

Gimnazija Kranj

Vpliv Greenovega elastičnega polja na nastajanje struktur prstnega odtisa v kristalih

Avtorji: Rok Oblak, Simon Udir in Vid Žepič

Mentor: dr. Jure Žalohar, prof. fiz.

2013

KAZALO

1.	Povzetek	3
2.	Zahvala	4
3.	Uvod	5
4.	Vključki v kremenovih kristalih	6
4.1	Vrste vključkov	6
4.2	Tekočinski vključki	9
5.	Mikroskopska opazovanja	14
5.1	Dokaz za obstoj Greenovih gradientnih polj	16
5.2	Proces celjenja razpok	20
5.2.1	Prva faza – nastanek tubastih struktur	20
5.2.2	Druga faza – nastanek individualnih negativnih kristalov; »necking«	22
5.2.3	Dokončno formiranje strukture prstnega odtisa	24
6.	Empirični del	29
6.1	Matematična analiza druge faze; nastajanje tubastih struktur	29
6.2	Matematična analiza tretje faze	31
6.2.1	Ena prostostna stopnja	31
6.2.2	Dve prostostni stopnji	32
6.2.3	Tri prostostne stopnje	33
6.2.4	Število prostostnih stopenj pri nastajanju negativnih kristalov	34
6.3	Preverjanje hipoteze	35
6.4	Reinterpretacija meritev Ručigajeve (2011)	37
7.	Zaključki in diskusija	41
8.	Reference	43
	DODATEK	44
	Linearna elastična teorija tekočinskih vključkov <i>Linear Elastic Fluid-Inclusion Mechanics (LEFIM)</i>	45
	DODATEK 1: Deformacije in napetosti	45
	DODATEK 2: Lastne vrednosti in lastni vektorji	46
	DODATEK 3: Hookov zakon	47
	DODATEK 4: Vpliv temperature	49
	DODATEK 5: Greenov tenzor deformacije	49
	DODATEK 6: Napetosti ob okroglem tekočinskem vključku in v njem	51
	DODATEK 7: Gibbsova prosta energija kristala s tekočinskim vključkom	54
	DODATEK 8: Odbojna sila med sosednjimi tekočinskimi vključki; Greenova gradientna sila	55

1. Povzetek

V raziskovalni nalogi podajamo rezultate novih mikroskopskih in fotomikrografičnih preiskav kremenovih kristalov. Mnogi kristali vsebujejo zanimive tekočinske vključke, ki so razporejeni v t.i. strukture prstnih odtisov oziroma »*fingerprint patterns*«. V dosednji strokovni literaturi nastanek teh struktur ni zadovoljivo pojasnjen. Obstajajo številni teoretični modeli, ki temeljijo na zakonih termodinamike, elastičnosti in difuzije. Naša mikroskopska opazovanja so nakazala možnost, da na strukturo prstnih odtisov vplivajo tudi Greenova elastična polja. Relevantnost te hipoteze smo preverili v tej raziskovalni nalogi.

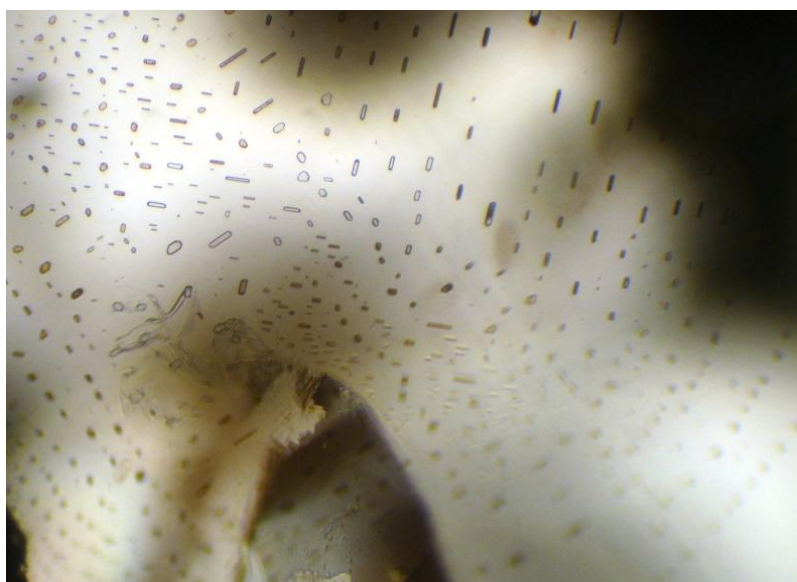
V prvem delu besedila navajamo nekaj osnovnih podatkov o mineralnih vključkih, še posebej o tekočinskih vključkih. V drugem delu opisujemo kvalitativne rezultate naših fotomikrografskega analiz. Pri tem se opiramo na linearno elastično teorijo tekočinskih vključkov ali LEFIM (Linear Elastic Fluid Inclusion Mechanics), ki jo je leta 1957 predstavil Eshelby. Moderno formalizirano sintakso pa najdemo v Udias (1999). Ta teorija napove, da na končno konfiguracijo strukture prstnega odtisa vpliva zlasti površinska energija tekočine, ki je ujeta v kristal. Po tej hipotezi kristal namreč išče takšno konfiguracijo, kjer je površinska energija minimalna. V tretjem delu besedila to hipotezo natančno preverjamo. Ugotoviti želimo pogoje, pri katerih v kasnejših fazah nastajanja strukture prstnega odtisa površinska energija tekočine, ujete v kristal, dejansko pada. V nadaljnjem koraku analiziramo enega izmed najzanimivejših in najbolj pravičnih primerov strukture prstnih odtisov, ki pokaže, kateri od teoretičnih modelov se najbolj ujema z opazovanji.

2. Zahvala

Zahvaljujemo se mentorju dr. Juretu Žaloharju, ki nas je s svojim izjemnim poznavanjem opisane teme vseskozi vodil preko obsežne in kompleksne literature, teoretičnega dela ter izdelavi hipoteze.

3. Uvod

Običajno predpostavimo, da so kristali pravilna telesa mineralov, ki imajo zaradi notranje (molekularne, atomske) urejenosti tudi pravilno zunanjo obliko. Bežen pogled skozi mikroskop pa pokaže, da je v notranjosti kristalov veliko nepravilnosti v obliki mineralnih vključkov, dislokacij, razpok itd. Mineralne vključke so pričeli proučevati že v antiki, a do pomembnejših odkritij je prišlo šele v dobi prve znanstvene revolucije, ko je postal dostopen mikroskop (Rykart, 1995). Med najpomembnejše naravoslovce, ki so se ukvarjali z omenjenim, štejemo Boëtiusa Boodta, ki je v 17. stoletju našel mnoge mineralne vključke in jih kot prvi na svetu tudi poimenoval in klasificiral. Očeta znanstvenega proučevanja vključkov sta angleški kemik Humphry Davy in italijanski geolog Scipione Breislak. Pomembne teoretične temelje je podal Brewster (1832), ki je bil mnenja, da se v mineralih poleg vode največkrat pojavlja tudi CO₂. V 60-ih letih prejšnjega stoletja je proučevanje vključkov doseglo ponoven vzpon. Velika večina raziskav je bila osnovana na preučevanju tekočinskih vključkov v kremenju, saj so prav v njem najbolj številčni in prepoznavni (Shelton in Orville, 1980). Raziskave na temo tekočinskih vključkov so danes uporabne v geologiji, gemologiji¹, vulkanologiji, petrokemiji in geotermalni energiji (Rykart, 1995).



Slika 1: Množica vključkov v kremenovem kristalu.

¹ Gemologija je veda, ki se ukvarja z različnimi vrstami surovih in brušenih kamnov.

4. Vključki v kremenovih kristalih

Vključki se pojavljajo v večini naravnih kristalov. So izjemno majhni in tako s prostim očesom skoraj nevidni. V nekaterih kristalih, kot so na primer kremenovi kristali, je vključkov izjemno veliko. Obstajajo tudi kristali z malo ali nič vključkov – le-ti so ob primerni obarvanosti dostikrat klasificirani kot dragi kamni.

V teku rasti kremenovih kristalov lahko nastanejo različni vključki, ki nastanejo kot posledica preraščanja kremenca preko »tujkov«. Vključki so lahko v obliki plina, tekočine ali trdne snovi. Vsi kristali – tudi najbolj prozorni – vsebujejo vključke, četudi so le-ti mikroskopsko majhni. Preučevanje vključkov nam zagotovi informacije o (Rykart, 1995):

- nastanku mineralov oz. zaporedju kristalizacije različnih mineralov,
- geoloških procesih v okolici oz. spreminjanju fizikalno-kemičnih razmer,
- kemijskih lastnosti vključkov ujetih v mineral.

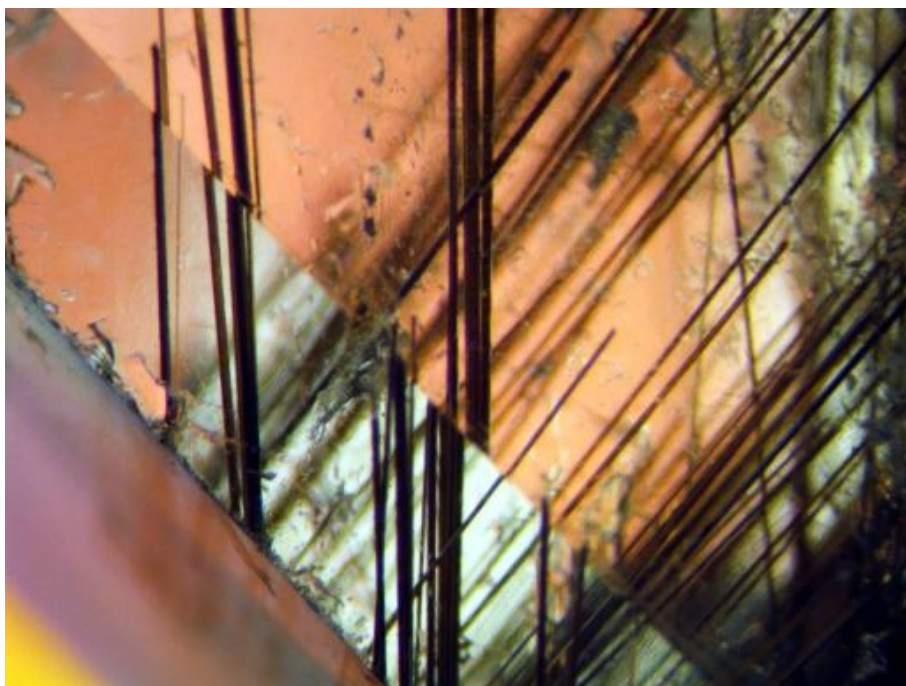
Posebno pomembni so tekočinski vključki, ki nam ob proučevanju posredujejo informacije o pogojih za njihov nastanek, torej o tlaku, temperaturi in sestavi raztopine ujete v različnih obdobjih rasti minerala. Nastaneje, če se v razpoko, ki je nastala zaradi krčenja in raztezanja kristala, nabere določena tekočina.

4.1 Vrste vključkov

Vrste kristalnih vključkov lahko v grobem razdelimo na (Rykart, 1995):

- *protogenetske vključke,*
- *singenetske vključke,*
- *epigenetske vključke.*

Protogenetski vključi so tisti, ki so prisotni od samega začetka rasti kristala in so tekom kristalizacije popolno ali deloma preraščeni. Med pomembnejše protogenetske vključke uvrščamo anhidrit, aktinolit, epidot in rutil. Obstajajo le v trdnem agregatnem stanju.

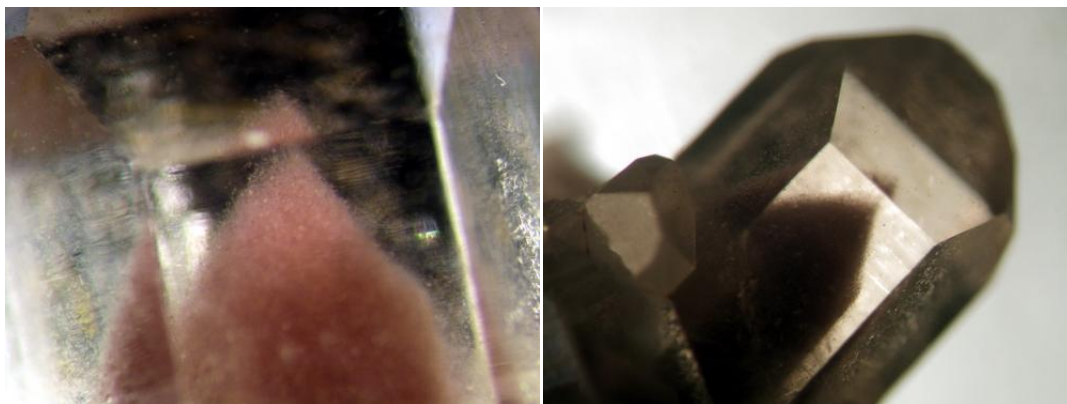


Slika 2: Rutil v kristalu kremen z nahajališča Minas Gerais v Braziliji.

Singenetski vključki nastajajo tekom kristalizacije. Njihova pogostost je večja v primeru nižjih temperatur in pritiska, saj se razpoke kristala tedaj povečajo. Le-to omogoča odkruškom drugih kristalov (ki so lahko protogenetske zgradbe), da se sedimentirajo na rastoče kristale in z njimi naprej rastejo. Rastoči kristal te vključke prej ko slej popolnoma ali delno (nepopolni vključki) preraste, kar privede do »lebdenja« *singenetskih vključkov. Med singenetske vključke uvrščamo na primer klorit, aktinolit in fluorit. Poseben primer so vključki istega kristala, na primer kremenovi vključki v kremenovem kristalu. Singenetski vključki so izjemnega pomena, saj lahko preko njih ugotavljamo položaj starega minerala in njegovo morebitno spreminjanje pozicije tekom geološke zgodovine – predvsem pa nam zagotavljajo razumevanje geoloških procesov v katere je bil vključen.*

Posebna oblika *singenetskih* vključkov so fantomi. Le-ti so nastajali tekom fizikalno-kemijskih sprememb. V teh pogojih je prišlo do izločanja snovi iz tujka, ujetega v mineral. Pride do obarvanih obrisov, ki so še posebej lepo vidni v čistem (prozornem) kremenu. Kakor večina *singenetskih* vključkov nam tudi fantomi nakazujejo katera stran kristala je bila zgoraj in katera spodaj. Fantomi so v alpskih predelih večinoma iz klorita, karbonatnih mineralov, hematita, antimona in grafitu. V poznejših (post-hidrotermalnih) fazah lahko pride do migracije mineralnih snovi, ki gradijo fantom. Do tega pride ob spiranju zaradi meteornih voda in atmosferilij (CO_2 , H_2O , O_2). V praznih votlinah se nato lahko naberejo organski

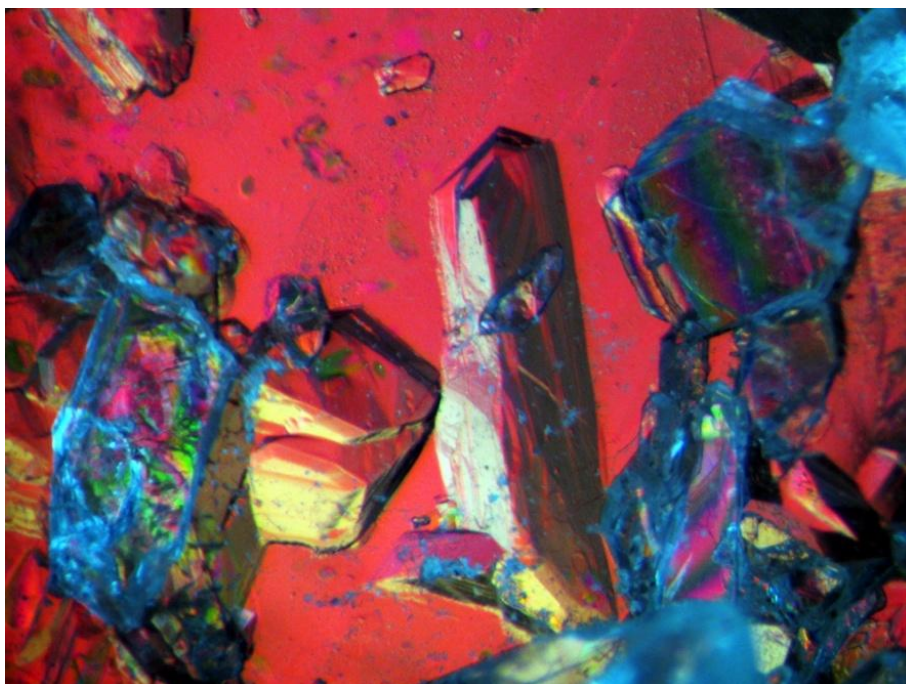
odpadki. Odtise teh vključkov v kremenu, katerih oblika je enaka preraščenemu kristalu, imenujemo negativni kristali.



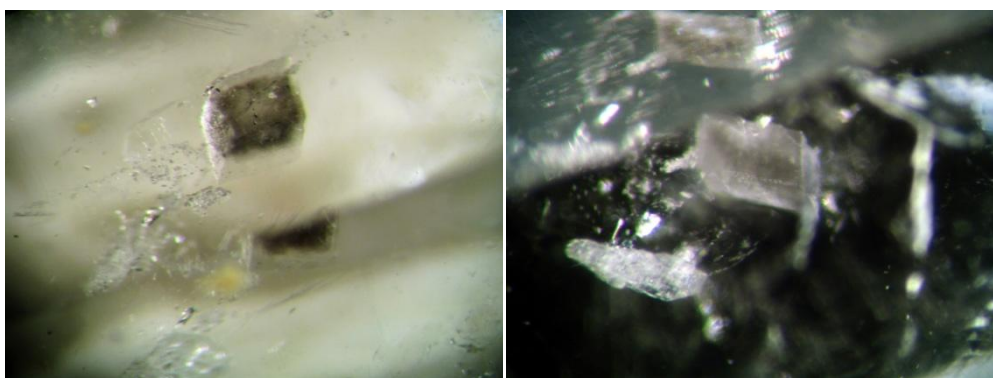
Slika 3: Fantom, preraščen z železovimi hidroksidi s Črnega vrha pri Polhovem Gradcu.



Slika 4: Fantom, preraščen z rdečim hematitom iz Madagaskarja.



Slika 5: Številna kristalizacijska jedra (pozitivni kristali), ki so se ujeli v večji kremenov kristal. Ta jih je povsem prerasel.



Slika 6: Dva kristala dolomita v kremenovem kristalu iz Crngroba

Epigenetski vključki so tisti, ki se po končani rasti kristala prvi nanesejo na stari kristal. Med njih prištevamo tudi mineralne tvorbe, ki se izoblikujejo znotraj tekočinskih vključkov.

4.2 Tekočinski vključki

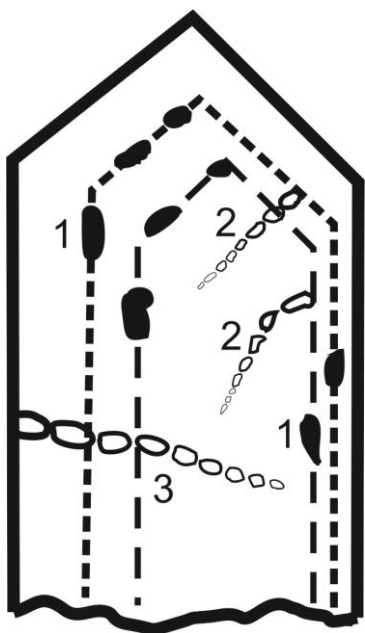
Kristalne vključke lahko delimo tudi po agregatnem stanju vključkov, t.j. na trdne in tekočinske (fluidne) vključke. V tekočinskih vključkih se nahaja ali plin ali kapljevina. Kapljevine so znane po tem, da imajo točno določen volumen, kar pomeni, da so praktično nestisljive, medtem ko plin nima določene prostornine, saj zavzame ves prostor, ki mu je na voljo in je zato stisljiv. Pri tekočinskih vključkih je pomembna kritična temperatura, saj nam

ta pove, kakšna je najvišja temperatura, pri kateri se plin ob zviševanju tlaka utekočini. Tekočinski vključki nastanejo ob vdoru tekočine (v obliki vode, metana ali tekočega CO₂) v razpoko, ki je posledica krčenja in raztezanja kristala, na katerega vplivajo spremembe v okolju.

Tekočinske vključke glede na starost razdelimo na (Rykart, 1995):

- *primarne tekočinske vključke,*
- *pseudosekundarne tekočinske vključke,*
- *sekundarne tekočinske vključke.*

Primarni tekočinski vključki se nabirajo na poškodovanih stenah kristala, ki jih slednji slej ko prej preraste. *Pseudosekundarni* vključki se naberejo v razpokah kristala, povzročenih zaradi tektonskih aktivnosti območja, ki pa jih pozneje vselej preraste nov del kristala. Torej njihova sled ne poteka po celotnem kristalu, pač pa le po omejenem notranjem prostoru. Takih vključkov je v povprečnemu kremenovemu kristalu največ. *Sekundarni* vključki, se podobno kot pseudosekundarni, nastanejo v kristalnih razpokah, vendar so te razpoke še v celoti nepreraščene in rezultat recentnih faz kristalne rasti.



Slika 7: Oblike tekočinskih vključkov (Stalder, 1978): 1 prikazuje primarne, 2 pseudosekundarne in 3 sekundarne tekočinske vključke.

Med najpogostejše anorganske vključke štejemo ogljikov dioksid, ki se največkrat pojavlja v obliki majhnih mehurčkov ujetih v kristal. Obstajajo tudi organski vključki kot so na primer

nafta, bitumen in kerogen². Ti vključki so nastali z diagenezo (sedimentacijo) mrtvih organizmov. Nato je potekla piroliza (razkroj snovi pri visoki temperaturi), ki je organske snovi na kristalih razkrojila na posamezne molekule (metan, premog).

Glede na vsebnost določenih anorganskih snovi, lahko tekočinske po raziskavah *Shin in Lee* (2004: 73) vključke delimo na:

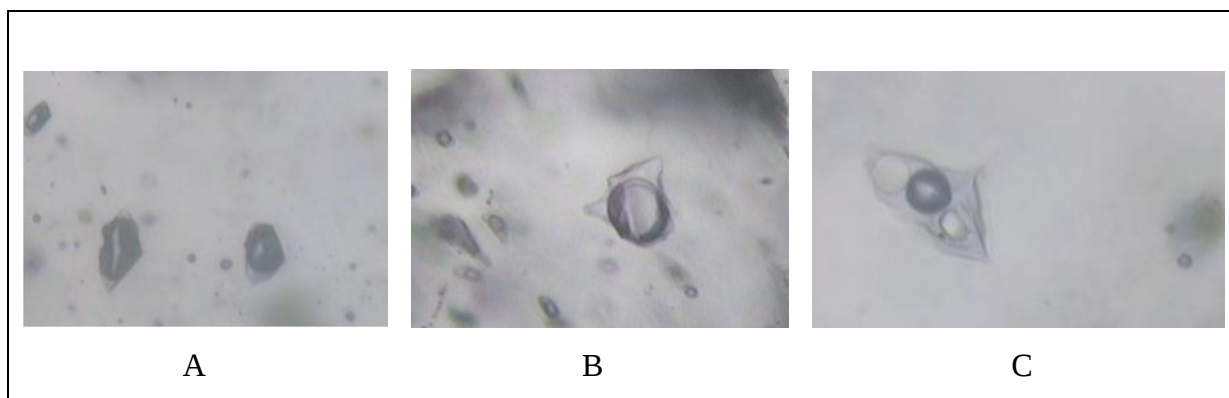
- *Tip I* ($CH_4 + H_2O$)
- *Tip II* ($H_2O + CO_2 + CH_4$)
- *Tip III* ($H_2O + NaCl$)
- *Tip IV* ($H_2O + NaCl + halit \pm silvit$)

V *tipu I* zmes v mehurčku metana in vode lahko zavzame od 40% do 90% celotnega volumna vključka, včasih pa je omenjeni volumen zapolnjen skoraj le izključno z metanom. Oblike negativnih kristalov tipa I. so iregularne, dosežejo pa do 20 μ m.

Vključki *tipa II* so precej bolj pogosti in se pojavljajo v urejenih linearnih zaporedjih, mehurčki v njih pa nastopajo v plinastem ali tekočem agregatnem stanju.

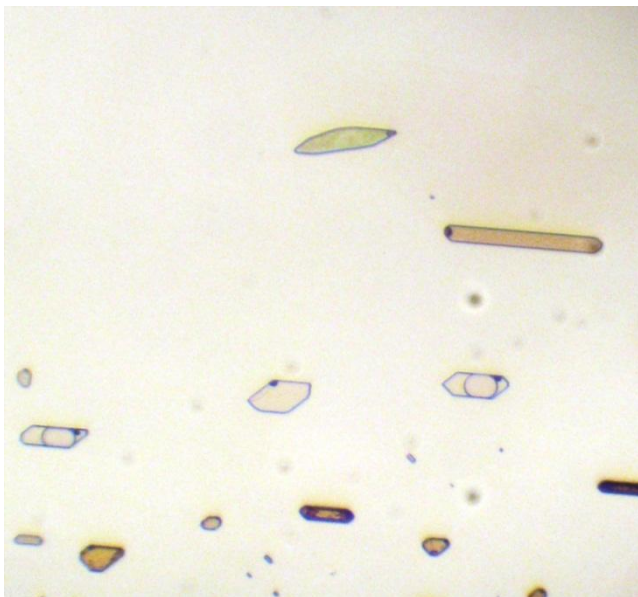
Tekočinski mehurčki v vključku *tipa III*, ki ga sestavlja natrijev klorid in voda, dosežejo velikost večjo od 20 μ m.

Vključki *tipa IV* se od ostalih treh razlikujejo po tem, da vsebujejo tudi trdne delce (halit, silvit) ter plinske in tekoče snovi.



Slika 8: Fotomikrografika (po *Shin in Lee*, 2004: 72) različnih tipov vključkov. Fotografija A predstavlja vključke tipa I, fotografija B tipa II, fotografija C tipa IV.

² Kerogen je mešanica organskih spojin, ki sestavlja ogljikovodike v sedimentnih kamninah



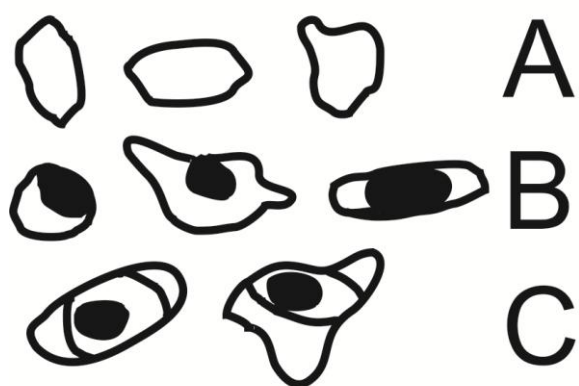
Slika 9: Vidni mehurčki CH_4 ali CO_2 v vključkih znotraj kremenca (tip I).

Zanimivo je, da lahko organski vključki vplivajo tudi na spremembo habitusa (oblike) kristala. Kristali, ki rastejo v okolju bogatim z metanom, razvijejo t.i. žezlast habitus, medtem ko na območju, kjer je metana v okolici manj, največkrat najdemo romboedrične mineralne strukture.

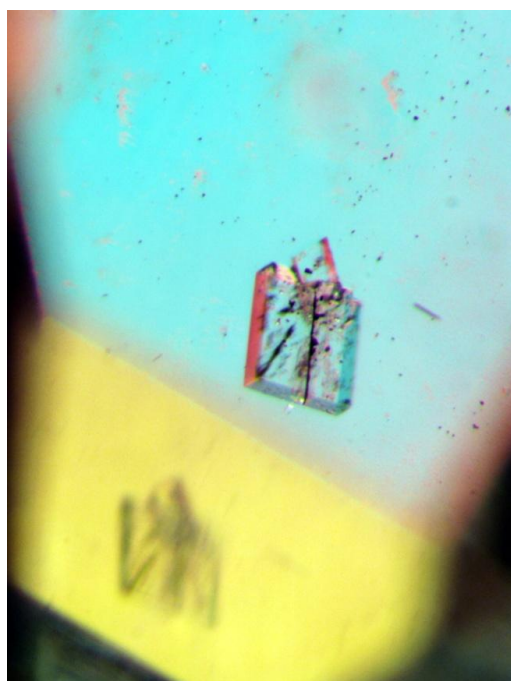


Slika 10: Žezlasti kremenovi kristali iz Crngroba

Kadar so v meteorni vodi, ki vdre v kristalne razpoke, raztopljene različne soli, se na le-teh nabrle različne soli, najpogostejše kar NaCl. Takšni kristali so imenovani tudi »hčerinski kristali«. Najpogostejši so pri evaporitih. Vključki lahko vsebujejo več snovi hkrati, zato so takšni imenovani tudi »večfazni kristali«. Večfazni vključki tako največkrat kombinirajo plinski CO₂, CH₄ in tekočinski bitumenski mehurček. V kolikor je teh vključkov več, se lahko med svojimi komorami povežejo s tankim kanalom, ki je prostemu očesu neviden. Na ta način se večji nepravilno oblikovani vključki, da bi potešili potrebo po minimalni površinski energiji, razdelijo v več manjših vključkov. Pri tem nastaja t.i. neck (vrat), zato je pojav imenovan tudi *necking*. Tekočine lahko po teh kanalih migrirajo.



Slika 11: (A) Enofazni vključki (metan), (B) dvofazni vključki (plinski mehurček in solna raztopina), (C) večfazni vključki (tekoči CO₂, plinski mehurček, solna raztopina).

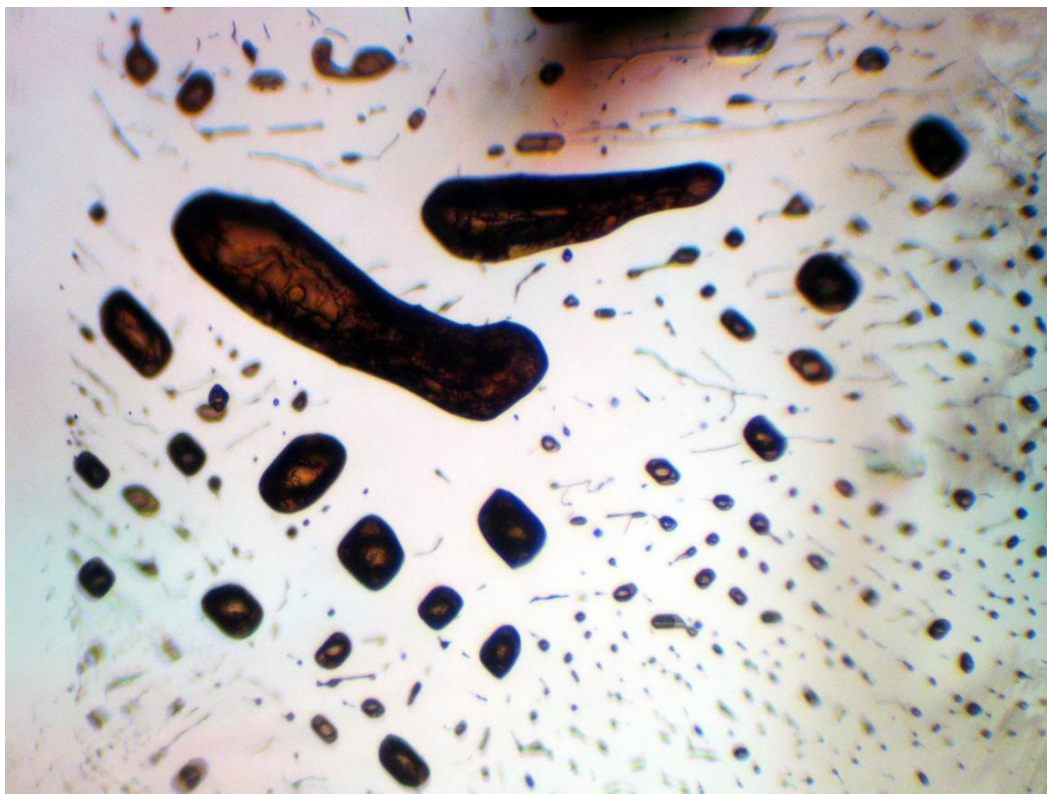


Slika 12: Kristal soli v kremenovem kristalu iz Crngroba

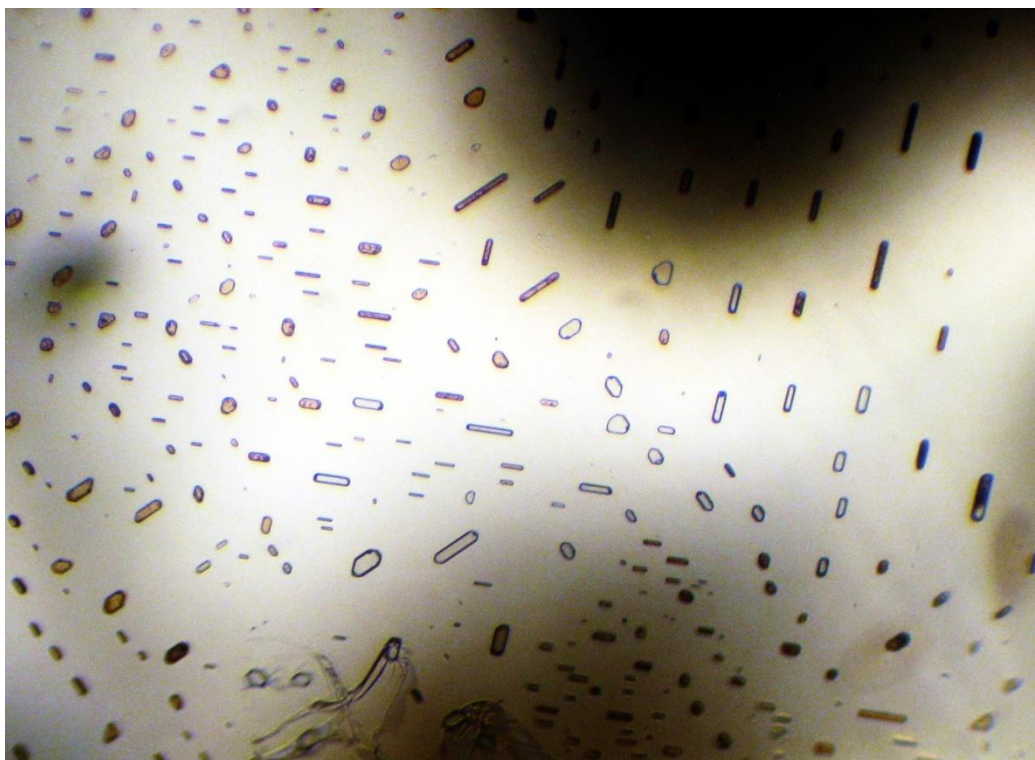
5. Mikroskopska opazovanja

V tem poglavju opisujemo rezultate mikroskopskih opazovanj vključkov v kremenovih kristalih, ki so bili v zadnjem času najdeni v Crngrobu in Bezuljaku. Vsi kristali so del zasebne zbirke Franceta Stareta iz Žabnice. Vse fotografije pa je napravil dr. Jure Žalohar.

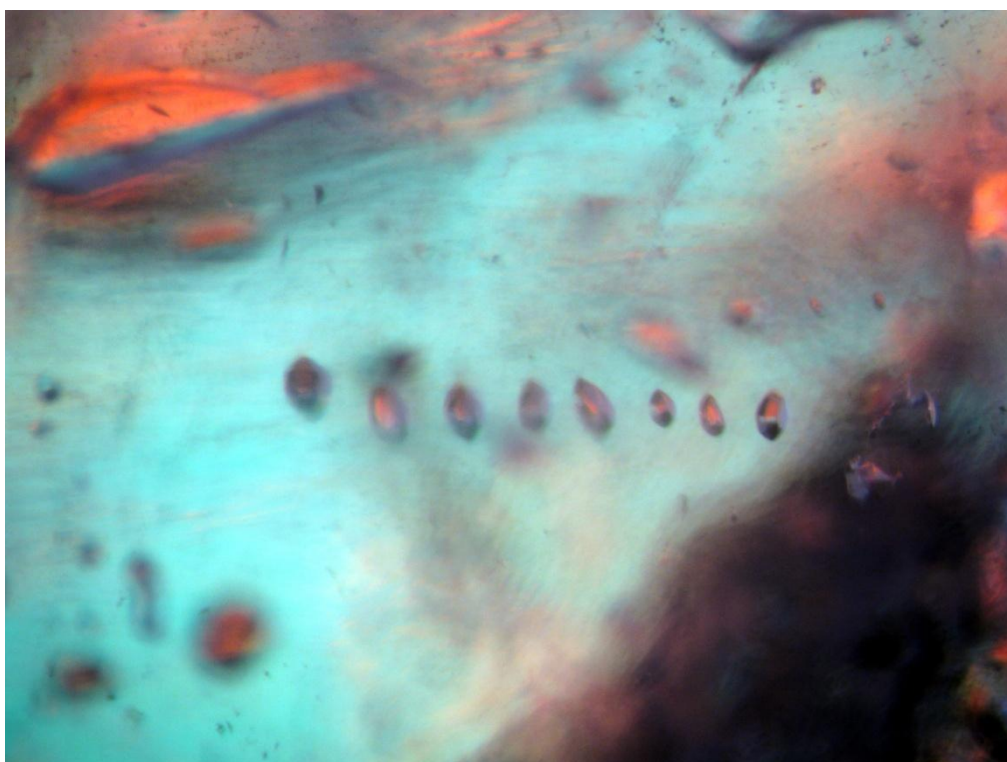
Prva, splošna opazka in ugotovitev je, da so tekočinski vključki v kremenovih kristalih praviloma razporejeni v nekakšne mreže ali verižice. Te strukture v strokovni literaturi imenujejo »fingerprint patterns« ali slovensko, »struktura prstnega odtisa«. Primeri takšnih struktur so na spodnjih slikah.



Slika 13: »Fingerprint pattern« v kremenovem kristalu iz Bezuljaka.



Slika 14: »Fingerprint pattern« v kremenovem kristalu iz Crngroba.



Slika 15: Struktura verige v kremenovem kristalu z Madagaskarja.

Nastanek teh struktur v dosednji literaturi ni zadovoljivo pojasnjen. Teorija in eksperimentalni podatki kažejo, da takšne strukture nastajajo pri celjenju razpok, v katere se

je ujela tekočina. Obstajajo številni modeli cilindrizacije in sferoidizacije, ki nastopita pri celjenju razpok. Ti modeli temeljijo na zakonih termodinamike, difuzije in elastični teoriji dislokacij, elastični perturbacijski teoriji itd. (Nichols in Mullins, 1965; Nichols, 1976; Salac in Wei Lu, 2008). Recenzijo teh mehanizmov je podal Schaneman (2009), v grobem pa jih lahko delimo v a) Raleighovo perturbacijsko teorijo, b) Mullins-Nicholsovo modificirano perturbacijsko teorijo, c) termično teorijo, d) prelomno-migracijsko teorijo, d) teorijo multiplih mehanizmov in e) Ostwaldovo teorijo. Vsi modeli so teoretično izjemno zahtevni. Naša mikroskopska opazovanja nesporno kažejo, da igrajo pomembno vlogo pri nastajanju struktur prstnega odtisa tudi elastične napetosti v kristalu. V tem smislu je najbolj uporabna teorija, ki jo je razvil Eshelby (1957; The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. Proceedings of the Royal Society of London 241 1043 (1226), 376–396, doi:10.1098/rspa.1957.0133.) V nadaljnjem besedilu to teorijo imenujemo **Linearna elastična teorija tekočinskih vključkov** oziroma LEFIM (**Linear Elastic Fluid-Inclusion Mechanics**). Ta teorija temelji na linearni teoriji elastičnosti, bolj natančno na teoremu recipročnosti in reprezentacije in teoriji Greenovih polj, katere formalizirano sintakso je podal naprimer Udias (1999). Namen sledečega besedila in naših mikroskopskih analiz je bilo ugotoviti, kakšna je stopnja relevantnosti razlage nastajanja strukture prtnsega odtisa na osnovi LEFIM.

5.1 Dokaz za obstoj Greenovih gradientnih polj

Obstoj Greenovih elastičnih polj lahko dokažemo neposredno s fotoelastičnimi opazovanji. Fotoelastičnost je eksperimentalna metoda, s katero lahko določimo porazdelitev napetosti v materialu. Metoda temelji na pojavu dvojnega loma, ki nastane pod vplivom visokih napetosti. Velikost lomnega količnika v vsaki točki optično aktivnega materiala je neposredno odvisna od napetostnega stanja. Ko polarizirana svetloba potuje skozi fotoelastičen kristal, imajo komponente jakosti električnega polja vzdolž glavnih smeri napetosti različen lomni količnik. Posledično pride do faznega zamika med komponentami, kar opišemo z napetostno-optičnim zakonom:

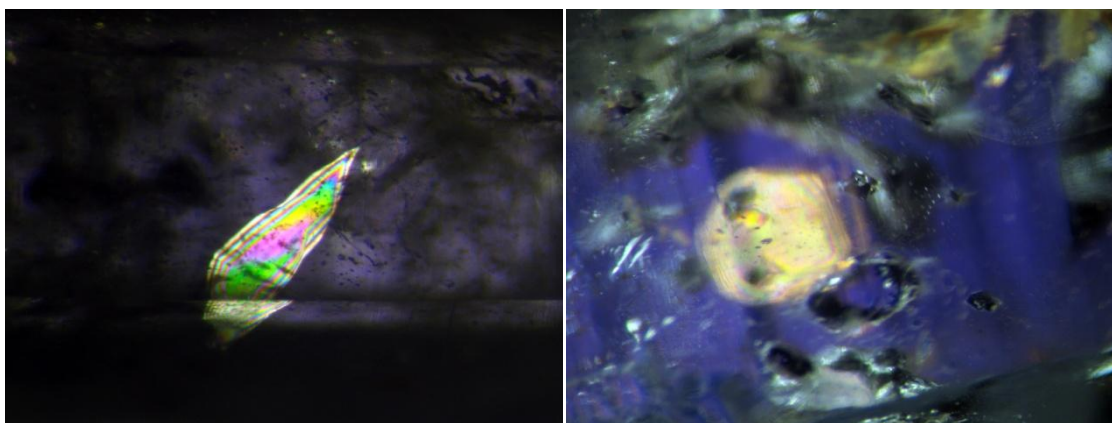
$$\Delta = \frac{2\pi t}{\lambda} C(\sigma_1 - \sigma_2) \quad (1)$$

Tu je Δ induciran fazni zamik, C je napetostno-optična konstanta, t je debelina kristala, σ_1 in σ_2 sta glavni napetosti. Fazni zamik spremeni polarizacijo prepuščene svetlobe, kar lahko

opazujemo v polariskopu. Polariskop kombinira različno polarizacijo svetlobe predno in po tem, ko gre svetloba skozi kristal. Zaradi interference nastanejo v polariskopu značilni barvni pasovi znani pod imenom »*fringe patterns*«. Število barvnih pasov je

$$N = \frac{\Delta}{2\pi} \quad (2)$$

S pomočjo barvnih pasov lahko narišemo izokline in izokromate. Izokrilne so črte, kjer so glavne osi napetosti enako usmerjene. Izokromate pa so črte, kjer je razlika ($\sigma_1 - \sigma_2$) konstatna. Povezujejo mesta s konstantno strižno napetostjo. Podrobneje se v vprašanje fotoelastičnosti ne bomo spuščali, saj je za naše besedilo pomembno le to, da obstoj Greenovih elastičnih polj potrdimo v okolici razpok in tekočinskih vključkov. Obstoj teh polj je dejansko razviden iz spodnjih fotografij.



Slika 16: Greenova elastična polja v okolici razpoke in negativnega kristala (tekočinskega vključka) v kremenovem kristalu.

Na levi fotografiji je Greenovo polje razvidno ob razpoki, na desni pa je razvidno ob negativnem kristalu. Zanimivo je, da je kristal optično aktiven samo neposredno ob razpoki ali vključku, drugod pa ne. Videti je, da so neposredno ob razpoki ali vključku elastične napetosti zelo velike, z razdaljo pa hitro padajo.

Greenove elastične napetosti v okolici tekočinskega vključka je zelo težko izračunati. Analitične rešitve obstajajo za elipsoidne in okrogle vključke. Za potrebe naših opazovanj je bilo iz Eshelbyjevih rešitev in teorije predstavljene v Udiasovem učbeniku možno izpeljati specifične rešitve za okrogle tekočinske vključke. To delo je opravil mentor, dr Jure Žalohar, saj močno presega nivo srednješolske matematike in fizike. Izpeljave so navedene v Dodatku. Mi smo jih zgolj uporabili pri razlagi pojavov, ki smo jih opazili na fotomikrografičnih posnetkih kristalov.

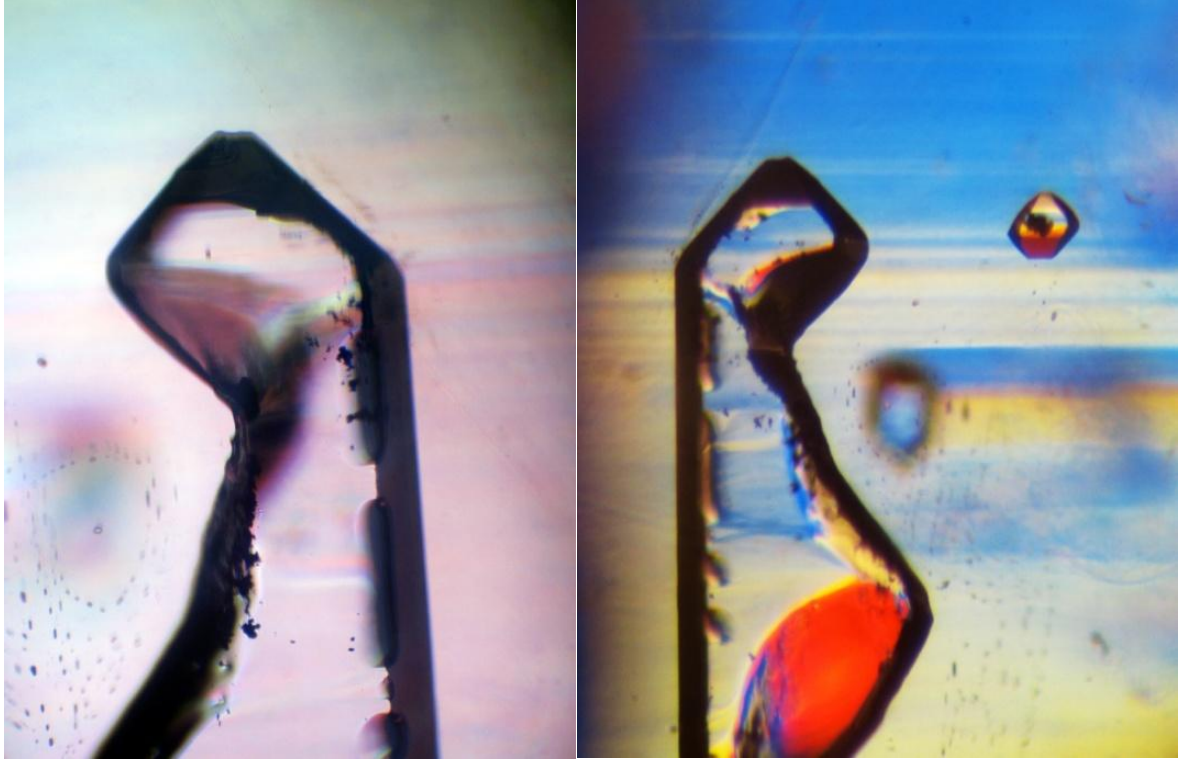
Osnovna ideja LEFIM je v tem, da sekundarni in psevdosekundarni tekočinski vključki v kristalih nastajajo pri višji temperaturi, ko je tista pri mikroskopskih opazovanjih v laboratoriju (DODATKI 1-6). Od nastanka do danes so se kristali ohladili, zaradi česar so se tudi termično skrčili. Pri termičnem krčenju kristal močno stisne tekočino v vključkih, saj ima tekočina navadno manjši koeficient temperaturnega raztezanja kot okoliški kristal. Pri tem v tekočini in v okoliškem kristalu nastanejo močne elastične napetosti (DODATEK 6). Natančen račun LEFIM pokaže, da je tlak znotraj tekočine povsod enak in neodvisen od velikosti in oblike tekočinskih vključkov v kristalu. Greenove elastične napetosti v okolici tekočinskih vključkov pa padajo obratno-sorazmerno s kvadratom razdalje. Tenzor Greenovih napetosti lahko napišemo v sledeči obliki:

$$\sigma_{ij} = \frac{k_1 r_0'^2}{k_1' r^2} \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu) & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda - 2\mu) & 0 \\ 0 & 0 & (\lambda - 2\mu) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Koordinatni sistem vedno postavimo tako, da je x -os usmerjena v smeri radija (razdalje) r od središča vključka. Pri tem sta k_1 in k_1' parametra, odvisna od elastičnih lastnosti kristala, od razlike temperaturnih koeficientov kristala in tekočine ter od razlike med začetno in končno temperaturo. λ in μ sta Laméjeva koeficienta kristala. r_0' je radij tekočinskega vključka.

Če elastične Greenove napetosti v kristalih dejansko igrajo kakšno vlogo pri konfiguraciji strukture prstnega odtisa, potem teoretično povzročajo nekakšno vzgonsko silo na druge tekočinske vključke v kristalu (DODATEK 8). Imenujmo to silo kar *Greenova gradientna sila*. Zanja je značilno, da tekočino potiska v smeri zmanjševanja Greenovih napetostnih polj. Dokaz za obstoj Greenove gradientne sile najdemo denimo na spodnjih fotografijah (Slika 17). Na teh dveh fotografijah lahko vidimo večji negativen kristal, poleg katerega je tipična struktura prstnega odtisa. Na levi fotografiji se vidi, da so drobni tekočinski vključki porazdeljeni v verižici, ki obkroža šesterokotno oblikovan prostor brez tekočinskih vključkov. V sredini tega šesterokotno oblikovanega prostora je en droben negativni kristal. Na desni fotografiji se vidi, da je takšna razporeditev strukture prstnega odtisa v tem primeru povezana s prisotnostjo večjega negativnega kristala v ozadju, ki je v tlorisu približno takšne oblike, kot prazen peterokoten prostor znotraj strukture prstnega odtisa. Videti je, da je ta večji negativni kristal v ozadju povzročil Greenovo gradientno silo, ki je drobne negativne kristale v strukturi prstnega odtisa nekoliko odmaknila proč. Zgornji dve fotografiji sta ključni pri utemeljitvi

pristopa, ki smo ga ubrali v tem besedilu. Sicer bi lahko uporabili tudi kakega od že znanih modelov.



Slika 17: Dokaz obstoja Greenove gradientne sile.

Teorija LEFIM pokaže, da na nek tekočinski vključek z velikostjo r'_{0j} v Greenovem polju tekočinskega vključka z velikostjo r'_{0i} deluje sila (DODATEK 8)

$$F_{grad} = \nabla p(r) V_i = \chi \frac{r'^2_{0i} r'^3_{0j}}{r^3},$$

$$\chi = \frac{8\pi(\lambda + 2\mu)k_1}{3k'_1}.$$
(4)

Tu je V_i volumen tekočinskega vključka, ki smo ga označili z indeksom i . Na mestu j – tega vključka deluje tako Greenov tlak

$$p_{ij} = \nabla p_i(r) r'_{0j} = 2(\lambda + 2\mu) \frac{k_1}{k'_1} \frac{r'^2_{0i}}{r^3} r'_{0j}.$$
(5)

Ta je odvisen od radijev i – tega in j – tega vključka. Indeksa v oklepaju ne označujeta komponent tenzorja napetosti, temveč je tlak v zgornji enačbi skalarna količina. Indeks ij tu pove, da gre za tlak, ki ga Greenovo napetostno polje i – tega vključka povzroča na j – ti vključek.

Podobno na mestu i – tega vključka deluje Greenov tlak

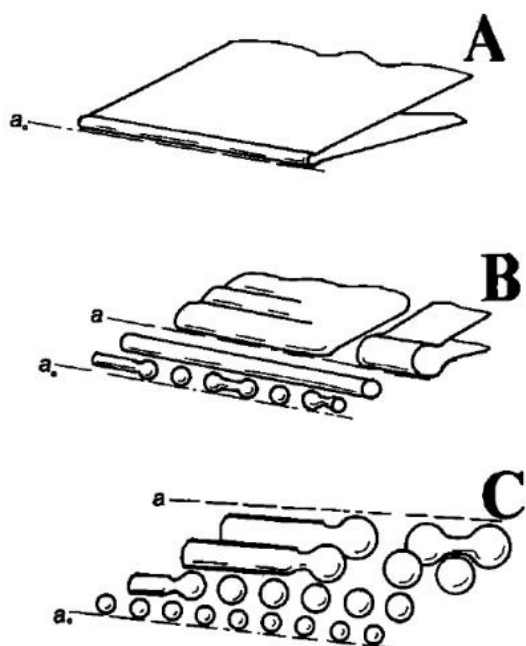
$$p_{ji} = \nabla p_j(r) r'_{0i} = 2(\lambda + 2\mu) \frac{k_1}{k_1'} \frac{r_{0j}'^2}{r^3} r'_{0i}. \quad (6)$$

Ti dve enačbi sta zlasti pomembni za razumevanje razpadanja/celjenja razpok.

5.2 Proces celjenja razpok

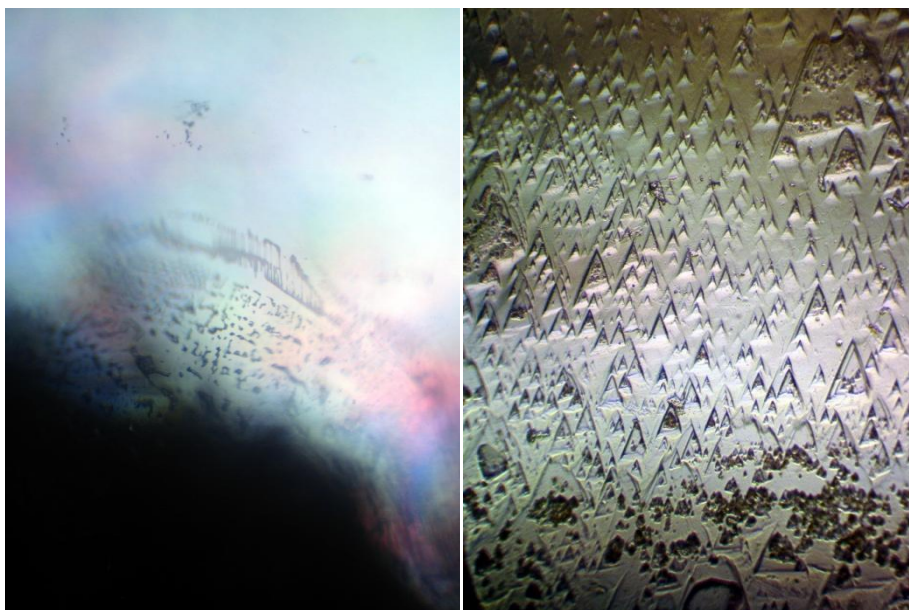
5.2.1 Prva faza – nastanek tubastih struktur

Proces nastajanja struktur prstnega odtisa še zdaleč ni kaotičen in se zgodi v treh kontinuiranih fazah. Prva faza predstavlja nastanek same razpoke, zapolnjene s tekočino. Druga in tretja faza pa sta povezani z razpadom in celjenjem razpoke. Vse te faze so v literaturi že znane (e.g., Smith in Evans, 1984).

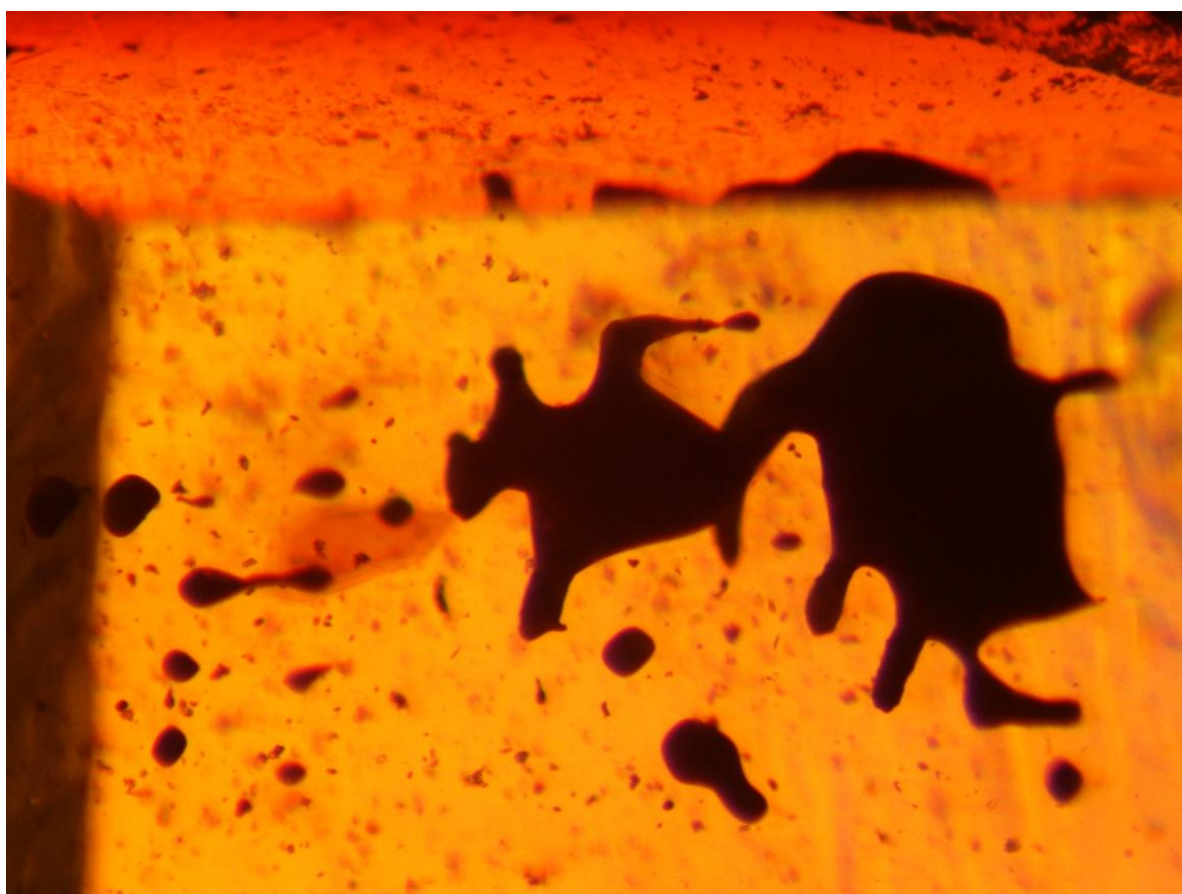


Slika 18: Faze nastajanja strukture prstnega odtisa po Smith in Evans (1984). A) prva faza, kjer nastane s tekočino napolnjena razpoka; B) nastajanje tubastih struktur; C) razpadanje tubastih struktur na verige negativnih kristalov ali okroglih tekočinskih vključkov.

V drugi fazi razpoka razpade na več tubastih vključkov oziroma cevi. Geometrična konfiguracija teh tub je zelo kompleksna in kaotična, kar je razvidno iz spodnje fotografije. Na njej vidimo začetni stadij nastajanja strukture prstnega odtisa. V zgornjem delu te strukture vidimo zaporedje praktično vzporednih cevčic in tub.



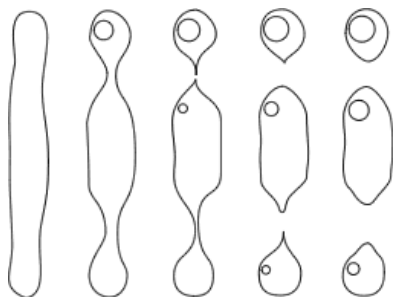
Slika 19: Začetna faza nastajanja strukture prstnih odtisov predstavlja formiranje zapletene strukture nekakšnih tubastih struktur, ki so v posameznih domenah vzporedne med seboj. Na desni fotografiji je fraktalna struktura podobna trikotnikom Sierpinskega. Oba kremenaova kristala sta iz Bezuljaka.



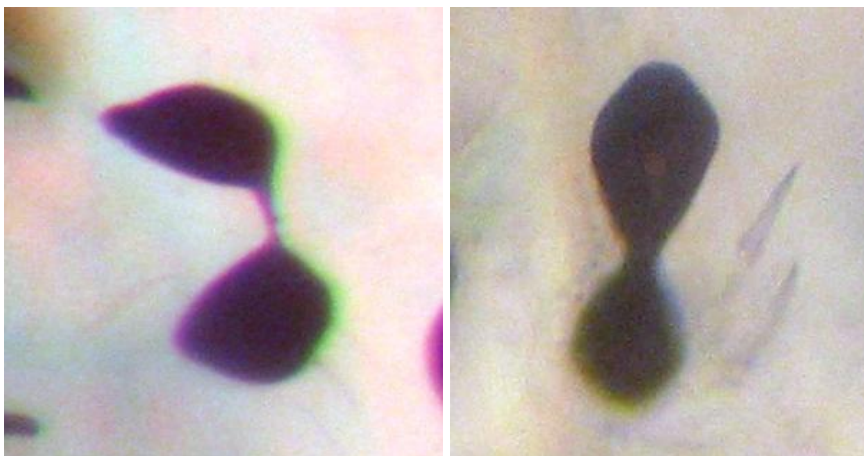
Slika 20: Primer razpadanja s tekočino zapolnjene razpoke (pseudosekundarnega vključka tekočine) na več manjših tekočinskih kristalov, ki na skrajni levi tvorijo pravilne razporeditve.

5.2.2 Tretja faza – nastanek individualnih negativnih kristalov; »necking«

Mikroskopka opazovanja kažejo, da v tretji fazi pride do razpada posameznih tub na individualne negativne kristale. Pri tem razpadu pride do t.i. pojava »necking«, kjer so negativni kristali med seboj povezani s tanko kapilaro.



Slika 21: Tekočinski vključki se iz podolgovatih struktur počasi spreminjajo v manjše okrogle strukture iz katerih se razvijejo negativni kristali. (<http://www.ruby-sapphire.com/r-s-bk-ch5.htm>).



Slika 22: Dva kristalna vključka sta povezana s »cevko«.

V sledečem nas zanima, kako utegne na gibanje tekočine vplivati Greenov tlak, ki ga povzročajo negativni kristali. Glede na literaturo je znano, da igrajo pomembno vlogo zakoni termodinamike in difuzije, ki jih bomo tule zanemarili. V našem primeru nas namreč zanima relevantnost napovedi LEFIM. Vzemimo naprimer dva med seboj povezana negativna kristala. Glede na enačbi (5) in (6) Greenov tlak manj močno potiska tekočino v večji vključek kot v manjšega. Manjši vključek bo zato počasi rasel, večji pa se bo krčil. V ravnovesnem stanju bosta p_{ji} in p_{ij} enaka, kar pomeni tudi

$$r'_{0i} = r'_{0j}. \quad (7)$$

Oba vključka bosta v ravnovesju enako velika. Greenov tlak močnejše potiska tekočino v manjši negativni kristal kakor pa v večjega. To pomeni, da bo manjši negativni kristal počasi rasel, večji pa se bo krčil. V ravnovesnem stanju bosta oba negativna kristala enako velika. Točno tej situaciji ustrezata zgornji dve fotografiji.

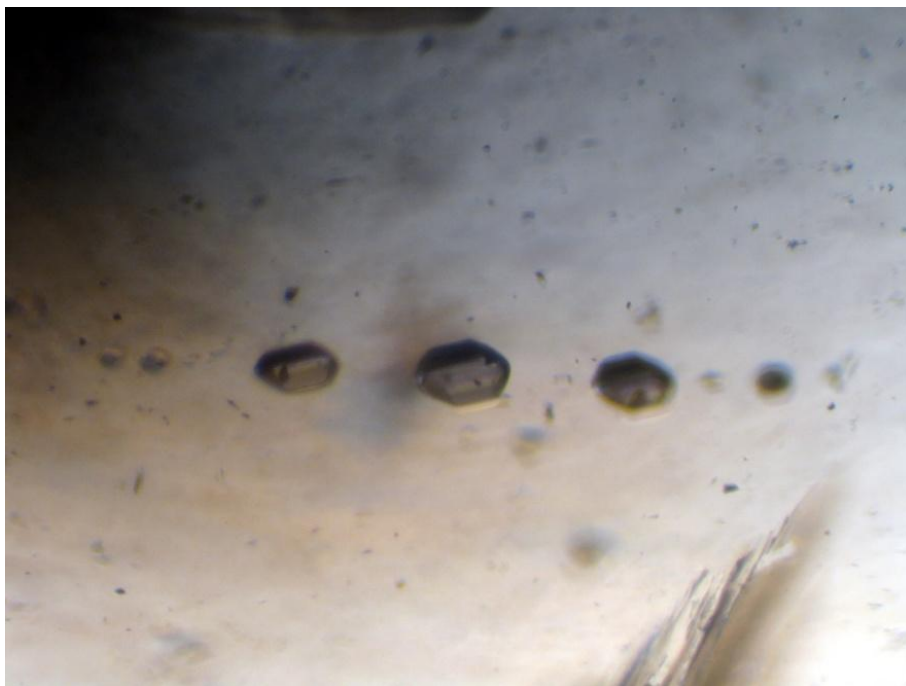
Nekoliko bolj kompleksna je situacija, če imamo v verižici tri vključke. Pri tem je potrebno upoštevati, da na srednjega deluje tlak, skrajno levega in skrajno desnega vključka. Označimo vključke z indeksi i , j in k . Zaradi simetrije v ravnovesnem stanju velja

$$\begin{aligned} p_{ji} &= p_{jk}, \\ p_{ij} &= p_{kj} = 2p_{ji} = 2p_{jk}. \end{aligned} \quad (8)$$

Od tod dobimo

$$r'_{0j} = 2r'_{0i}. \quad (9)$$

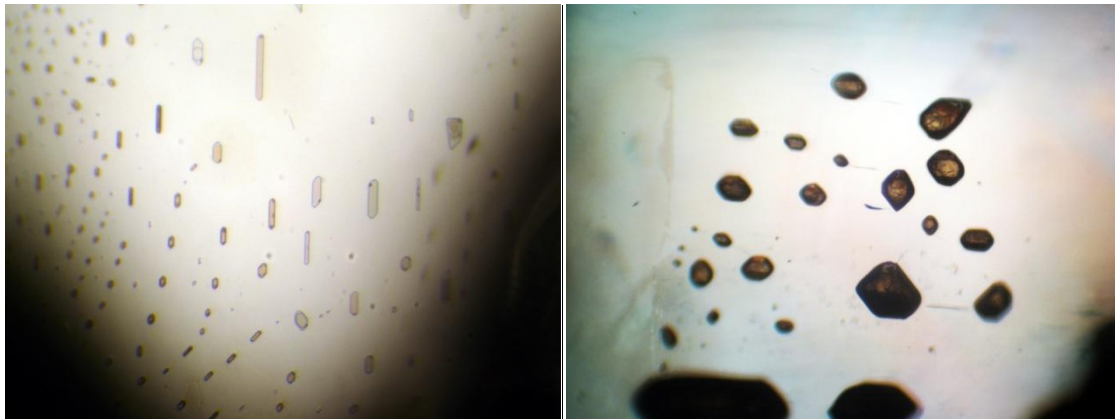
Robna vključka bosta pol manjša od centralnega. Kadar je v verižici še več vključkov, je račun bolj kompleksen, rezultat pa je podoben. Zunanji vključki bodo manjši od tistih v notranjosti verižice. Takšna teoretična napoved se dobro sklada z našimi mikroskopskimi opazovanji, kar je denimo razvidno iz spodnje fotografije. Videti je, da se LEFIM dobro ujema vsaj z nekaterimi strukturami.



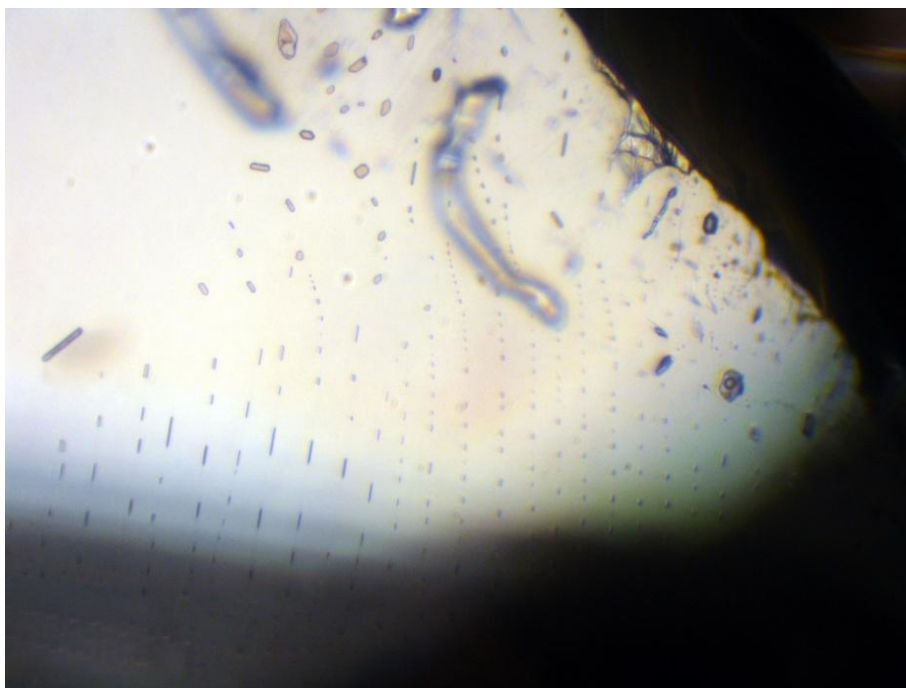
Slika 23: Zaporedje negativnih kristalov, kjer so robni kristali manjši od centralnih.

5.2.3 Dokončno formiranje strukture prstnega odtisa

V idealnih pogojih in v ravnovesnem stanju so negativni kristali znotraj strukture prstnega odtisa razporejeni v verižice. Znotraj posameznih verižic so vsi negativni kristali približno enako veliki in v ekvidistančnih razdaljah. Lahko so podolgovati ali bolj okrogli.



Slika 24: Tubasti in okrogli negativni kristali v strukturi prstnega odtisa

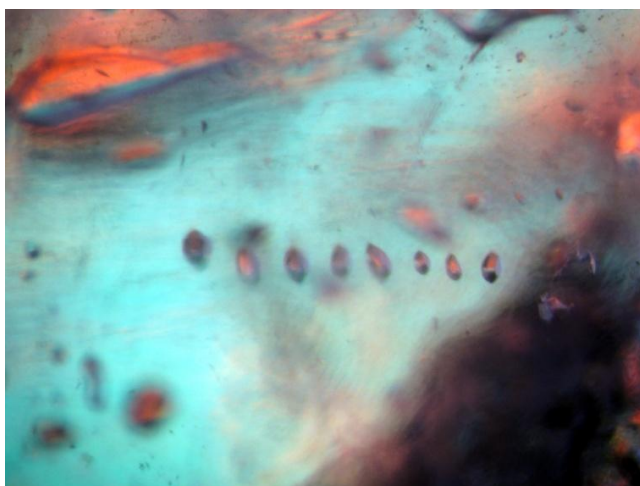


Slika 25: Struktura prstnega odtisa, v kateri so vsi negativni kristali tubaste oblike. Razporejeni so v verižice, katerih vzdolžna os je približno vzporedna s c-osjo negativnih kristalov.

Zgornja fotografija je zelo zgovorna. Zdi se, da je bila rast teh negativnih kristalov omejena na eno samo prostostno stopnjo (dolžino). V nasprotju je morda rast bolj okroglih negativnih kristalov omejena na dve ali celo tri prostostne stopnje. Prav tako pokaže, da cevka, ki

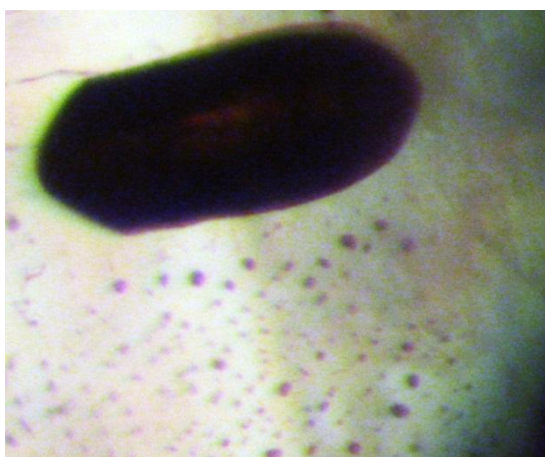
povezuje sosednja dva vključka med seboj, počasi izginja, ko se vzpostavi ravnovesno končno stanje.

Prav tako je različna usmerjenost c-osi negativnih kristalov glede na usmerjenost verižic. Na zgornji sliki je usmerjenost c-osi vsaj približno vzporedna z dolgo osjo verižic. Na sledeči fotografiji, pa je usmerjenost c-osi negativnih kristalov približno pravokotna na vzdolžno os verižic:

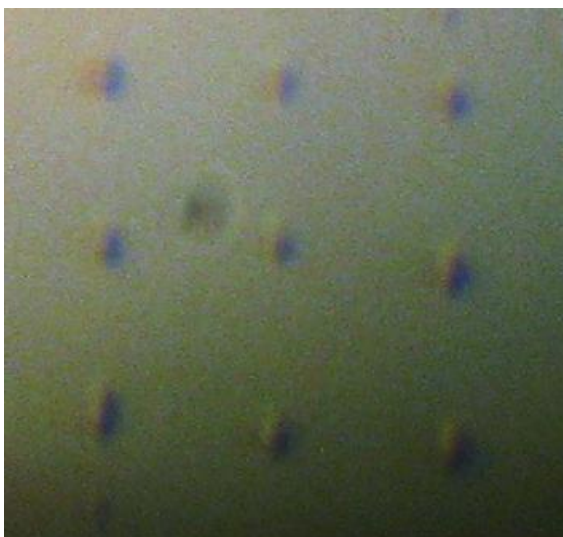


Slika 26: Verižica negativnih kristalov, v kateri je njihova c-os približno pravokotna na vzdolžno os verižice.

Nekoliko bolj zapletena pa je razlaga pravilne medsebojne urejenosti kristalnih vključkov. Ker je večina vključkov podobnih velikosti, so med seboj približno enako oddaljeni in zaradi tega pride do urejene razporeditve. Vključki se razporedijo v pravilne vzorce. Najpogosteje se uredijo v obliko verig, ker pa so tudi té enako oddaljene druga od druge, pride do nastanka oblik, podobnih kvadratom.

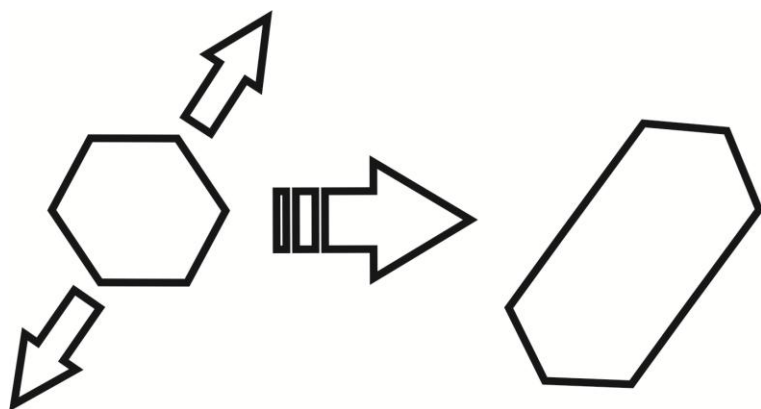


Slika 27: Od večjega vključka se enakomerno odbijajo manjši, ki so urejeni v verižice.

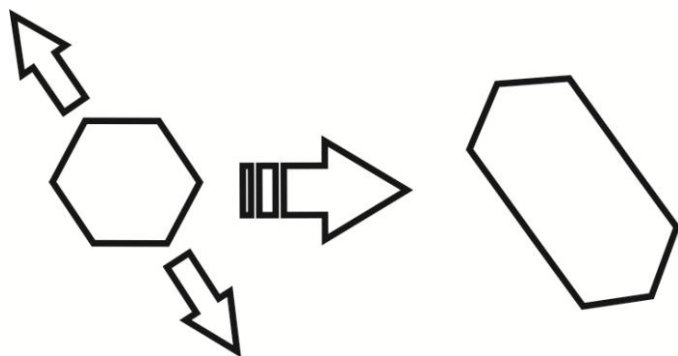


Slika 28: Vključki so pravilno urejeni v obliko kvadratov.

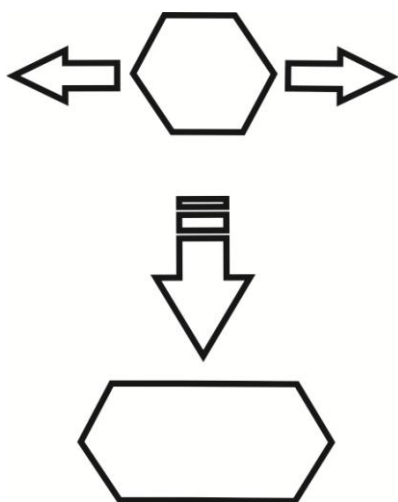
Zanimiv problem predstavlja tudi usmerjenost podolgovatih kristalnih vključkov v različnih delih iste strukture prstnega odtisa. Vključki so po našem mnenju lahko usmerjeni le v tri smeri, saj imajo obliko šestkotnikov, ti pa so raztegljivi le prek nasprotnih stranic.



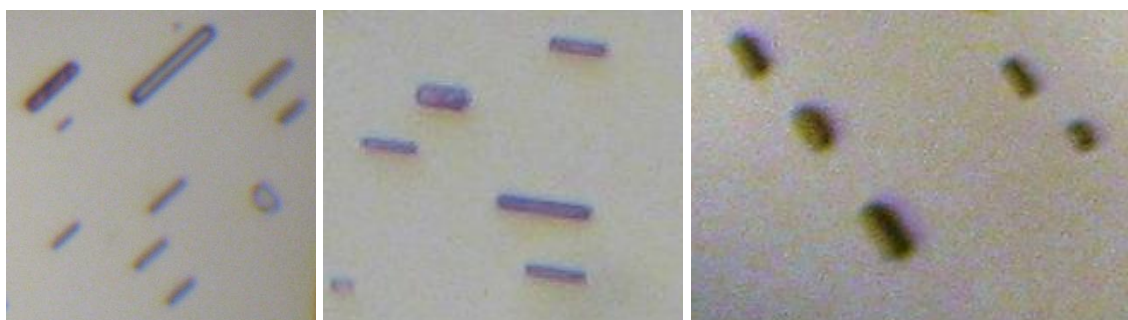
Slika 29: Raztegnjenost v smeri X



Slika 30: Raztegnjenost v smeri Y



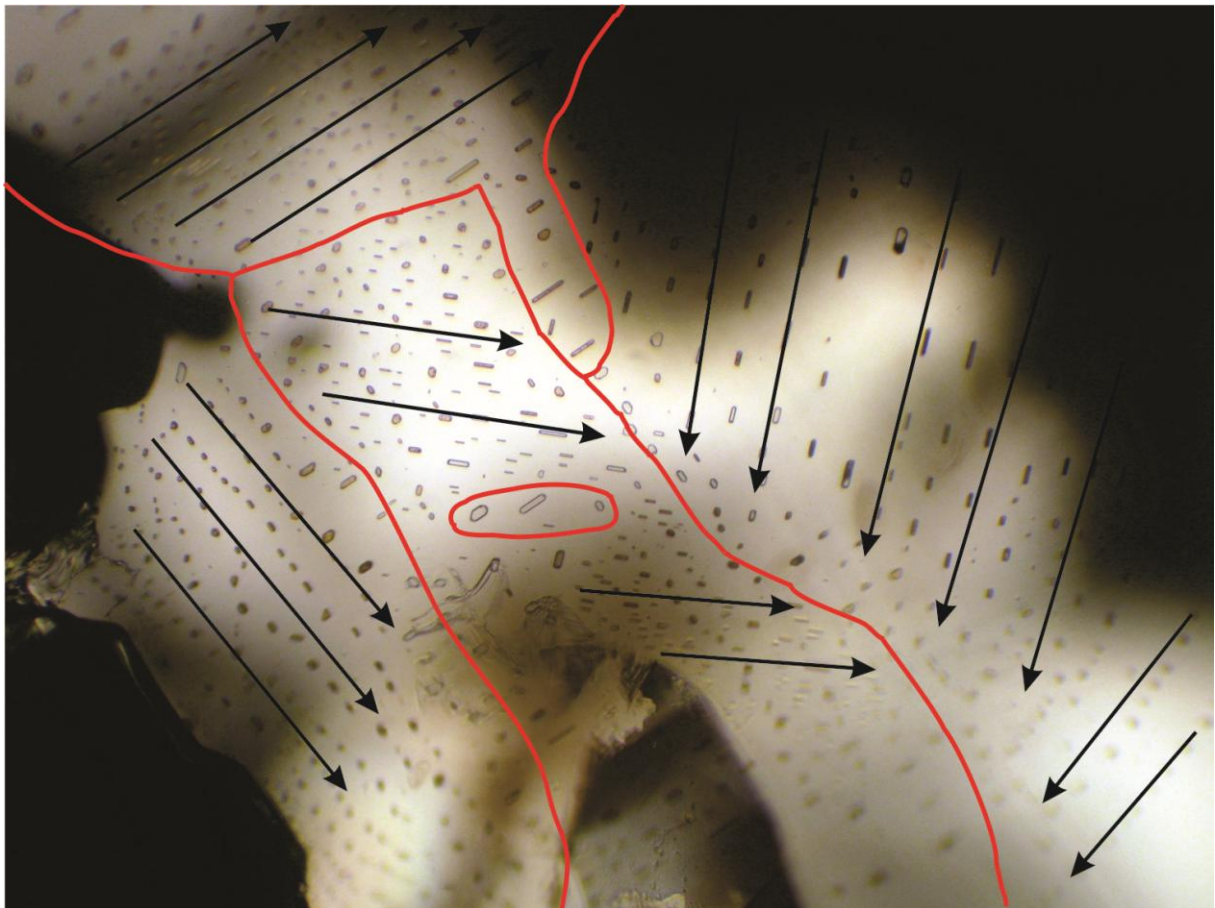
Slika 31: Raztegnjenost v smeri Z



Slika 32: Vključki so usmerjeni v tri različne smeri.

Zgornji primer prikazuje po eno domeno raztegljivosti. Gre za tri različne usmerjenosti, saj ima vsaka raztegnjen drug par stranic. Nekateri vključki so tako zelo raztegnjeni, da je njihova šestkotna oblika neprepoznava. Ker so zgornje slike zgolj izseki s fotografije, ni mogoče prepoznati, v kakšnem obsegu se v resnici pojavljajo enako usmerjeni kristalni vključki.

Na sliki 33 so prisotne štiri domene različne »raztegljivosti« vključkov. Tri izmed štirih sestavljajo svojo domeno, četrta pa pripada neki drugi domeni, ki pa ni v popolnosti prikazana na fotografiji. Na sredini slike je nekaj vključkov, ki nekoliko odstopajo od večine okrog njih. Njihova usmerjenost namreč ni v skladu z usmerjenostjo preostalih. Domene smo določili na podlagi opazovanj, saj je že z večje fotografije možno opaziti različne usmerjenosti. Z računalniškim programom Corel DRAW smo na fotografije z rdečo črto narisali meje med različno usmerjenimi skupinami vključkov.



Slika 33: Skupine enako usmerjenih vključkov so ločene s črto, puščice označujejo njihovo smer

6. Empirični del

V prejšnjem poglavju smo prišli do sledečih pomembnih ugotovitev:

1. Nastanek strukture prstnega odtisa je povezan z minimumom Gibbsove proste energije, točneje z minimumom površinske energije tekočine, ki je ujeta v kristal (e.g., Smith in Evans, 2984).
2. Nastanek strukture prstnega odtisa poteka v treh fazah. V prvi fazi nastane razpoka, ki jo kristal preraste (psevdosekundarni vključek). V drugi fazi razpoka razpade na tubaste strukture. V tretji fazi pa posamezne tubaste strukture razpadejo na verižice manjših negativnih kristalov (e.g., Smith in Evans, 2984).
3. Razpadanje tubastih struktur pri celjenju razpok je morda determinirano z različnim številom prostostnih stopenj (1D, 2D ali 3D primer).
4. Razdalja med negativnimi kristali (tekočinskimi vključki) je odvisna od njihove velikosti (naša opazovanja).

V sledečem postavljamo teoretično hipotezo. Predstavili bomo natančen matematični račun, ki pove, kako je oddaljenost med negativnimi kristali odvisna od njihove velikosti v primeru ene, dveh ali treh prostostnih stopenj. Nekaj spodnjih računov je po Ručigaj (2011). Nova je izpeljava, ki opisuje nastajanje verižic negativnih kristalov pri eni in dveh prostostnih stopnjah. Nato bomo na podlagi natančne statistične analize izbrane strukture prstnega odtisa model preverili. Namen sledečih računov je preveriti, ali obstajajo pogoji, da je površinska energija v kasnejših fazah nastajanja strukture prstnega odtisa manjša od površinske energije v prejšnjih fazah.

6.1 Matematična analiza druge faze; nastajanje tubastih struktur

Najprej se omejimo na drugo fazo, ko iz razpoke z volumnom

$$V = ab \cdot l \quad (10)$$

nastanejo tube z radijem r in dolžino l . Volumen tube je potemtakem:

$$V_t = \pi r^2 l. \quad (11)$$

Površinska potencialna energija tube je:

$$W_{p,t1} = k \cdot 2\pi r \cdot l. \quad (12)$$

V tej enačbi nastopa neka konstanta k , ki je ekvivalentna površinski napetosti. Površinska potencialna energija tube mora biti manjša, kot je površinska potencialna energija celotne razpoke:

$$W_p = k \cdot 2bl. \quad (13)$$

Tu upoštevamo le največji ploskvi razpoke. Skupni volumen vseh tub je enak začetnemu volumnu razpoke:

$$V = N_t \cdot \pi r^2 l. \quad (14)$$

Od tod sledi za število tub:

$$N_t = \frac{V}{\pi r^2 l} = \frac{ab}{\pi r^2}. \quad (15)$$

Za celotno površinsko potencialno energijo tub pa potem dobimo:

$$W_{p,t} = N_t \cdot W_{p,t1} = \frac{ab}{\pi r^2} \cdot k \cdot 2\pi r \cdot l = \frac{2kV}{r} \quad (16)$$

Skupna površinska potencialna energija vseh tub mora biti manjša od začetne površinske potencialne energije začetne razpoke:

$$\begin{aligned} k \cdot 2bl &\geq \frac{2kV}{r}, \\ r &\geq \frac{V}{bl} = a. \end{aligned} \quad (17)$$

Radij tube bo zato postal večji, kot je začetna debelina razpoke.

Za razdaljo med tubami velja sledeča zveza:

$$b = N_t \cdot 2r + (N_t - 1) d. \quad (18)$$

Od tod dobimo za razdaljo

$$d = \frac{b - N_t \cdot 2r}{N_t - 1} \approx \frac{b - N_t \cdot 2r}{N_t} = \frac{b}{N_t} - 2r. \quad (19)$$

Če upoštevamo, da velja $N_t = V/\pi r^2 l$, sledi

$$d = \frac{\pi bl}{V} r^2 - 2r. \quad (20)$$

V nadaljevanju nas zanima tudi razdalja D_t med središči tub, zato zgornjemu rezultatu prištejemo $2r$. Dobimo:

$$D_t = \frac{\pi bl}{V} r^2 = konst. S_t \quad (21)$$

Vidimo, da je razdalja med tubami premo sorazmerna s površino osnovne ploskve tube.

6.2 Matematična analiza tretje faze

6.2.1 Ena prostostna stopnja

V tem primeru predpostavimo, da so tekočinski vključki tubaste oblike. V posamezni veržici imajo vsi tubasti negativni kristali enako osnovno ploskev in enako dolžino. Zanima nas odvisnost razdalje med njimi od njihove dolžine. Prostostna stopnja je torej dolžina tubastih negativnih kristalov, x . Pri tem bomo predpostavili, da je skupna površinska energija negativnih kristalov po razpadu manjša kot od začetne tube, iz katere so negativni kristali nastali. Volumen tekočine pa se ohranja. Skupni volumen negativnih kristalov v verigi je:

$$V_t = N \cdot Sx \quad (22)$$

in mora biti enak kot začetni volumen tube. Negativni kristali so v tem primeru tube z osnovno ploskvijo $S = \pi R^2$ in dolžino x . Od tod sledi za število negativnih kristalčkov v verigi:

$$N = \frac{V_t}{\pi R^2 x} = \frac{r^2 l}{R^2 x}. \quad (23)$$

Površinska potencialna energija negativnih kristalov v verigi je:

$$W_p = k \cdot N \cdot 2\pi R \cdot x = k \frac{2\pi r^2 l}{R}. \quad (24)$$

Prav tako predpostavimo, da sta razdalja d med negativnimi kristali ter njihova dolžina R geometrično povezana s prvotno dolžino tube, in sicer:

$$l = N \cdot x + (N - 1) d. \quad (25)$$

Od tod sledi za razdaljo d

$$d = \frac{l - N \cdot x}{N - 1} = \frac{l - \frac{V_t}{\pi R^2 x} x}{N - 1} = \frac{l - \frac{V_t}{\pi R^2}}{N - 1}. \quad (26)$$

Ali če nadaljujemo

$$\begin{aligned} d &= \frac{l - \frac{V_t}{\pi R^2}}{\frac{V_t}{\pi R^2 x} - 1} \approx \frac{l - \frac{V_t}{\pi R^2}}{\frac{V_t}{\pi R^2 x}} = \frac{\left(l - \frac{V_t}{\pi R^2}\right) \cdot \pi R^2 x}{V_t} = \frac{\pi R^2 l - V_t}{V_t} x = \\ &= \frac{\pi R^2 l}{V_t} x - x. \end{aligned} \quad (27)$$

Razdalja med središči vključkov (tub) je

$$D = d + x = \frac{\pi R^2 l}{V_t} x. \quad (28)$$

Razdalja med tubastimi vključki je premosorazmerna z njihovo dolžino.

Pri tem velja, da je skupna površinska energija kristalov manjša od skupne površinske energije tube:

$$k \cdot 2\pi r \cdot l \geq k \frac{2\pi r^2 l}{R}, \quad (29)$$

od koder sledi:

$$R \geq r. \quad (30)$$

Radij tubastega negativnega kristala (osnovne ploskve) je torej večji kot je začetni radij tube, iz katerega je negativni kristal nastal.

6.2.2 Dve prostostni stopnji

V primeru dveh prostostnih stopenj je ena dimenzija vključkov v verigah konstatna. Naj bo volumen posameznega vključka $V = Sh$, kjer je $S = \pi R^2$ osnovna ploskev, h pa je višina. Slednja je konstanta, torej $h = konst.$ Domnevamo, da je vrednost h podana z začetnim radijem tube r , iz katere so nastali negativni kristali. Skupni volumen negativnih kristalov v verigi je:

$$V_t = N \cdot Sh \quad (31)$$

in mora biti enak kot začetni volumen tube. Od tod sledi za število negativnih kristalov v verigi:

$$N = \frac{V_t}{\pi R^2 h} = \frac{r^2 l}{R^2 h}. \quad (32)$$

Površinska potencialna energija negativnih kristalov v verigi je:

$$W_p = k \cdot N \cdot \pi R^2 = k \frac{\pi r^2 l}{h}. \quad (33)$$

Pri tem predpostavimo, da je $R \geq h$. Prav tako predpostavimo, da sta razdalja d med negativnimi kristali ter njihova dolžina R geometrično povezana s prvotno dolžino tube, in sicer:

$$l = N \cdot 2R + N - 1 \cdot d. \quad (34)$$

Od tod sledi za razdaljo d

$$d = \frac{l - N \cdot 2R}{N - 1} = \frac{l - \frac{V_t}{\pi R^2 h} 2R}{N - 1} = \frac{l - \frac{2V_t}{\pi R h}}{N - 1}. \quad (35)$$

Ali če nadaljujemo

$$\begin{aligned} d &= \frac{l - \frac{2V_t}{\pi R h}}{\frac{V_t}{\pi R^2 h} - 1} \approx \frac{l - \frac{2V_t}{\pi R h}}{\frac{V_t}{\pi R^2 h}} = \frac{\left(l - \frac{2V_t}{\pi R h}\right) \cdot \pi R^2 h}{V_t} = \frac{\pi R^2 h l - V_t 2R}{V_t} = \\ &= \frac{\pi R^2 h l}{V_t} - 2R. \end{aligned} \quad (36)$$

Razdalja med središči vključkov (tub) je

$$D = d + 2R = \frac{\pi h l}{V_t} R^2 \quad (37)$$

Razdalja med tubastimi vključki je premosorazmerna z njihovo dolžino. Pri tem velja, da je skupna površinska energija kristalov manjša od skupne površinske energije tube:

$$k \cdot 2\pi r \cdot l \geq k \frac{\pi r^2 l}{h} \quad (38)$$

od koder sledi:

$$h \geq r \quad (39)$$

Višina negativnega kristala h je torej večja kot je začetni radij tube, iz katerega je negativni kristal nastal.

6.2.3 Tri prostostne stopnje

Skupni volumen negativnih kristalov v verigi je:

$$V_t = N \cdot \frac{4\pi R^3}{3}. \quad (40)$$

in mora biti enak kot začetni volumen tube. Od tod sledi za število negativnih kristalčkov v verigi:

$$N = \frac{3V_t}{4\pi R^3}. \quad (41)$$

Površinska potencialna energija negativnih kristalov v verigi je:

$$W_p = k \cdot N \cdot 4\pi R^2 = \frac{3kV_t}{R}. \quad (42)$$

Prav tako predpostavimo, da je razdalja d med negativnimi kristali ter njihov radij R geometrično povezan s prvotno dolžino tube, in sicer:

$$l = N \cdot 2R + N - 1 \cdot d. \quad (43)$$

Od tod sledi za razdaljo d

$$d = \frac{l - N \cdot 2R}{N - 1} = \frac{l - \frac{3V_t}{4\pi R^3} \cdot 2R}{N - 1} = \frac{l - \frac{3V_t}{2\pi R^2}}{N - 1}. \quad (44)$$

Ali če nadaljujemo:

$$\begin{aligned} d &= \frac{l - \frac{3V_t}{2\pi R^2}}{\frac{3V_t}{4\pi R^3} - 1} \approx \frac{l - \frac{3V_t}{2\pi R^2}}{\frac{3V_t}{4\pi R^3}} = \frac{\left(l - \frac{3V_t}{2\pi R^2}\right) \cdot 4\pi R^3}{3V_t} = \frac{4\pi R^3 l - 6V_t R}{3V_t} \\ &= \frac{4\pi l}{3V_t} R^3 - 2R. \end{aligned} \quad (45)$$

Če nas zanima razdalja med središči negativnih kristalov D , zgornjemu rezultatu prištejemo $2R$ in dobimo:

$$D = \frac{4\pi l}{3V_t} R^3 \quad (46)$$

Prišli smo do pomembnega rezultata, ki kaže, da je razdalja med negativnimi kristali premo sorazmerna s kubom njihovega radija. Pri tem velja, da je skupna površinska energija kristalov manjša od skupne površinske energije tube:

$$k2\pi r l \geq \frac{3kV_t}{R} \quad (47)$$

od koder sledi:

$$R \geq \frac{3}{2} r \quad (48)$$

Radij negativnega kristala je torej večji kot je začetni radij tube, iz katerega je negativni kristal nastal.

6.2.4 Število prostostnih stopenj pri nastajanju negativnih kristalov

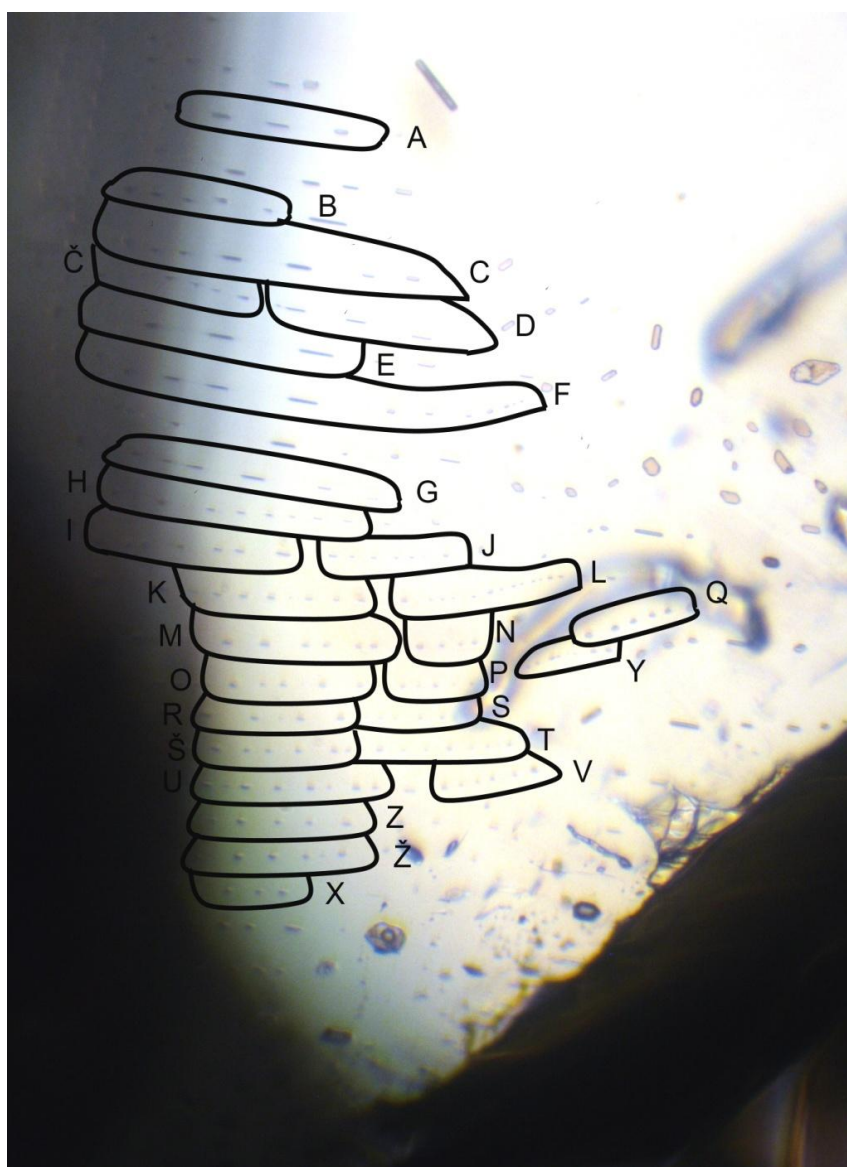
Zgornji rezultati nazorno kažejo, da je razdalja med negativnimi kristali v verižicah odvisna od njihovega radija:

$$\begin{aligned} D &= \text{const.} \cdot R^n \\ R &= \text{const.} \cdot D^{1/n} \end{aligned} \quad (49)$$

Tu je n prostostna stopnja sistema. V drugi fazi nastajanja (nastajanje tub) negativnih kristalov je število prostostnih stopenj $n = 2$, v tretji fazi pa je število prostostnih stopenj lahko poljubno, torej $1 \leq n \leq 3$.

6.3 Preverjanje hipoteze

Meritve smo opravljali na povečanem modelu fotografije mikroskopskih vključkov v kristalu (glej slika 34), najdenem blizu Crngroba.



Slika 34: Označene verižice kristalov na mikroskopski fotografiji, ki smo jo podrobno opazovali.

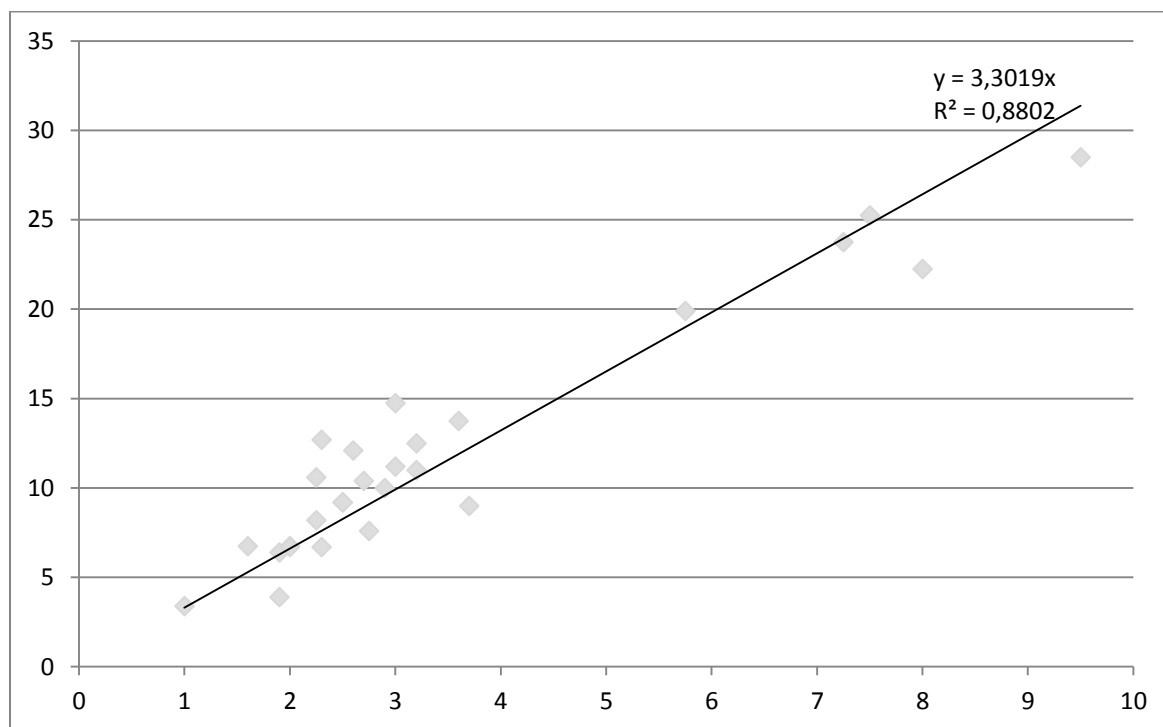
To fotografijo smo izbrali predvsem zaradi jasne in izrazite razporejenosti vključkov v značilne verižice. Zanimalo nas je razmerje med prečno dolžino posameznih negativnih kristalov in razdaljo med posameznimi vključki.

Ugotovili smo, da vseh verižic ne moremo obravnavati enako, saj so velikosti vključkov v njih različnih velikosti. Zato smo najprej izločili izrazite in po možnosti homogene verige. Tako smo prišli do skupaj 27 verig. V vsaki verigi posebej smo nato izmerili dolžino posamezne tube in razdaljo med centralnima točkama sosednjih tub. Izbrana enota je imaginarna, saj je nemogoče določiti dejansko magnitudo povečave. Kot končno vrednost smo za vsako izmed 27 verig določili povprečno vrednost velikosti tub ter razdalje med središči le-teh. Podatke smo tako zbrali za vse določene verižice in jih uredili v preglednico.

	$\bar{x}$	$\bar{D}$
A	8	22,25
B	3	14,75
C	5,75	19,9
Č	3,7	9
D	7,25	23,75
E	9,5	28,5
G	7,5	25,25
H	2,9	10
I	3,2	12,5
J	1,9	6,4
K	2,7	10,4
L	1,9	3,9
M	3	11,2
N	2,3	6,7
O	2,5	9,2
P	2	6,75
R	3,2	11
S	1,6	6,75
Š	2,25	10,6
T	2,25	8,2
U	3,6	13,75
V	2	6,7
Z	2,6	12,1
Ž	2,3	12,7
X	2,5	9,2
Y	1	3,4
Q	2,75	7,6

Tabela 1: Odvisnost povprečne razdalje $\bar{D}$ (med središči) od povprečne dolžine negativnih kristalov $\bar{x}$.

Zbrane podatke smo nato vnesli v graf, kjer nas je zanimala predvsem odvisnost razdalje med centralnima točkama tub od prečne velikosti posameznih tub v verižici.



Graf 1: Odvisnost povprečne razdalje $\bar{D}$ (med središči) od povprečne dolžine negativnih kristalov $\bar{x}$.

Iz grafa je jasno razvidno, da z večanjem velikosti tub narašča tudi razdalja med njimi. Še več, razdalja raste premo-sorazmerno in linearno, kjer enačbo linearne funkcije lahko zapišemo tudi kot $y = 3.3019x$, kjer y predstavlja razdaljo med centralnimi točkami posameznih tub, x pa prečno velikost le teh. Korelacijski faktor funkcije, ki nam pove v kolikšni meri pridobljeni podatki ustrezajo izračunani funkciji, je približno 88%.

6.4 Reinterpretacija meritev Ručigajeve (2011)

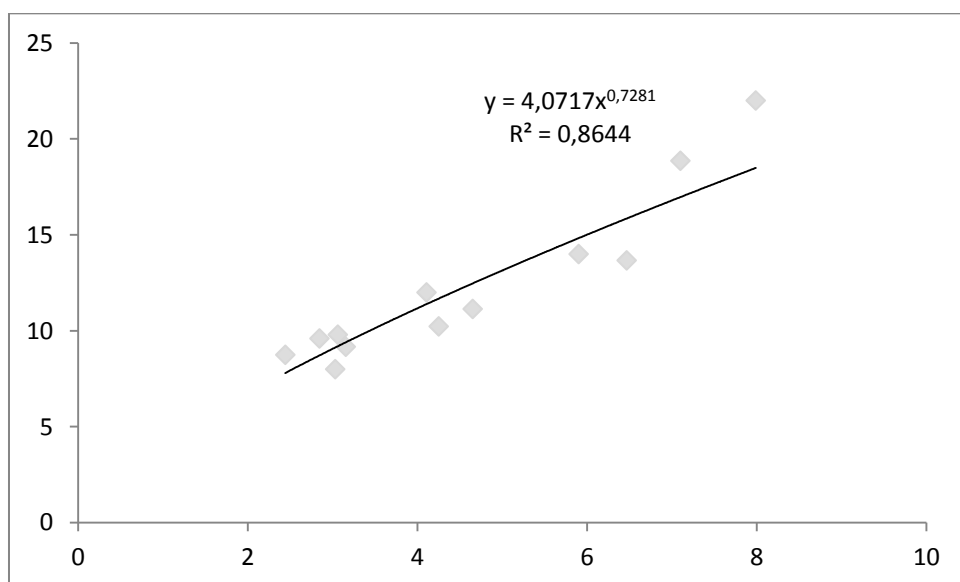
V nadaljevanju smo reinterpretirali podatke, ki jih je zbrala Ručigajeva (2011) pri analizi strukture prstnega odtisa v kristalu kremena iz Bezuljaka (slika 13). Ručigajeva je natančno analizirala odvisnost povprečne razdalje med negativnimi kristali v posameznih verižicah od njihovega radija. Interpretirala je, da odvisnost kaže na model dveh prostostnih stopenj.

V spodnji tabeli so navedeni podatki, ki za posamezno verižico prikazujejo povprečno razdaljo $\bar{D}$ od povprečnega radija vključkov $\bar{R}$.

$\bar{D}$	$\bar{R}$
3,03	8
2,44	8,75
3,15	9,17
2,84	9,6
3,06	9,8
4,25	10,23
4,65	11,14
4,10	12
6,46	13,67
5,90	14
7,09	18,86
7,98	22

Tabela 2: Razdalja med vključkoma glede na radij vključka.

Podatke smo fitali z eksponentno funkcijo, rezultat pa kaže, da velja zveza $\bar{D} = 4.07R^{0.73}$. Število prostostnih stopenj je torej približno $\frac{3}{4}$. Tak rezultat govori v prid možnosti, da je najboljši teoretični model tisti z eno prostostno stopnjo.



Graf 2: Odvisnost povprečne razdalje $\bar{D}$ od povprečnega radija vključkov $\bar{R}$

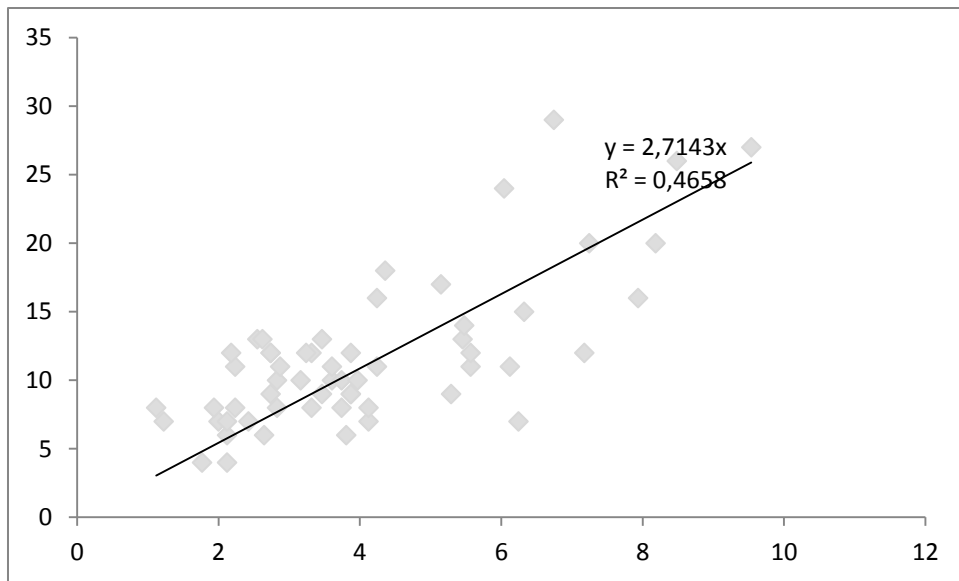
To potrjuje tudi test, pri katerem smo analizirali velikost posameznega negativnega kristala R in razdaljo do prvega sosednjega vključka D . Podatki so navedeni v tabeli.

D	R
1,76	4
2,12	4
2,64	6
3,80	6
2,12	6
1,99	7
6,24	7
2,12	7
2,42	7
4,12	7
1,22	7
2,82	8
2,23	8
1,93	8
1,11	8
4,12	8
3,74	8
3,31	8
3,87	9
5,29	9
2,73	9
3,46	9
3,87	9
3,60	10
3,16	10
3,74	10
2,82	10
3,96	10
4,24	11

3,60	11
2,23	11
2,87	11
6,12	11
5,56	11
3,31	12
2,17	12
7,17	12
2,73	12
3,23	12
3,87	12
5,56	12
2,73	12
2,54	13
3,46	13
5,45	13
2,62	13
5,47	14
6,32	15
7,93	16
4,24	16
5,14	17
4,35	18
8,18	20
7,24	20
6,03	24
8,48	26
9,53	27
6,74	29

Tabela 3: velikost posameznega negativnega kristala R in razdalja do prvega sosednjega vključka D .

V tem primeru se najboljše prilega linearna funkcija $D = 2.71R$. Prostostna stopnja modela je torej 1.



Graf 3: Odvisnost velikosti posameznega negativnega kristala R od razdalje do prvega sosednjega vključka D .

V obeh primerih so rezultati statistične analize obravnavane strukture prstnega odtisa skladni z modelom ene prostostne stopnje. Ta model namreč napoveduje opaženo linearno odvisnost razdalje med negativnimi kristali od njihove dolžine (radija).

7. Zaključki in diskusija

V raziskovalni nalogi smo preverili relevantnost Linearne elastične teorije tekočinskih vključkov, oziroma LEFIM (Linear Elastic Fluid-Inclusions Mechanics) pri razlagi nastajanja in konfiguracije strukture prstnih odtisov (fingerprint patterns) v kristalih kremenca. Te strukture nastajajo v treh kontinuiranih fazah:

- 1) V prvi fazi nastane razpoka, v katero se ujame tekočina. Kristal pri nadaljni rasti to tekočino preraste, zato tekočina ostane zaprta v kristalu.
- 2) V drugi fazi pride do razpada/celjenja razpoke na vzdolžne, tubaste strukture, ki so različno debele in dolge. V različnih domenah nekdanje razpoke so posamezne tube med seboj vzporedne (e.g., Smith in Evans, 2984).
- 3) V tretji fazi tubaste strukture razpadejo na verižice negativnih kristalov, ki so v ekvidistančnih razdaljah (e.g., Smith in Evans, 2984).

Nastanek strukture prstnega odtisa v dosedanji literaturi ni zadovoljivo pojasnjen. Obstajajo številni modeli cilindrizacije in sferoidizacije, ki nastopita pri celjenju razpok. Ti modeli temeljijo na zakonih termodinamike, difuzije in na elastični teoriji dislokacij. Recenzijo doslej znanih mehanizmov je podal Schaneman (2009), v grobem pa jih lahko delimo v a) Raleighhovo perturbacijsko teorijo, b) Mullins-Nicholsovo modificirano perturbacijsko teorijo, c) termično teorijo, d) prelomno-migracijsko teorijo, d) teorijo multiplih mehanizmov in e) Ostwaldovo teorijo. Vsi modeli so teoretično izjemno zahtevni. Naša mikroskopska opazovanja nedvomno kažejo, da igrajo pomembno vlogo tudi Greenove elastične napetosti v kristalu. V tem smislu je najbolj uporabna teorija, ki jo je razvil Eshelby (1957). V našem besedilu to teorijo imenujemo Linearna elastična teorija tekočinskih vključkov oziroma LEFIM (Linear Elastic Fluid-Inclusion Mechanics). Ta teorija temelji na linearni teoriji elastičnosti, bolj natančno na teoremu recipročnosti in reprezentacije in teoriji Greenovih elastičnih polj, katere formalizirano sintakso je podal Udias (1999).

Osnovna ideja LEFIM je, da se po prvi fazi kristal ohladi in termično skrči, bolj kot tekočina v ujetih razpokah. Kristal tekočino močno stisne, zato pride do kasnejše rekristalizacije kristala in razpada/celjenja razpoke. Pri tem kristal išče konfiguracijo z najmanjšo površinsko energijo tekočine v njegovi notranjosti. Dinamiko tekočinskih vključkov vsaj do neke mere definira Greenovo elastično polje, ki povzroča na tekočino nekakšno vzgonsko silo, to je

Greenovo gradientno silo. Posamezni negativni kristali se med seboj odbijajo. Hkrati Greenova gradientna sila povzroči, da so sosednji negativni kristali približno enako veliki. V tej raziskovalni nalogi smo obstoj Greenove gradientne sile potrdili s mikroskopskimi opazovanji.

V raziskovalni nalogi smo preverili tudi hipotezo, ki pravi da se tekom nastajanja strukture prstnega odtisa površinska energija zmanjšuje (e.g., Smith in Evans, 2984). Naš model vključuje različno število prostostnih stopenj. In sicer je število prostostnih stopenj odvisno od oblike končnih negativnih kristalov. Zanimivo je, da naši empirični podatki, ki smo jih dobili z mikroskopskimi analizami, kažejo, da je najbolj pravilen teoretičen model z eno prostostno stopnjo. Dve dimenziji negativnih kristalov, ki nastajajo v tretji fazi, sta določeni z debelino tub, iz katerih ti negativni kristali nastajajo. Ena dimenzija pa je prosta. Ta model napove, da je razdalja med negativnimi kristali premo-sorazmerna z njihovo dolžino, kar smo z mikroskopskimi opazovanji dejansko potrdili.

8. Reference

1. Shelton, K., Orville, P., 1980: Formation of synthetic fluid inclusions in natural quartz. *American Mineralogist*, Volume 65, 1233-1236 str.
2. Rykart, R., 1995: Quartz – Monographie. Ott Verlag Thun (1989), 2. Auflage (1995), 462 S.
3. Shin, D., Insung, L., 2006: Fluid inclusions and their stable isotope geochemistry of the carbonate-hosted talc deposits near the Cretaceous Muamsa Granite, South Korea. *Geochemical Journal*, Volume 40, 69-85 str.
4. Smith, D., Evans, B., 1984: Diffusional Crack Healing in Quartz. *Journal of geophysical research* 89/B6, 4125-4135.
5. Eshelby, J.D., 1957. The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proceedings of the Royal Society of London* 241 (1226), 376–396, doi:10.1098/rspa.1957.0133.
6. Udias, A., 1999. Principles of Seismology. 475 pp., Cambridge University Press.
7. Nichols, F.A., Mullins, W.W., 1965. Surface- (interface-) and volume-diffusion contribution to morphological changes driven by capillarity, *Trans. Metall. Soc.* 233, 1840-1848.
8. Nichols, F.A., 1976. On the spheroidization of rod-shaped particles of finite length, *J. Mater. Sci.* 11, 1077-1082.
9. Schaneman, R.A., 2009. The effects of prior microstructure on spheroidizing kinetics and cold workability in bar steels. Ph.D. thesis, Colorado School of Mines, 123 pp.
10. Ručigaj, S., 2011. Negativni kristali kot Plateaujev problem. Raziskovalna naloga, Gimnazija Kranj, 29. Str.

DODATEK

Linearna elastična teorija tekočinskih vključkov

Linear Elastic Fluid-Inclusion Mechanics (LEFIM)

V sledečem opisujemo rešitve enačb Eshelbyja (1957) in enačb Greenove reprezentacije elastičnih polj v okolici okroglega tekočinskega vključka. Formalizirana matematična sintaksa je povzeta po Udias (1999). Rešitve je v pomoč interpretaciji naših mikroskopskih pazovanj izpeljal dr. Jure Žalohar.

DODATEK 1: Deformacije in napetosti

Napetosti v kristalu opišemo s tenzorjem napetosti

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{pmatrix}. \quad (50)$$

V odsotnosti zunanjih navorov je tenzor napetosti simetričen, kar pomeni

$$\tau_{ij} = \tau_{ji}. \quad (51)$$

V kartezičnem koordinatnem sistemu komponente na diagonali, torej $i = j$, predstavljajo normalne napetosti, izvendiagonalni elementi, $i \neq j$, pa predstavljajo tangencialne ali strižne napetosti.

Deformacijo kontinuumu opišemo z vektorjem $\vec{u}$. Naj bo $\vec{r}$ začetna pozicija neke točke, $\vec{r}'$ pa končna. Oba vektorja med seboj povezuje enačba

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{u}. \quad (52)$$

Naj bo dl diferencialna razdalja med dvema točkama kontinuuma. Pri homogeni deformaciji se razdalja dl ne spreminja. Če deformacija ni homogena, pa se dl spremeni. Deformacijski tenzor je definiran na podlagi spremembe diferencialne razdalje dl . Če je razdalja med sosednjima točkama pred deformacijo dl , po deformaciji pa dl' , potem v aproksimaciji prvega reda lahko napišemo

$$dl'^2 - dl^2 = 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j dx_i. \quad (53)$$

V primeru infinitezimalnih deformacij je Cauchyjev tenzor deformacije

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (54)$$

V tej enačbi uporabimo vejice kot oznako za odvode. Zgornji tenzor je po definiciji simetričen

$$e_{ij} = e_{ji}. \quad (55)$$

Samo šest od devetih komponent je med seboj različnih. Komponente tenzorja deformacije imajo tudi preprosto geometrično interpretacijo. Diagonalni elementi predstavljajo longitudinalno deformacijo vzdolž koordinatnih osi, izvendiagonalni elementi pa predstavljajo deformacijo kotov med koordinatnimi osmi v deformiranem in nedeformiranem stanju. Deformacije tega tipa se imenujejo strižne deformacije.

DODATEK 2: Lastne vrednosti in lastni vektorji

Tenzorja napetosti τ_{ij} in deformacije e_{ij} lahko interpretiramo v smislu lastnih vrednosti in lastnih vektorjev. Ker sta oba tenzorja simetrični 3x3 matriki, imata tri realne lastne vrednosti, ki jim pripadajo trije ortogonalni (med seboj pravokotni, ki so dolgi eno enoto) lastni vektorji. Lastni vektorji formirajo t.i. lastni koordinatni sistem, v katerem se oba tenzorja τ_{ij} in e_{ij} zapišeta v diagonalni obliki. Vsi izvendiagonalni elementi so enaki nič. V nasprotju pa so diagonalni elementi lahko različni od nič in se imenujejo lastne vrednosti. Iz enačbe

$$\text{Det}(\tau_{ij} - \sigma \delta_{ij}) = 0 \quad (56)$$

lahko izračunamo lastne vrednosti in vektorje. Trije lastni vektorji $\vec{\sigma}_1$, $\vec{\sigma}_2$ in $\vec{\sigma}_3$ ustrezajo lastnim vrednostim σ_1 , σ_2 in σ_3 . V lastnem koordinatnem sistemu ima tenzor napetosti sledečo obliko:

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Pri tem izberemo $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$.

V podobnem smislu lahko v lastnem koordinatnem sistemu napišemo tudi tenzor deformacije:

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Vsota diagonalnih elementov obeh tenzorjev je prva invarianta matrike, tako da za vsako orientacijo koordinatnih osi velja

$$\begin{aligned} \tau_{11} + \tau_{22} + \tau_{33} &= \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = \textit{konst.} \\ e_{11} + e_{22} + e_{33} &= e_1 + e_2 + e_3 = \textit{konst.} \end{aligned} \quad (59)$$

V primeru tenzorja deformacije ta vsota predstavlja spremembo volumna na enoto volumna in se imenuje volumska dilatacija θ . Ta je hkrati enaka tudi divergenci vektorja deformacije

$$\begin{aligned} e_{11} + e_{22} + e_{33} &= e_1 + e_2 + e_3 = \theta, \\ \operatorname{div} \vec{u} &= \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \theta. \end{aligned} \quad (60)$$

Tenzorja napetosti in deformacije lahko izrazimo kot vsoto izotropičnega in deviatoričnega dela

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \sigma_0 \delta_{ij} + \tau'_{ij}, \\ e_{ij} &= e_0 \delta_{ij} + e'_{ij}. \end{aligned} \quad (61)$$

Tu velja še

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \frac{1}{3}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \\ e_0 &= \frac{1}{3}(e_1 + e_2 + e_3) \end{aligned} \quad (62)$$

Deviatorični del opisuje spremembo oblike telesa, medtem ko izotropični del opisuje spremembo volumna telesa.

DODATEK 3: Hookov zakon

Mehansko obnašanje kontinuuma opredeljuje relacija med napetostmi in deformacijami. Za linearno elastičen material je ta relacija dana s t.i. Hookovim zakonom, ki pravi, da so deformacije prenosorazmerne z napetostmi. Cauchyjeva formulacija v tenzorski obliki se glasi

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} e_{kl}. \quad (63)$$

Ta enačba je temelj linearne teorije elastičnosti. Tenzor C_{ijkl} je četrtega reda in ima 81 komponent. Zaradi simetrije tenzorjev τ_{ij} in e_{ij} je samo 36 komponent med seboj različnih. Izkaže se, da zaradi specifičnih lastnosti prožnostne energije velja $C_{ijkl} = C_{klij}$, kar število med seboj različnih komponent zmanjša na 21. V najenostavnejšem primeru izotropnega materiala (enake lastnosti v vseh smereh), lahko tenzor C_{ijkl} izrazimo z dvema Lamejevima koeficientoma

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (64)$$

Tako imamo Hookov zakon v obliki

$$\tau_{ij} = \lambda \delta_{ij} e_{kk} + 2\mu e_{ij}. \quad (65)$$

Tu seveda upoštevamo Einsteinov sumacijski dogovor. To pomeni, da je $e_{kk} = \theta$ sled tenzorja deformacije. V smislu odvodov vektorja deformacije lahko zgornjo enačbo zapišemo tudi takole

$$\tau_{ij} = \lambda \delta_{ij} u_{k,k} + 2\mu(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (66)$$

Hookov zakon lahko izrazimo tudi v smislu stisljivostnega modula K in strižnega modula G . Pri tem se stisljivostni modul K nanaša na spremembo volumna telesa brez spremembe oblike. Strižni modul pa se nanaša na spremembo oblike telesa brez spremembe volumna. V prvem primeru imamo

$$\begin{aligned} \tau_{11} + \tau_{22} + \tau_{33} &= 3K(e_{11} + e_{22} + e_{33}), \\ \text{Tr}(\tau_{ij}) &= 3K \text{Tr}(e_{ij}). \end{aligned} \quad (67)$$

V primeru hidrostaticnega tlaka, kjer velja $\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{33} = -P$ lahko pišemo

$$P = -K\theta. \quad (68)$$

Koeficient K predstavlja kvocient med tlakom in volumskimi spremembami. Zaradi tega se imenuje tudi stisljivostni modul (ang. *bulk modulus or incompressibility*). Drugi modul G povezuje spremembe oblike telesa brez spremembe volumna in povezuje deviatorični del tenzorjev deformacije in napetosti

$$\tau'_{ij} = 2G e'_{ij}. \quad (69)$$

Koeficient G je ekvivalenten Lamjevi konstanti μ in se imenuje strižni modul ali rigidnost.

Velja sledeča zveza:

$$\begin{aligned} G &= \mu, \\ K &= \lambda + \frac{2}{3}\mu. \end{aligned} \quad (70)$$

Še en pomemben koeficient elastičnosti je Youngov modul, ki povezuje longitudinalne napetosti in deformacije v isti smeri

$$E = \frac{\tau_{11}}{e_{11}}. \quad (71)$$

Zveza med E , λ , μ in K je

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} = \frac{9K\mu}{3K + \mu}. \quad (72)$$

Poissonovo razmerje pa povezuje longitudinalne in transversalne deformacije

$$\sigma = \frac{e_{22}}{e_{11}}. \quad (73)$$

Pri tem velja

$$\sigma = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}. \quad (74)$$

Vrednost Poissonovega razmerja je med 0 in $\frac{1}{2}$.

DODATEK 4: Vpliv temperature

Med deformacijo elastičnega kontinuuma lahko pride do temperaturnih sprememb. To pomeni, da moramo premisliti termodinamske zakonitosti. Če se temperatura spremeni od T_0 na T , lahko za izotropičen material napišemo sledečo zvezo med tenzorjem napetosti in deformacije

$$\tau_{ij} = \delta_{ij} \lambda e_{kk} + 2\mu e_{ij} - K\beta(T_0 - T)\delta_{ij}. \quad (75)$$

V zadnjem členu nastopa koeficient termičnega raztezanja β . Če ni nobene napetosti, torej $\tau_{ij} = 0$, potem imamo

$$e_{kk} = \theta = \beta(T_0 - T). \quad (76)$$

Oziroma

$$dV = V\beta \cdot dT. \quad (77)$$

Če je sprememba temperature pozitivna (povečanje temperature), je sprememba volumna tudi pozitivna (povečanje volumna). Koeficient β povezuje spremembo volumna s spremembo temperature pri konstantnem tlaku

$$\beta = \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (78)$$

DODATEK 5: Greenov tenzor deformacije

Osnovni relaciji, ki opisujeta obnašanje elastičnega medija, sta kontinuitetna enačba in Navierova enačba. Prva je posledica principa ohranitve energije in mase, druga pa je posledica 2. Newtonovega zakona. Tule se seveda ne bomo ukvarjali z izpeljavo obeh enačb, navedli bomo samo rezultate. Kontinuitetna enačba je

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i) = 0. \quad (79)$$

Enačba gibanja je

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i = \rho \frac{dv_i}{dt}, \quad (80)$$

ki jo lahko napišemo v obliki Navierove enačbe

$$\begin{aligned} (\lambda + \mu) u_{k,ki} + \mu u_{i,jj} + F_i &= \rho \ddot{u}_i, \\ (\lambda + \mu) \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{u} + \vec{F} &= \rho \ddot{\vec{u}}. \end{aligned} \quad (81)$$

Tip volumske sile $\vec{F}$, ki je pomemben pri reševanju številnih problemov elastodinamike, je enotska impulzivna sila v poljubni smeri. To silo lahko reprezentiramo matematično s pomočjo Diracove delta funkcije

$$F_i(x_s, t) = \delta(x_s - \xi_s) \delta(t - \tau) \delta_{in}. \quad (82)$$

Sila deluje ob času τ v točki ξ_i in je enaka nič povsod drugod. Njena orientacija je podana s tremi komponentami, ki so povezane z indeksom n . Če vstavimo to enačbo v enačbo gibanja (80), dobimo rešitve za elastične premike v vsaki točki kontinuuma v vsakem času, v volumnu V obdanem s površino S . Komponente premika (indeks i) so odvisne od orientacije sile (indeks n), kar pomeni, da je premik dan z tenzorjem drugega reda $G_{ni}(x_s, \xi_s, t, \tau)$, ki je funkcija koordinat in časa (x_s, τ) . Enačbo (80) lahko potem napišemo v sledeči obliki

$$\rho \ddot{G}_{ni} - C_{ijkl} G_{nk,lj} = \delta(x_s - \xi_s) (t - \tau) \delta_{ni}. \quad (83)$$

Tenzor G_{ni} se imenuje Greenov tenzor elastodinamike. Oblika tega tenzorja je odvisna od lastnosti medija, elastičnih koeficientov in gostote. V končnem mediju je Greenov tenzor odvisen tudi od oblike telesa.

V izotropičnem neskončnem mediju lahko zgornjo enačbo zapišemo takole

$$\rho \ddot{G}_{ij} - (\lambda + \mu) G_{ik,kj} - \mu G_{ij,kk} = \delta(x_s) (t) \delta_{ni}. \quad (84)$$

Če deluje v neki točki konstantna radialna sila, imajo elastični premiki le sferično simetrijo.

Rešitev zgornje enačbe je

$$u(r) = \frac{A}{r}. \quad (85)$$

Premik pada obratno sorazmerno z razdaljo. Če je v razdalji r_0 premik enak δr_+ , potem velja

$$u(r) = \frac{\delta r_+ r_0}{r} \quad (86)$$

DODATEK 6: Napetosti ob okroglem tekočinskem vključku in v njem

Sedaj imamo na voljo vse potrebno matematično orodje, s katerim lahko izračunamo napetosti ob okroglem tekočinskem vključku v kristalu. Predpostavili bomo, da je volumen kristala bistveno večji kot volumen vključka. Kristal bomo torej obravnavali kot neskončnega.

Začetna temperatura kristala in vključka je T_0 , končna pa je T , kjer je $\delta T = T_0 - T > 0$.

Začetna temperatura je večja od končne. Pri ohlajanju se kristal in tekočina termično skrčita.

Velja

$$\begin{aligned}\delta V'_k &= V\beta_k\delta T, \\ \delta V'_t &= V\beta_t\delta T.\end{aligned}\tag{87}$$

Ti dve enačbi lahko napišemo v smislu radijev

$$\begin{aligned}\delta r_k &= \frac{1}{3}r_0\beta_k\delta T, \\ \delta r_t &= \frac{1}{3}r_0\beta_t\delta T.\end{aligned}\tag{88}$$

Enak volumen kristala, kakršnega izpodriva tekočinski vključek, bi se skrčil bolj kot tekočina. Začetni radij okroglega tekočinskega vključka naj bo r_0 . Končni radij vključka naj bo r'_0 . Če bi bil vključek prazen (= votlinica v kristalu), bi bil njegov radij r'_k . Prosta tekočina v vključku pa bi se po ohlajanju skrčila na radij r'_t , kjer je $r'_t > r'_k$. Ohlajanje torej povzroči prekomerno krčenje kristala oziroma luknjice, v katero je ujeta tekočina. Ker ima tekočina manjši temperaturni koeficient, jo okoliški kristal močno stisne, pri čemer tudi sam ostane nekoliko razširjen. Z drugimi besedami pomeni to sledeče. Namesto da bi bil radij tekočine po ohlajanju r'_t , je $r'_t - \delta r_- = r'_0$. Tekočina je torej stisnjena za δr_- . Namesto da bi bil radij luknjice, v kateri je tekočina po ohlajanju r'_k , je v resnici $r'_k + \delta r_+ = r'_0$. Kristal je raztegnjen za δr_+ . Velja torej

$$r'_t - \delta r_- = r'_k + \delta r_+, \tag{89}$$

oziroma

$$r'_t - r'_k = \delta r_+ + \delta r_- \tag{90}$$

Ker velja tudi

$$\begin{aligned}r'_t &= r_0 - \delta r_t, \\ r'_k &= r_0 - \delta r_k,\end{aligned}\tag{91}$$

lahko enačbo (90) napišemo v sledeči obliki

$$\delta r_k - \delta r_t = \delta r_+ + \delta r_- = \frac{1}{3} r_0 (\beta_k - \beta_t) \delta T. \quad (92)$$

Tlak znotraj tekočinskega vključka je potemtakem

$$p = \frac{\delta V_-}{KV} = \frac{4\pi r_t'^2 \delta r_-}{K \frac{4\pi r_t'^3}{3}} = \frac{3}{K} \frac{\delta r_-}{r_t'} \approx \frac{3}{K} \frac{\delta r_-}{r_0'}. \quad (93)$$

Na meji tekočinskega vključka je tlak enak v tekočini in v kristalu, kjer ga lahko izračunamo iz Greenovega tenzorja deformacije. Velja

$$u(r) = \delta r(r) = \frac{A}{r}. \quad (94)$$

Na radiju r_0' velja

$$u(r_0') = \delta r(r_0') = \frac{A}{r_0'} = \delta r_+. \quad (95)$$

Od tu pa sledi

$$A = r_0' \delta r_+. \quad (96)$$

Vektor deformacije kristala ob vključku je

$$\vec{u} = u_i = \frac{A}{x^2 + y^2 + z^2} (x, y, z)^T. \quad (97)$$

Sedaj lahko izračunamo tenzor defromacije po enačbi (54). Zanima nas njegova vrednost na x-osi. Vzamemo, da je $y = 0$ in $z = 0$. Ker je deformacijsko polje okoli vključka krogelno simetrično, velja enak rezultat v poljubni smeri. Kratek račun da

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) = \frac{A}{x^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (98)$$

Tenzor napetosti pa je po Hookovem zakonu, enačba (65)

$$\sigma_{ij} = \frac{A}{x^2} \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu) & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda - 2\mu) & 0 \\ 0 & 0 & (\lambda - 2\mu) \end{pmatrix}. \quad (99)$$

Tlak na rob tekočinskega vključka z normalo $\vec{n} = (1, 0, 0)^T$ je

$$p = \sigma_{ij} n_j = (\lambda + 2\mu) \frac{A}{x^2} = (\lambda + 2\mu) \frac{A}{r_0'^2}. \quad (100)$$

Upoštevali smo namreč $x = r_0'$. Veljati mora

$$(\lambda + 2\mu) \frac{A}{r_0'^2} = \frac{3}{K} \frac{\delta r_-}{r_0'}. \quad (101)$$

Od tu z upoštevanjem enačbe (96) dobimo

$$\delta r_- = (\lambda + 2\mu) \frac{KA}{3r_0'} = (\lambda + 2\mu) \frac{Kr_0' \delta r_+}{3r_0'} = \frac{K}{3} (\lambda + 2\mu) \delta r_+. \quad (102)$$

Iz enačb (92) in (102) dobimo za δr_+

$$\begin{aligned} \delta r_+ &= \frac{(\beta_k - \beta_t) \delta T}{1 + \frac{K}{3} (\lambda + 2\mu)} r_0 = k_1 r_0, \\ \delta r_- &= \frac{K}{3} (\lambda + 2\mu) \frac{(\beta_k - \beta_t) \delta T}{1 + \frac{K}{3} (\lambda + 2\mu)} r_0 = k_2 r_0. \end{aligned} \quad (103)$$

Sedaj lahko napišemo še zveze med r_0' in r_0 . Za tekočinski vključek velja

$$r_0' = r_0 - \delta r_t - \delta r_- = r_0 - \frac{1}{3} r_0 \beta_t \delta T - k_2 r_0 = (1 - \frac{1}{3} \beta_t \delta T - k_2) r_0 = k_2' r_0. \quad (104)$$

V podobnem smislu lahko napišemo tudi za kristal:

$$r_0' = r_0 - \delta r_k + \delta r_+ = r_0 - \frac{1}{3} r_0 \beta_k \delta T + k_1 r_0 = (1 - \frac{1}{3} \beta_k \delta T + k_1) r_0 = k_1' r_0. \quad (105)$$

Poiščimo še zvezi med δr_- in δr_+ ter r_0' . Iz zgornjih zvez (103), (104) in (105) dobimo:

$$\begin{aligned} \delta r_+ &= \frac{k_1}{k_1'} r_0', \\ \delta r_- &= \frac{k_2}{k_2'} r_0'. \end{aligned} \quad (106)$$

To pomeni, da je tlak tekočine znotraj tekočinskih vključkov neodvisen od njihovega radija:

$$p \approx \frac{3}{K} \frac{\delta r_-}{r_0'} = \frac{3}{K} \frac{k_2}{k_2'} = \text{const.} \quad (107)$$

To je zelo pomemben rezultat. Ker sta koeficienta k_2 in k_2' odvisna od elastičnih lastnosti kristala in od temperaturnih koeficientov tekočine in kristala, lahko pričakujemo, da je tlak znotraj negativnih kristalov odvisen predvsem od tipa tekočine. Ta namreč določa temperaturni koeficient tekočine.

Z upoštevanjem $r_0' = k_1' r_0$ dobimo iz enačbe (96) še

$$\begin{aligned} A &= r_0' \delta r_+ = k_1' k_1 r_0^2, \\ A &= \frac{k_1}{k_1'} r_0'^2. \end{aligned} \quad (108)$$

DODATEK 7: Gibbsova prosta energija kristala s tekočinskim vključkom

V tem poglavju izračunajmo, kolikšna je Gibbsova prosta energija kristala, ki vsebuje okrogel tekočinski vključek. Ta energija je sestavljena iz najmanj treh komponent (e.g., Ronald in Jansen, 1994), in sicer iz površinske energije vključka, iz elastične energije tekočine v vključku in iz elastične energije deformiranega kristala v okolici tekočinskega vključka.

Površinska energija okroglega tekočinskega vključka je

$$W_S = \gamma 4\pi r_0'^2. \quad (109)$$

Druga dva člena bomo izračunali iz enačbe za gostoto elastične energije (e.g., Udias, 1999)

$$w = \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij}. \quad (110)$$

Tenzor napetosti v tekočini znotraj vključka je

$$\sigma_{ij} = p \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{K} \frac{k_2}{k_2'} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (111)$$

Tenzor deformacije pa lahko napišemo v obliki

$$e_{ij} = -\frac{\delta r}{r_0'} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = -\frac{k_2}{k_2'} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (112)$$

Gostota elastične energije je potemtakem

$$w_{et} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_2}{k_2'} \right)^2. \quad (113)$$

Elastična energija tekočine pa je

$$W_{et} = w_{et} V = \frac{3}{2} \left(\frac{k_2}{k_2'} \right)^2 \frac{4\pi}{3} r_0'^3. \quad (114)$$

Na podoben način bomo izračunali elastično energijo deformiranega kristala v okolici tekočinskega vključka. Z upoštevanjem enačb (98) in (99) dobimo

$$w_{ek} = \frac{A^2}{r^4} (3\lambda + 2\mu), \quad (115)$$

kjer smo namesto x pisali r . Elastična energija je:

$$W_{ek} = \int_{r_0'}^{\infty} w_{ek}(r) \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi A^2 (3\lambda + 2\mu)}{r_0'^4} = 4\pi k_1^2 k_1' (3\lambda + 2\mu) r_0'^3. \quad (116)$$

Celotna Gibbsova energija kristala s tekočinskim vključkom je tako:

$$G_i = W_s + W_{et} + W_{ek} = \gamma 4\pi r_0'^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{k_2}{k_2'} \right)^2 \frac{4\pi}{3} r_0'^3 + 4\pi k_1^2 k_1' (3\lambda + 2\mu) r_0'^3. \quad (117)$$

Tu indeks i označuje i – ti negativni kristal. V resnici bi morali pisati tudi r_{0i}' , namesto r_0' . Celotna Gibbsova energija vseh negativnih kristalov je

$$G_0 = \sum_{i=1}^n G_i \quad (118)$$

Pomembno je, da se pri celjenju iz zapiranj razpoke ohranja volumen tekočine, ki je v njej. Velja torej

$$\sum_{i=1}^n \frac{4\pi}{3} r_{0i}^3 = const. \quad (119)$$

To pomeni, da je pri računanju sprememb Gibbsove energije na račun zapiranja razpoke potrebno upoštevati le prvi na desni strani enačbe (117), saj sta drugi in tretji premo-sorazmerna z $r_0'^3$. Celotno Gibbsovo energijo vseh tekočinskih vključkov bomo zapisali na poenostavljen način

$$G_0 = \sum_{i=1}^n (\gamma 4\pi r_{0i}'^2) + const. \quad (120)$$

Funkcija ima minimum, ko je minimalna površinska energija tekočinskih vključkov. Najdemo ga z zahtevo:

$$\frac{\partial G_0}{\partial r} = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n W_{si} = min. \quad (121)$$

Pri celjenju razpoke kristal torej išče takšno konfiguracijo, pri kateri je površinska energija tekočinskih vključkov minimalna. Na to konfiguracijo ne vplivata elastična energija tekočine in kristala.

DODATEK 8: Odbojna sila med sosednjimi tekočinskimi vključki; Greenova gradientna sila

Naši rezultati lepo pojasnjujejo odbojno silo med tekočinskimi vključki, ki smo jo ugotovili z mikroskopskimi opazovanji. Vzemimo pravokoten tekočinski vključek z volumnom $\delta S \delta x$. Na levo ploskev vključka deluje sila

$$\delta F(x) = \sigma_{ij} n_j \delta S = (\lambda + 2\mu) \frac{A}{x^2} \delta S. \quad (122)$$

Na desno ploskev pa deluje sila

$$\delta F(x + \delta x) = \delta F(x) - \left| \frac{\partial F(x)}{\partial x} \right| \delta x = (\lambda + 2\mu) \frac{A}{x^2} \delta S - 2(\lambda + 2\mu) \frac{A}{x^3} \delta x \delta S. \quad (123)$$

Rezultanta sil je tako

$$F_{grad} = \delta F(x) - \delta F(x + \delta x) = 2(\lambda + 2\mu) \frac{A}{x^3} \delta x \delta S, \quad (124)$$

oziroma

$$F_{grad} = 2(\lambda + 2\mu) \frac{A}{r^3} V = \nabla p(r) V. \quad (125)$$

Sila, ki deluje na tekočinski vključek z volumnom V v Greenovem polju drugega vključka, je odbojna. Imenovali jo bomo Greenova gradientna sila. Je obratno sorazmerna z razdaljo med vključkoma in premosorazmerna z volumnom vključka. Njen ekvivalent je vzgonska sila v vodi ali zraku. Mislimo si lahko, da je tekočina v kristalu izpostavljena nekakšni vzgonski sili v Greenovem elastičnem polju. To polje potiska tekočino v smeri zmanjševanja Greenovih napetosti. Definirajmo tudi gradientni tlak, ki deluje na tekočino znotraj tekočinskega vključka s premerom $\delta x = r'_0$ v polju nekega drugega vključka:

$$p_g = \frac{F_{grad}}{\delta S} \delta x = \nabla p(r) r'_0. \quad (126)$$

Ta rezultat bomo potrebovali, ko bomo obravnavali premikaje tekočine od enega vključka v drugega.

Z upoštevanjem enačbe (108) lahko enačbo za odbojno silo nekoliko poenostavimo:

$$F_{ji} = 2(\lambda + 2\mu) \frac{k_1}{k'_1} r'^2_{0j} \frac{1}{r^3} \frac{4\pi r'^3_{0i}}{3} = \chi \frac{r'^3_{0i} r'^2_{0j}}{r^3}, \quad (127)$$

$$\chi = \frac{8\pi(\lambda + 2\mu)k_1}{3k'_1}.$$

Tu indeks i označuje i – ti vključek v polju j – tega vključka. Upoštevamo tudi, da so vsi vključki okrogle oblike. F_{ji} pomeni, da gre za silo j – tega vključka na i – ti vključek. Sila i – tega vključka na j – ti vključek ni nasprotno enaka kot sila j – tega vključka na i – ti vključek. Torej

$$F_{ij} \neq F_{ji}. \quad (128)$$