Zadania z Rzeczywistej Struktury Materiałów (3)

1. Wylicz macierz orientacji **g** opisującą orientację kryształu względem układu próbki, jeśli układ kryształu powstał z układu próbki przez obrót o kąt ω wokół osi **d**. Oś obrotu **d** o jednostkowej długości ma współrzędne d_1, d_2, d_3 w układzie próbki. Wylicz przykładowo wyrazy g_{11}, g_{12} macierzy **g**.

Odpowiedź: macierz ***g*** *ma postać*

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} (1-d_1^2)\cos\omega + d_1^2 & d_1 d_2(1-\cos\omega) + d_3\sin\omega & d_1 d_3(1-\cos\omega) - d_2\sin\omega \\ d_1 d_2(1-\cos\omega) - d_3\sin\omega & (1-d_2^2)\cos\omega + d_2^2 & d_2 d_3(1-\cos\omega) + d_1\sin\omega \\ d_1 d_3(1-\cos\omega) + d_2\sin\omega & d_2 d_3(1-\cos\omega) - d_1\sin\omega & (1-d_3^2)\cos\omega + d_3^2 \end{pmatrix}$$

Wskazówki:

Widzieliśmy już na ćwiczeniach, że łatwo jest wyliczyć macierz obrotu wokół osi obrotu równoległej do osi **z**. Postąpimy zatem następująco:

a) Obróćmy najpierw „pomocniczo” układ próbki {**S**} (przy pomocy macierzy $\mathbf{g_0}$), aby otrzymać układu {**S’**} taki, że jego oś **s3’** jest równoległa do osi **d**. Zauważmy, że macierz transformacji $\mathbf{g_0}$ będzie miała postać:

$$\mathbf{g_0} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ d_1 & d_2 & d_3 \end{bmatrix}$$

gdzie a_{ij} mają jakieś konkretne wartości liczbowe, ale ich znajomość nie jest konieczna,

b) Dokonujemy teraz obrotu układu {**S’**} o kąt ω wokół osi **s3’**, otrzymując układ {**S’’**}. Postać odpowiedniej macierzy $\mathbf{g}_\omega$ poznaliśmy już na ćwiczeniach,

c) Skompensujmy pierwszy obrót (który był tylko „pomocniczy”). Czyli wprowadzimy obrót przeciwny do pierwszego, który przeprowadzi układ {**S’’**} w układ {**S’’’**}. Omówiony obrót kompensujący przedstawia macierz $\mathbf{g_0}^{-1}$ (równa $\mathbf{g_0}^{\mathrm{T}}$).

W ten sposób dostaniemy końcowy układ {**S’’’**}={**C**} reprezentujący orientację kryształu, który powstał z {**S**} w wyniku obrotu o kąt ω wokół osi **d**. Poszukiwana macierz **g** jest złożeniem trzech powyższych obrotów.

W celu pozbycia się kosinusów kierunkowych a_{ij} i wyrażenia ich przez d_k, skorzystaj z warunku prostopadłości wersorów układu współrzędnych (przy użyciu definicji iloczynów skalarnego i wektorowego).

2. Macierz orientacji [a] służy do transformacji wersorów z układu próbki {**S**} do układu kryształu {**C**}:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \\ \mathbf{c}_3 \end{bmatrix} = [a] \begin{bmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \mathbf{s}_2 \\ \mathbf{s}_3 \end{bmatrix}$$

gdzie $\mathbf{c_1}, \mathbf{c_2}, \mathbf{c_3}$ są wersorami układu kryształu, zaś $\mathbf{s_1}, \mathbf{s_2}, \mathbf{s_3}$ – wersorami układu próbki (przy czym oba zestawy wersorów są wyrażone w dowolnym, ale tym samym układzie współrzędnych. Powyższe równanie możemy zapisać skrótowo jako: $\{\mathbf{C}\}=[\mathrm{a}]\{\mathbf{S}\}$.

Można wskazać jeszcze jedno ważne działanie macierzy a jakim jest transformacja dowolnego wektora **F** układu próbki $\{\mathbf{S}\}$ do układu kryształu $\{\mathbf{C}\}$:

$$\begin{bmatrix} F_1' \\ F_2' \\ F_3' \end{bmatrix} = [a] \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{bmatrix}$$

lub krócej:

$$\mathbf{F}' = [\mathrm{a}]\,\mathbf{F}$$

Udowodnij przez prosty rachunek algebraiczny słuszność obu powyższych relacji.

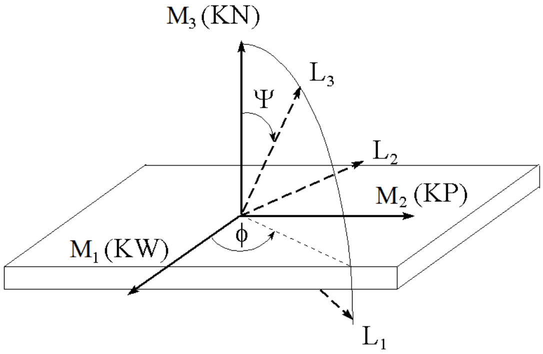
3. Mamy dwa kryształy, A i B, o orientacjach opisanych macierzami $\mathrm{a_A}$ oraz $\mathrm{a_B}$ (przypomnijmy, że macierze te opisują przejście od układu próbki do układu kryształu). Uzasadnij, że macierz bezpośredniego przejścia od układu kryształu B do układu kryształu A wynosi: $\Gamma_{\mathrm{AB}} = \mathrm{a_A}\,\mathrm{a_B^{-1}}$.

4. Układ kryształu $\{\mathbf{C}\}$ powstał z układu próbki $\{\mathbf{S}\}$ przez obrót o kąt ω wokół osi **d**. Oś obrotu **d** o jednostkowej długości ma współrzędne d_1, d_2, d_3 w układzie próbki (jak i w układzie kryształu). W zadaniu 2 wyliczyliśmy postać macierzy orientacji a opisującą orientację kryształu względem układu próbki.

a) wyraź kąt obrotu ω oraz składowe d_1, d_2, d_3 osi obrotu **d** przez wyrazy a_{ij},
b) wylicz kąty α, β charakteryzujące orientację osi obrotu (chodzi o te same kąty α, β, które definiują kierunek na sferze projekcji). Wyraź je przez d_1, d_2, d_3.

5. Wyprowadzić wyrażenie na macierz obrotu [a] charakteryzującą końcową orientację układu współrzędnych względem układu wyjściowego. Końcowa orientacja układu współrzędnych powstała z początkowej przez trzy kolejne obroty: γ_1 (wokół osi x_1), γ_2 (wokół osi x_2'), oraz γ_3 (wokół osi x_3''). Założyć, że wszystkie trzy „gamy" są określone dodatnio względem odpowiednich osi, zgodnie z regułą śruby prawoskrętnej.
Założyć następnie, że „gamy" są małe (np. rzędu 1 stopnia). Jak uprości się wtedy otrzymana macierz g, jeśli pominiemy wyrazy małe drugiego rzędu ?

6. Wyprowadzić macierz macierz obrotu $[b_{ij}]$ wiążącą układ odniesienia M (próbki) z układem laboratoryjnym (L), używanym przy wyznaczaniu naprężeń wewnętrznych metodą dyfrakcyjną. Orientacja trzeciej osi układu L (czyli L_3) względem układu M wyznaczona jest dwoma kątami: ψ i φ. Natomiast oś L_2 leży w płaszczyźnie P_1P_2. We elementach macierzy obrotu, b_{ij}, pierwszy wskaźnik dotyczy układu L, zaś drugi – M.



7. Podanie macierzy orientacji **a** określa jednoznacznie orientację kryształu (np., przez kąty Eulera $\varphi_1, \phi, \varphi_2$). Do danej orientacji **a** można jednak stworzyć orientacje równoważne, gdyż istnieją symetryczne i równoważne orientacje układów kryształu **{C}** i próbki **{S}**: $\{\mathbf{C}'\} = \mathbf{k}\,\{\mathbf{C}\}$ oraz $\{\mathbf{S}'\} = \mathbf{p}\,\{\mathbf{S}\}$. Opisane są one macierzami symetrii $\mathbf{k}_i$(dla kryształu) i $\mathbf{p}_j$(dla próbki). Wynikają one z istnienia osi symetrii o krotnościach 1, 2, 3 lub 4. I tak np.:

$$\mathbf{k}_{100}^{4} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$ opisuje oś czterokrotną w kierunku [100] kryształu, zaś

$$\mathbf{p}_{x_1}^{2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$ opisuje oś dwukrotną w kierunku x_1 układu próbki.

a) Podaj ogólną relację na równoważną macierz orientacji **a’** do danej macierzy **a**, gdy uwzględni się macierze symetrii $\mathbf{k}_i$ i $\mathbf{p}_j$. Wystartuj z równania: $\{\mathbf{C}\} = \mathbf{a}\,\{\mathbf{S}\}$.
b) Spróbuj ustalić, ile będzie różnych macierz symetrii $\mathbf{k}_i$ dla kryształu o sieci regularnej,
c) Ile będzie różnych macierzy symetrii $\mathbf{p}_j$ dla próbki o symetrii rombowej,
d) Ile zatem będzie równoważnych macierzy **a’** odpowiadających danej macierzy **a** ?

8. Orientacja kryształu o symetrii regularnej względem układu próbki opisana jest wskaźnikami Millera: (*hkl*) [*uvw*]. Znajdź kąty α i β, które określają orientację dowolnego kierunku kryształu [*prt*] względem układu próbki. (kąt α zawarty jest między kierunkiem krystalograficznym [*prt*] a osią **z** układu próbki, zaś kąt β jest pomiędzy rzutem tego kierunku na płaszczyznę *xy* a osią **x** układu próbki).