

Wykład 7

Tensory Deformacji i Odkształcenia

Tensory deformacji i odkształcenia

Żeby opisać odkształcenie (deformacje) ciała stałego wprowadźmy kartezjański układ współrzędnych. Przypuśćmy, że po deformacji ciała wszystkie punkty ciała przemieściły się w nowe położenia. Jeżeli dowolny punkt A w wyniku deformacji przemieści się do położenia A' , to przemieszczenie punktu A możemy opisać wprowadzając **wektor przemieszczenia** $\vec{u}(\vec{r})$

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{r}' - \vec{r} , \quad (7.1)$$

gdzie \vec{r} - wektor określający położenie punktu A przed deformacją, \vec{r}' - wektor określający położenie tego samego punktu po deformacji ciała. W ogólnym przypadku wektor przemieszczenia $\vec{u}(\vec{r})$ zależy od położenia punktu A w ciele, czyli zależy od \vec{r} .

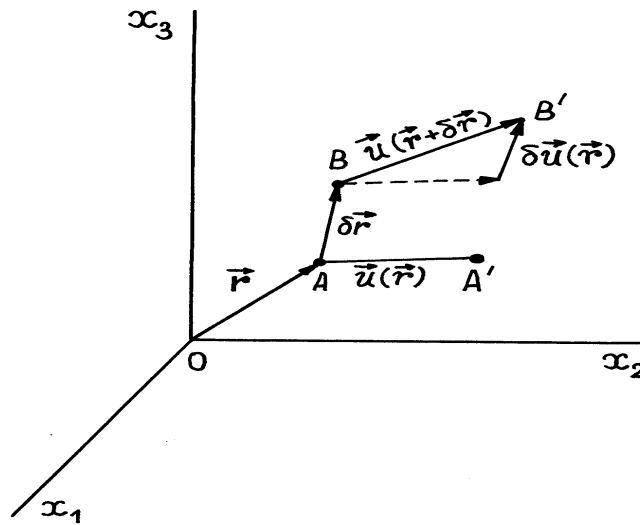
Rozważmy teraz otoczenie punktu A o nieskończenie małej objętości (rys.7.1). Deformację tego małego otoczenia punktu A można traktować jako złożenie trzech ruchów: 1) przemieszczenie punktu A , wspólnie z jego otoczeniem, jako bryły sztywnej w punkt A' ; 2) obrót otoczenia punktu A' , jako bryły sztywnej, dookoła osi przechodzącej przez punkt A' ; 3) zmiana postaci (odkształcenie) otoczenia punktu A' , która składa się ze zmiany jego kształtu i objętości. Wszystkie trzy składowe deformacji ciała (otoczenia punktu) występują łącznie. Przemieszczenie punktu A wraz z otoczeniem określa wektor przemieszczenia (7.1). Natomiast obrót ciała jako całości i jego odkształcenie, jak zobaczymy niżej, określone są przez pochodne wektora przemieszczenia $\vec{u}(\vec{r})$ względem współrzędnych x_i .

Rozważmy dowolny punkt B z otoczenia punktu A położenie którego przed deformacją określa wektor $\vec{r} + \delta\vec{r}$. Jeżeli deformacje ciała są małe, to korzystając z rozwinięcia Taylora, składowe wektora deformacji $\vec{u}(\vec{r} + \delta\vec{r})$ punktu B możemy zapisać w postaci

$$u_i(\vec{r} + \delta\vec{r}) = u_i(\vec{r}) + \sum_{j=1,2,3} \frac{\partial u_i(\vec{r})}{\partial x_j} \cdot \delta x_j = u_i(\vec{r}) + e_{ij} \cdot \delta x_j . \quad (7.2)$$

Tu przez e_{ij} oznaczyliśmy

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i(\vec{r})}{\partial x_j} . \quad (7.3)$$



Rys.7.1. Deformacja otoczenia punktu A

Ze wzoru (7.2) wynika, że składowe wektora przemieszczenia $\delta\vec{u}$ punktu B względem wybranego punktu A wynoszą

$$\delta u_i = u_i(\vec{r} + \delta\vec{r}) - u_i(\vec{r}) = e_{ij} \cdot \delta x_j . \quad (7.4)$$

W ogólnym przypadku wielkości e_{ij} są funkcjami współrzędnych x_i punktu A przed deformacją. Deformacje będziemy nazywali **jednorodnymi** jeżeli wielkości e_{ij} są stałe i nie zależą od współrzędnych x_i rozważanego punktu ciała.

W przypadku deformacji jednorodnej są słuszne twierdzenia:

- 1) punkty znajdujące się na jednej płaszczyźnie, po deformacji znajdują się również na jednej płaszczyźnie.
- 2) trzy punkty leżące na linii prostej przed deformacją ciała, po deformacji leżą również na linii prostej, która na ogół różni się od linii pierwotnej;
- 3) linie równoległe pozostają po deformacji ciała równoległymi względem siebie;
- 4) linie proste wykreślone w tym samym kierunku ulegają skróceniu lub wydłużeniu w tym samym stosunku;

5) punkty znajdujące się na powierzchni drugiego stopnia, po deformacji znajdują się również na powierzchni drugiego stopnia. Na przykład ciało w postaci kuli po deformacji może przyjąć tylko postać elipsoidy.

Dalej będziemy rozważali tylko deformacji jednorodnej. Przy deformacji jednorodnej składowe wektora przemieszczenia dowolnego punktu znajdziemy mnożąc (7.3) przez dx_j i sumując otrzymane wyniki względem wskaźnika j

$$e_{ij} \cdot dx_j = \frac{\partial u_i(\vec{r})}{\partial x_j} dx_j \equiv du_i(\vec{r}) . \quad (7.5a)$$

Po scałkowaniu wzory (7.5a) znajdujemy

$$u_i(\vec{r}) = u_i(0) + e_{ij} \cdot x_j , \quad (7.5b)$$

Tu $\vec{u}(0)$ jest przemieszczeniem punktu znajdującego się w początku układu współrzędnych; x_j są współrzędnymi dowolnego punktu do deformacji ciała. Wektor $\vec{u}(0)$ określa przemieszczenie ciała jako ciała sztywnego. Odształcenia ciała opisuje drugi wyraz w (7.5b). Pomijając składowe wektora $\vec{u}(0)$ we wzorze (7.5b) i biorąc pod uwagę wzór (7.1) mamy

$$x'_i = x_i + e_{ij} \cdot x_j . \quad (7.6)$$

Wielkości e_{ij} określające w jednoznaczny sposób małe przemieszczenia punktu ciała wskutek deformacji tworzą tensor drugiego rzędu, który nosi nazwę **tensora deformacji**. W ogólnym przypadku ten tensor nie jest tensorem symetrycznym ($e_{ij} \neq e_{ji}$). Jednak dowolny tensor drugiego rzędu zawsze można przedstawić w postaci sumy tensora symetrycznego i antysymetrycznego. Istotnie

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}) + \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}) \equiv r_{ij} + \omega_{ij} . \quad (7.7)$$

Tensor

$$r_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}) \quad (7.8)$$

jest tensorem symetrycznym i nosi nazwę **tensora odształcenia**.

Tensor

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}) \quad (7.9)$$

jest tensorem antysymetrycznym i w przypadku deformacji jednorodnej opisuje czysty obrót (bez odkształcenia) ciała jako ciała sztywnego. Łatwo udowodnić to twierdzenie przypuszczając na chwile, że tensor deformacji zawiera tylko część antysymetryczną: $e_{ij} = \omega_{ij}$. Antysymetryczny tensor ω_{ij} ma zerowe elementy przekątne. Korzystając ze wzoru (7.6) możemy zapisać

$$x'_1 - x_1 = \omega_{13}x_3 - \omega_{21}x_2, \quad (7.10a)$$

$$x'_2 - x_2 = \omega_{21}x_1 - \omega_{32}x_3, \quad (7.10b)$$

$$x'_3 - x_3 = \omega_{32}x_2 - \omega_{13}x_1, \quad (7.10c)$$

albo w postaci wektorowej

$$\vec{r}' - \vec{r} = [\vec{\omega} \times \vec{r}]. \quad (7.11)$$

Z mechaniki ciała sztywnego wiemy, że wektor przemieszczenia $[\vec{\omega} \times \vec{r}]$ opisuje obrót wektora \vec{r} dookoła osi określonej wektorem $\vec{\omega}$, czyli obrót ciała jako całości bez odkształcenia. Kąt obrotu ciała dookoła osi Ox_3 określa składowa $\omega_3 \equiv \omega_{21}$ wektora $\vec{\omega}$ albo składowa ω_{21} tensora antysymetrycznego ω_{ij} . Składowa $\omega_2 \equiv \omega_{13}$ określa obrót ciała o kąt ω_{13} dookoła osi Ox_2 , a składowa $\omega_1 \equiv \omega_{32}$ - obrót o kąt ω_{32} dookoła osi Ox_1 . Tensor antysymetryczny ω_{ij} opisuje zatem obrót ciała jako ciała sztywnego bez zmiany wzajemnych odległości między dowolnymi punktami ciała. Odkształcenia ciała wskutek deformacji określa wyłącznie symetryczny tensor odkształcenia r_{ij} (7.8), a więc jeżeli interesują nas tylko odkształcenia ciała związane z deformacją możemy pominąć tensor ω_{ij} we wzorze (7.7) i zapisać (7.6) w postaci

$$x'_i = x_i + r_{ij} \cdot x_j. \quad (7.12)$$

Żeby uzmysłowić sobie znaczenie geometryczne składowych tensora odkształcenia r_{ij} rozważmy odkształcenie dwóch narysowanych na nie zdeformowanym ciele odcinków

równoległych do osi Ox_1 i Ox_2 (rys.7.2). Po deformacji ciała punkty A i B tych odcinków przejdą w punkty A' i B' , współrzędne których zgodnie z (7.12) są równe

$$x_1(A') = x_1(A) \cdot (1 + r_{11}), \quad x_2(A') = x_1(A) \cdot r_{21}, \quad (7.13)$$

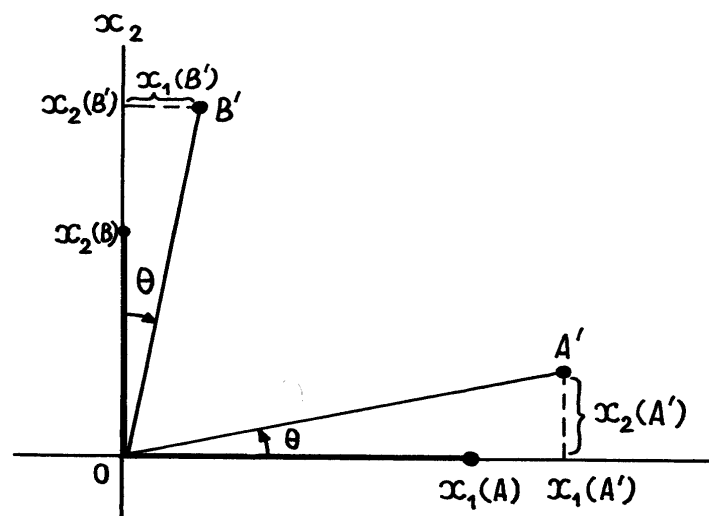
$$x_2(B') = x_2(B) \cdot (1 + r_{22}), \quad x_2(B') = x_2(B) \cdot r_{12}. \quad (7.14)$$

Ze wzorów (7.13) i (7.14) wynika, że składowe diagonalne tensora deformacji r_{11} i r_{22} odpowiadają przypadającym na jednostkę długości rozciągnięciom równoległym do kierunków Ox_1 i Ox_2 . Natomiast składowe r_{12} (r_{21}) są miarą odkształceń ścinających

$$\operatorname{tg} \theta \approx \frac{r_{21}}{(1 + r_{11})},$$

skąd dla małych odkształceń ($r_{11} \ll 1$) mamy

$$\theta \approx r_{21}. \quad (\text{III.2.15})$$



Rys.III.2.2. Odkształcenie dwóch odcinków równoległych do osi Ox_1 i Ox_2

W podobny sposób można wykazać, że składowa r_{33} określa wydłużenie ciała wzdłuż osi Ox_3 , a składowa r_{12} i r_{23} są miarą wielkości odkształceń ścinających. Na przykład, jeżeli

dwa odcinki prostej narysujemy na nie zdeformowanym ciele równoległe do osi Ox_1 i Ox_3 , to po dokonaniu deformacji kąt między nimi będzie równy $90^\circ - 2r_{12}$.

Tensor deformacji r_{ij} jest tensorem symetrycznym, a zatem zawsze możemy znaleźć taki układ współrzędnych w którym tensor r_{ij} ma niezerowe tylko przekątne elementy. Oznacza to, że w tym układzie głównych osi tensora r_{ij} odkształcenie ciała możemy opisać jako wydłużenie wzdłuż trzech wzajemnie prostopadłych osi. Jeżeli z kryształu wytniemy sześcian ze ścianami prostopadłymi do osi głównych tensora r_{ij} , to po deformacji sześcian przejdzie w prostopadłościan.

W ogólnym przypadku tensor r_{ij} jest tensorem pola i nie podlega więc ograniczeniom narzucanym zasadą Neumanna. Wyjątkiem są deformacje ciała spowodowane zmianą jego temperatury. Z doświadczeń wynika, że przy zmianie temperatury ciała o ΔT jednorodne deformacje ciała określa wzór

$$r_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T . \quad (7.16)$$

Tu tensor deformacji r_{ij} po prostu pokrywa się z tensorem rozszerzalności cieplnej α_{ij} , który jest tensorem materii i powinien spełniać zasadę Neumanna.

Przykład 7.1. Względny przyrost objętości związany z deformacją ciała nazywamy rozszerzalnością. Wykażemy, że rozszerzalność określa wzór

$$\delta = \frac{V' - V}{V} = r_{11} + r_{22} + r_{33} . \quad (7.17)$$

Tu V - objętość ciała do deformacji, a V' - objętość ciała po deformacji.

Rozpatrzmy jednostkowy sześcian i niech krawędzie sześcianu są równoległe do jednostkowych wektorów $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ układu współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 . Podczas odkształcenia jednorodnego krawędzie sześcianu zmieniają kierunek i długości. Wyrazimy teraz nowe krawędzie sześcianu $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$ za pomocą poprzednich $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Wektor \vec{e}_1 (1,00) po deformacji ciała przechodzi w wektor \vec{e}'_1 , współrzędne którego zgodnie z (7.12) są równe

$$(1 + r_{11}, r_{21}, r_{31}) ,$$

czyli w postaci wektorowej

$$\vec{e}'_1 = (1 + r_{11})\vec{e}_1 + r_{21}\vec{e}_2 + r_{31}\vec{e}_3 . \quad (7.18a)$$

W podobny sposób znajdziemy

$$\vec{e}'_2 = r_{12}\vec{e}_1 + (1 + r_{22})\vec{e}_2 + r_{32}\vec{e}_3 . \quad (7.18b)$$

$$\vec{e}'_3 = r_{13}\vec{e}_1 + r_{23}\vec{e}_2 + (1 + r_{33})\vec{e}_3 . \quad (7.18c)$$

Zgodnie ze znanym wzorem na objętość równoległoscianu o krawędziach $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

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

objętość jednostkowego sześcianu po odkształceniu przyjmuje wartość

$$V' = \vec{e}'_1 \cdot [\vec{e}'_2 \times \vec{e}'_3] . \quad (7.19)$$

Podstawiając wzory (7.18) do wzoru (7.19) i pomijając iloczyny dwóch składowych tensora r_{ij} otrzymujemy

$$V' \approx 1 + r_{11} + r_{22} + r_{33} .$$

Zatem rozszerzalność δ dana jest przez wyrażenie (7.17).

Przykład 7.2. Podczas odkształcenia ciał w postaci jednostkowego sześcianu ($1 \times 1 \times 1 \text{ cm}^3$) przemieszczenie dowolnego punktu o współrzędnych x_1, x_2, x_3 wynosi

$$u_1 = (4x_1 + 3x_2 - 5x_3) \cdot 10^{-4} \text{ cm} ,$$

$$u_2 = (7x_1 - 13x_2 + 4x_3) \cdot 10^{-4} \text{ cm} ,$$

$$u_3 = (9x_1 - 2x_2 + 4x_3) \cdot 10^{-4} \text{ cm} .$$

Wyznamy zmiany kątów między krawędziami sześcianu i względny przyrost objętości (rozszerzalność) ciała po deformacji.

Zgodnie ze wzorami (7.6), (7.8) i (7.9) tensory e_{ij}, r_{ij} i θ_{ij} mają postaci

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} 4 & 3 & -5 \\ 7 & -13 & 4 \\ 9 & -2 & 4 \end{bmatrix} \cdot 10^{-4} ,$$

$$[r_{ij}] = \begin{bmatrix} 4 & 5 & 2 \\ 5 & -13 & 1 \\ 2 & 1 & 4 \end{bmatrix} \cdot 10^{-4} ,$$

$$[\omega_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -2 & -7 \\ 2 & 0 & 3 \\ 7 & -3 & 0 \end{bmatrix} \cdot 10^{-4} .$$

Zmiany kątów między krawędziami jednostkowego sześcianu określają niediagonalne składowe tensora deformacji r_{ij} . Kąt między krawędziami równoległymi do osi Ox_1 i Ox_2 będzie równy $(90^\circ - 2r_{12})$. Czyli zmiana kąta jest równa $2r_{12} = 10^{-3} \text{ rad} = 3,42'$. Kąt między krawędziami równoległymi do osi Ox_1 i Ox_3 będzie równy $(90^\circ - 2r_{13})$, a zmiana kąta jest równa $2r_{13} = 4 \cdot 10^{-4} \text{ rad} = 1,2'$. Zmiana kąta między krawędziami równoległymi do osi Ox_2 i Ox_3 wynosi $2r_{23} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ rad} = 0,68'$. Rozszerzalność, zgodnie z (7.17) jest równa

$$\delta = (r_{11} + r_{22} + r_{33}) = -5 \cdot 10^{-4} .$$

Przykład 7.3. Trzy wektory $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ określające położenia trzech punktów A, B, C w ciele stałym są równoległe do wzajemnie prostopadłych jednostkowych wektorów $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$. W wyniku deformacji ciała punkty A, B, C przemieści się do nowych położenia, określonych przez wektory $\vec{b}'_1, \vec{b}'_2, \vec{b}'_3$. Wykażemy, że składowe tensora odkształcenia r_{ij} można wyrazić wzorem

$$2r_{ij} = \frac{(\vec{b}'_i \cdot \vec{b}'_j) - (\vec{b}_i \cdot \vec{b}_j)}{|\vec{b}_i| \cdot |\vec{b}_j|} . \quad (7.20)$$

Rozpatrzmy wektor \vec{b}_1 , który łączy punkty $(0,0,0)$ i $(b_1 \equiv |\vec{b}_1|, 0, 0)$. Współrzędne tych punktów, zgodnie z (7.12), są po deformacji równe: $(0,0,0)$ i $(b_1 + r_{11}b_1, r_{21}b_1, r_{31}b_1)$. Wektor \vec{b}'_1 więc ma postać

$$\vec{b}'_1 = b_1[(1 + r_{11}) \cdot \vec{e}_1 + r_{21}\vec{e}_2 + r_{31}\vec{e}_3] . \quad (7.21a)$$

W podobny sposób otrzymujemy

$$\vec{b}'_2 = b_2[r_{12}\vec{e}_1 + (1 + r_{22}) \cdot \vec{e}_2 + r_{32}\vec{e}_3] . \quad (7.21b)$$

$$\vec{b}'_3 = b_3[r_{13}\vec{e}_1 + r_{23}\vec{e}_2 + (1 + r_{33}) \cdot \vec{e}_3] . \quad (7.21c)$$

Skąd z dokładnością do wyrazów liniowych względem składowych tensora r_{ij} mamy

$$(\vec{b}'_i \cdot \vec{b}'_i) = b_i^2(1 + 2r_{ii}) \equiv (\vec{b}_i \cdot \vec{b}_i) + |\vec{b}_i|^2 \cdot 2r_{ii} , \quad (7.22)$$

$$(\vec{b}'_i \cdot \vec{b}'_j) = b_i b_j (r_{ij} + r_{ji}) \equiv |\vec{b}_i| \cdot |\vec{b}_j| \cdot 2r_{ij} , \quad (i \neq j) . \quad (7.23)$$

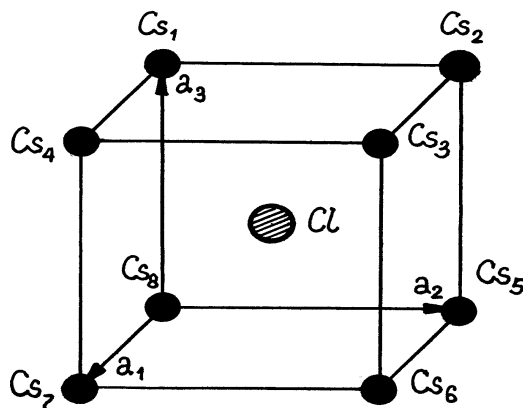
Ponieważ $(\vec{b}_i \cdot \vec{b}_j) = 0$, jeżeli $i \neq j$, wzór (7.23) możemy zapisać również jako

$$(\vec{b}'_i \cdot \vec{b}'_j) = (\vec{b}_i \cdot \vec{b}_j) + |\vec{b}_i| \cdot |\vec{b}_j| \cdot 2r_{ij} , \quad (i \neq j) . \quad (7.24)$$

Łatwo widzieć, że teraz wzór (7.24) obejmuje również i wzór (7.22), a zatem

$$2r_{ij} = \frac{(\vec{b}'_i \cdot \vec{b}'_j) - (\vec{b}_i \cdot \vec{b}_j)}{|\vec{b}_i| \cdot |\vec{b}_j|} .$$

Przykład 7.4. Sieć przestrzenna chlorku cezu $CsCl$ jest prostą siecią regularną (rys. 7.3). Prosta baza zawiera dwa atomy: atom cezu w położeniu $(0,0,0)$ i atom chloru w położeniu $(1/2, 1/2, 1/2)$. Po deformacji chlorku cezu tensor odkształcenia ma postać diagonalną: $r_{11} \neq r_{22} \neq r_{33}$ ($r_{ij} = 0$ przy $i \neq j$). Obliczymy: (a) odległości między atomom chloru i najbliższymi atomami cezu w komórce elementarnej i (b) kąty między wiązaniami $Cs_1 - Cl$ i $Cs_2 - Cl$ oraz między wiązaniami $Cs_1 - Cl$ i $Cs_3 - Cl$ (rys.7.3) po deformacji $CsCl$.



Rys.7.3. Komórka elementarna $CsCl$

Niech $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ są wektory translacji sieci krystalicznej $CsCl$ do deformacji kryształu ($|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = a$). Wtedy wektory \vec{R}_i ($i = 1, 2, \dots, 8$) łączące atom chloru z atomami cezu możemy zapisać jako (patrz rys.7.3)

$$\vec{R}_1 = -\vec{R}_6 = -\frac{1}{2}\vec{a}_1 - \frac{1}{2}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3, \quad (7.25a)$$

$$\vec{R}_2 = -\vec{R}_7 = -\frac{1}{2}\vec{a}_1 + \frac{1}{2}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3, \quad (7.25b)$$

$$\vec{R}_3 = -\vec{R}_8 = \frac{1}{2}\vec{a}_1 + \frac{1}{2}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3, \quad (7.25c)$$

$$\vec{R}_4 = -\vec{R}_5 = \frac{1}{2}\vec{a}_1 - \frac{1}{2}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3. \quad (7.25d)$$

Łatwo obliczyć, że przed deformacją długości wektorów \vec{R}_i są równe

$$|\vec{R}_i| = \frac{\sqrt{3}}{2}a. \quad (7.26)$$

Po deformacji kryształu wektory translacji \vec{a}_i zmieniają swoje kierunki i długości i przechodzą w wektory \vec{a}'_i . Zgodnie ze wzorem (7.20) dla iloczynu skalarnego ($\vec{a}'_i \cdot \vec{a}'_j$) możemy zapisać

$$(\vec{a}'_i \cdot \vec{a}'_j) = (2r_{ij} + \delta_{ij}) \cdot a^2, \quad (7.27)$$

gdzie δ_{ij} jest symbolem Kroneckera.

Niediagonalne elementy tensora odkształceń r_{ij} są równe zero, a zatem ze wzoru (7.27) otrzymujemy, że po deformacji kryształu wektory translacji \vec{a}'_i znów tworzą trójkę wzajemnie prostopadłych wektorów. Więc po deformacji komórka elementarna chlorku cezu przekształca się w prostopadłościan, długości krawędzie którego, zgodnie z (7.27), wynoszą

$$|\vec{a}'_1|^2 = (1 + 2r_{11}) \cdot a^2, \quad (7.28a)$$

$$|\vec{a}'_2|^2 = (1 + 2r_{22}) \cdot a^2, \quad (7.28b)$$

$$|\vec{a}'_3|^2 = (1 + 2r_{33}) \cdot a^2 . \quad (7.28c)$$

Zgodnie ze wzorami (7.25) po deformacji kryształu wektory \vec{R}_i , łączące atom chloru z atomami cezu przechodzą w wektory \vec{R}'_i i

$$\vec{R}'_1 = -\vec{R}'_6 = -\frac{1}{2}\vec{a}'_1 - \frac{1}{2}\vec{a}'_2 + \frac{1}{2}\vec{a}'_3 , \quad (7.29a)$$

$$\vec{R}'_2 = -\vec{R}'_7 = -\frac{1}{2}\vec{a}'_1 + \frac{1}{2}\vec{a}'_2 + \frac{1}{2}\vec{a}'_3 , \quad (7.29b)$$

$$\vec{R}'_3 = -\vec{R}'_8 = \frac{1}{2}\vec{a}'_1 + \frac{1}{2}\vec{a}'_2 + \frac{1}{2}\vec{a}'_3 , \quad (7.29c)$$

$$\vec{R}'_4 = -\vec{R}'_5 = \frac{1}{2}\vec{a}'_1 - \frac{1}{2}\vec{a}'_2 + \frac{1}{2}\vec{a}'_3 . \quad (7.29d)$$

Biorąc pod uwagę wzory (7.29), łatwo wykazać, że po deformacji kryształu odległości między atomami chloru i atomami cezu pozostają sobie równe i wynoszą

$$\begin{aligned} |\vec{R}'_i| &= \frac{1}{2} \sqrt{(\vec{a}'_1 \cdot \vec{a}'_1)^2 + (\vec{a}'_2 \cdot \vec{a}'_2)^2 + (\vec{a}'_3 \cdot \vec{a}'_3)^2} \\ &= |\vec{R}_i| \cdot \sqrt{1 + \frac{2}{3}(r_{11} + r_{22} + r_{33})} . \end{aligned} \quad (7.30)$$

Tu $|\vec{R}_i|$ jest określone wzorem (7.26).

Obliczymy teraz kąty między wektorami \vec{R}'_1 i \vec{R}'_2 (kąt θ'_{12}) oraz wektorami \vec{R}'_2 i \vec{R}'_3 (kąt θ'_{23}). Uwzględniając wzory (7.29) mamy

$$(\vec{R}'_1 \cdot \vec{R}'_2) = |\vec{R}'_1| |\vec{R}'_2| \cos \theta'_{12} = \left(\frac{a}{2}\right)^2 [1 + 2(r_{11} - r_{22} + r_{33})] , \quad (7.31)$$

$$(\vec{R}'_2 \cdot \vec{R}'_3) = |\vec{R}'_2| |\vec{R}'_3| \cos \theta'_{23} = \left(\frac{a}{2}\right)^2 [1 + 2(-r_{11} + r_{22} + r_{33})] , \quad (7.32)$$

Skąd wynika, że

$$\cos \theta'_{12} = \frac{1 + 2(r_{11} - r_{22} + r_{33})}{3 + 2(r_{11} + r_{22} + r_{33})} , \quad (7.33)$$

$$\cos\theta'_{23} = \frac{1 + 2(-r_{11} + r_{22} + r_{33})}{3 + 2(r_{11} + r_{22} + r_{33})} . \quad (7.34)$$

Przed deformacją kryształu kąty między wektorami \vec{R}_1 i \vec{R}_2 (kąt θ_{12}) oraz wektorami \vec{R}_2 i \vec{R}_3 (kąt θ_{23}) są sobie równe i wynoszą

$$\cos\theta_{12} = \cos\theta_{23} = \frac{1}{3} . \quad (7.35)$$

Z porównania wzorów (7.33), (7.34) i (7.35) widzimy, że po deformacji kryształu kąty między wiązaniami $Cs_1 - Cl$ i $Cs_2 - Cl$ oraz między $Cs_2 - Cl$ i $Cs_3 - Cl$ nie są już sobie równe.