq \frac{dQ}{T}$$
→ reverzibilno! => naš zahtjev (adijabatski "nastup" sile)

↳ $\delta E = T\,\delta S - \delta W$

↓ gustoća un. en.
↑ gustoća entropije
gustoća rada sile $-\sum_{ik} \sigma_{ik} \, \delta u_{ik}$

to je generalizacija $p\,dV$

U teoriji elastičnosti se sada definiraju: $S \neq cte$ => un. en.

def. $F = E - TS$

slobodna energija

$$dF = -S\,dT + \sum_{i,k} \sigma_{ik}\, du_{ik}$$

Gibbsov potencijal
$G = E + \underbrace{pV}_{} - TS$
$\sigma V = -\sum \sigma_{ik} u_{ik}$

def: $\Phi = E - TS - \sum \sigma_{ik} u_{ik}$

$$d\Phi = -S\,dT - \sum_{i,k} u_{ik}\, d\sigma_{ik}$$

termodinamički potencijali

$$u_{ik} = e_{ik}\,\frac{1+\delta_{ik}}{2} \Rightarrow \sum_{i,k} \sigma_{ik}\, du_{ik} = \sum_{i,k}{}' \sigma_{ik}\, de_{ik}\,\frac{1+\delta_{ik}}{2}$$

(*) $\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial E}{\partial e_{ik}}\right)_S = \left(\frac{\partial F}{\partial e_{ik}}\right)_T$? $\frac{\partial}{\partial u_{ik}}$ valjda ?

$u_{ik} = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}}\right)_T$

-> valjda za $i \neq k$

$\Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{i,k} \sigma_{ik}\, de_{ik}$

$= \sum_{i \geq k} \sigma_{ik}\, de_{ik}$

Obuhvatili smo sve moguće transformacije (vidjeli smo kako u termodinamičkom smislu opisati deformirano tijelo)

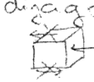
Na što se svode jednadžbe u slučaju primjene običnog tlaka? (specijalno za <u>homogenu kompresiju</u> -> samo tlak, nema smicanja)

$$\sum_{i,k} \sigma_{ik}\, du_{ik} = -p \sum_{i,k} \delta_{ik}\, du_{ik} = -p \sum du_{ii} = -p\,\frac{dV}{V}$$

$(\sigma_{ik} = -p\,\delta_{ik})$ tlak sa svih strana pritišće jednako

-> unutrašnji tlak ? prema van

vidimo da smo E, S definirali po jedinici volumena

(tenzor ima samo dijagonalne elemente a to su tlakovi =>  $\vec{p}$)

$$\Phi = F + p\,\frac{V - V_0}{V_0}$$

$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$

Treba uspostaviti vezu između tenzora deformacije i tenzora napona:

Hookeov zakon

-> linearna veza za male napone

↳ zapravo aproksimacija da je sila proporcionalna deformaciji.

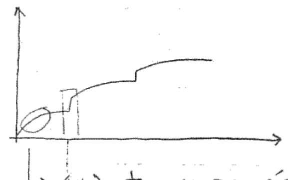
$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial e_{ik}}\right) \Rightarrow F$ mora biti kvadr. u ε tj. u u.

Želimo "uspostaviti" linearnu vezu sile i deformacije (tj. $\sigma \sim e$, kao $F \sim x$). Radimo u linearnom području (malim deformacijama odgovara mali napon).

Pretpostavljamo da se volumen sistema deformacijom ne mijenja ($V = cte$ => relevantni termodinamički potencijal je slobodna energija F; da promatramo sistem na stalnom tlaku ($p = cte$) => relevantna veličina bila bi G)

(harmonička aprox.)

Razvijamo slobodnu energiju F oko ravnotežnog položaja po deformaciji (u_{ii}) i to do kvadratnog člana (u energiji) => linearni član u deformaciji kod izračunamo silu. <u>Razvoj ovisi o SIMETRIJI KRISTALA</u>!



↳ (*) tu moguće
↳ ali tu svakako nije

- deformacije jesu posljedica napona
(*) - uspostavljamo linearnu vezu vezu između tenzora deformacije i tenzora napona (napon mali i deformacija mala) -> to je aproksimativno, kod izodemo iz linearnog područja ne vrijedi

σ_{ik} je u (*) izražen kao funkcija deformacije.

$$u_{ik} = \frac{e_{ik}}{2}(1 + \delta_{ik})$$

Dok je slobodna energija kvadratna funkcija deformacije, tenzor napona je linearna funkcija deformacije.
↳ (dok su deformacije toliko male da je dovoljan razvoj do kvadratnog člana)

1) homogeni izotropni kontinuum (medij) (izotropni kristal)
$V = V_0 = cte$ $T = T_0 = cte$

Slobodna energija:

$$F = F_0 + b \sum_i u_{ii} + \frac{1}{2}\lambda \left(\sum_i u_{ii}\right)^2 + \mu \sum_{ik} u_{ik}^2 (+ \ldots)$$

harmonička aproksimacija

$F_0 = F_0(V_0, T_0)$ -> položaj ravnoteže (navest ćemo koje)

$b = b(V_0, T_0)$ ...

$\sum_i u_{ii}$, $(\sum_i u_{ii})^2$, $\sum_{i,k} u_{ik}^2$ → linearne i kvadratne invarijante na rotacijske transformacije (jer je medij izotropan) → to su sve.

$\sum_i u_{ii}$ → trag tenzora → to je jedina linearna invarijanta

$(\sum_i u_{ii})^2$, $\sum_{i,k} u_{ik}^2$ → kvadratne invarijante

↓ offdijagonalne komponente ne tvore inv. 1. reda

Općenito na simetriju kristala vrijedi:

Razvoj (F kao kvadratna forma) ovisi o svojstvima (samo) simetrije kristala. U slučaju izotropnog kristala javljaju se samo takve kombinacije elemenata tenzora deformacije koje su invarijantne na grupu rotacija (karakterističnu za kristal) jer energija ne smije ovisiti o zakretu osi koordinatnog sustava
[F je skalar, a to je invarijanta grupe rotacija]
[operacijom rotacije se tijelo prevede samo u sebe]

F je zadana s 3 faktora (b, λ, μ)

μ = koeficijent kompresibilnosti

Koeficijenti λ, μ (uz invarijante 2. reda) nazivaju se
→ LAME-OVI KOEFICIJENTI

Dvije invarijante u kvadratnom redu ⇒ dva nezavisna
↳ koeficijenta. (Homogen i izotropan medij opisujemo sa samo dva nezavisna koeficijenta λ i μ)

↳ ovdje nema nikakve fizike (osim zahtjeva da su sile kratkodosežne) nego

9. 1. 2002.

Homogeni i izotropni materijal:

$$F = F_0 + b\sum_i u_{ii} + \frac{\lambda}{2}\left(\sum_i u_{ii}\right)^2 + \mu\sum_{i,k} u_{ik}^2$$

Naponi:

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{ik}}\right)_T$$

$F = E - TS$
$dF = dE - TdS + SdT$

$dE = TdS - pdV$
$= TdS + \sum_{ik} \sigma_{ik} u_{ik}$
$\Rightarrow dF = SdT + \sum_{ik} \sigma_{ik} u_{ik}$

Specijalno, homogena kompresija (dijagonalne komponente identificirali smo s uniaksijalnim tlakovima):

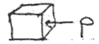
$$\sigma_{ii} = b + \lambda\sum_j u_{jj} + 2\mu u_{ii}$$

(*) $$p = b + (3\lambda + 2\mu)u_{ii} = \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\frac{V - V_0}{V_0} + b$$

↳ kada su u_{ii} jednaki

Sve tri osi ravnopravne → uzimamo: deformacije duž te tri osi su jednake, u_{ii} je 1/3 te promjene:

$\sigma_{ii} \equiv p$ ③ pp. $\forall i$: $u_{ii} = \frac{1}{3}\frac{V - V_0}{V_0} \Rightarrow \sum_i u_{ii} = \frac{V - V_0}{V_0}$



(vanjski tlak prema unutra)
imamo dakle samo vanjski tlak.

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$$

Fizika izvoda je u λ i μ, sama konstrukcija je vršena pomoću simetrije (nema fizike).

(*) To znači: ako na temperaturi T uzmemo da je V jednak ravnotežnom volumenu na toj temperaturi, $V = V_0(T)$ tada je $p = b = p_0(T)$ tlak na kojem je V_0 ravnotežni volumen na temperaturi T (interpretacija konstante b → tlak za koji je sve u ravnoteži s volumenom V_0 na temp. T)

⇒ to je def. ravnoteže

$$\boxed{b(T, V_0) = p_0}$$

JEDNADŽBA STANJA

↳ različita za razne sisteme i razne tlakove p_0 (početni tlak)

(→ odredimo b; za $V = V_0$ $(T = T_0)$ je $p_0 \equiv p(V_0, T_0)$)

$p_0 \to p_0 + \delta p$ Mijenjamo tlak p spram p_0 i gledamo deformacije volumena (poanta razvoja). (Jedina linearna invarijanta je volumen, off dijagonalne komponente – smikovi)

$\boxed{V_0}$ uniaksijalne deformacije (bez smikova)

U razvoju slobodne energije po deformaciji samo se dva koeficijenta pojavljuju kao nezavisni (Lameovi koeficijenti) Koeficijenata ima koliko ima nezavisnih invarijanta tenzora deformacije uz simetriju koju smo zadali.

↗ javljaju se dvije nez. konst. λ, μ

Dakle: HOOKE-OV ZAKON (za izotropni medij):

$$\boxed{p - p_0 = \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\frac{V - V_0}{V_0}}$$

↳ odstupanje volumena od ravnotežnog vodi do LINEARNOG odstupanja tlaka od ravnotežnog.

Vratimo se još na spomenuti ravnotežni položaj F_0:
- obično u FČS uzimamo $p_0 = 0$ što odgovara sobnoj situaciji (atmosferski tlak je $\ll$), pa već radimo s F razvijenom oko ravnoteže. U problem ulaze samo dijagonalne komponente napona i deformacije (tlak), a offdijagonalni (smikovi) se automatski računaju od 0.

$$F = F_0 + b\sum u_{ii} + \sim u^2$$

$$G = F - p_0 \frac{V-V_0}{V_0} = F \sim u^2$$

nula na $p_0 = 0$; $\underbrace{p_0 \frac{V-V_0}{V_0}}_{0}$, $b\sum u_{ii}$

nema lin člana

↑ funkcija koja je min pri tlaku p_0 je Gibbsov pot.

2.) Anizotropni kristal

Sada ćemo zadati drugu simetriju: sistem je homogen, ali ne izotropan, već ima simetriju kocke (KUBIČNI KRISTAL)
↳ kubična rešetka u kontinuiranoj aprox.

(Anizotropni kristal → sada nam ulaze u igru invarijante na samo neke rotacije. Ovisno o simetriji kristala imamo osi 2, 3, 4... reda. Mi promatramo kubični kristal (simetrija kocke)).

Slobodna energija razvijena po deformaciji:

$$F = F_0 + \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{zx}^2) + C_{12} (e_{xx} e_{yy} + e_{zz} e_{xx} + e_{zz} e_{yy}) + \dots$$

($F = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^{6} \sum_{\mu=1}^{6} \tilde{C}_{\lambda\mu} e_\lambda e_\mu$ energija opruge

1 = xx, 2 = yy, 3 = zz, 4 = yz, 5 = zx, 6 = xy

$C_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\tilde{C}_{\alpha\beta} + \tilde{C}_{\beta\alpha})$ pojavljuje se u izrazima

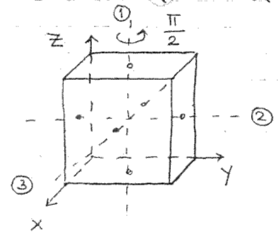
(linearni član $b\sum u_{ii} = b\sum \varepsilon_{ii}$ možemo izostaviti ako uzmemo da je $p_0 = 0$ ($\Rightarrow b = 0$)
→ linearna kombinacija ostaje ista kao pod 1) jer su sve tri osi ekvivalentne)

Smanjila se simetrija, a povećao se broj nezavisnih koeficijenata tj. invarijanti 2. reda; sad ih imamo 3 (C_{11}, C_{44}, C_{12} → ELASTIČNE KONSTANTE)

Kvadratne kombinacije koje prežive: $e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2$, $e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{zx}^2$, $e_{xx} e_{yy} + e_{zz} e_{xx} + e_{zz} e_{yy}$ → to su jedine invarijante (2. reda) kubične grupe rotacija.

Elementi simetrije kocke (operacije koje prevode kocku samu u sebe):
↳ F invarijantna na transformacije simetrije.
(→ dokaz da imamo samo 3 elastične konstante)

1°) 3 osi 4. reda $\left(\frac{\pi}{2}\right) \to \frac{2\pi}{4}$

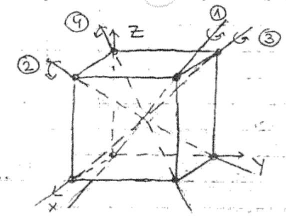


① $x \to y,\ y \to -x,\ z \to z$ $(x \to y \to -x \to -y \to x)$
② $z \to x,\ x \to -z,\ y \to y$ $(z \to x \to -z \to -x \to z)$
③ $y \to z,\ z \to -y,\ x \to x$ $(y \to z \to -y \to -z \to y)$

Vrtnjom oko glavnih osi za $\pi/2$ kocka prelazi sama u sebe. To se matematički radi cikličkom zamjenom indeksa ⇒ preživljavaju oni članovi u F čiji članovi su ciklički

↳ rotacija oko osi za $\pi/2$ svede se na cikličku zamjenu koordinata

2°) 4 osi 3. reda $\left(\frac{2\pi}{3}\right)$: ← BAŠ ZA $\frac{2\pi}{3}$?



Nužna je i invarijantnost na rotaciju za $2\pi/3$ oko ove 4 osi, što još reducira broj preživjelih članova.
npr. oko osi ①:
$x \to y,\ y \to z,\ z \to x$

↳ rotacija oko glavne dijagonale za $2\pi/3$

$\hat{n}$ jedinični vektor u smjeru osi

$$e^{\hat{n}\cdot\vec{X}\vartheta} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \vartheta^k (\vec{X}\cdot\hat{n})^k$$

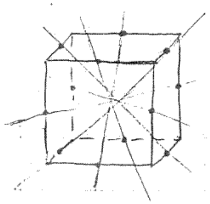
$[X_i, X_j] = \varepsilon_{ijk} X_k$
↳ generatori grupe rotacija (SO(3))

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Dakle, kako se mijenjaju os
① $x \to y \to z \to x$
② $x \to z \to -y \to x$
③ $-x \to z \to -y \to -x$
④ $-x \to y \to z \to -x$

3°) Šest osi drugog reda (rotacija za π)



Moramo vidjeti jesu li gornje kvadratne forme invarijantne na ove transformacije.

Rotacija za $\pi/2$:

e_{xy} $\quad x \to y$, $y \to -x$ $\quad e_{x,-y} = (-)e_{xy}$ $\quad$ jer $u_{-y} = -u_y$ jer smo zahtjevali $\vec{u} \sim \vec{r}$

$e_{-x,-y} = e_{xy}$

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

↳ ne smeta jer dodu 2 puta pa se poništi

=> zaista invarijante

Sada se pitamo što je sa drugim mogućim kvadratnim formama tj. zašto se ne javljaju mješovite kombinacije tipa:

$e_{xx}\, e_{xy} + \ldots$

$e_{yz} \cdot e_{zx} + \ldots$

$e_{xx}\, e_{yz} + \ldots$

zadovoljavaju rotacije za $\pi/2$ (cikličke zamjene) ali ne i rotacije za $3\pi/2$ (mijenjaju predznak)

=> ∃ tri nezavisne kvadratne invarijante za kubičnu grupu (grupu kocke). Razvoj F je jednoznačno određen simetrijom sistema. Fizika ulazi u interpretaciju koeficijenata (u tri konstante C_{11}, C_{44} i C_{12} – konstante elastičnosti) – njihova ovisnost o T i slično.

↳ ovdje je povećan broj nezavisnih konstanti elastičnosti jer je manja simetrija (u odnosu na sferičnu)

Što je stupanj simetrije manji (što je sistem nesimetričniji) to je više nezavisnih koeficijenata → potreban je veći broj konstanti elastičnosti za opis elastičnih svojstava (Hookeovog zakona).

kristalni sustav	broj nezavisnih koeficijenata (broj mogućih kvadratnih invarijanti)
izotropni	2
kubični	3
heksagonski	5
romboedarski (trigonski)	6
tetragonski	6 (linearna inv. se razlikuje za dva karoda)
rombični	6
monoklinski	12
triklinski	18

No, te konstante uz opis ponašanja zbog vanjskih napona opisuju i situaciju oko položaja ravnoteže – zbog npr. termičkih fluktuacija javljaju se naponi koji sistem vraćaju u ravnotežu → odgovori vanjskim silama su proporcionalni unutrašnjim fluktuacijama oko položaja ravnoteže. [FLUKTUACIJSKO-DISIPACIJSKI TEOREM]
=> To znači da ako sila izvuče česticu iz položaja ravnoteže i prestane djelovati čestica se vrati natrag (fluktuacija).
Ako želimo pravu ravnotežu, to znači da za $p=0$ imamo stvarni minimum slobodne energije F => konstante elastičnosti vode na negativnu promjenu volumena pri povećanju tlaka (za vanjski tlak $\neq 0$ minimiziramo G)

$F - F_0$ mora biti pozitivno definitno pa bi se na prvi pogled reklo da treba biti $C_{ij} > 0$, ali nije baš tako.

↳ pozabavimo se drugim pitanjem:

Stabilnost kubične rešetke

Uvjet na stabilnost: svaka deformacija povećava slobodnu energiju. (u tom slučaju će biti stabilan; u ravnoteži slobodna energija mora biti minimalna)

$$F - F_0 \overset{p=0\ (\text{vanjski})}{=} \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{xy}^2 + e_{xz}^2 + e_{yz}^2)$$
$$+ C_{12} (e_{xx} e_{yy} + e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx})$$

↳ ova kvadratna forma mora biti pozitivno definitna ($(F-F_0) > 0$ stabilnost, $(F-F_0) < 0$ nestabilna). Tražimo uvjete na koeficijente C_{ij} da to bude ispunjeno.

1) $C_{44} > 0$ – Evidentno, jer se promjene kuta samo tu očituju (kutevi – offdijagonalni članovi su pozitivni → C_{44} pozitivan). Slobodna energija se promjenom kuta povećava => kubična rešetka je stabilna (opire se promjeni kuta). Da je npr. $C_{44} < 0$ bilo bi da promjenom kuta $F - F_0$ pada tj. kristal bi težio spontanoj promjeni kuta što nikako nije realno.

2.) $C_{12} = ?$ – zeznut! Može biti '+' i '-'. Da bismo vidjeli što je treba dijagonalizirati formu.
$C_{11} = ?$

$$F - F_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e_{xx} & e_{yy} & e_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \end{pmatrix}$$

Cilj nam je svesti izraze uz konstante na potpune kvadrate jer su takve veličine sigurno pozitivne pa možemo reći sve o predznaku koeficijenata uz njih.

Dijagonalizirani $[C]$:

$$[C]\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle$$

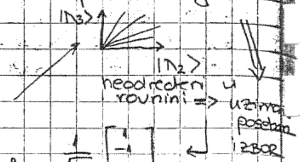
- imamo tri vlastita vektora, dva proizvoljno zadana

$$\lambda_1 = C_{11} + 2C_{12} \qquad |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$\lambda_{2,3} = C_{11} - C_{12}$$

↑ degenerirano

$$|\lambda_{2,3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix}1\\1\\-2\end{bmatrix} \quad \& \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\\0\end{bmatrix}$$



neodređeni u ravnini => uzima posebni izbor

$$\det\begin{bmatrix} C_{11}-\lambda & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11}-\lambda & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11}-\lambda \end{bmatrix} = 0 = (C_{11}-\lambda)\left[(C_{11}-\lambda)^2 - C_{12}^2\right]$$

$$- C_{12}\left[(C_{11}-\lambda)C_{12} - C_{12}^2\right]$$

$$+ C_{12}\left[C_{12}^2 - C_{12}(C_{11}-\lambda)\right]$$

$$= (C_{11}-\lambda)\left[(C_{11}-\lambda) - C_{12}\right]\left[C_{11}-\lambda+C_{12}\right] - 2C_{12}^2\left[(C_{11}-\lambda) - C_{12}\right]$$

$$= \left[(C_{11}-\lambda) - C_{12}\right]\left[(C_{11}-\lambda)(C_{11}+C_{12}-\lambda) - 2C_{12}^2\right]$$

$$= \left[C_{11} - C_{12} - \lambda\right]\left[C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - C_{11}\lambda - C_{11}\lambda - C_{12}\lambda + \lambda^2 - 2C_{12}^2\right]$$

$$\Rightarrow \lambda_3 = C_{11} - C_{12}$$

$$\lambda_{1|2}^2 - (2C_{11} + C_{12})\lambda_{1|2} + C_{11}^2 - 2C_{12}^2 + C_{11}C_{12} = 0$$

$$\lambda_{1|2} = \frac{2C_{11}+C_{12} \pm \sqrt{(2C_{11}+C_{12})^2 - 4(C_{11}^2 - 2C_{12}^2 + C_{11}C_{12})}}{2}$$

$$= \frac{2C_{11} + C_{12} \pm 3C_{12}}{2}$$

$$\lambda_1 = C_{11} + 2C_{12} \qquad \Leftarrow$$

$$\lambda_2 = C_{11} - C_{12}$$

$$|\lambda_1\rangle = \begin{bmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -2C_{12} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & -2C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & -2C_{12} \end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\y_1\\z_1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix} \Rightarrow \begin{array}{l} -2x_1 + y_1 + z_1 = 0 \\ x_1 - 2y_1 + z_1 = 0 \quad /\cdot 2 \\ x_1 + y_1 - 2z_1 = 0 \end{array}$$

$$-3y_1 + 3z_1 = 0 \Rightarrow y_1 = z_1 = x_1$$
$$3y_1 - 3z_1 = 0 \qquad = a$$

$$\Rightarrow |\lambda_1\rangle = a\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$$

Normiramo: $\langle\lambda_1|\lambda_1\rangle = 1 \Rightarrow 3a^2 = 1 \Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$\Rightarrow |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$$

analogno nalazimo $|\lambda_2\rangle$ i $|\lambda_3\rangle$

Pišemo opću deformaciju rastavljenu po $|\lambda_i\rangle$, $i = 1,2,3$:

$$\begin{pmatrix}e_{xx}\\e_{yy}\\e_{zz}\end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{3}}(e_{xx}+e_{yy}+e_{zz})}_{\eta_1}|\lambda_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\underbrace{(e_{xx}+e_{yy}-2e_{zz})}_{\eta_2}|\lambda_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{(e_{xx}-e_{yy})}_{\eta_3}|\lambda_3\rangle$$

ovo mora biti tako (trag tenzora, asocirano s promjenom volumena)

Slobodna energija nakon dijagonalizacije

$$F - F_0 = \frac{1}{2}\left[(C_{11}+2C_{12})\eta_1^2 + (C_{11}-C_{12})(\eta_2^2+\eta_3^2)\right]$$

$$2(F-F_0) = \frac{1}{3}\eta_1^2\langle\lambda_1|C|\lambda_1\rangle + \frac{1}{6}\eta_2^2\langle\lambda_2|C|\lambda_2\rangle + \frac{1}{2}\eta_3^2\langle\lambda_3|C|\lambda_3\rangle$$

$$= \frac{1}{3}\eta_1^2\lambda_1\cdot\overbrace{\langle\lambda_1|\lambda_1\rangle}^{3} + \frac{1}{6}\eta_2^2\lambda_2\overbrace{\langle\lambda_2|\lambda_2\rangle}^{6} + \frac{1}{2}\eta_3^2\lambda_3\overbrace{\langle\lambda_3|\lambda_3\rangle}^{2}$$

↳ misli se na nenormirane sv. vektore $(a=1)$

$$\Rightarrow F - F_0 = \frac{1}{2}\left[\underbrace{(C_{11}+2C_{12})}_{>0}\eta_1^2 + \underbrace{(C_{11}-C_{12})}_{>0}(\eta_2^2+\eta_3^2)\right]$$

$\hookrightarrow >0$ $\quad \hookrightarrow >0$

Uvjet stabilnosti:

$(F - F_0) > 0$

Vidimo da je forma dijagonalna i da bi bila pozitivno definitna mora vrijediti:

(*)

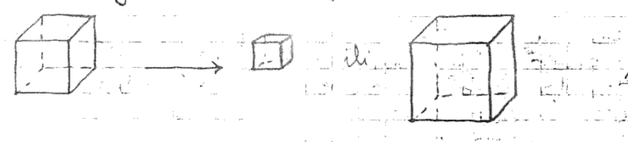
$$\boxed{\begin{array}{l}\lambda_1 = C_{11} + 2C_{12} > 0 \\ \lambda_{2,3} = C_{11} - C_{12} > 0 \\ C_{44} > 0\end{array}}$$

- uvjet stabilnosti kubičnog kristala
- ideja je uvidjeti da je pojava bilo koje deformacije vezana uz porast slobodne energije

Pitanje je zašto smo uzeli baš takve η_2, η_3 kad nam izbor baze nije jednoznačan?

Uzmimo:

1.) Ako želimo imati samo prvi član $(\eta_2 = \eta_3 = 0) \Rightarrow$ $e_{xx} = e_{yy} = e_{zz} \Rightarrow$ jednaka deformacija duž sve tri osi $\Rightarrow$ to da η_1 znači samo promjenu volumena bez promjene simetrije (kutova):



deformacija čuva simetričnost

$\frac{\Delta V}{V} = \eta_1 = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$ sve tri se jednoliko mijenjaju

⇒ radi se o promjeni volumena kubičnog sustava uz sačuvanje njegove kubičnosti, simetrija ostaje sačuvana

2) Samo drugi član ($\eta_1 = \eta_3 = 0$) => prelaz iz kubičnog u tetragonalni sustav (tetragonski) uz sačuvanje volumena (izduženje kocke).

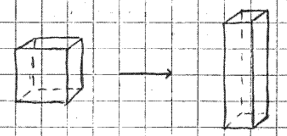
$\eta_2 = e_{xx} + e_{yy} - 2e_{zz}$

$e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} = 0 \Rightarrow \Delta V = 0$

$e_{xx} - e_{yy} = 0$

$\Rightarrow e_{xx} = e_{yy}$ jednako se povećavaju (smanjuju)

$e_{zz} = -2e_{xx} = -2e_{yy}$ dva puta više se smanjuje (povećava)



kocka → kvadar uz V = const.

3) Samo treći član ($\eta_1 = \eta_2 = 0$) => prijelaz iz kubičnog u ortorombski sustav uz sačuvanje volumena

$\eta_1 = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} = 0 = \frac{\Delta V}{V} \Rightarrow \Delta V = 0 \Rightarrow V = const$

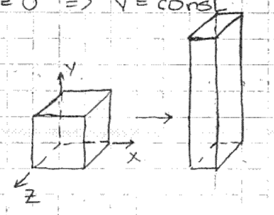
$\eta_2 = e_{xx} + e_{yy} - 2e_{zz} = 0$

$\Rightarrow e_{xx} = -e_{yy}$

$e_{zz} = 0$ treća os ostaje ista

$\eta_3 = e_{xx} - e_{yy} \neq 0$

poveća se   jednako se smanji

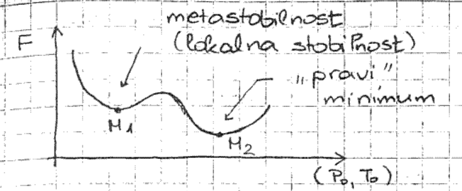


itd.

Da još dodamo kutove (off dijagonalne komponente) mogli bismo preći iz kubičnog sustava u sve ostale (sve do triklinskog) → možemo preći u bilo koji sustav i ispitati stabilnost kubičnog sustava obzirom na ostale sustave.
Ako je ispunjen uvjet stabilnosti (*) male deformacije povećavaju slobodnu energiju i sustav je stabilan obzirom na male deformacije.

Treba gledati ono što je energetski povoljno, a to je ono što vodi na spuštanje slobodne energije (stabilnost kristala) {npr. ako su sva 3 $c_{ij} > 0$ => ne valja jer F raste, ali ako su npr. 2 $c_{ij} > 0$, a 1 $c_{ij} < 0$ => O.K. jer F pada!}

Gledamo kako se $c_{ij}(T_0, p_0)$ ponaša pri promjeni T_0 i p_0. Ako pri tom F pada (tj. $c_{44} < 0$ ili $(c_{11} + 2c_{12}) < 0$ ili $(c_{11} - c_{12}) < 0$), onda kubični sistem nije stabilan i mijenja mu se struktura (FAZNI PRIJELAZ) tj. kutevi, stranice itd. F nam ide ka novom minimumu:

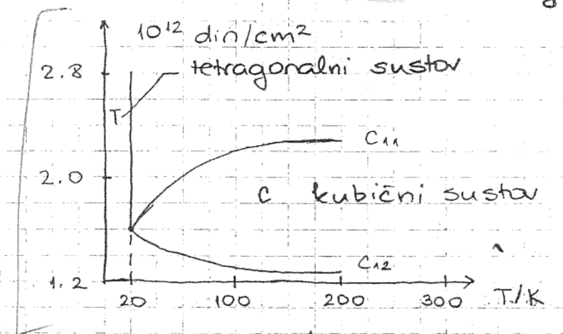


=> npr. staklo je metastabilno (prelazi u stabilno stanje lokalnim topološkim deformacijama a ne elastičnim deformacijama, a ako ga pustimo dovoljno dugo prijeđe u stabilno stanje (kristalizira se))

Treba naći apsolutni minimum - energetski najpovoljnije stanje (na putu do njega prolazimo kroz eventualne sedlene točke). Kvadratni razvoj može dati da je sistem nestabilan => tek članovi višeg reda kažu koje stanje je stabilno.
Ovo je bio primjer proučavanja LOMLJENJA SIMETRIJE. (Pretpostavka je bila da su male promjene e - da se po njima može razvijati, ali to nije kritična pretpostavka)

Moguće su i linearne kombinacije η_2 i η_3, ali je geometrijska reprezentacija toga dosta zeznuta.

Fizikalni primjer - kako izgledaju elastične konstante u kubičnom sustavu V_3Si (vanadij-III-silicija):



! cijela analiza je simetrijska

↳ Landau - opća teorija faznih prijelaza uz promjenu simetrije

- kubični sustav na temperaturi od 20 K postaje nestabilan → deformacije uz očuvanje homogenosti → dolazi do promjene simetrije - faznog prijelaza.

· Izotermna i adijabatska kompresibilnost – širenje zvuka u kristalu

Već smo spomenuli način deformiranja kristala u smislu brzine deformacije:

- IZOTERMNOST ($T = cte.$) → spora deformacija – entropija se stigne proširiti cijelim kristalom i održati istu temperaturu ($F = min$)

- ADIJABATIČNOST (izentropnost; $S = cte$); brza deformacija – entropija se „ne stigne proširiti", sačuvana energija ($E = min$); T se ne stigne izjednačiti.

Da li je širenje zvuka adijabatsko (izentropsko) ili izotermno tj. pitanje je da li širenje topline ima dovoljno vremena da „popuni rupu" nastalu deformacijom zbog širenja zvuka.

Odgovor: provjeriti predznake!

Termodinamika:

$$\begin{matrix} {}^{+}V & F & T^{+} \\ E & & G \\ S & H & P \end{matrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{P(V,T) = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S}$$

izotermno — izentropski (adijabatski)

def. KOMPRESIBILNOST

$$\varkappa = -\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T/S}$$ (T – izotermna, S – adijabatska)

$$\varkappa^{-1}_{(T)} = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T$$

- IZOTERMNA (spore promjene, temperatura se izjednači i sve se događa na istoj temperaturi)

$$\varkappa^{-1}_{(S)} = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S$$

- ADIJABATSKA (brze promjene, entropija se ne proširi tj. energija se ne disperzira i sve je približno na konst. energiji)

$\varkappa_{(S)}$ i $\varkappa_{(T)}$ ne moraju biti jednake ali su vezane

Veza (bez dokaza):

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T \cdot \left[1 + \frac{T}{C_V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P^2 \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T\right]$$

↑ koeficijent linearnog rastezanja (α)

Kada je $\varkappa_{(T)} \neq \varkappa_{(S)}$?

Ako ravnotežni volumen ovisi o temperaturi tj. $\frac{\partial V}{\partial T} \neq 0$, tada je $\varkappa_{(T)} \neq \varkappa_{(S)}$!

$$\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} = \frac{\partial^2 F}{\partial \eta_1^2} \qquad \varkappa_T^{-1} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = C_{11}^T + 2C_{12}^T$$

$$\varkappa_S^{-1} = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = C_{11}^S + 2C_{12}^S$$

↳ (za izoentropski proces gledamo E; isto kao i F)

$$(C_{11} + 2C_{12})_T \neq (C_{11} + 2C_{12})_S$$

! Različitost ostalih veličina povezana je s postojanjem $b \neq 0$ ($b = p_e(V_0, T_0) \neq 0$ ⇒ netrivijalne jednadžbe stanja), dokle linearna invarijanta postoji (ona govori o promjeni volumena) ⇒ $\varkappa_{(T)} \neq \varkappa_{(S)}$

(*) lin. inv. ∃ samo za volumne promjene $b(e_{xx}+e_{yy}+e_{zz})$

Što se tiče preostalih kvadratnih invarijanti, vrijedi:

$$C_{11}^S - C_{12}^S = C_{11}^T - C_{12}^T$$
$$C_{44}^S = C_{44}^T$$

ako nema linearne invarijante (inače se i one razlikuju)

Nema linearnih članova koji bi išli uz promjenu kuteva uz η_2 i η_3, zbog (*).

To dolazi do izražaja kod opisa zvuka (elastični valovi) ↦ odstupanje od ravnoteže – u vezi s brzinom tog odstupanja tj. vremenom vraćanja natrag, pitamo se:

Kolika je frekvencija zvuka u odnosu na karakteristično vrijeme (~1/frekvencija) preraspodjele topline (entropije)

1) Ako je frekvencija zvuka viša (puno) tj. $\nu_{zvuk} \gg \frac{1}{T_{preraspodjele}}$, entropija se nema vremena preraspodijeliti; sve se dogodi praktički na konstantnoj entropiji/energiji. U igri je opis preko $\varkappa_{(S)}$. (To je najčešće!)

2) Ako je $\nu_{zvuk} \ll \frac{1}{T_{preraspodjele}}$, tada se entropija preraspodijeli da se održi svuda T konstantan i opisujemo stvar preko $\varkappa_{(T)}$. (To je rijetko!)

- homogene deformacije
- dugovalne deformacije

Dugovalna deformacija

Kako se pojavljuju dugi valovi u kubičnoj strukturi?
elastični valovi u kubičnim kristalima ≪ (homogenim tijelima))

Još jednom napominjemo:

Elastične konstante imaju dvostruku ulogu. One opisuju:

- odgovor kristala na vanjske napone
- spontano fluktuiranje kristala oko položaja ravnoteže tj. njegovo vraćanje u ravnotežu

Promatranje fluktuacija oko ravnotežnog položaja vodi nas na promatranje elastičnih valova.

Komponenta gustoće sile: (sila na jedinicu volumena)
$$F_i = \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

sila je izražena kao div neke veličine da možemo izraziti preko površ. int.

↳ σ smo dosada shvaćali kao vanjsku silu. Sada ju drugačije shvaćamo. Zamišljamo da kristal sam izlazi iz položaja ravnoteže spontano zbog termičkih ili kvantnih fluktuacija.
Javljaju se spontani naponi / sile koji ga vraćaju u ravnotežu ↳ (kvantno ili termički pobuđeni)

Jednadžbe gibanja (II. Newtonov zakon):

$$F = \rho \cdot \ddot{x} \qquad \rho \cdot \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}$$

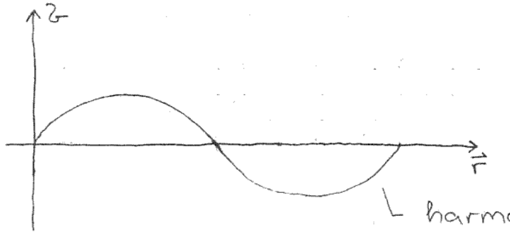
$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

↳ tražena lin. dif. jedn.

I dalje smo u elastičnoj (harmoničkoj) aprox. (Hookeov zakon, lin. veza napona i pomaka, energija razvijena do kvadratnog člana

Podrazumijeva se: $\vec{u} = \vec{u}(\vec{r}, t)$, $\sigma = \sigma(\vec{r}, t)$

Rješenja te jednadžbe bit će harmonički valovi (zvuk). To se mijenja u vremenu sa karakterističnom vremenskom skalom ω^{-1}.



← očekujemo

ω^{-1} karakteristična skala

└ harmonički (zvuk)

Sad nas zanimaju promjene σ_{ik} (to treba naći) (samosuglasno sa rješenjem koje tražimo) ↓ prostorno-vremensku ovisnost

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial E}{\partial e_{ik}}\right)_S = \left(\frac{\partial F}{\partial e_{ik}}\right)_T$$

$$\delta\sigma_{ik} = \delta\left(\frac{\partial E}{\partial e_{ik}}\right)_S = \delta\left(\frac{\partial F}{\partial e_{ik}}\right)_T \qquad \delta\sigma_{ik}(\vec{r}, t)$$

$$dE = TdS + \sum_{i,k} \sigma_{ik}\, du_{ik} \Rightarrow \sigma_{ik} = \left(\frac{\partial E}{\partial u_{ik}}\right)_S$$

$$dF = -SdT + \sum_{i,k} \sigma_{ik}\, du_{ik} \Rightarrow \sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{ik}}\right)_T$$

$$u_{ik} = e_{ik}\frac{1+\delta_{ik}}{2} \qquad \sum_{i,k} \sigma_{ik} \frac{1+\delta_{ik}}{2}\, de_{ik} = \sum_{i\geq k} \sigma_{ik}\, de_{ik}$$

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial E}{\partial e_{ik}}\right)_S, \quad \sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial e_{ik}}\right)_T \Leftarrow \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,k\\ i\neq k}} \sigma_{ik}\, de_{ik}}_{\sum_{i>k} \sigma_{ik}\, de_{ik}} + \sum_i \sigma_{ii}\, de_{ii}$$

simetričnost: $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$, $e_{ik} = e_{ki}$

Važno pitanje: da li će se pri promjeni σ po $\vec{r}$ entropija uspjeti preraspodijeliti ili neće?

↳ npr. dolazi do lokalnih promjena volumena (kontrakcija, dilatacija) - hoće li se toplina uspjeti preraspodijeliti t. da se izjednače temperatur
Ako da → izotermna promjena σ
ne → izentropska

? Da li će promjena ići uz konst. S i bez prijenosa topline (izentropski) ili će se toplina uspjeti preraspodijeliti uz T = const.?

↳ 2 granična slučaja

To ovisi o termičkoj vodljivosti kristala.

U većini slučajeva zvuk je prevelike frekvencije (previsok ω) da bi se entropija uspjela preraspodijeliti tj. da bi se izjednačile T pa se promjene odvijaju izentropski.

Treba paziti na $\omega^{-1} \lessgtr \tau_S$ → vrijeme transporta entropije
↳ vrijeme oscilacija

Standardne situacije su: $\omega \gg \tau_S$ izentropski procesi (brze promjene)

(Izotermno $\omega \ll \tau_S$ (spore promjene))

Relevantna veličina:

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial e_{ik}^2}\right)_S \neq \left(\frac{\partial^2 F}{\partial e_{ik}^2}\right)_T \quad \text{u principu}$$

↳ može se pokazati: za kubični kristal ova razlika je važna samo za volumne promjene (jer linearna invarijanta ∃ samo u dijagonalnim komponentama tj. linearni član je samo volumni član)

$$\left.\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right|_S \neq \left.\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right|_T$$

veza između te dvije veličine DZ naći

DZ: $F = E - TS$ $\qquad dE = TdS - pdV$

$$dF = dE - TdS - SdT$$

$$dF = -SdT - pdV$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -p \qquad \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S = -p \qquad \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S$$

$z = f(x,y)$

$x = f(y,z)$ $\Rightarrow$ $\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z = -1$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y = \frac{1}{(\partial z/\partial x)_y}$$

$F = f(T,V)$ $\qquad E = f(S,V)$

$V = f(T,F)$ $\qquad V = f(S,E)$

$x = V$, $y = T$, $z = F$ $\qquad x = V$, $y = S$, $z = E$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial F}\right)_T \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_F = -1 \qquad \left(\frac{\partial V}{\partial E}\right)_S \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_E = -1$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_F \qquad \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_E$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = -\left[\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V\right]_T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_F \qquad \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = -\left[\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V\right]_S \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_E$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_F = -\frac{p}{S} \qquad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_E = \frac{p}{T}$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -S \qquad \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V = T$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = -\frac{p}{S}\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \qquad \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = -\frac{p}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S$$

$$-\frac{p}{S}\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \Rightarrow p = S\cdot\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_T$$

$$-\frac{p}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S$$

$$\frac{S}{T}\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = \frac{S}{T}\cdot\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S \cdot \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T$$

$$\frac{S}{T}\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\frac{S}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_S = \left[-\frac{S}{T}\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V\right]\left[\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right]_T$$

$$(C_{11}^T + 2C_{12}^T) \neq (C_{11}^S + 2C_{12}^S)$$

izotermna elastična konstanta — izoentropska elastična konstanta

Razvoj unutrašnje energije je simetrijski isti kao razvoj slobodne energije

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$
$$e_{ii} = \varepsilon_{ii} = u_{ii}$$
$$i \neq j \quad e_{ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji} = e_{ij}\frac{1+\delta_{ij}}{2}$$

$$\tau_{xx} = C_{11}^S + C_{12}^S(e_{yy} + e_{zz})$$

$$\tau_{xy} = C_{44}e_{xy}, \quad \tau_{xz} = C_{44}e_{xz}$$

apsolutni pomak, relativni pomak

$$\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11}^S\frac{\partial e_{xx}}{\partial x} + C_{12}^S\left(\frac{\partial e_{yy}}{\partial x} + \frac{\partial e_{zz}}{\partial x}\right) + C_{44}\left(\frac{\partial e_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial e_{xz}}{\partial z}\right)$$

↳ tri vezana jednodžbe za tri komponente (u kojoj su vezani apsolutni pomaci sa relativnim pomacima)

(gibanje u x će ovisiti o u_y)

ravni val

$$\vec u(\vec r, t) = \vec u_0 e^{i(\vec k\vec r - \omega t)}$$

p.p. rješenje oblika (rješenja su i dalje ravni valovi zbog translacione inv. problema)

... koji treba odrediti

Sada izrazimo relativne pomake preko apsolutnih:

$$\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11}^S\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{12}^S\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x\partial z}\right) + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x\partial z}\right)$$

$$\left[\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11}^S\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}\right) + (C_{12}^S + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x\partial z}\right)\right] \quad (*)$$

Jednodžba gibanja za x-komponentu. Za y i z komponentu dobivamo cikličkom zamjenom indeksa pa dobivamo sustav tri vezane diferencijalne jednodžbe => situacija više nije izotropna (ista u svim smjerovima) već anizotropna!

Uvrštavanjem p.p. rješenja po komponentama u jednodžbu (*) dobivamo homogeni sustav od 3 algebarske jednodžbe čija det = 0 (jednodžbe su po u_{0x}, u_{0y}, u_{0z})

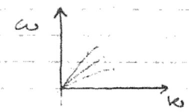
↳ uvjet da sustav (homogene) ima netrivijalno rješenje => dobijemo vlastite frekvencije i vektore)

Za x-komponentu:

$$u_x(\vec r, t) = u_{0x}\, e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} \quad \binom{y}{z}\ \binom{y}{z}$$

$$-\rho\omega_x^2 u_{0x} = -k_x^2 C_{11}^S u_{0x} - C_{44}(k_y^2 + k_z^2)u_{0x} - (C_{12}^S + C_{44})\cdot(k_x k_y u_{0y} + k_x k_z u_{0z})$$

Rješavanjem dobivamo ($\forall \vec k$), 3 rješenja $\vec u_0^\nu(\vec k)$ čemu odgovaraju 3 frekvencije $\omega_\nu(\vec k)$ ($\nu = 1,2,3$ - index polarizacije → ima 3 moguće polarizacije vala)
Vektor $\vec u_0$ obično normiramo na 1.



Za opći smjer propagacije $\vec k$ imamo 3 različite vrijednosti ω. $\forall \vec k$ treba rješavati 3 jednodžbe, 3. reda

Vidimo da dobivamo determinantu 3×3 => jednodžba za ω(k) 3. reda što je zeznuto za izračunati, pa gledamo specijalne slučajeve!

Napomena: Usporedbom naše jednodžbe s valnom jedn.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \left(\frac{1}{v_s^2}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad v_s = \frac{\partial\omega}{\partial k}$$

↳ brzina zvuka je grupna.

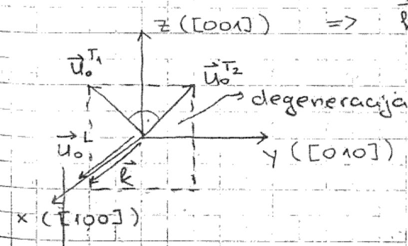
naći ćemo brzinu zvuka v_s!

Dakle, mi ćemo pogoditi rješenja.
Ograničavamo se na rješavanje te jednodžbe za posebne, specijalne, slučajeve.

U smjerovima visoke simetrije sustava stvar se pojednostavljuje. Izaberemo da se val širi u nekom od tih smjerova.

(1.) $\vec k \parallel [100]$: propagacija duž x-osi

=> $\vec k = \{k_x, 0, 0\}$



↳ longitudinalni val

- mogućnosti smjera titranja koje simetrija kocke dozvoljava:
  1°) $\vec u_0^L \parallel \vec k$ (longitudinalno - L)
  2°) $\vec u_0^{T_1,T_2} \perp \vec k$ (2 transv. moda - T_1, T_2)

↳ vidimo da su to rješenja iz simetrije problema

→ uđemo sa simetrijom u jednodžbu

Transverzalni valovi - degenerirani

"L": $u_x^L = u_{0x}^L e^{i(k_x x - \omega t)}$, $u_y = u_z = 0$

longitudinalni pomak (mod)] $\vec{k} = \{k_x, 0, 0\}$

Uvrštovanjem u jednodžbu dobijemo:

$$\rho \omega_L^2 = C_{11}^S k_x^2$$

↳ longitudinalni mod

↳ kontrakcija i širenje medija duž glavne osi.

$$\omega_L = \sqrt{\frac{C_{11}^S}{\rho}}\, k_x$$

Grupna brzina:

$$v_s^L = \frac{\partial \omega_L}{\partial k_x} \Rightarrow \boxed{v_s^L = \sqrt{\frac{C_{11}^S}{\rho}}}$$

brzina zvuka (longitudinalna) u kubičnom kristalu duž glavne osi (v_g = faznoj brzini)

→ vrsta deformacije se vidi kad se ω uvrsti u jednodžbe gibanja i vidi kakav je odnos koordinata.
→ ovdje je tip deformacije: C_{11} → kontrakcija (širenje) duž 1 osi dok su druge dvije konstantne (volumen se mijenja)

L val sabija i razvlači rešetku duž [100] osi.

"$T_{1,2}$": $u_y = u_0^T e^{i(k_x x - \omega t)}$ (izabiremo ga) duž y-osi; drugi duž z-osi)

transverzalni mod]

$$y:\quad \rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{11}^S \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}\right) +$$
$$+ (C_{12}^S + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z}\right)$$

↓ ciklička zamjena

x y z
y z x
z x y

$$z:\quad \rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{11}^S \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}\right) +$$
$$+ (C_{12}^S + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z \partial x}\right)$$

- - - - - - - -

$$\rho \omega_T^2 = C_{44} k_x^2 \Rightarrow \omega_T = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}\, k_x$$

Rješenje je 2 puta degenerirano (isto je za y i z)
↳ dvije ekvivalentne polarizacije

$$\Rightarrow \boxed{v_s^T = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}}$$

→ transverzalna brzina zvuka (2 puta deg. rješ; isto za T^1 i T^2)

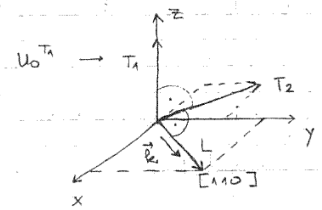
Tip deformacije je: promjena kuteva uz konstantni V. (uzrok su smikovi)

PAZITI: ovo dva puta degenerirano ne vrijedi za bilo koji pravac $\vec{k}$!

Dakle, transverzalni mod: taj zvuk mijenja samo kuteve (lokalno; ne mijenja ni volumen ni dužinu osi – da mijenja dužinu osi pojavila bi se konstanta C_{11} i C_{12})
↳ jer se pojavljuje samo konstanta C_{44}

Sljedeći slučaj: propagacija duž plošne dijagonale

(2.) $\vec{k} \parallel [110]$ => (plošna dijagonala), $\vec{k} = \{k_x, k_y, 0\}$, $k_y = k_x$



xoy — L : $u_{0x}^L = u_{0y}^L \neq 0$, $u_{0z}^L = 0$

z-os — T_1 : $u_{0z}^{T_1} \neq 0$, $u_{0x}^{T_1} = u_{0y}^{T_1} = 0$

⊥xoy — T_2 : $u_{0x}^{T_2} = -u_{0y}^{T_2} \neq 0$, $u_{0z}^{T_2} = 0$

$\vec{u}^L = \vec{u}_0^L e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)}$, $k_y = k_x$
↳ smicajni val u xoy ravnini

Brzine:

$$v_s^L = \sqrt{\frac{C_{11}^S + C_{12}^S + 2C_{44}}{3\rho}}$$

→ netransparentna kombinacija elastičnih konstanti (dira i osi i kuteve)

$$v_s^{T_1} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \qquad v_s^{T_2} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}$$

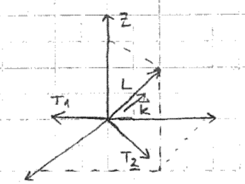
↳ tri nedegenerirane grane

↳ čisti smik

→ čuva volumen; razlika nema veze sa δV pa nema razlike između izoS i izoT.

$v_s^{T_1}$ → mijenja kuteve
$v_s^{T_2}$ → mijenja osi čuvajući volumen

(3.) $\vec{k} \parallel [111]$ na jednoj prostornoj dijagonali (glavnoj)



$$v_s^L = \sqrt{\frac{C_{11}^S + 2C_{12}^S + 4C_{44}}{3\rho}}$$

promjena volumena, promjena kuta → lokalna varijacija volumena + lokalna deformacija kuteva

$$v_T = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}}$$

čuva volumen, mijenja kuteve → promjena osi i promjena kuteva uz očuvanje volumena

↳ 2 puta degenerirano

(→ lokalna tetragonalna deformacija uz V = cte, lokalno deformiranje kubične strukture u neku drugu.

[ρ - prosječna gustoća jedinične ćelije]

Dakle, ovisno o prisutnim konstantama C_{ij} u brzini, vidimo koji se mod deformacije uključuje (promjena kuta, promjena volumena, sužbijanje itd.)

Sve te brzine su pozitivne ako uzmemo stabilan kristal.

Napomenimo još:

$V = \frac{1}{2} M\omega^2(k)\, u_k^2$ & $M\omega^2 = c^2 k^2$

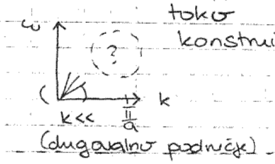
↑ pot. energija u harmoničkoj aproksimaciji

$\Rightarrow V = \frac{1}{2} c^2 k^2 u_k^2 = \frac{1}{2} C \varepsilon^2 = cte$

$k^2 u_k^2 \to \varepsilon$; uz $k \to 0$, $u \to \infty$

(?)

Svugdje dobivamo $\omega = ck$ ali to je za $k <<$ jer je model tako konstruiran



· Eksperimentalno određivanje elastičnih konstanti

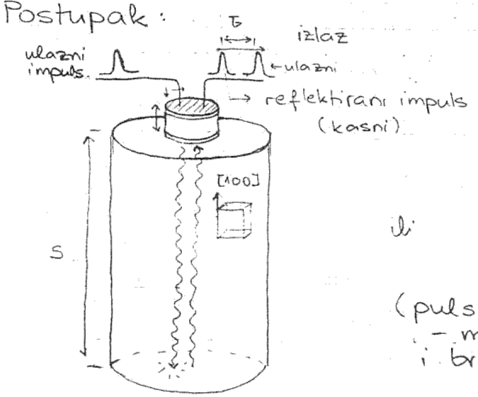
(za kubični kristal)

Pitanje imamo li dosta veličina da iz mjerenja odredimo elastične konstante? Da.

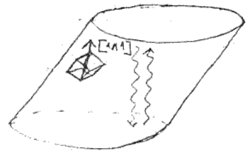
Izveli smo više relacija za brzinu v_s (7) nego što imamo konstanti elastičnosti (3). Dakle imamo 3 elastične konstante i puno brzina ⇒ mjerenjem 3 brzine zvuka možemo određivati konstante elastičnosti, a ostale služe za kontrolu.

Promjene kuta mjere se smicanjem. Na kristal zalijepimo kvarc i na kvarc dovedemo impuls. Kvarc se ili smiče ili generira.

Postupak:

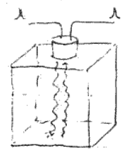


ili

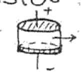


(puls koji izlazi van je manji – mjerimo atenuaciju zvuka i brzinu zvuka)

ili



Kristal izrežemo tako da mu je gornja (i donja) ploha okomita na željeni smjer u jediničnoj ćeliji.

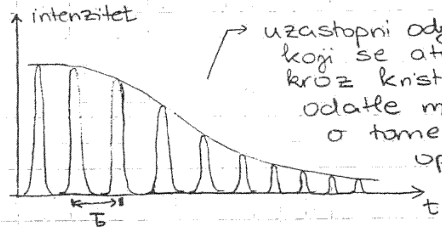
Na gornju plohu stavimo piezoelektrični oscilator (kristal kvarca s naparenim elektrodama: ) koji kod mu dovedemo električni impuls (RF generator → ultrazvučni impulsi ~ $f = 15$ MHz, trajanj 1 μs) mehanički zatitra i tako izazove deformaciju donjeg kristala koja se širi prema „dolje", reflektira od donje plohe, vrati nazad i mehanički „drmne" kvarc koji onda daje električni impuls na izlaz. Taj impuls, a također i višestruke refleksije, detektiramo osciloskopom. Tu se vidi kako se val na putu kroz kristal atenuira (guši) (smjer širenja [100], [100] itd. odabrali smo pogodnim rezanjem kristala).

Iz kašnjenja reflektiranog signala za ulaznim može se izračunati brzina zvuka u namještenom smjeru

($v = 2s/\tau$)

↳ mjerimo.

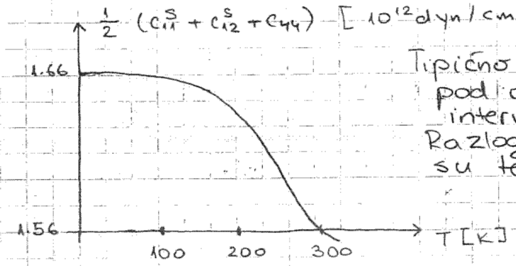
Mjereni signal impulsa nakon višestrukih refleksija izgleda otprilike ovako:



→ uzastopni odjeci ultrazvučnih impulsa koji se atenuiraju prolascima kroz kristal ⇒ atenuaciju možemo odatle mjeriti. Atenuacija govori o tome koliko je linearna aprox. dobra za opis. Ako je atenuacija jako mala ⇒ harm. aprox. je dobra.

Rezultati mjerenja (temperaturna ovisnost izmjerenih elastičnih konstanti)

1°) Ag



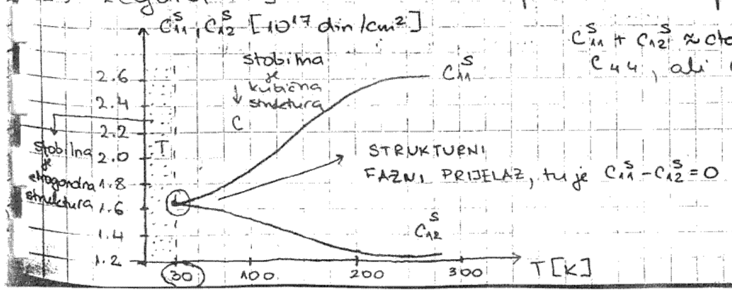
Tipično ponašanje el. konstanti: pod od nekoliko % u intervalu T od 0 do 300 K

Razlog: Što je T veća, veća su termička gibanja ⇒ anharmonički efekti u Hookeovu zakonu, ili zbog npr. vezanja titraja na elektrone.

Možemo nacrtati atenuaciju kao funkciju od T i to provjeriti.

2°) Legura V_3Si (visokotemperaturni supravodič)

↓ vanadij



$c_{11}^s + c_{12}^s \approx cte$

c_{44}, ali $c_{11} - c_{12}$ čini svoje!

(Uzrok ovakvog ponašanja je vezanje deformacije na elektronski plin ...)

! ~ 30 K → nestabilnost kristala → deformacija se veže na elektronski plin koji ima specijalno anizotropno svojstvo koje vodi jakoj temperaturnoj ovisnosti i nestabilnosti.

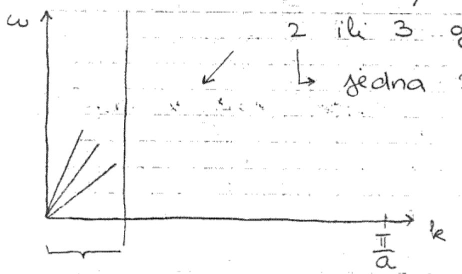
Sjetimo se: za $C_{11}-C_{12}>0$ raste slobodna energija F ; za $C_{11}-C_{12}<0$ F pada => izlazimo iz stabilnosti => mora se dogoditi fazni prijelaz

Ako se dogodi npr. $C_{11}^{S}+2C_{12}^{S}\to 0 \Rightarrow v_B \to 0,\ \omega\to 0$ => vrijeme u kojem neki mod stoji postoje dugačko (divergira) => entropija ima vremena da se preraspodijeli => možemo promatrati prijelaz iz izentropskog u izotermički režim (to ne možemo u bilo kojem kristalu → samo u onom u kojem dolazi do volumne promjene bez promjene simetrije; slučaj $\vec{k}\parallel[111]$)

→ nema degeneracije

2 ili 3 grane

↳ jedna 2× degenerirana



ultrazvučno područje → vrlo daleko od ruba Brillouinove zone (tu smo riješili problem) (dugi valovi)

Napomena: Razvoj za F koji smo radili zove se Landauov razvoj slobodne energije.

Uključene su samo homogene deformacije ($k=0$ stabilnost) a ne i one koje se (sporo) mijenjaju u prostoru. To bi bio Landau-Ginsbourgov razvoj koji je prvobitno primijenjen samo na supravodljivost (nalaženje minimuma je jako teško) Odatle se opisuje i nehomogene konfiguracije (stvaranje kopljica; Wilson → Nobelova nagrada)

dugovalno !

Sva dosadašnja razmatranja bila su u dugovalnoj aproksimaciji ($\lambda \gg a$) kod val ne „vidi" zrnatost kristala. Sada želimo promotriti stvari izvan te aproksimacije =>
=> FONONI