

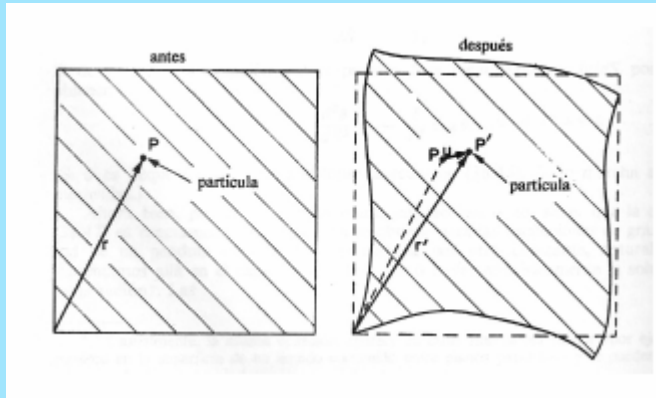
# CAP.4: ELASTICIDAD

## (sólido macroscópico $\cong$ continuo)

1. Definición de tensores de tensiones y deformaciones en sólidos
2. Pequeñas deformaciones, ley de Hooke.
3. Ondas en cristales
4. Sólidos isótropos. Deformaciones en equilibrio
5. Origen microscópico del comportamiento elástico.

Referencias:        Kittel, cap 4, 6<sup>a</sup> ed en inglés  
                          Feynman, Vol II, cap 38 y 39  
                          Landau-Lifshitz, Vol 7, "teoría de la elasticidad"

# Tensor de deformaciones

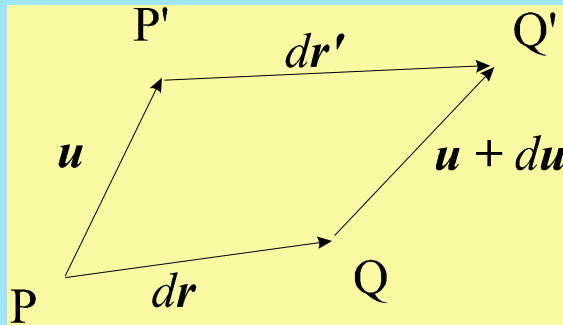


Consideremos un sólido que se deforma ligeramente al aplicarle fuerzas externas.

$P(x_1, x_2, x_3)$ :  $r$  Posición original

$P'(x'_1, x'_2, x'_3)$ :  $r'$  Posición desplazada

DESPLAZAMIENTO:  $u = r' - r = f(x_1, x_2, x_3)$



$$du_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} dx_3$$

$$du_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} dx_3$$

$$du_3 = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} dx_3$$

$$\varepsilon_{ij} \equiv \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

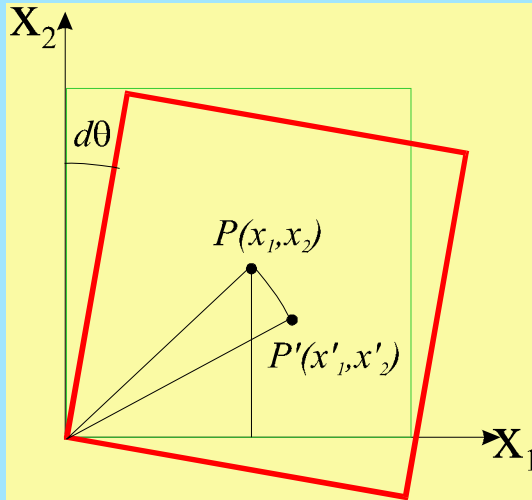
$$\begin{pmatrix} du_1 \\ du_2 \\ du_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ dx_3 \end{pmatrix}$$

¿Este tensor  $\varepsilon_{ij}$  representa **siempre** una deformación del sólido en el punto P?

**¡¡NO!!**

Puede ser una rotación

# Desplazamiento en una rotación infinitesimal



Caso sencillo: rotación de ángulo  $d\theta$  alrededor del eje  $x_3$

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(d\theta) & \text{sen}(d\theta) & 0 \\ -\text{sen}(d\theta) & \cos(d\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \cong \begin{pmatrix} 1 & d\theta & 0 \\ -d\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 d\theta \\ x_2 - x_1 d\theta \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 d\theta \\ x_2 - x_1 d\theta \\ x_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \\ 0 \end{pmatrix} d\theta$$

$$\varepsilon_{12} \equiv \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = d\theta = -\frac{\partial u_2}{\partial x_1} \equiv \varepsilon_{21}$$

## DEFINIMOS EL TENSOR DE DEFORMACIONES

$$e_{ij} \equiv \left( \frac{1}{2} \right) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Incremento relativo de volumen:

$$\delta \equiv \frac{\Delta V}{V} = e_{11} + e_{22} + e_{33}$$

- \* Sin dimensiones físicas
- \* Representa verdaderas deformaciones (excluye rotación)
- \* Es simétrico
- \* Kittel y nosotros no aplicamos el factor 1/2 cuando  $i \neq j$
- \*  $e_{ii}$  = deformaciones axiales (o normales)
- \*  $e_{ij}$  = deformaciones de cizalladura (o de corte)
- \* deformación homogénea: si  $e_{ij}$  son iguales en todos puntos

# Tensor de deformaciones en coordenadas cilíndricas y esféricas

Se obtienen por las técnicas usuales en cálculo vectorial diferencial (gradiente, divergencia, rotacional,...)

Elemento de longitud: cilíndricas

$$dl = dr \mathbf{i}_r + r d\varphi \mathbf{i}_\varphi + dz \mathbf{i}_z$$

esféricas

$$dl = dr \mathbf{i}_r + r d\theta \mathbf{i}_\theta + r \sin \theta d\varphi \mathbf{i}_\varphi$$

Vector desplazamiento, cilíndricas

$$\mathbf{u} = u_r \mathbf{i}_r + u_\varphi \mathbf{i}_\varphi + u_z \mathbf{i}_z \Rightarrow du = du_r \mathbf{i}_r + u_r d\mathbf{i}_r + du_\varphi \mathbf{i}_\varphi + u_\varphi d\mathbf{i}_\varphi + du_z \mathbf{i}_z + u_z d\mathbf{i}_z$$

Pero:

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_r = \cos \varphi \mathbf{i}_x + \sin \varphi \mathbf{i}_y &\Rightarrow d\mathbf{i}_r = -\sin \varphi d\varphi \mathbf{i}_x + \cos \varphi d\varphi \mathbf{i}_y = d\varphi \mathbf{i}_\varphi \\ \mathbf{i}_\varphi = -\sin \varphi \mathbf{i}_x + \cos \varphi \mathbf{i}_y &\Rightarrow d\mathbf{i}_\varphi = -\cos \varphi d\varphi \mathbf{i}_x - \sin \varphi d\varphi \mathbf{i}_y = -d\varphi \mathbf{i}_r \end{aligned}$$

$$\mathbf{u} = u_r \mathbf{i}_r + u_\varphi \mathbf{i}_\varphi + u_z \mathbf{i}_z \Rightarrow du = (du_r - u_\varphi d\varphi) \mathbf{i}_r + [du_\varphi + u_r d\varphi] \mathbf{i}_\varphi + du_z \mathbf{i}_z$$

El tensor  $u_{ij}$  se obtiene dividiendo un desplazamiento  $du$  en la dirección  $i$  por un elemento de longitud  $dl$  en la  $j$ :

Ejemplos (cilíndricas):

$$e_{rr} \equiv \left( \frac{(du)_r}{(dl)_r} \right)_{\varphi, z = \text{ctes}} = \frac{du_r - u_\varphi d\varphi}{dr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} \quad (d\varphi = 0)$$

$$e_{r\varphi} \equiv \frac{(du)_r}{(dl)_\varphi} + \frac{(du)_\varphi}{(dl)_r} = \left( \frac{du_r - u_\varphi d\varphi}{rd\varphi} \right)_{r,z} + \left( \frac{du_\varphi + u_r d\varphi}{dr} \right)_{\varphi,z} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi}{r} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} \quad \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0 \right)$$

**Resultado** ( de Landau: en la notación de Kittel el factor 2 no se pone y  $u_{ij} \equiv e_{ij}$ )

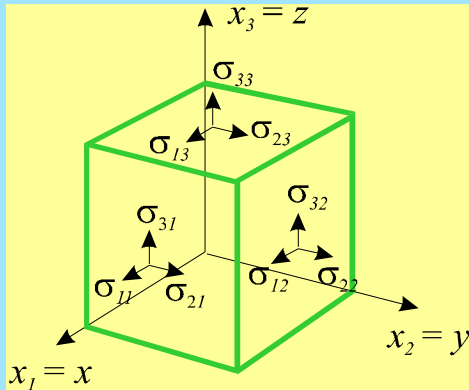
Cilíndricas

$$\begin{aligned} u_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad u_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r}, \quad u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \\ 2u_{\varphi z} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial z}, \quad 2u_{rz} = \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}, \\ 2u_{r\varphi} &= \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Esféricas

$$\begin{aligned} u_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad u_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r}, \quad u_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta + \frac{u_r}{r}, \\ 2u_{\theta\varphi} &= \frac{1}{r} \left( \frac{\partial u_\varphi}{\partial \theta} - u_\varphi \operatorname{ctg} \theta \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \varphi}, \quad 2u_{r\theta} = \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}, \\ 2u_{r\varphi} &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r}. \end{aligned}$$

# Tensor de esfuerzos (o tensiones)



Consideremos un **cubo infinitesimal** con aristas paralelas a los ejes  $x_1=x$ ,  $x_2=y$ ,  $x_3=z$

$$\sigma_{ij} = \frac{F_i}{A_j}; \quad [\sigma_{ij}] = \frac{\text{fuerza}}{\text{área}} \Rightarrow Pa = \frac{N}{m^2}$$

$\sigma_{ij} \equiv$  Fuerza en la dirección  $i$  aplicada sobre la cara normal a la dirección  $j$ , dividida por el área de dicha cara

En equilibrio:  $\sum F_i = 0$  y  $\sum M_i = 0 \Rightarrow \sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

*Tensor simétrico: diagonalizable  $\Rightarrow$  existen tres ejes perpendiculares en los que sólo  $\sigma_{ii} \neq 0$*

Presión hidrostática:

$$P = -\frac{1}{3}(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) = -\frac{1}{3}Tr\sigma$$

# Ley de Hooke: Constantes elásticas

Tensores 3x3

vectores 6 dim

Notación simplificada:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_4 & \sigma_5 \\ \sigma_4 & \sigma_2 & \sigma_6 \\ \sigma_5 & \sigma_6 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

$$(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6)$$

$$\sigma_1 \equiv \sigma_{11}; \sigma_2 \equiv \sigma_{22}; \sigma_3 \equiv \sigma_{33}; \sigma_4 \equiv \sigma_{12}; \sigma_5 \equiv \sigma_{13}; \sigma_6 \equiv \sigma_{23}$$

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} e_1 & e_4 & e_5 \\ e_4 & e_2 & e_6 \\ e_5 & e_6 & e_3 \end{pmatrix}$$

$$(e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6)$$

$$e_1 \equiv e_{11}; e_2 \equiv e_{22}; e_3 \equiv e_{33}; e_4 \equiv e_{12}; e_5 \equiv e_{13}; e_6 \equiv e_{23}$$

Ley de Hooke (“definición de sólido”). Para  $e_i \ll 1$  se cumple:

$$e_i = \sum_{j=1}^6 S_{ij} \sigma_j$$

$C_{ij}$  = ctes elásticas de rigidez:

Inversamente:

$$\sigma_i = \sum_{j=1}^6 C_{ij} e_j$$

$S_{ij}$  = ctes elásticas de flexibilidad

$$(S_{ij}) = (C_{ij})^{-1}$$

$$\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix}$$

# Energía elástica

Energía por unidad de volumen:  
(Taylor,  $e_i \ll 1$ , y no hay término lineal porque  $e_i = 0$  es equilibrio en ausencia de esfuerzos)

$$U = U(e_1, \dots, e_6) \cong U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 C_{ij} e_i e_j + \dots; \quad C_{ij} = \left[ \frac{\partial^2 U}{\partial e_i \partial e_j} \right]_{e_i=0} = C_{ji}$$

⇒ 21 elementos independientes

Los esfuerzos se obtienen de U:

$$\sigma = + \nabla U \quad (+ \text{ porque es fuerza externa sobre el sistema})$$

$$\sigma_i = + \frac{\partial U}{\partial e_i} = \sum_{i=1}^6 C_{ij} e_j \Leftrightarrow \text{ley de Hooke}$$

**Simetría:** Eligiendo los ejes de coordenadas paralelos a los de simetría se reduce el número de elementos independientes: **la energía no puede cambiar al aplicar los elementos de simetría.**

Ejemplos (ejercicio: demostrarlos):

\*\* Monocristal ortorrómbico: Todos nulos excepto  $C_{ii}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{23}$  y  $C_{13} \Rightarrow 9$  ctes indeptes

\*\* Monocristal cúbico: además  $C_{11} = C_{22} = C_{33}$ ,  $C_{44} = C_{55} = C_{66}$  y  $C_{12} = C_{13} = C_{23}$  (3 ctes)

\*\* Sólido isótropo (amorfo o policristalino): además  $2 C_{44} = C_{11} - C_{12}$  (2 ctes indeptes, se verá luego)

Constantes elásticas de  
un **monocristal cúbico** ⇒

Ejercicio: Obtener la matriz  $S_{ij}$   
(inversa de  $C_{ij}$ )

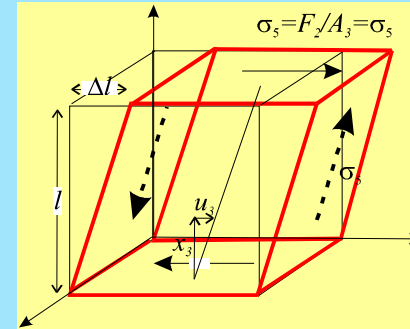
$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix}$$

# Algunos resultados interesantes con pequeñas deformaciones homogéneas ( $e_{ij} = \text{cte} \ll 1$ ) para monocristales cúbicos y amorfos

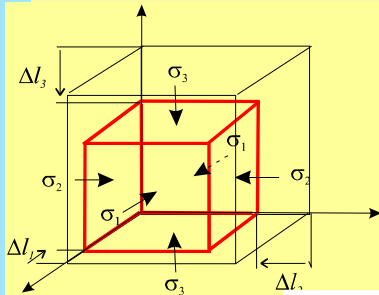
Ejemplo 1: Deformación uniforme por cizalladura pura :

$$u_1 = u_3 = 0; u_2 = x_3 \operatorname{tg} \varphi; e_5 \equiv e_{23} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} = \operatorname{tg} \varphi = \frac{\Delta l}{l}$$

$$\sigma_5 = C_{44} e_5 = C_{44} \frac{\Delta l}{l} \equiv G e_5 \Leftrightarrow C_{44} \equiv G : \text{módulo de rigidez}$$



Ejemplo 2: Presión hidrostática:  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -P; \sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0$



$$e_1 = -\frac{\Delta l_1}{l_1}; e_2 = -\frac{\Delta l_2}{l_2}; e_3 = -\frac{\Delta l_3}{l_3} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{(l_1 - \Delta l_1)(l_2 - \Delta l_2)(l_3 - \Delta l_3) - l_1 l_2 l_3}{l_1 l_2 l_3} \approx -\left(\frac{\Delta l_1}{l_1} + \frac{\Delta l_2}{l_2} + \frac{\Delta l_3}{l_3}\right) = e_1 + e_2 + e_3 =$$

$$(S_{11} + 2S_{12})\sigma_1 + (S_{11} + 2S_{12})\sigma_2 + (S_{11} + 2S_{12})\sigma_3 = -3(S_{11} + 2S_{12})P$$

$$\kappa_T \equiv \frac{1}{B} \equiv -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \approx -\frac{\Delta V}{VP} = 3(S_{11} + 2S_{12}) = \frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} > 0$$

$\kappa_T$  = compresibilidad;  $B$  = módulo volumétrico

Ejemplo 3: Esfuerzo uniaxial:

$\sigma_1 = \sigma_3 = \sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0; \sigma_2 > 0$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix}$$

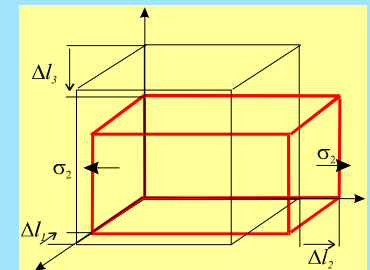
$$e_4 = e_5 = e_6 = 0;$$

$$e_2 = S_{11} \sigma_2 = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}^3 + 2C_{12}^3 - 3C_{11}C_{12}^2} \sigma_2 \equiv \frac{\sigma_2}{Y} \Rightarrow$$

$$\frac{1}{Y} = \frac{C_{11}^2 - C_{12}^2}{C_{11}^3 + 2C_{12}^3 - 3C_{11}C_{12}^2} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{12}^2}$$

$$e_1 = e_3 = S_{12} \sigma_2 = \frac{(C_{12} - C_{11})C_{12}}{C_{11}^3 + 2C_{12}^3 - 3C_{11}C_{12}^2} \sigma_2 (< 0 \text{ casi siempre})$$

$$\nu \equiv -\frac{e_3}{e_2} = \frac{(C_{11} - C_{12})C_{12}}{C_{11}^2 - C_{12}^2} = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{Razón de Poisson} < 0.5)$$



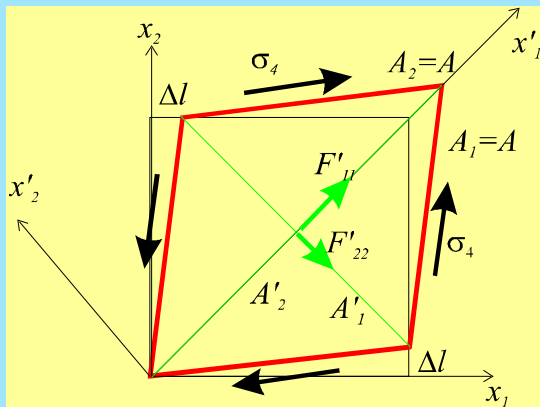
Demostrar que:  $B = \frac{Y}{3(1-2\nu)}$



# Sólido isótropo: amorfo o policristalino.

## Demostración de que $2C_{44}=C_{11}-C_{12}$

Consideremos un **cuco de sólido isótropo** sometido a las tensiones  $\sigma_4 = \sigma_{12} = \sigma_{21}$ ,  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0$  (cizalladura pura)



$$F_{21} = \sigma_{21}A_1 = \sigma_4 A; F_{12} = \sigma_{12}A_2 = F_{21} = \sigma_4 A$$

Consideremos los ejes  $x'_1, x'_2$ , rotados  $45^\circ$ . Consideremos los esfuerzos sobre las diagonales del cuco: **son axiales**

$$F'_{11} = 2F_{21} \cos 45^\circ; \sigma'_1 = \frac{F'_{11}}{A'_1} = \frac{2\sigma_4 A / \sqrt{2}}{\sqrt{2}A} = \sigma_4 = C_{44}e_4 = Ge_4;$$

$$F'_{22} = -2F_{21} \cos 45^\circ; \sigma'_2 = \frac{F'_{22}}{A'_2} = -\sigma_4 \text{ (compresión)}$$

Por otro lado las deformaciones en el sistema de ejes  $x_1, x_2, x_3$  son  $e_1 = e_2 = e_3 = e_5 = e_6 = 0, e_4 = 2\Delta l/l$ ,

Y en el sistema  $x'_1, x'_2, x'_3$  son:

$$\begin{pmatrix} \sigma'_1 \\ \sigma'_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_4 \\ -\sigma_4 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{44}e_4 \\ -C_{44}e_4 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_4/2 \\ -e_4/2 \\ e'_3 \\ e'_4 \\ e'_5 \\ e'_6 \end{pmatrix}$$

$$e'_1 = \frac{\Delta l \sqrt{2}}{l \sqrt{2}} = \frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{2}e_4$$

$$e'_2 = -\frac{\Delta l \sqrt{2}}{l \sqrt{2}} = -\frac{\Delta l}{l} = -\frac{1}{2}e_4$$

$$e'_3 = e'_4 = e'_5 = e'_6 = 0 \text{ (para este caso particular)}$$

$$\Rightarrow C_{44} = (C_{11} - C_{12})/2 > 0$$

Es decir para un **sólido isótropo** hay **2 ctes elásticas independientes  $Y$  y  $\nu$**

Todas las demás dependen de  $Y$  y  $\nu$ , por ejemplo:

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

# Ondas elásticas en un monocristal cúbico

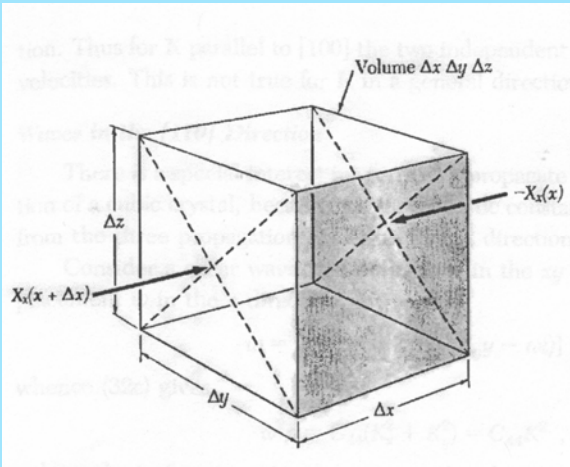
Consideremos un **cubo infinitesimal** con aristas paralelas a los ejes de lados  $\Delta x_1 (\equiv \Delta x)$ ,  $\Delta x_2 (\equiv \Delta y)$ ,  $\Delta x_3 (\equiv \Delta z)$ .

1) *Los esfuerzos en caras opuestas están relacionados por (serie de Taylor):*

$$\sigma_{11}(x + \Delta x) = \sigma_{11}(x) + \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} \Delta x + \dots$$

$$\sigma_{12}(y + \Delta y) = \sigma_{12}(y) + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial y} \Delta y + \dots$$

$$\sigma_{13}(z + \Delta z) = \sigma_{13}(z) + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} \Delta z + \dots$$



2) Fuerza total sobre el cubo:

$$F_1 \equiv F_x = [\sigma_{11}(x + \Delta x) - \sigma_{11}(x)]\Delta y\Delta z + [\sigma_{12}(y + \Delta y) - \sigma_{12}(y)]\Delta x\Delta z + [\sigma_{13}(z + \Delta z) - \sigma_{13}(z)]\Delta x\Delta y = \left( \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} \right) \Delta x\Delta y\Delta z$$

3) 2ª ley de Newton ( $u_i =$  desplazamiento en la dirección  $x_i$ ):

$$\left( \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} \right) \Delta x\Delta y\Delta z = \rho \Delta x\Delta y\Delta z \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$$

4) Ley de Hooke:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial e_{11}}{\partial x} + C_{12} \left( \frac{\partial e_{22}}{\partial x} + \frac{\partial e_{33}}{\partial x} \right) + C_{44} \left( \frac{\partial e_{12}}{\partial y} + \frac{\partial e_{13}}{\partial z} \right)$$

5) Usamos la definición de  $e_{ij}$ :  
y escribimos las ecuaciones  
para las tres componentes de  $\mathbf{u}$ :

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

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= C_{11} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x \partial z} \right) \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= C_{11} \frac{\partial^2 u_2}{\partial y^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial y \partial z} \right) \\ \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} &= C_{11} \frac{\partial^2 u_3}{\partial z^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial y \partial z} \right) \end{aligned}$$

**Ondas longitudinales** : Probemos solución en forma de ondas que se propagan en la dirección [100], con desplazamiento en  $x$ :  $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ ,  $k = 2\pi/\lambda$  :

$$u_1 = u_0 e^{i(kx - \omega t)}; u_2 = u_3 = 0$$

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = -k^2 u_0 e^{i(kx - \omega t)} = -k^2 u_1(x, t); \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = -\omega^2 u_0 e^{i(kx - \omega t)} = -\omega^2 u_1(x, t) \Rightarrow -\omega^2 \rho u_1 = -k^2 C_{11} \Leftrightarrow$$

$$v_L = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \quad \left( \text{¡¡NO } \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \text{!!} \right)$$

**Ondas transversales**: se propagan en la dirección [100], con desplazamiento en  $y$  (o análogamente en la  $z$ )  $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ ,  $k = 2\pi/\lambda$  :

$$\frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} = -k^2 u_2(x, t); \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = -\omega^2 u_2(x, t) \Rightarrow -\omega^2 \rho u_2 = -k^2 C_{44} \Leftrightarrow$$

$$u_2 = u_0 e^{i(kx - \omega t)}; u_1 = u_3 = 0$$

$$v_T = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$$

**Ondas en la dirección [110]**  $k = (1,1,0)k/\sqrt{2}$  ,  $k = 2\pi/\lambda$

a) Transversales con  $u$  en la dirección z:  $u = (0,0,u_3)$

$$\frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = -\omega^2 u_3(x,t)$$

$$\frac{\partial^2 u_3(x,y,t)}{\partial x^2} = -k_x^2 u_0 e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)} = -k_x^2 u_3(x,t) = -\frac{1}{2} k^2 u_3;$$

$$\frac{\partial^2 u_3(x,y,t)}{\partial y^2} = -k_y^2 u_0 e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)} = -k_y^2 u_3(x,t) = -\frac{1}{2} k^2 u_3;$$

$$\frac{\partial^2 u_3(x,y,t)}{\partial x \partial y^2} = -k_x k_y u_0 e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)} = -\frac{1}{2} k^2 u_3;$$

$$\Rightarrow -\omega^2 \rho u_3 = -k^2 C_{44} u_3 \Leftrightarrow$$

$$u_3 = u_0 e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)}; u_2 = u_1 = 0$$

$$v_{Tz}[110] = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} = v_T[100]$$

b) Longitudinales o transversales con  $u$  en el plano XY z:  $u = (u_1, u_2, 0)$

$$u_1(x,y,t) = u_{10} e^{i[k(x+y)/\sqrt{2} - \omega t]}$$

$$u_2(x,y,t) = u_{20} e^{i[k(x+y)/\sqrt{2} - \omega t]}$$

*Calculando las 2as derivadas y sustituyendo:*

$$-\omega^2 \rho u_1 = -k^2 \frac{1}{2} [(C_{11} + C_{44})u_1 + (C_{12} + C_{44})u_2]$$

$$-\omega^2 \rho u_3 = -k^2 \frac{1}{2} [(C_{11} + C_{44})u_3 + (C_{12} + C_{44})u_1]$$

El sistema homogéneo tiene solución si:

$$\begin{vmatrix} -\frac{2\omega^2}{k^2}\rho + (C_{11} + C_{44}) & (C_{12} + C_{44}) \\ (C_{12} + C_{44}) & -\frac{2\omega^2}{k^2}\rho + (C_{11} + C_{44}) \end{vmatrix} = 0$$

Es decir si:

$$\left[ -\frac{2\omega^2}{k^2}\rho + \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44}) \right]^2 - \frac{1}{4}(C_{12} + C_{44})^2 = 0$$

Soluciones: 1)

2)

$$\frac{\omega^2}{k^2}\rho = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44}) \Rightarrow v_1 = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}$$

$$\frac{\omega^2}{k^2}\rho = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \Rightarrow v_2 = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}$$

Obtenemos los **desplazamientos** correspondientes llevando 1) o 2) al sistema :

$$1) \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})u_1 = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})u_1 + \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})u_2 \Rightarrow u_2 = u_1$$

Es decir, el vector  $\mathbf{u}$  ( $u_1, u_1, 0$ ) tiene la misma dirección que  $\mathbf{k}$  : **onda longitudinal**

$$2) \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})u_1 = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})u_1 + \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})u_2 \Rightarrow u_2 = -u_1 \quad v_L[110] = v_1 = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}$$

$\mathbf{u}$  ( $u_1, -u_1, 0$ )  $\perp$   $\mathbf{k}$  ( $k/\sqrt{2}, k/\sqrt{2}, 0$ ) : **onda transversal, polarizada en el plano XY**

$$v_{Ty}[110] = v_2 = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}$$

Cuando la dirección de propagación no es un eje de simetría (ej. [235]) hay 3 modos de polarización pero **no son longitudinales ni transversales** (el vector  $\mathbf{u}$  no es paralelo ni perpendicular a  $\mathbf{k}$  en ninguna de las soluciones).

# Sólido isótropo

Hemos visto que además de  $B = \frac{Y}{3(1-2\nu)}$

Se cumple:  $C_{44} = (C_{11} - C_{12})/2 > 0 \Leftrightarrow G = \frac{Y}{2(1+\nu)}$

2 Ctes elásticas indeptes:  $C_{11}$  y  $C_{44}$  o bien  $Y$  y  $\nu$ ,  $G$  e  $Y$ , etc

$\lambda \equiv C_{12}$ ,  $\mu \equiv C_{44}$ : ctes elásticas "de Lamé" (otra notación equivalente)

Las velocidades de las ondas elásticas en cualquier dirección son

$$v_L = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} = \sqrt{\frac{Y(1-\nu)}{\rho(1+\nu)(1-2\nu)}} \left( = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \text{ si } \nu = 0 \right) \quad v_T = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} = \sqrt{\frac{G}{\rho}} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$$

**Problema de elasticidad:** Dadas unas tensiones aplicadas a las superficies externas del cuerpo y una fuerza externa aplicada (ej: gravedad) determinar los desplazamientos  $\mathbf{u}$  y las tensiones  $\sigma_{ij}$  en un punto cualquiera del cuerpo **en equilibrio**

## Condiciones de equilibrio

Fuerza sobre un volumen  $V$  del cuerpo

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{int} + \mathbf{F}_{ext}$$

$$F_{int,x} = \int_A (\sigma_{11}n_x + \sigma_{12}n_y + \sigma_{13}n_z) dA \equiv \int_A (\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}) \cdot d\mathbf{A} \stackrel{\text{Gauss}}{=} \int_V \left( \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} \right) dV \equiv \int_V f_x dV$$

$f \equiv$  fuerza interna por unidad de volumen =  $dF/dV$  para un volumen infinitesimal  $dV$

La ecuación anterior debe cumplirse para las tres componentes y cualquier volumen, incluso uno infinitesimal, luego

$$f_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$$

Equilibrio:  $f_i + f_{i,ext} = 0 \Leftrightarrow \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \rho g \delta_{i3} = 0$  (caso  $f_{ext} =$  gravedad)

Sustituyendo en función de los desplazamientos mediante l. de Hooke y operando la condición de equilibrio se puede expresar en forma vectorial "sencilla":

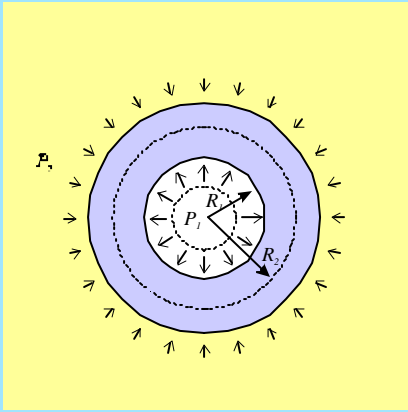
$$\mu \nabla^2 \mathbf{u}(x, y, z) + (\lambda + \mu) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} = 0$$

O en función de  $Y$  y  $\nu$ :

$$\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{1-2\nu} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \frac{2(1+\nu)}{Y} \rho \mathbf{g} = 0$$

Similares a la ec. Poisson en la electrostática

# Ejemplo: Esfera hueca con presión interior y exterior



Supongamos una esfera hueca que en ausencia de tensiones tiene radio interior  $R_1$  y exterior  $R_2$ . Se aplica una presión  $p_1$  en el interior y  $p_2$  en el exterior. Determinar los desplazamientos, los radios finales y las tensiones.

## Solución:

Tomemos coordenadas esféricas:

Por simetría  $\mathbf{u}$  es radial y depende de  $r$ .  $\mathbf{u} = u(r)\mathbf{i}_r \Rightarrow \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 u)}{dr}$ ;  $\nabla \times \mathbf{u} = 0$

Escribamos la ec de equilibrio usando la identidad vectorial:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla^2 \mathbf{u} = 0 \Rightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) = \nabla^2 \mathbf{u}$$

$$\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{1-2\nu} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) = \left(1 + \frac{1}{1-2\nu}\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \Rightarrow (\nabla \cdot \mathbf{u}) = cte \equiv 3A$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 u)}{dr} = 3A \Rightarrow \frac{d(r^2 u)}{dr} = 3r^2 A \Rightarrow r^2 u(r) = Ar^3 + B \Rightarrow$$

$$u(r) = Ar + \frac{B}{r^2}$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla^2 \mathbf{u} \Rightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) = \nabla^2 \mathbf{u}$$

Tensor de deformación

(los demás elementos nulos)

$$e_{\theta\theta}(r) \equiv \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} = e_2 = A + \frac{B}{r^3};$$

$$e_{rr}(r) \equiv \frac{\partial u_r}{\partial r} \equiv e_1 = A - \frac{2B}{r^3};$$

$$e_{\varphi\varphi}(r) \equiv \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_\theta}{r} \cot \theta + \frac{u_r}{r} = e_{\theta\theta}(r) = e_3 = A + \frac{B}{r^3};$$

Tensor de tensiones:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix}$$

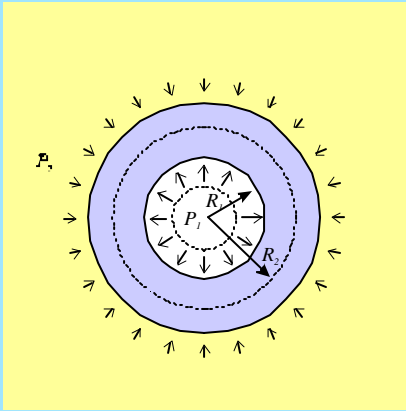
$$\sigma_1(r) \equiv \sigma_{rr}(r) = C_{11}e_1 + 2C_{12}e_2 = C_{11} \left( A - \frac{2B}{r^3} \right) + 2C_{12} \left( A + \frac{B}{r^3} \right) = \frac{Y}{1-2\nu} A - \frac{2Y}{1+\nu} \frac{B}{r^3}$$

Condiciones de contorno: para  $R = R_1$   $\sigma_{rr} = -P_1$  y para  $r = R_2$   $\sigma_{rr} = -P_2$

$$\sigma_2(r) \equiv \sigma_{\theta\theta}(r) = \sigma_3(r) \equiv \sigma_{\varphi\varphi}(r) = C_{11}e_1 + 2C_{12}e_2 = \dots$$



## Ejemplo: Esfera hueca con presión interior y exterior II



Sustituyendo las condiciones de contorno queda:

$$\sigma_1(R_1) \equiv \sigma_{rr}(R_1) = \frac{Y}{1-2\nu} A - \frac{2Y}{1+\nu} \frac{B}{R_1^3} = -p_1$$

$$\sigma_1(R_2) \equiv \sigma_{rr}(R_2) = \frac{Y}{1-2\nu} A - \frac{2Y}{1+\nu} \frac{B}{R_2^3} = -p_2$$

Sistema de 2 ecuaciones  
para obtener A y B

Resolviendo:

$$A = \frac{p_1 R_1^3 - p_2 R_2^3}{R_2^3 - R_1^3} \frac{1-2\nu}{Y} \quad B = \frac{R_1^3 R_2^3 (p_1 - p_2)}{R_2^3 - R_1^3} \frac{1+\nu}{2Y}$$

Lo que da finalmente todas las tensiones, deformaciones y desplazamientos sustituyendo A y B por su valor

**Algunos casos particulares** interesantes (Obtener la solución explícita):

- Globo hinchado: espesor  $h \equiv R_2 - R_1 \ll R_1$
- Esfera maciza sometida a presión exterior ( $R_1 \rightarrow 0$ )
- Hueco esférico en un sólido infinito sometido a una presión exterior  $p$  ( $p_1 = 0$ ,  $p_2 = p$ ,  $R_2 \gg R_1$ )

**Se propone estudiar similarmente:**

- \* tubo cilíndrico largo con presión interior y exterior
- \* esfera bajo la acción de su propia gravedad (la Tierra, supuesta sólida)

# Solución numérica de problemas de contorno: Diferencias finitas I

Problema de contorno: encontrar una función  $\Phi(x,y)$  que satisfice cierta ec. diferencial parcial y toma valores dados en un contorno

Pasos:

1) Discretizar: tomar una rejilla

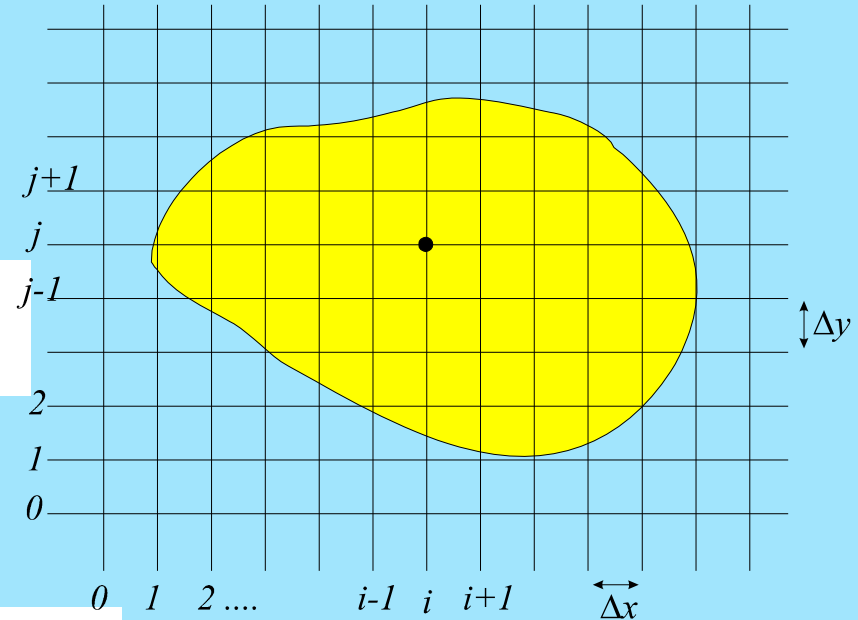
2) Aproximación de derivadas por diferencias finitas

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} \cong \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_{i,j} \cong \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} \cong \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{\Delta x^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_{i,j} \cong \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{\Delta y^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}\right)_{i,i} \cong \frac{\phi_{i+1,j+1} + \phi_{i-1,j-1} - \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j+1}}{4\Delta x \Delta y}$$



3) Sustituyendo en la ec. diferencial queda un sistema de ecuaciones algebraicas: datos= puntos del contorno, incógnitas: los demás puntos

4) Ejemplo: Ecuación de Laplace:  $\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right) = 0 \Rightarrow \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{\Delta y^2} \cong 0$

## Solución numérica de problemas de contorno: Diferencias finitas II

5) Resolver el sistema de muchas ecuaciones. Métodos eficientes iterativos

Para la ec. de Laplace un método simple y eficiente es el de Gauss-Seidel.

Tomando  $\Delta x = \Delta y$  se tiene el sistema:

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4} (\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1})$$

- Se dan los valores de  $\Phi$  conocidos en el contorno y valores arbitrarios en los demás puntos
- Se calculan en todos los puntos unos nuevos valores usando la ecuación y poniendo en la parte de la derecha los datos anteriores.
- Se repite el número de veces necesario hasta que los valores no cambien apreciablemente en ningún punto: Entonces satisfacen la ecuación y las condiciones de contorno.

# Solución numérica de problemas de contorno: Ec de Laplace

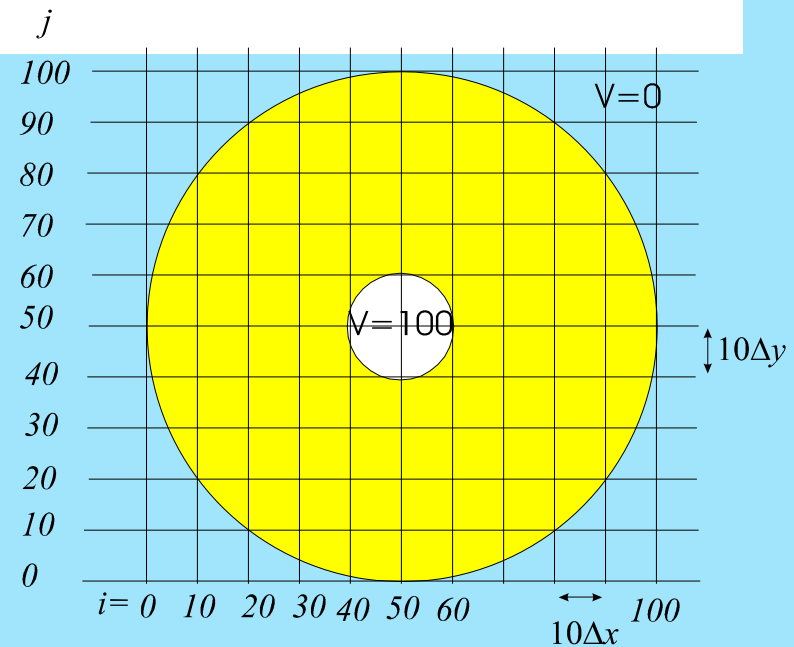
Sea el siguiente problema: Se tiene un cilindro de radio  $a$  a potencial  $100\text{ V}$  y otro de radio  $b = 5a$  a  $0\text{ V}$ . Encontrar el potencial en cualquier punto a distancia  $r$  del centro.

Tiene solución analítica elemental, pero precisamente lo usamos como test del método de diferencias finitas. Incluso por diferencias finitas sería más eficiente programarlo en coordenadas cilíndricas pero vamos a hacerlo en cartesianas para apreciar la capacidad de método en un contorno arbitrario.

1) Se ha discretizado en una rejilla de  $101 \times 101$  puntos. Por claridad del dibujo la figura muestra una rejilla 10 veces mayor que la realmente usada para el cálculo.

La distancia de un punto  $(i, j)$  al centro es  $r^2 = (50-i)^2 + (50-j)^2$  unidades de  $\Delta x = \Delta y$ .

2) Se dan fijos  $V = 100$  para  $r \leq 10$  (zona blanca) y  $V = 0$  para  $r \geq 50$  (zona azul)



# Laplace II

Mediante el programa Laplagr y después de 2000 iteraciones por el método de Gauss-Seidel se obtienen valores en los puntos del dibujo anterior (no se dan los 10201 valores por ahorrar espacio)

$j \setminus i = 0$	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	0.00	0.00	0.00	7.07	11.94	13.74	11.95	7.07	0.00	0.00
20	0.00	0.00	10.23	20.05	27.99	31.18	28.00	20.06	10.24	0.00
30	0.00	7.07	20.05	34.78	49.09	55.83	49.10	34.80	20.07	7.07
40	0.00	11.94	27.99	49.09	77.38	100.00	77.38	49.10	28.01	11.96
50	0.00	13.74	31.18	55.83	100.00	100.00	100.00	55.84	31.19	13.75
60	0.00	11.95	28.00	49.10	77.38	100.00	77.38	49.11	28.01	11.96
70	0.00	7.07	20.06	34.80	49.10	55.84	49.11	34.81	20.08	7.08
80	0.00	0.00	10.24	20.07	28.01	31.19	28.01	20.08	10.24	0.00
90	0.00	0.00	0.00	7.07	11.96	13.75	11.96	7.08	0.00	0.00
100	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

El cálculo analítico exacto es  $V(r) = 100 \ln(50/r)/\ln(50/10)$  lo que da por ejemplo para  $j = 50$  y para cada  $i$  valores que se comparan con los numéricos (dif máxima 2%)

$j \setminus i = 0$	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100		
50	0.00	13.87	31.74	56.93	100.00	100.00	100.00	56.93	31.74	13.87	0.00	Análítico
50	0.00	13.74	31.18	55.83	100.00	100.00	100.00	55.84	31.19	13.75	0.00	Numérico

El **mayor error se debe al pixelado de los contornos** (especialmente el de radio  $a = 10$  cuadros). La precisión mejoraría mucho sin aumentar el tiempo de cálculo si se toman para los puntos cercanos al contorno los incrementos  $\Delta x$  y  $\Delta y$  verdaderos (menores que un cuadrado) que hay hasta los puntos del contorno más próximos, lo que exige unas pocas líneas más de programación.

# Ecuación de la elasticidad en dos dimensiones I

$$\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{1-2\nu} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \frac{2(1+\nu)}{Y} \rho \mathbf{g} = 0$$

La ecuación de la elasticidad, en el caso más general, es más difícil que la de Laplace, pero se puede resolver igualmente por este método.

En cada punto  $(i,j)$  hay dos variables que determinar  $u_x(i,j)$  y  $u_y(i,j)$ .

Usando las aproximaciones de diferencias finitas para las derivadas parciales:

$$\nabla^2 u_x \cong \frac{u_x(i+1, j) + u_x(i-1, j) - 2u_x(i, j)}{\Delta x^2} + \frac{u_x(i, j+1) + u_x(i, j-1) - 2u_x(i, j)}{\Delta y^2}$$

$$[\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u})]_x = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} \cong$$

$$\frac{u_x(i+1, j) + u_x(i-1, j) - 2u_x(i, j)}{\Delta x^2} + \frac{u_y(i+1, j+1) + u_y(i-1, j-1) - u_y(i+1, j-1) - u_y(i-1, j+1)}{4\Delta x \Delta y}$$

# Ecuación de la elasticidad en dos dimensiones II

Las **condiciones de contorno** son valores de  $u_x$  o  $u_y$  (puntos fijados del cuerpo) o tensiones. En el caso de que sean tensiones se incluyen como más ecuaciones. Por ejemplo  $\sigma_{xx}=0$  en  $x=0$  para todo  $y$  se escribe:

$$\sigma_{xx} = 0 \Rightarrow C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{44}e_{xy} = 0$$

Y usando las definiciones de  $e_{ij}$  es una ecuación con derivadas primeras de  $u_x$ ,  $u_y$  que debe satisfacerse en  $x=0$ .

Las derivadas se aproximan por diferencias finitas donde para  $x=0$  ( $i=0$ )

$$e_{xx} \equiv \frac{\partial u_x}{\partial x} \cong \frac{u_x(1, j) - u_x(0, j)}{\Delta x} \quad e_{yy} \equiv \frac{\partial u_y}{\partial y} \cong \frac{u_y(0, j+1) - u_y(0, j-1)}{2\Delta y}$$

$$e_{xy} \equiv \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \cong \frac{u_x(0, j+1) - u_x(0, j-1)}{2\Delta y} + \frac{u_y(1, j) - u_y(0, j)}{\Delta x}$$

# Ejemplo: bloque cúbico apoyado en el suelo sin rozamiento

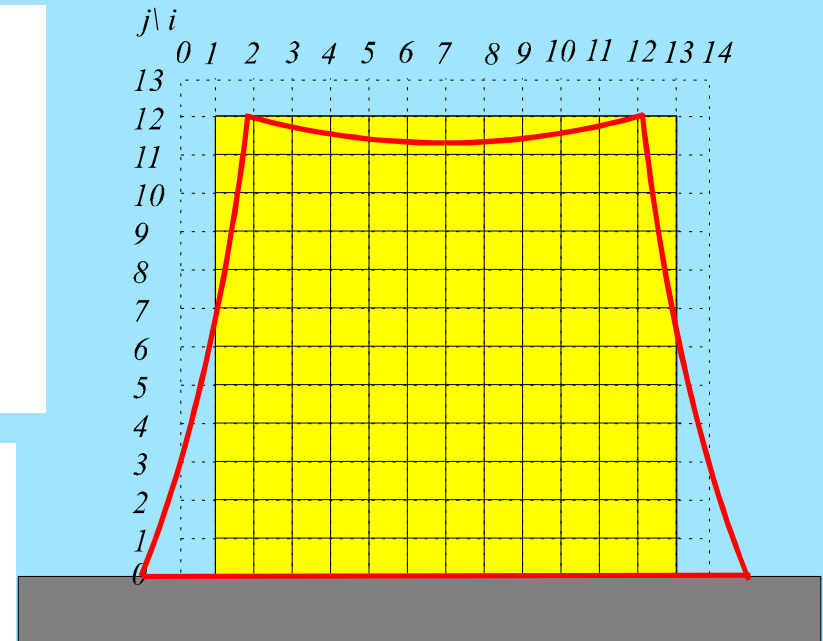
Las **condiciones de contorno** son:

- a) Para  $y = 0$   $u_y(x,0)=0$ ,  $\sigma_{xy}(x,0)=0$ ; b) Para  $y= H$  ( $j=12$ )  $\sigma_{xy}(x,H)=0$ ,  $\sigma_{yy}(x,H)=0$   
c) Para  $x = 0$   $\sigma_{xy}(0,y)=0$ ,  $\sigma_{xx}(0,y)=0$  y d) para  $x = L$ ,  $\sigma_{xy}(L,y)=0$ ,  $\sigma_{xx}(L,y)=0$

Se ha cuadrículado en una rejilla de 12x12 intervalos, añadiendo una casilla ficticia fuera del bloque para poner las condiciones de contorno. Por ejemplo en b)  $\sigma_{yy}(x,H)=0$  se escribe  $u_y(i,13)=u_y(i,12)$ , ya que la derivada de  $u_y$  respecto a  $y$  es cero.

Al depender los valores de  $u_x$  y  $u_y$  de los de 8 vecinos el método de Gauss-Seidel no necesariamente converge. En este caso sí lo hace calculando primero los valores cercanos al suelo (donde  $u_y=0$ ) y cercanos a la línea central (donde  $u_x = 0$  por simetría, esta condición se fija para simplificar).

La línea roja gruesa del dibujo indica la forma final que adopta el bloque (con deformaciones muy exageradas para los valores de  $Y$  y dimensiones usados en la simulación)





# Ejemplo: bloque cúbico apoyado en el suelo sin rozamiento II

Los resultados se han calculado mediante el programa elasti.c, con  $\nu = 0.25$  y  $\Delta x^2 \cdot \rho \cdot g \cdot 2 \cdot (1 + \nu) / Y = 0.1568$  que da los valores  $u_x$  y  $u_y$  en unidades de  $D_x$ , multiplicados por  $10^5$  (son mucho menores que la unidad)

Resultados finales:  $u_x \cdot 1.e5$

j	i=	1	2	3	4	5	6	7
12		991	919	798	632	420	182	0 ...por simetría
11		720	633	515	381	244	125	0
10		466	400	310	216	133	68	0
9		237	196	140	86	47	22	0
8		24	5	-18	-33	-33	-19	0
7		-184	-184	-176	-153	-114	-60	0
6		-401	-383	-344	-283	-202	-105	0
5		-638	-601	-531	-429	-302	-156	0
4		-908	-852	-747	-599	-418	-215	0
3		-1228	-1149	-1002	-801	-558	-286	0
2		-1616	-1508	-1312	-1046	-726	-372	0
1		-2098	-1954	-1694	-1347	-934	-479	0
0		-2715	-2515	-2172	-1722	-1194	-613	0

Resultados finales:  $u_y \cdot 1.e5$

12		-26	-372	-789	-1222	-1650	-1980	-1847
11		-276	-654	-1068	-1478	-1846	-2089	-2081
10		-435	-861	-1276	-1658	-1975	-2178	-2215
9		-531	-998	-1414	-1773	-2055	-2233	-2282
8		-585	-1075	-1489	-1829	-2086	-2246	-2296
7		-608	-1104	-1509	-1831	-2067	-2212	-2259
6		-604	-1090	-1478	-1778	-1995	-2125	-2169
5		-577	-1035	-1395	-1669	-1863	-1980	-2019
4		-527	-939	-1259	-1499	-1667	-1768	-1801
3		-451	-798	-1063	-1260	-1397	-1478	-1505
2		-345	-603	-798	-941	-1040	-1099	-1119
1		-199	-344	-450	-527	-581	-613	-624
0		0	0	0	0	0	0	0

# Solución numérica de la ec. de Schrödinger I

Consideremos la ec de Schroedinger en una dimensión, para una partícula confinada sometida a una energía potencial  $V(x)$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (V(x) - E)\psi = 0$$

1) Vamos a hacer que  $V(x)$  sea el verdadero potencial para  $-a < x < +a$  y que  $V(x) = \text{infinito}$  para  $|x| > a$ , es decir forzamos que  $\psi=0$  fuera del intervalo considerado.

Cuanto mayor tomemos  $a$  más precisa será la solución pero más tiempo de cálculo costará.

2) Discretización Dividimos el intervalo  $[-a, a]$  en  $N+1$  trozos de longitud  $\Delta x$ . Sustituyendo la segunda derivada por su aproximación de diferencias finitas queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i}{\Delta x^2} + (V(x_i) - E)\psi = 0$$

# Solución numérica de la ec. de Schrödinger II

3) Definimos la magnitud sin dimensiones  $U(x) = \frac{2mV(x)}{\hbar^2} \Delta x^2$

Y la constante  $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2} \Delta x^2$

Reordenando la ecuación queda:

$$(2 - U_i - \lambda)\psi_i - \psi_{i+1} - \psi_{i-1} = 0$$

$$U_i \equiv U(x_i) = U(-a + i\Delta x)$$

4) Considerando las  $\psi_i$  como componentes de un vector, esto queda reducido a un problema de autovalores y autovectores de una matriz cuyos elementos diagonales son  $2 - U_i$ , los inmediatamene al lado de la diagonal son  $-1$  y el resto ceros.

El sistema homogéneo de  $N$  ecuaciones lineales tiene solución si y sólo si el determinante es nulo, lo que da los valores posibles de  $\lambda$  y por tanto las energías posibles.

5) Los métodos numéricos son muy eficientes para diagonalizar rápidamente matrices de gran dimensión cuando sólo son distintos de cero los elementos de la diagonal principal y las dos adyacentes.

# Origen microscópico del comportamiento elástico

## Fuerzas interatómicas de enlace

Compresión hidrostática  $\Leftrightarrow B \Leftrightarrow$  acortamiento de las distancias interatómicas,

Cizalladura  $\Leftrightarrow G \Leftrightarrow$  Curvatura o distorsión de los enlaces

Tracción uniaxial  $\Leftrightarrow Y \Leftrightarrow$  Combinación de los dos anteriores

## Ejemplo: Sólidos fcc con enlace de van der Waals

Vimos que la energía (a  $T=0, P=0$ ), (a  $T>0$  hay que contar en cinética y lo que se minimiza es  $G = U - TS + PV$ )

$$U_{tot} = \frac{1}{2} N 4\epsilon \left[ \sum_j \left( \frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^{12} - \sum_j \left( \frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^6 \right]$$

Definimos  $A_6 \equiv \sum_j \frac{1}{p_{ij}^6} = 14.45392; A_{12} \equiv \sum_j \frac{1}{p_{ij}^{12}} = 12.13188;$

Element	$r_{nn}[\text{Å}]$ theory	$r_{nn}[\text{Å}]$ exper.	u[eV] theory	u[eV] exper.	B[10 <sup>9</sup> Pa] theory	B[10 <sup>9</sup> Pa] exper.
Ne	2.99	3.13	-0.027	-0.02	1.81	1.1
Ar	3.71	3.75	-0.089	-0.08	3.18	2.7
Kr	3.98	3.99	-0.120	-0.11	3.46	3.5
Xe	4.34	4.33	-0.172	-0.17	3.81	3.6

Table 3.2: Some properties of inert gas crystals

Equilibrio:

$$\frac{\partial U}{\partial R} = 0 \Rightarrow R_0 / \sigma = 1.09; \quad U_{tot}(R_0) = -8.6 N \epsilon$$

## Compresibilidad

$$B \equiv \frac{1}{k_T} = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_{eq} = -V \left( \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{eq} = \dots = \frac{4\epsilon(A_6)^{5/2}}{\sigma^3(A_{12})^{3/2}}$$