

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Εξαρμοσείς ολίσθησης και αναρρίχησης
στα διηλεκτρικά υλικά
του Μαρίου Κ. Χαλδούπη



Επιβλέπων Αθανάσιος Ζήσης
Καθηγητής Τομέα μηχανικής της Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.

Αθήνα, 2023

Copyright ©Μάριος Κ. Χαλδούπης

Απρίλιος, 2023

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ' ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Η έγκριση της παρούσας διπλωματικής εργασίας υπό της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου δεν υποδηλοί αποδοχή των γνώμών του συγγραφέως.

(Ν. 5343/1932, Άρθρο 20)

Πρόλογος

Η παρούσα διπλωματική εργασία αποτελεί ένα έργο ολοκλήρωσης των φοιτητικών μου χρόνων στην Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών. Ένα ταξίδι που ξεκίνησε από το ακαδημαϊκό έτος 2017-2018 και λαμβάνει τέλος το ακαδημαϊκό έτος 2022-2023.

Μέσα σε αυτό το ταξίδι, είχα την ευκαιρία να γνωρίσω τις θετικές επιστήμες σε βάθος που ποτέ δεν φανταζόμουν, αλλά και να εξερευνήσω κομμάτια του εαυτού μου που ποτέ πριν δεν είχα ξαναδεί. Εκτίμησα παραπάνω την αξία της γνώσης, της συνεργασίας, του σωστού προγραμματισμού και της έρευνας. Παρατήρησα ιδιαίτερη κλίση στους τομείς των υλικών και της μηχανικής, μια κλίση που θα επιθυμούσα να διατηρήσω παραπάνω στην πορεία της ζωής μου.

Ενθυμούμαι καθέναν από τους Καθηγητές και τις Καθηγήτριες μου, που με τον δικό τους αγώνα συνέβαλαν στην διεύρυνση των οριζόντων μου. Ανάμεσά τους, πρώτα ξεχώρισε ο κύριος Χ. Γεωργιάδης, μια ξεχωριστή και σπουδαία μορφή τόσο στον ερευνητικό κλάδο, όσο και μέσα στις αίθουσες διδασκαλίας. Σε εκείνον οφείλω τις βάσεις που κατέχω στα πλαίσια της θεωρητικής μηχανικής. Κατόπιν, οφείλω τις βαθύτερες ευχαριστίες μου στον επιβλέποντα καθηγητή μου τον κύριο Α. Ζήση, που μου παρείχε υπέρμετρη βοήθεια, στήριξη και καθοδήγηση στην εργασία μου. Χάρη σε εκείνον, εισήλθα σε τόπους ανεξερεύνητους στον τομέα τη μηχανικής και γνώρισα την σπουδαιότητα ενός ακαδημαϊκού ερευνητή.

Παράλληλα, δεν ξεχνώ τους συμπορευτές μου που συμπλήρωσαν την εμπειρία μου αυτή. Οι συμφοιτητές μου, οι φίλοι μου και οι συγγενείς που ήσαν δίπλα μου μέχρι τέλους αυτής της διαδρομής. Οφείλω μέσα από τα βάθη της καρδιάς μου ένα μεγάλο ευχαριστώ.

Η διπλωματική μου εργασία αυτή είναι αφιερωμένη στους γονείς μου, τον Κωνσταντίνο και την Αρτέμιδα, και τα αδέρφια μου, τον Γεώργιο-Σεραφείμ, τον Σιλουανό και τον Βησσαρίωνα.

Περιεχόμενα

Πρόλογος	2
Περίληψη.....	4
Abstract	5
Εισαγωγή	6
Κεφ. 1: Διηλεκτρικά υλικά και μονωτές	9
1.1 Η πόλωση στα διηλεκτρικά υλικά	9
1.2 Πιεζοηλεκτρικό φαινόμενο	12
Κεφ. 2: Η θεωρία βαθμίδας της πόλωσης σε ελαστικά διηλεκτρικά υλικά	14
2.1 Η θεωρία μεταβολών του Mindlin	14
2.2 Κεντροσυμμετρικά Υλικά.....	20
2.3 Θετικά ορισμένη ενέργεια της συνάρτησης ενεργειακής πυκνότητας.....	22
2.4 Εξισώσεις υπό συνθήκες επίπεδης παραμόρφωσης.....	22
2.5 Εφαρμογή του Μετασχηματισμού Fourier	24
Κεφ. 3: Εξάρμωση ακμών.....	28
3.1 Εξάρμωση ολίσθησης.....	28
3.2 Εξάρμωση αναρρίχησης.....	32
Κεφ. 4: Αποτελέσματα και συζήτηση	36
Παράρτημα Α1	41
Παράρτημα Α2.....	42
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	45
Ξένη βιβλιογραφία.....	46
Ελληνική βιβλιογραφία.....	50

Περίληψη

Η παρούσα εργασία αφορά στην εύρεση αναλυτικών σχέσεων που σχετίζονται με τις παραγόμενες μετατοπίσεις, τις τάσεις και την πόλωση που αναπτύσσονται σε ένα διηλεκτρικό υλικό στα πλαίσια της ελαστικότητας, με δεδομένη την ύπαρξη μίας εξάρμοσης (ολίσθησης ή αναρρίχησης).

Για την μελέτη αυτή, θεωρούμε ότι τα υλικά περιλαμβάνουν στην έκφραση της ενέργειας την βαθμίδα της πόλωσης, σύμφωνα με την θεωρία που εισήγαγε και ανέπτυξε ο **Mindlin (1968)**. Τα υλικά που μελετώνται είναι κεντροσυμμετρικά και στα πλαίσια της παραπάνω θεωρίας επιλύεται το πρόβλημα της εξάρμοσης ολίσθησης και εξάρμοσης αναρρίχησης. Οι αναλυτικές λύσεις, που παρουσιάζονται μεταξύ άλλων, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση προβλημάτων ρωγμών στην αντίστοιχη εμπλουτισμένη θεωρία.

Abstract

The present work concerns the finding of analytical equations related to the produced displacements, stresses and polarization that are being develop in a dielectric material in the context of elasticity, given the existence of a dislocation (slip or climb).

For this study, we consider that materials include the degree of polarization in the expression of energy, according to the theory introduced and developed by Mindlin (1968). The materials, which are studied here, are centrosymmetric and within the framework of the above theory the problem of sliding and climbing is solved. Analytical solutions, presented among others, can be used to solve crack problems in the corresponding enriched theory.

Εισαγωγή

Τα ελαστικά διηλεκτρικά είναι μια σημαντική και ενδιαφέρουσα κατηγορία στερεών υλικών. Τα φωτοελαστικά και πιεζοηλεκτρικά φαινόμενα δεν είναι παρά δύο από τα φυσικά φαινόμενα που σχετίζονται με τα ελαστικά διηλεκτρικά που έχουν βρει εφαρμογές στη μηχανική και στο εργαστήριο. Ο **Neumann (1841)** ήταν ο πρώτος που μελέτησε συστηματικά το φωτοελαστικό φαινόμενο σε ισότροπα υλικά. Ο **Pockels (1889)** επέκτεινε τη θεωρία του Neumann για το φωτοελαστικό φαινόμενο στην περίπτωση των κρυσταλλικών μέσων. Αυτό που θα μπορούσε να ονομαστεί η κλασική γραμμική θεωρία του πιεζοηλεκτρισμού αποδίδεται γενικά στον **Voigt (1910)**. Παρ' όλα αυτά, και οι τρεις περιοριστήκανε σε προβλήματα μικρών παραμορφώσεων (**Toupin, 1956**).

Προκειμένου να ληφθεί υπόψη η πεπερασμένη τάση και τα ηλεκτρικά φαινόμενα υψηλότερης τάξης των ελαστικών διηλεκτρικών υλικών, ο **Toupin (1956)** γενίκευσε τις γραμμικές πιεζοηλεκτρικές σχέσεις του Voigt, αντιμετωπίζοντας πλέον μεγάλες παραμορφώσεις. Παρατήρησε νέα προβλήματα να αναδύονται στην επιφάνεια που δεν μπορούσαν να παρατηρηθούν μέσω της θεωρίας ελαστικότητας. Το πιο σημαντικό εξ αυτών ήταν πως υπολείπονταν θεμελιώδεις εξισώσεις που να παράγουν έναν ασύμμετρο τανυστή τοπικής τάσης, στα πλαίσια της θεωρίας του Maxwell. Υπό αυτήν την έννοια, παρουσίασε μια ενεργειακή αρχή, από την οποία εξάγονταν οι εξισώσεις αυτές, ενώ παράλληλα κάλυπτε και το αντισυμμετρικό κομμάτι του τανυστή. Για να μπορέσει να δείξει τη γενική θεωρία, ασχολήθηκε εκτενώς με τα ισότροπα διηλεκτρικά υλικά. Οι λύσεις που παρουσίασε για την ομογενή παραμόρφωση ενός ισοτροπικού διηλεκτρικού ελλειψοειδούς και μιας άπειρης πλάκας τοποθετημένης σε ομοιόμορφο εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο δόθηκαν ως απεικονίσεις των ποιοτικών χαρακτηριστικών της συμπεριφοράς των ελαστικών διηλεκτρικών που προβλέπονται από τη θεωρία. Τέλος, εξειδίκευσε τη θεωρία του λαμβάνοντας μια ειδική μορφή για τη συνάρτηση αποθηκευμένης ενέργειας, προκειμένου να μπορεί να συγκριθεί με άλλες ήδη υπάρχουσες θεωρίες (**Toupin, 1956**).

Στην επέκταση των γενικών πιεζοηλεκτρικών εξισώσεων του Toupin προέβη ο **Mindlin (1968)**. Ο Mindlin θεώρησε πως η επέκταση αυτή επιτυγχάνεται απλά προσθέτοντας μια λειτουργική εξάρτηση της πυκνότητας ενέργειας παραμόρφωσης και πόλωσης W_L από την κλίση της πόλωσης. Η συγκεκριμένη θεώρηση μπορεί να δικαιολογηθεί για πολλούς λόγους. Αρχικά, η τάξη των διαφορικών εξισώσεων δεν αυξάνεται, έτσι ώστε να μην προστίθενται αποτελέσματα υψηλότερης τάξης από αυτά που υπάρχουν ήδη. Παρατηρώντας το από άλλη σκοπιά, ως θεωρήσουμε πως έπρεπε να ξεκινήσουμε υποθέτοντας την εξάρτηση του W_L από τη μετατόπιση και την πόλωση και τις κλίσεις τους και, αργότερα, περικόπτοντας τις πρώτες διαβαθμίσεις. Η απαίτηση της αμετάβλητης της W_L , σε μια άκαμπτη μετατόπιση και περιστροφή του παραμορφωμένου και πολωμένου σώματος, εξαλείφει την εξάρτηση μόνο από τη μετατόπιση και την περιστροφή, αφήνοντας την τάση, την πόλωση και την κλίση πόλωσης. Κατ' αυτόν τον τρόπο, η θεωρία του Mindlin προσέφερε την δυνατότητα επίλυσης ηλεκτρομηχανικών προβλημάτων που αφορούν τα ελαστικά διηλεκτρικά υλικά (**Mindlin, 1970**).

Παρ' όλο που ο Mindlin ανέπτυξε μία τόσο σπουδαία θεωρία, δεν έχουν λυθεί, παρά λίγα, προβλήματα συνοριακών τιμών έως και σήμερα. Συγκεκριμένα, κατά χρονολογική σειρά, ο **Schwarz (1969)** κατασκεύασε, για την προαναφερθείσα θεωρία, Parkovitch συναρτήσεις, προκειμένου να λύσει το πρόβλημα της συγκεντρωμένης δύναμης σε άπειρο ελαστικό διηλεκτρικό μέσο. Ο **Gou (1971)** ασχολήθηκε με τη συγκέντρωση τάσεων σε μια κυλινδρική οπή σε ένα άπειρο διηλεκτρικό μέσο κάτω από το πεδίο της διαμήκουσ τάσης. Εν συνεχεία, οι **Askar et al. (1974)** ασχολήθηκαν με την επίδραση της ασυνέχειας στην επιφανειακή ενεργειακή πυκνότητα, με το πρόβλημα της γραμμικής ρωγμής (crack) σε άπειρο ελαστικό διηλεκτρικό μέσο και με την προσέγγιση δυναμικής πλέγματος στην θεωρία των διατομικών ελαστικών διηλεκτρικών. Επιπλέον, οι **Chowdhury και Glocrner (1976)** αναζήτησαν Galerkin και Beltrami παραστάσεις για τους τανυστές μετατόπισης, πόλωσης και για τα πεδία δυναμικού στη θεωρία στατικού επιπέδου των ελαστικών διηλεκτρικών χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των σχετικών πινάκων. Κατόπιν, κατασκεύασαν μια γενική λύση σε προβλήματα συνοριακών τιμών ενός ημι-επιπέδου που υπόκειται σε αυθαίρετη κατανομή φορτίου μέσω της θεωρίας των ελαστικών διηλεκτρικών του Mindlin (**Chowdhury και Glocrner, 1979**). Οι **Nowacki και Hsieh (1986)** μελέτησαν το πρόβλημα των απλών εξαρμόσεων σε πολυπολικά ελαστικά διηλεκτρικά υλικά. Οι **Sahin και Dost (1988)** εισήγαγαν μια θεωρία ηλεκτροελαστοδυναμικής με χρήση χωρικής διασποράς, που περιλαμβάνει την επίδραση της πρώτης και της δεύτερης βαθμίδας παραμόρφωσης, της βαθμίδας πόλωσης, της αδράνειας πόλωσης, και η οποία είναι συμβατή μέχρι την περιοχή των μακρινού υπέρυθρου φάσματος ακτινοβολιών. Ο **Vukobrat (1994)** χρησιμοποίησε J-ολοκληρώματα για το πρόβλημα μιας ρωγμής σε ένα ελαστικά παραμορφώσιμο διηλεκτρικό που υπόκειται σε ελαστοστατικό και μηχανικό φορτίο. Οι **Yang et al. (2004)** μελετήσανε την επίδραση της βαθμίδας του ηλεκτρικού πεδίου σε αντιεπίπεδα προβλήματα σε πολωμένα κεραμικά.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει, ακόμη, η εφαρμογή αναλυτικών μεθόδων στην επίλυση μηχανικών προβλημάτων σε πιεζοηλεκτρικά στερεά. Αρχικά, η μέθοδος ασυνέχειας μετατόπισης που προτάθηκε από τους **Crouch και Starfield (1983)** είναι μια μέθοδος συνοριακών στοιχείων που βασίζεται σε μια διακριτή έκδοση του μοντέλου κατανεμημένης εξάρθρωσης των **Bilby και Eshelby (1968)**. Η συγκεκριμένη μέθοδος επεκτάθηκε από τον **Deeg (1980)**, έτσι ώστε να μπορεί να εξετάσει τη μηχανική θραύση πιεζοηλεκτρικών στερεών υπό σύνθετη γεωμετρία και φόρτωση. Αργότερα, ο **Pak (1992)** χρησιμοποίησε τον φορμαλισμό του **Deeg (1980)** για να μελετήσει μια ρωγμή (crack) σε ένα ομοιογενές υλικό, αλλά δεν επικεντρώθηκε στην εφαρμογή μιας υπολογιστικής προσέγγισης βασισμένης στα προαναφερθέντα συνοριακά στοιχεία για ελαστικά διηλεκτρικά υλικά (**Rajapakse,1999**). Μια τέτοια υπολογιστική προσέγγιση θα αποτελούσε ένα ευέλικτο εργαλείο που θα επέτρεπε την εξέταση αυθαίρετα προσανατολισμένων πολλαπλών ρωγμών σύνθετης γεωμετρίας καθώς και πολύπλοκων προβλημάτων συνοριακών τιμών.

Ο **Rajapakse (1999)** κατάφερε να αναπτύξει ένα τέτοιο αποδοτικό υπολογιστικό μοντέλο μετατόπισης-ασυνέχειας για πιεζοηλεκτρικά στερεά. Ξεκινώντας με την εξής παρατήρηση, η πλειονότητα των

πιεζοηλεκτρικών στερεών που χρησιμοποιούνται σε πρακτικές εφαρμογές είναι εγκάρσια ισότροπα, σε αντίθεση με τα στερεά γενικής ανισοτροπίας, για τα οποία δεν μπορούν να προκύψουν λύσεις κλειστής μορφής. Κατ' αυτόν τον τρόπο, ο **Pak (1990)** παρουσίασε σε εργασία του λύσεις κλειστής μορφής για εξάρμωση κοχλίας σε εγκάρσια ισότροπο πιεζοηλεκτρικό στερεό. Ωστόσο, ο Rajapakse διαπίστωσε πως οι εξισώσεις που διέπουν τις μετατοπίσεις και το ηλεκτρικό δυναμικό δεν αποσυνδέονται στην περίπτωση της εξάρμωσης ακμών (όπως συμβαίνει στην περίπτωση της εξάρμωσης κοχλίας) και υπάρχει πλήρης ηλεκτροελαστική σύζευξη. Υπό αυτό το πρίσμα, παρουσιάσανε λύσεις κλειστής μορφής για εξαρμώσεις ακμών σε ένα εγκάρσια ισότροπο πιεζοηλεκτρικό στερεό, εφαρμόζοντας τες στην μελέτη των ιδιομορφιών των ηλεκτροελαστικών πεδίων του υλικού PZT-4.

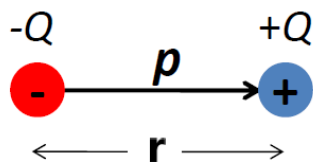
Στην παρούσα εργασία, θα παρουσιάσουμε αναλυτικές λύσεις για εξαρμώσεις ολίσθησης και αναρρίχησης σε ελαστικά διηλεκτρικά υλικά, τα οποία παρουσιάζουν εξάρτηση από την βαθμίδα πόλωσης. Στην ανάλυση μας θα χρησιμοποιηθούν γενικές λύσεις που βασίζονται σε ολοκληρωτικούς μετασχηματισμούς Fourier. Παράλληλα, μελετάμε τους περιορισμούς της θετικά ορισμένης ενέργειας. Τέλος, θα παρουσιάσουμε τις ισοϋψείς καμπύλες για το αδιάστατο μέτρο του διανύσματος μετατόπισης, για τις αδιάστατες τάσεις κατά von Mises και για το αδιάστατο μέτρο του διανύσματος της πόλωσης.

Κεφ. 1: Διηλεκτρικά υλικά και μονωτές

Η φύση των υλικών χωρίζεται σε δύο γενικές κατηγορίες, τους αγωγούς και τους μονωτές. Αγωγοί ονομάζονται τα υλικά εκείνα που επιτρέπουν την κίνηση των ηλεκτρονίων στο εσωτερικό τους, λόγω της περίσσειας ελεύθερων ηλεκτρονίων που περιέχουν. Σε αντίθεση με τους αγωγούς, οι μονωτές δεν έχουν ελεύθερα ηλεκτρόνια και κατ' επέκταση ούτε ελεύθερους φορείς, καθώς όλα τους τα ηλεκτρόνια σθένους έχουν ισχυρές ενώσεις με τα άτομα και τους χημικούς τους δεσμούς. Ως απόρροια, αποτρέπεται η διέλευση του ηλεκτρικού ρεύματος και απαγορεύεται η δημιουργία ηλεκτρικού πεδίου εντός τους. Αυτό το φαινόμενο ονομάζεται ηλεκτρική μόνωση και παρουσιάζεται, ακόμη, στην παθητική φύση των διηλεκτρικών υλικών. Επομένως, όταν συναντάμε τα διηλεκτρικά ως παθητικά στοιχεία, λειτουργούν ως μονωτές με συχνότερη εμφάνιση στα υλικά πυκνωτών.

1.1 Η πόλωση στα διηλεκτρικά υλικά

Πέραν της παθητικής τους φύσεως, τα διηλεκτρικά υλικά λειτουργούν και ως ενεργητικά στοιχεία. Η λειτουργία τους αυτή απαιτεί τα υλικά να μπορούν να πολωθούν, με αποτέλεσμα να αποθηκεύουν ενέργεια στο υλικό και να την αποδίδουν αργότερα σε ηλεκτρονικά κυκλώματα. Η πόλωση αυτή των υλικών, οφείλεται στην ύπαρξη διηλεκτρικών διπόλων. Ένα ηλεκτρικό δίπολο αποτελείται από δύο ίσα κι αντίθετα φορτία, τα οποία έχουν μεταξύ τους μία απόσταση r (Kasap, 2006). Όπως είναι εύκολα αντιληπτό, το συνολικό τους φορτίο είναι μηδέν.

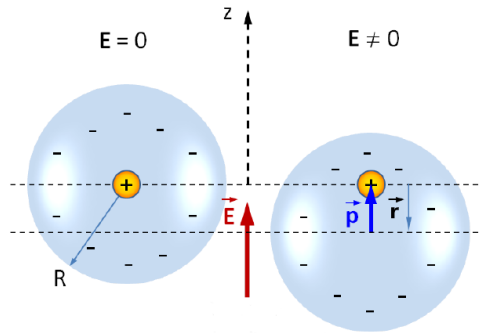


Σχήμα 1: Δύο φορτία ίσης και αντίθετης τιμής σε απόσταση r μεταξύ τους δημιουργούν ένα ηλεκτρικό δίπολο (Kasap, 2006).

Το διάνυσμα της απόστασης πολλαπλασιασμένο επί το εκάστοτε φορτίο μας δίνει το διάνυσμα της διπολικής ροπής:

$$p = r \cdot Q \quad (1.1)$$

Ακόμα και ένα άτομο όταν πολωθεί ομοιάζει σε ένα ηλεκτρικό δίπολο. Όταν σε ένα άτομο δεν ασκείται εξωτερικό πεδίο, τότε παρατηρείται σφαιρική συμμετρία. Έτσι, έχουμε μηδενικό συνολικό φορτίο, αλλά και μηδενική πόλωση. Όταν στο άτομο αυτό ασκηθεί εξωτερικό πεδίο, τότε χάνεται η σφαιρική συμμετρία, παραμένει το συνολικό φορτίο μηδέν, αλλά πλέον η πόλωση είναι μη-μηδενική.



Σχήμα 2: Απλοποιημένο ατομικό μοντέλο με δράση εξωτερικού πεδίου (Γλύτσης, 2020).

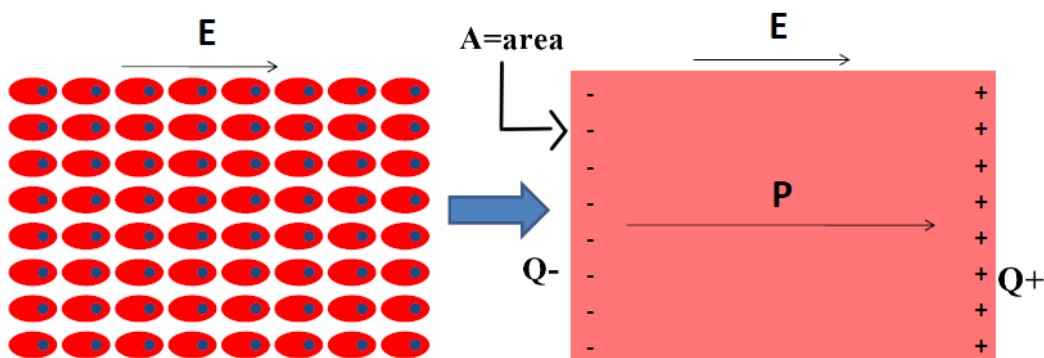
Κατ' αυτόν τον τρόπο, αποκτούμε την επαγόμενη πόλωση \mathbf{p}_{ind} που είναι παρόμοια τη διπολικής ροπής (Γλύτσης, 2020). Παρατηρούμε τώρα, πως η απόσταση r είναι ανάλογη του εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, άρα και η επαγόμενη πόλωση κατά την ίδια λογική. Για να έχουμε σωστές μονάδες, το ηλεκτρικό πεδίο με μονάδες V/m πολλαπλασιάζεται με την ηλεκτρονική πολωσιμότητα a_e με μονάδες m^2C/V :

$$\mathbf{p}_{ind} = a_e \cdot \mathbf{E} \quad (1.2)$$

Ένα διηλεκτρικό υλικό λειτουργεί όμοια, καθώς αποτελείται από ένα σύνολο ατόμων που εν ασκήσει εξωτερικού πεδίου δρουν ως ηλεκτρικά δίπολα. Υπό αυτήν την έννοια, ορίζουμε την μακροσκοπική πόλωση \mathbf{P} ως την συνολική διπολική ροπή ανά μονάδα όγκου.

$$\mathbf{P} = \frac{\sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i}{V} = N\mathbf{p}_{ave} = N\mathbf{p}_{ind} \quad (1.3)$$

όπου N είναι το πλήθος των μορίων ανά μονάδα όγκου. Ωστόσο, η συνολική διπολική ροπή ισούται με το φορτίο που δημιουργείται στο κάθε άκρο του διηλεκτρικού επί το συνολικό του μήκος.



Σχήμα 3: Αριστερά φαίνονται το σύνολο των ηλεκτρικών διπόλων ενός διηλεκτρικού υλικού. Δεξιά φαίνεται η μακροσκοπική πόλωση που δημιουργεί η συνολική διπολική ροπή (Κυρίτσης, 2021).

Επίσης, ο όγκος ορίζεται από την επιφάνεια κάθε άκρου του διηλεκτρικού επί το μήκος του διηλεκτρικού, οπότε έχουμε το εξής για το μέτρο της πόλωσης:

$$P = \frac{\sum_{i=1}^N p_i}{V} = \frac{Q_b \cdot d}{A \cdot d} = \frac{Q_b}{A} = \sigma_b \quad (1.4)$$

ενώ διανυσματικά ισχύει ότι

$$\sigma_b = \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (1.5)$$

Η σ_b είναι η επιφανειακή πυκνότητα δέσμιων φορτίων. Οφείλεται στην συσσώρευση θετικών και αρνητικών ηλεκτρικών φορτίων στην αντίστοιχη θετική και αρνητική πλευρά του διηλεκτρικού. Ταυτόχρονα, η πόλωση είναι ανάλογη του ηλεκτρικού πεδίου που εφαρμόζεται, καθώς και της ηλεκτρικής επιδεκτικότητας χ_e :

$$\mathbf{P} = \chi_e \varepsilon_o \mathbf{E} \quad (1.6)$$

Μελετώντας την κλίση της πόλωσης, συναντάμε την χωρική πυκνότητα δέσμιων φορτίων ρ_b που αναπτύσσεται ανομοιόμορφα μέσα στο υλικό:

$$\rho_b = -\nabla \cdot \mathbf{P} \quad (1.7)$$

Σε στατική κατάσταση, ακολουθώντας τον νόμο του Gauss, συμπεριλαμβάνοντας και τα δέσμια και τα ελεύθερα φορτία του διηλεκτρικού, διερευνούμε μία εκ των πεδιακών εξισώσεων σε σημειακή μορφή ως εξής:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\varepsilon_o \mathbf{E}) = \rho_f + \rho_b &\Rightarrow \nabla \cdot (\varepsilon_o \mathbf{E}) = \rho_f - \nabla \cdot \mathbf{P} \\ &\Rightarrow \nabla \cdot (\varepsilon_o \mathbf{E} + \mathbf{P}) = \rho_f \end{aligned} \quad (1.8)$$

όπου ορίζουμε το διάνυσμα της ηλεκτρικής μετατόπισης \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = \varepsilon_o \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1.9)$$

Αναπτύσσοντας παραπάνω την σχέση με την βοήθεια της εξίσωσης (1.6) παίρνουμε:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_o \mathbf{E} + \chi_e \varepsilon_o \mathbf{E} \Rightarrow \mathbf{D} = \varepsilon_o (1 + \chi_e) \mathbf{E} \quad (1.10)$$

ενώ ταυτόχρονα ισχύει ότι:

$$(1 + \chi_e) = \varepsilon_r \quad (1.11)$$

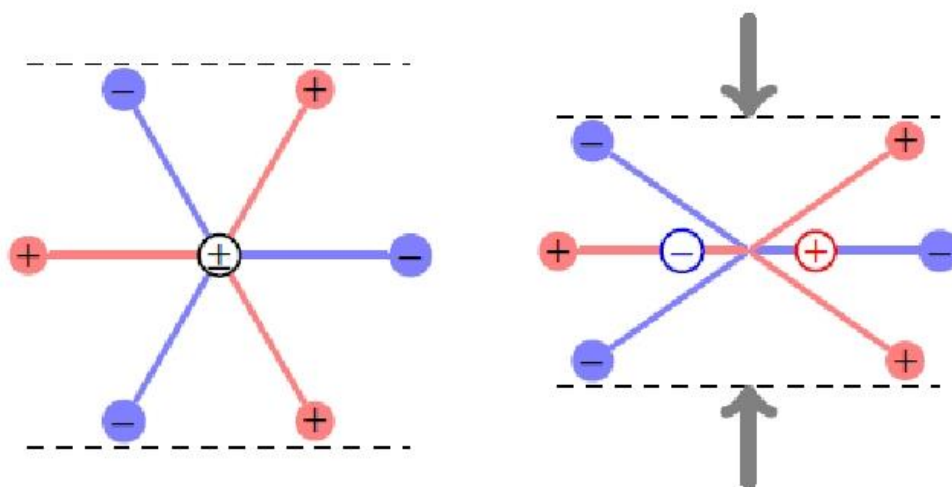
Η τελευταία σχέση υποδηλώνει και την πιο συχνή μορφή της ηλεκτρικής μετατόπισης, η οποία όπως φαίνεται, εξαρτάται από την διηλεκτρική σταθερά του κενού ε_o , την σχετική διηλεκτρική σταθερά ε_r και από το ηλεκτρικό πεδίο που εφαρμόζεται στο υλικό.

1.2 Πιεζοηλεκτρικό φαινόμενο

Τα διηλεκτρικά υλικά χρησιμοποιούνται σε πλήθος εφαρμογών. Εμφανίζονται συχνά ως «έξυπνα υλικά», αλλά και ως υλικά για την συγκομιδή και την συλλογή ενέργειας. Αυτό οφείλεται στην ικανότητά τους να παράγουν, να ενισχύουν, να διαμορφώνουν και να αντιστρέφουν ηλεκτρικά σήματα, μέσω των πολλών και διαφόρων πηγών πόλωσης τους. Η επιρροή αυτή στο ηλεκτρικό σήμα συνδυάζει πεδία μαζί με τις αλληλεπιδράσεις τους και για αυτόν τον λόγο συναντάμε ζεύγη ιδιοτήτων στα υλικά. Τα πεδία που αλληλεπιδρούν είναι ηλεκτρικά, μαγνητικά, μηχανικά και θερμικά.

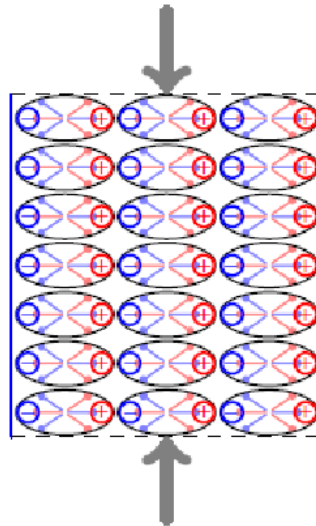
Ο συνδυασμός των ηλεκτρικών και των μηχανικών πεδίων φέρνουν στην επιφάνεια την μεγαλύτερη υποκατηγορία διηλεκτρικών υλικών τα οποία ονομάζουμε πιεζοηλεκτρικά υλικά. Το πιεζοηλεκτρικό φαινόμενο παρουσιάζει δύο μορφές: το ευθύ και το αντίστροφο. Και στις δύο περιπτώσεις, το υλικό βρίσκεται σε αρχική κατάσταση ισορροπίας, χωρίς να του ασκείται κάποια εξωτερική τάση. Στην πρώτη εξ αυτών, όταν ασκούμε μηχανική τάση στο υλικό, δημιουργείται πόλωση και κατ' επέκταση ηλεκτρική μετατόπιση που φέρει τελικά διαφορά ηλεκτρικής τάσης στο υλικό. Το αντίστροφο πιεζοηλεκτρικό φαινόμενο απαιτεί την επιβολή ηλεκτρικής τάσεως στο υλικό, η οποία μετέπειτα θα επιφέρει παραμόρφωση στο υλικό. Είναι απαραίτητο να σημειωθεί πως η συμμετρία του υλικού παίζει μεγάλο ρόλο στην επίδραση που θα 'χει η μηχανική τάση πάνω σε αυτό. Ο πιεζοηλεκτρισμός δεν εμφανίζεται σε κρυστάλλους με κεντρική συμμετρία (Delfino, 1978).

Αξίζει να αναφερθούμε και σε ατομικό επίπεδο. Προτού υποβάλουμε το διηλεκτρικό υλικό σε κάποιο εξωτερικό μηχανικό φορτίο, τα κέντρα των αρνητικών και θετικών φορτίων κάθε μορίου συμπίπτουν. Επομένως, οι εξωτερικές επιδράσεις των φορτίων αλληλο-ακυρώνονται. Υπό αυτό το πρίσμα, το κάθε μόριο του διηλεκτρικού υλικού παρουσιάζεται ηλεκτρικά ουδέτερο. Εφόσον ασκήσουμε κάποια τάση στο υλικό, η εσωτερική του δομή παραμορφώνεται (Κυρίτσης, 2021).



Σχήμα 4: Απλό πιεζοηλεκτρικό ατομικό μοντέλο (Κυρίτσης, 2021).

Τότε, προκαλείται διαχωρισμός των θετικών και των αρνητικών κέντρων των μορίων και ως απόρροια αυτού, δημιουργούνται δίπολα μέσα στο υλικό, όπως φαίνονται παρακάτω. Από εκεί και πέρα η μελέτη γίνεται ίδια με την προαναφερθείσα μελέτη τη πόλωσης στα διηλεκτρικά υλικά, ακόμα και στο μακροσκοπικό επίπεδο.



Σχήμα 5: Η δημιουργία μικρών ηλεκτρικών διπόλων μέσα στο πιεζοηλεκτρικό υλικό, όταν αυτό υπόκειται σε θλιπτική καταπόνηση (Κορίτσης, 2021).

Κεφ. 2: Η θεωρία βαθμίδας της πόλωσης σε ελαστικά διηλεκτρικά υλικά

Προκειμένου να μελετήσουμε τη συμπεριφορά των διηλεκτρικών υλικών θα εισάγουμε τη θεωρία βαθμίδας πόλωσης σε ελαστικά διηλεκτρικά υλικά, σύμφωνα με την θεωρία του **Mindlin (1968)**. Ο Mindlin ουσιαστικά επέκτεινε τη θεωρία του **Toupin (1956)** θεωρώντας ότι η πυκνότητα ενέργειας παραμόρφωσης και πόλωσης εξαρτάται από την τροπή, την πόλωση, καθώς και την βαθμίδα της πόλωσης. Όπως θα φανεί στη συνέχεια, η θεωρία αυτή καταλήγει σε ένα σύνολο γραμμικών εξισώσεων πεδίου, στις οποίες η μετατόπιση, η πόλωση και το ηλεκτρικό δυναμικό του αυτοπεδίου Maxwell συλλέγονται διαμέσου των καταστατικών εξισώσεων, ακόμη και στις περιπτώσεις που αφορούν κεντροσυμμετρικά και ισότροπα υλικά.

2.1 Η θεωρία μεταβολών του Mindlin

Ο **Toupin (1956)** διαχωρίζει την ηλεκτρική πυκνότητα ενθαλπίας σε μία πυκνότητα ενέργειας παραμόρφωσης και πόλωσης $W^L(S_{ij}, P_i)$ και σε κάποια υπολειπόμενη πυκνότητα ενέργειας. Η επέκταση της θεωρίας του Toupin, που θα εξεταστεί στην παρούσα εργασία, όπως προτείνεται από τον **Mindlin (1968)**, προκύπτει προσθέτοντας μια λειτουργική εξάρτηση της ενεργειακής πυκνότητας από την βαθμίδα της πόλωσης. Κατά συνέπεια, η ηλεκτρική ενθαλπία μπορεί να γραφτεί ως

$$H = W^L(S_{ij}, P_i, P_{i,j}) - \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varphi_{,i} \varphi_{,i} + \varphi_{,i} P_i \quad (2.1)$$

όπου, S_{ij} είναι τα στοιχεία των τανυστών της τροπής, με το u_i να είναι τα στοιχεία του διανύσματος μετατόπισης,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j}) \quad (2.2)$$

και φ το δυναμικό του αυτοπεδίου (self field) Maxwell,

$$E_i^{MS} = -\varphi_{,i} \quad (2.3)$$

Επιπλέον, στην (2.1) το P_i είναι τα στοιχεία του διανύσματος της πόλωσης και το ε_0 είναι η διαπερατότητα του κενού.

Από την άποψη των θεωριών πλέγματος των κρυστάλλων που βασίζονται στο μοντέλο των στιβάδων (shell model) του ατόμου, η βαθμίδα πόλωσης αντιπροσωπεύει την προσέγγιση μεγάλων μηκών κύματος (με $h/\ell \ll 1$, όπου h το πλάτος του κύματος και ℓ το μήκος του) στις αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων των στιβάδων και των πυρήνων, μεταξύ ατόμων που θα έπρεπε να αλληλεπιδρούν και μέσω των πυρήνων τους, παρά το πιθανώς μικρό τους μέγεθος (**Mindlin 1968**). Από την (2.1) θεωρούμε ότι το $W^L(S_{ij}, P_i, P_{j,i})$ γράφεται ως

$$H = \underbrace{T_{ij} S_{ij} + E_{ij} P_{i,j} - \bar{E}_i P_i}_{W^L} - \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varphi_{,i} \varphi_{,i} + \varphi_{,i} P_i \quad (2.4)$$

όπου,

$$T_{ij} \equiv \frac{\partial W^L}{\partial S_{ij}} = T_{ji}, \quad \bar{E}_i \equiv -\frac{\partial W^L}{\partial P_i}, \quad E_{ij} \equiv \frac{\partial W^L}{\partial P_{j,i}}, \quad (2.5)$$

Σε ένα σώμα που καταλαμβάνει όγκο V οριοθετημένο από μια επιφάνεια S , που χωρίζει το V από το εξωτερικό κενό V' , θεωρείται ότι:

$$\int_{V^*} \delta H dV = \int_V (F_i \delta u_i + E_i^0 \delta P_i) dV + \int_S (t_i \delta u_i + \Pi_i \delta P_i + q \delta \varphi) dS \quad (2.6)$$

Στην (2.6) ορίζεται, $V^* = V + V'$, F_i και E_i^0 είναι η καθολική δύναμη του σώματος και το ηλεκτρικό πεδίο, αντίστοιχα. Ακολουθώντας, t_i είναι ο ελκυστής των τάσεων στο σύνορο S , ενώ Π_i και q είναι ποσότητες που σχετίζονται με την επιφανειακή ενέργεια στο σύνορο S . Για ανεξάρτητες μεταβολές των u_i , φ και P_i γράφουμε από την εξ. (2.4):

$$\delta H = T_{ij} \delta S_{ij} + E_{ij} \delta P_{i,j} - \bar{E}_i \delta P_i - \varepsilon_0 \varphi_{,i} \delta \varphi_{,i} + \varphi_{,i} \delta P_i + P_i \delta \varphi_{,i} \quad (2.7)$$

Τότε η εξίσωση (2.6) μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned} \int_{V^*} \underbrace{(T_{ij} \delta S_{ij} + E_{ij} \delta P_{i,j} - \bar{E}_i \delta P_i)}_{\delta W^L} dV + \int_{V^*} \underbrace{(-\varepsilon_0 \varphi_{,i} \delta \varphi_{,i} + \varphi_{,i} \delta P_i + \delta \varphi_{,i} P_i)}_{\delta H - \delta W^L} dV = \\ = \int_V (F_i \delta u_i + E_i^0 \delta P_i) dV + \int_S (t_i \delta u_i + \Pi_i \delta P_i + q \delta \varphi) dS \end{aligned} \quad (2.8)$$

Αντικαθιστώντας την μεταβολή $\delta S_{ij} = \delta u_{i,j}$ στην (2.8) γράφουμε:

$$\begin{aligned} \int_{V^*} T_{ij} \delta u_{i,j} dV + \int_{V^*} E_{ij} \delta P_{i,j} dV - \int_{V^*} \bar{E}_i \delta P_i dV + \\ + \int_{V^*} (-\varepsilon_0 \varphi_{,i} \delta \varphi_{,i}) dV + \int_{V^*} \varphi_{,i} \delta P_i dV + \int_{V^*} P_i \delta \varphi_{,i} dV = \\ = \int_V F_i \delta u_i dV + \int_V E_i^0 \delta P_i dV + \int_S t_i \delta u_i dS + \int_S \Pi_i \delta P_i dS + \int_S q \delta \varphi dS \end{aligned} \quad (2.9)$$

Στη συνέχεια γράφουμε,

$$\begin{aligned} T_{ij} \delta u_{i,j} &= (T_{ij} \delta u_i)_{,j} - T_{ij,j} \delta u_i, \\ E_{ij} \delta P_{i,j} &= (E_{ij} \delta P_i)_{,j} - E_{ij,j} \delta P_i, \\ -\varepsilon_0 \varphi_{,i} \delta \varphi_{,i} &= \varepsilon_0 \varphi_{,ii} \delta \varphi - (\varepsilon_0 \varphi_{,i} \delta \varphi)_{,i}, \\ P_i \delta \varphi_{,i} &= (P_i \delta \varphi)_{,i} - P_{i,i} \delta \varphi. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Συνεπώς, η εξίσωση (2.9) εν όψει του (2.10) μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned}
& \int_{V^*} \left((T_{ij} \delta u_i)_{,j} - T_{ij,j} \delta u_i \right) dV + \int_{V^*} \left((E_{ij} \delta P_i)_{,j} - E_{ij,j} \delta P_i \right) dV - \int_{V^*} (\bar{E}_i \delta P_i) dV \\
& + \int_{V^*} \left(\varepsilon_0 \varphi_{,ii} \delta \varphi - (\varepsilon_0 \varphi_{,i} \delta \varphi)_{,i} \right) dV + \int_{V^*} (\varphi_{,i} \delta P_i) dV + \int_{V^*} \left((P_i \delta \varphi)_{,i} - P_{i,i} \delta \varphi \right) dV = \quad (2.11) \\
& = \int_V F_i \delta u_i dV + \int_V E_i^0 \delta P_i dV + \int_S t_i \delta u_i dS + \int_S \Pi_i \delta P_i dS + \int_S q \delta \varphi dS
\end{aligned}$$

Εφαρμόζοντας το θεώρημα της απόκλισης προκύπτει,

$$\begin{aligned}
& \int_S T_{ij} n_j \delta u_i dS + \int_{V^*} (-T_{ij,j} \delta u_i) dV + \int_S E_{ij} n_j \delta P_i dS + \int_{V^*} (-E_{ij,j} \delta P_i) dV - \int_{V^*} \bar{E}_i \delta P_i dV \\
& + \int_{V^*} \varepsilon_0 \varphi_{,ii} \delta \varphi dV + \int_S (-\varepsilon_0 \varphi_{,i} n_i \delta \varphi) dS \\
& + \int_{V^*} \varphi_{,i} \delta P_i dV + \int_S P_i n_i \delta \varphi dS + \int_{V^*} (-P_{i,i} \delta \varphi) dV = \quad (2.12) \\
& = \int_V F_i \delta u_i dV + \int_V E_i^0 \delta P_i dV + \int_S t_i \delta u_i dS + \int_S \Pi_i \delta P_i dS + \int_S q \delta \varphi dS
\end{aligned}$$

Στη σχέση (2.12) διαχωρίζουμε τους μηχανικούς όρους όγκου και επιφανείας και τους ηλεκτρικούς όρους όγκου και επιφανείας ως εξής:

$$\begin{aligned}
& \int_S T_{ij} n_j \delta u_i dS - \int_S t_i \delta u_i dS + \int_S E_{ij} n_j \delta P_i dS - \int_S \Pi_i \delta P_i dS \\
& + \int_S P_i n_i \delta \varphi dS + \int_S (-\varepsilon_0 \varphi_{,i} n_i \delta \varphi) dS - \int_S q \delta \varphi dS \\
& - \int_V F_i \delta u_i dV + \int_V (-T_{ij,j} \delta u_i) dV \quad (2.13) \\
& + \int_{V^*} (-E_{ij,j} \delta P_i) dV - \int_{V^*} \bar{E}_i \delta P_i dV - \int_V E_i^0 \delta P_i dV + \int_{V^*} \varphi_{,i} \delta P_i dV \\
& + \int_{V^*} \varepsilon_0 \varphi_{,ii} \delta \varphi dV + \int_{V^*} (-P_{i,i} \delta \varphi) dV = 0
\end{aligned}$$

είτε,

$$\begin{aligned}
& \int_S (T_{ij}n_j - t_i) \delta u_i dS + \int_S (E_{ij}n_j - \Pi_i) \delta P_i dS \\
& + \int_S ((P_i - \varepsilon_0 \varphi_{,i})n_i - q) \delta \varphi dS \\
& + \int_V (T_{ij,j} - F_i) \delta u_i dV \\
& + \int_V (-E_{ij,j} - \bar{E}_i - E_i^0 + \varphi_{,i}) \delta P dV \\
& + \int_V (\varepsilon_0 \varphi_{,ii} \delta \varphi - P_{i,i} \delta \varphi) dV + \int_{V'} \varepsilon_0 \varphi_{,ii} \delta \varphi dV = 0
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Τέλος, από την (2.14) παίρνουμε τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$\begin{aligned}
T_{ij,j} - F_i &= 0, & \text{in } V, \\
\bar{E}_i + E_{ij,j} - \varphi_{,i} + E_i^0 &= 0, & \text{in } V, \\
-\varepsilon_0 \varphi_{,ii} + P_{i,i} &= 0, & \text{in } V, \\
\varphi_{,ii} &= 0, & \text{in } V',
\end{aligned} \tag{2.15}$$

και τις αντίστοιχες συνοριακές συνθήκες,

$$\begin{aligned}
n_j T_{ij} &= t_i, & \text{on } S, \\
n_j E_{ij} &= \Pi_i, & \text{on } S, \\
n_i (-\varepsilon_0 \llbracket \varphi_{,i} \rrbracket + P_i) &= q, & \text{on } S,
\end{aligned} \tag{2.16}$$

όπου, $\llbracket \varphi_{,i} \rrbracket$ είναι το άλμα μέσα στο $\varphi_{,i}$ κατά μήκος του S , n_i είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στο σύνορο S , κατευθυνόμενο προς τα έξω από το V .

Στη συνέχεια, γράφουμε την πυκνότητα παραμορφωσιακής ενέργειας W^L ως

$$W^L = b_{ij}^0 P_{j,i} + \frac{1}{2} a_{ij} P_i P_j + \frac{1}{2} b_{ijkl} P_{j,i} P_{l,k} + \frac{1}{2} c_{ijkl} S_{ij} S_{kl} + d_{ijkl} P_{j,i} S_{kl} + f_{ijk} P_i S_{jk} + g_{ijk} P_i P_{k,j} \tag{2.17}$$

Σε αυτό το σημείο, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η πυκνότητα παραμορφωσιακής ενέργειας W^L περιλαμβάνει τον γραμμικό όρο $b_{ij}^0 P_{j,i}$ στην κλίση της πόλωσης. Ακολούθως, όπως αποδεικνύει ο **Mindlin (1968)** ότι η επιφανειακή ενέργεια παραμόρφωσης και πόλωσης ανά μονάδα επιφανείας υπολογίζεται ως

$$T = \frac{1}{2} b_0 [n_i P_i]_s \quad (2.18)$$

Αυτή η ενέργεια προστίθεται στην ενέργεια δεσμού ανά μονάδα επιφάνειας προκειμένου να υπολογισθεί η συνολική ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας που απαιτείται για τον διαχωρισμό του υλικού κατά μήκος της επιφάνειας S (Toupin, 1956, Schwartz, 1969).

Από την εξίσωση (2.5) γράφουμε,

$$-\bar{E}_j = f_{jkl} S_{kl} + a_{jk} P_k + g_{jkl} P_{l,k},$$

$$E_{ij} = d_{ijkl} S_{kl} + g_{kij} P_k + b_{ijkl} P_{l,k} + b_{ij}^0, \quad (2.19)$$

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} + f_{kij} P_k + d_{klij} P_{l,k},$$

Οι εξισώσεις (2.2), (2.15) και (2.19) με τις συνοριακές συνθήκες (2.16) σχηματίζουν τις εξισώσεις της εκτεταμένης θεωρίας.

Πίνακας 1: Ισοτροπικοί συντελεστές υλικών και σχετικών παραμέτρων					
	<i>NaCl</i>	<i>GaAs</i>	<i>BaTiO3</i>	<i>SrTiO3</i>	Μονάδες
<i>E</i>	37.2 · 10⁹	85.26 · 10⁹	117 · 10⁹	246 · 10⁹	N/m²
<i>ν</i>	0.249	0.311	0.349	0.300	-
<i>d₁₂</i>	0.470	1.304	22	6.27	Nm/C
<i>d₄₄</i>	-0.170	0.356	-12	-5.57	
<i>b₁₂</i>	0	0	0	0	10⁻⁹Nm⁴/C²
<i>b₄₄</i>	0.34	0.53	5.00	0.50	
<i>b₇₇</i>	0.34	0.53	5.00	0.50	
<i>ε_r</i>	7.50	13.4	2000	310	-
<i>a</i>	1.74 · 10¹⁰	9.16 · 10⁹	5.68 · 10⁷	3.68 · 10⁸	C²/Nm²

Αξιόλογο είναι να αναλύσουμε παραπάνω τα τέσσερα υλικά που αναφέρονται στον παραπάνω πίνακα. Ένας ιονικός κρύσταλλος *NaCl* χαρακτηρίζεται ως μια χημική ένωση που αποτελείται από ιόντα, τα οποία συγκρατούνται μεταξύ τους με ηλεκτροστατικές δυνάμεις που ονομάζονται ιοντικοί δεσμοί. Δεν υπάρχει καθαρή πόλωση μέσα σε αυτά τα υλικά, απουσία εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, επειδή οι διπολικές ροπές των αρνητικών ιόντων ακυρώνονται με αυτές των θετικών ιόντων. Ωστόσο, όταν εφαρμόζεται ένα εξωτερικό πεδίο, τα ιόντα μετατοπίζονται, γεγονός που οδηγεί σε μια επαγόμενη

πόλωση. Παραδείγματα τέτοιων κρυστάλλων είναι τα αλογονίδια αλκαλίων, συμπεριλαμβανομένου του φθοριούχου καλίου, του χλωριούχου καλίου, του βρωμιούχου καλίου, του ιωδιούχου καλίου, του φθοριούχου νατρίου και άλλων συνδυασμών ιόντων νατρίου, καισίου, ρουβιδίου ή λιθίου με ιόντα φθοριούχου, βρωμιούχου ή ιωδίου. Οι ιδιότητες του *NaCl* αντικατοπτρίζουν τις ισχυρές αλληλεπιδράσεις που υπάρχουν μεταξύ των ιόντων. Είναι καλός αγωγός του ηλεκτρισμού όταν είναι λιωμένος, αλλά πολύ αδύναμος σε στερεά κατάσταση (Hellwege, 1979).

Το αρσενίδιο του γαλλίου (*GaAs*) είναι ένας ημιαγωγός άμεσου χάσματος ζωνών III-V με κρυσταλλική δομή μείγματος ψευδαργύρου. Το αρσενίδιο του γαλλίου χρησιμοποιείται στην κατασκευή συσκευών όπως ολοκληρωμένα κυκλώματα συχνότητας μικροκυμάτων, μονολιθικά ολοκληρωμένα κυκλώματα μικροκυμάτων, διόδους εκπομπής υπέρυθρου φωτός, διόδους λέιζερ, ηλιακά κύτταρα και οπτικά παράθυρα. Το *GaAs* χρησιμοποιείται συχνά ως υλικό υποστρώματος για την επιταξιακή ανάπτυξη άλλων ημιαγωγών III-V, συμπεριλαμβανομένου του αρσενιδίου γαλλίου ινδίου, του αρσενιδίου γαλλίου αργιλίου και άλλων.

Ο περοβσκίτης *BaTiO₃* είναι ένα σιδηροηλεκτρικό υλικό με εφαρμογές σε πολλές ηλεκτρονικές συσκευές, όπως πυκνωτές, νυχτερινή όραση και συσκευές μνήμης. Επιταξιακές λεπτές μεμβράνες *BaTiO₃* έχουν αναπτυχθεί σε *SrTiO₃* χρησιμοποιώντας ενεργό-αντιδραστική εξάτμιση με παλμική εναπόθεση λέιζερ και εναπόθεση χημικών μέταλλο-οργανικών ατμών. Κάτω από τους 130°C, το μη τεντωμένο *BaTiO₃* είναι τετραγωνικό ($a=0.3992$ nm, $c=0.4036$ nm) με αυθόρμητη πόλωση κατά μήκος του άξονα c του. Πάνω από 130°C είναι κυβικό ($a>0.401$ nm). Το *SrTiO₃* είναι ένας κυβικός περοβσκίτης με παράμετρο πλέγματος $a=0.3905$ nm σε θερμοκρασία δωματίου (Iijima, et al. 1990).

Από την επιστήμη των υλικών, γνωρίζουμε πως η γενική μορφή του διανύσματος Burger χαρακτηρίζεται από την εξής σχέση (Callister, 2005)

$$b = \frac{a}{n} \sqrt{h^2 + l^2 + k^2} \quad (2.20)$$

όπου a είναι το μήκος της πλευράς της μοναδιαίας κυψελίδας, n είναι ο συντελεστής διόρθωσης του a που εξαρτάται από την δομή του κρυστάλλου και $(h \ l \ k)$ είναι οι δείκτες Miller. Λαμβάνοντας από την βιβλιογραφία τον μέσο όρο του μήκους της μοναδιαίας κυβικής κυψελίδας, καθώς και τη μορφή του διανύσματος burger για κάθε ένα από τα προαναφερθέντα υλικά, συμπληρώνουμε τον Πίνακα 2 με την βοήθεια της εξίσωσης (2.20) για να βρούμε το μέτρο του διανύσματος burger σε κάθε περίπτωση:

Πίνακας 2: Μέτρο διανύσματος Burger						
	a (nm)	n	h	l	k	b (nm)
<i>NaCl</i>	0.5635	0.5	1	1	0	0.398455
<i>GaAs</i>	0.567667	0.5	1	1	0	0.401401
<i>BaTiO₃</i>	0.404	1	1	0	0	0.404
<i>SrTiO₃</i>	0.395	0.5	0	1	1	0.279307

2.2 Κεντροσυμμετρικά Υλικά

Η παρούσα θεωρία, ουσιαστικά, περιλαμβάνει την ηλεκτρομηχανική αλληλεπίδραση, η οποία παρουσιάζεται μέσω του συντελεστή d_{ijkl} , ακόμη και για υλικά με κεντροσυμμετρία. Για κεντροσυμμετρικό υλικό έχουμε (Mason, 1966),

$$\begin{aligned}
 f_{ijk} &= 0, \quad g_{ijk} = 0, \quad a_{ij} = a\delta_{ij}, \quad b_{ij}^0 = b_0\delta_{ij}, \\
 b_{ijkl} &= b\delta_{ijkl} + b_{12}\delta_{ij}\delta_{kl} + b_{44}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + b_{77}(\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}), \\
 c_{ijkl} &= c\delta_{ijkl} + c_{12}\delta_{ij}\delta_{kl} + c_{44}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \\
 d_{ijkl} &= d\delta_{ijkl} + d_{12}\delta_{ij}\delta_{kl} + d_{44}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}).
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

όπου,

$$b = b_{11} - b_{12} - 2b_{44}, \quad c = c_{11} - c_{12} - 2c_{44}, \quad d = d_{11} - d_{12} - 2d_{44}. \tag{2.22}$$

Παραπάνω, το δ_{ij} είναι το δέλτα του Kronecker και είναι μονάδα εάν όλοι οι δείκτες είναι ίδιοι, και μηδέν διαφορετικά.

Στη συνέχεια από τις εξισώσεις (2.5), (2.17) και (2.21) γράφουμε,

$$-\bar{E}_i = aP_i,$$

$$E_{ij} = b\delta_{ijkl}P_{l,k} + b_{12}\delta_{ij}P_{k,k} + b_{44}(P_{j,i} + P_{i,j}) + b_{77}(P_{j,i} - P_{i,j}) + d\delta_{ijkl}S_{kl} + d_{12}\delta_{ij}S_{kk} + 2d_{44}S_{ij} + b_0\delta_{ij}, \tag{2.23}$$

$$T_{ij} = d\delta_{ijkl}P_{l,k} + d_{12}\delta_{ij}P_{k,k} + d_{44}(P_{j,i} + P_{i,j}) + c\delta_{ijkl}S_{kl} + c_{12}\delta_{ij}S_{kk} + 2c_{44}S_{ij}.$$

Επιπλέον, για ισότροπα υλικά απαιτείται μόνο να θέσουμε (Mindlin, 1968),

$$b = c = d = 0. \tag{2.24}$$

Έτσι, από την (2.23) μπορούμε να γράψουμε (Παράρτημα A1),

$$-\bar{E}_j \equiv \frac{\partial W^L}{\partial P_j} = aP_j,$$

$$E_{ij} \equiv \frac{\partial W^L}{\partial P_{j,i}} = b_{12}\delta_{ij}P_{k,k} + (b_{44} + b_{77})P_{j,i} + (b_{44} - b_{77})P_{i,j} + d_{12}\delta_{ij}S_{kk} + 2d_{44}S_{ij} + b_0\delta_{ij}, \tag{2.25}$$

$$T_{ij} \equiv \frac{\partial W^L}{\partial S_{ij}} = d_{12}\delta_{ij}P_{k,k} + d_{44}(P_{j,i} + P_{i,j}) + c_{12}\delta_{ij}S_{kk} + 2c_{44}S_{ij} = T_{ji}$$

Για ένα ομογενές υλικό λαμβάνουμε τις εξισώσεις μετατόπισης ισορροπίας από τις (2.15), (2.2) και (2.25)

. Σε διανυσματική μορφή γράφονται ως (Schwartz, 1969):

$$\begin{aligned}
 c_{44}\nabla^2\mathbf{u} + (c_{12} + c_{44})\nabla\nabla\cdot\mathbf{u} + d_{44}\nabla^2\mathbf{P} + (d_{12} + d_{44})\nabla\nabla\cdot\mathbf{P} + \mathbf{F} &= 0, \\
 d_{44}\nabla^2\mathbf{u} + (d_{12} + d_{44})\nabla\nabla\cdot\mathbf{u} + (b_{44} + b_{77})\nabla^2\mathbf{P} + (b_{12} + b_{44} - b_{77})\nabla\nabla\cdot\mathbf{P} - a\mathbf{P} - \nabla\varphi + \mathbf{E}^0 &= 0, \\
 -\varepsilon_0\nabla^2\varphi + \nabla\cdot\mathbf{P} &= 0, \text{ in } V,
 \end{aligned}
 \tag{2.26}$$

$$\nabla^2\varphi = 0, \text{ in } V'.$$

Οι συνοριακές συνθήκες για μια ελεύθερη επιφάνεια S σε σχέση με τα \mathbf{u} , \mathbf{P} , φ σε διανυσματική μορφή γράφονται, από τις σχέσεις (2.16), (2.2) και (2.25) ως:

$$\begin{aligned}
 d_{12}\mathbf{n}\nabla\cdot\mathbf{P} + d_{44}\mathbf{n}\cdot(\nabla\mathbf{P} + \mathbf{P}\nabla) + c_{12}\mathbf{n}\nabla\cdot\mathbf{u} + c_{44}\mathbf{n}\cdot(\nabla\mathbf{u} + \mathbf{u}\nabla) &= \mathbf{t}, \\
 b_{12}\mathbf{n}\nabla\cdot\mathbf{P} + b_{44}\mathbf{n}\cdot(\nabla\mathbf{P} + \mathbf{P}\nabla) + b_{77}\mathbf{n}\cdot(\nabla\mathbf{P} - \mathbf{P}\nabla) + d_{12}\mathbf{n}\nabla\cdot\mathbf{u} + d_{44}\mathbf{n}\cdot(\nabla\mathbf{u} + \mathbf{u}\nabla) + b_0\mathbf{n} &= \mathbf{\Pi}, \\
 \mathbf{n}\cdot(-\varepsilon_0\nabla\varphi + \mathbf{P}) &= q.
 \end{aligned}
 \tag{2.27}$$

2.3 Θετικά ορισμένη ενέργεια της συνάρτησης ενεργειακής πυκνότητας

Οι υλικές σταθερές $(c_{12}, c_{44}, d_{12}, d_{44}, b_{12}, b_{44}, b_{77}, a)$ θα πρέπει να υπόκεινται σε ορισμένους περιορισμούς, εξαιτίας της απαίτησης πως η παραμορφωσιακή πυκνότητα ενέργειας W^L πρέπει να είναι θετικά ορισμένη (PD). Οι περιορισμοί αυτοί δίνονται από τις ακόλουθες ανισότητες (**Παράρτημα Α2**):

$$\begin{aligned} c_{44} > 0, \quad 3c_{12} + 2c_{44} > 0, \quad a > 0, \quad b_{44} > \frac{d_{44}^2}{c_{44}} \\ b_{12} + 2b_{44} > \frac{4b_{44}(3c_{12} + 2c_{44}) + (3d_{12} + 2d_{44})^2}{9c_{12} + 6c_{44}}, \quad b_{77} > 0 \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.4 Εξισώσεις υπό συνθήκες επίπεδης παραμόρφωσης

Για ένα σώμα που καταλαμβάνει μια περιοχή στο επίπεδο $(x-y)$ υπό συνθήκες επίπεδης παραμόρφωσης, το πεδίο μετατόπισης λαμβάνει την ακόλουθη γενική διατύπωση (**Sadd, 2009**):

$$u_x \equiv u_x(x, y) \neq 0, \quad u_y \equiv u_y(x, y), \quad u_z = 0. \quad (2.29)$$

Συνεπώς, η (2.25) έχει την ακόλουθη μορφή:

- i. Καταστατικές σχέσεις για την αποτελεσματική τοπική ηλεκτρική δύναμη \bar{E}_i :

$$-\bar{E}_x = aP_x, \quad -\bar{E}_y = aP_y, \quad (2.30)$$

- ii. Καταστατικές σχέσεις για το E_{ij} :

$$\begin{aligned} E_{xx} &= (b_{12} + 2b_{44})P_{x,x} + b_{12}P_{y,y} + (d_{12} + 2d_{44})u_{x,x} + d_{12}u_{y,y} + b_0 \\ E_{yy} &= b_{12}P_{x,x} + (b_{12} + 2b_{44})P_{y,y} + d_{12}u_{x,x} + (d_{12} + 2d_{44})u_{y,y} + b_0 \\ E_{xy} &= (b_{44} + b_{77})P_{y,x} + (b_{44} - b_{77})P_{x,y} + d_{44}(u_{x,y} + u_{y,x}) \\ E_{yx} &= (b_{44} + b_{77})P_{x,y} + (b_{44} - b_{77})P_{y,x} + d_{44}(u_{x,y} + u_{y,x}) \end{aligned} \quad (2.31)$$

- iii. Καταστατικές σχέσεις για τις τάσεις T_{ij} :

$$\begin{aligned} T_{xx} &= (d_{12} + 2d_{44})P_{x,x} + d_{12}P_{y,y} + (c_{12} + 2c_{44})u_{x,x} + c_{12}u_{y,y} \\ T_{yy} &= d_{12}P_{x,x} + (d_{12} + 2d_{44})P_{y,y} + c_{12}u_{x,x} + (c_{12} + 2c_{44})u_{y,y} \\ T_{xy} &= d_{44}(P_{y,x} + P_{x,y}) + c_{44}(u_{x,y} + u_{y,x}) \\ T_{yx} &= d_{44}(P_{x,y} + P_{y,x}) + c_{44}(u_{x,y} + u_{y,x}) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Οι εξισώσεις ισορροπίας μπορούν να γραφτούν από την (2.26) απουσία καθολικών δυνάμεων και $E_x^0 = E_y^0 = 0$ ως:

$$(d_{12} + 2d_{44})P_{x,xx} + d_{12}P_{y,yx} + d_{44}(P_{x,yy} + P_{y,xy}) + (c_{12} + 2c_{44})u_{x,xx} + c_{12}u_{y,yx} + c_{44}(u_{x,yy} + u_{y,xy}) = 0, \quad (2.33)$$

$$(d_{12} + 2d_{44})P_{y,yy} + d_{12}P_{x,xy} + d_{44}(P_{y,xx} + P_{x,yx}) + (c_{12} + 2c_{44})u_{y,yy} + c_{12}u_{x,xy} + c_{44}(u_{x,yx} + u_{y,xx}) = 0, \\ -aP_x + (b_{12} + 2b_{44})P_{x,xx} + b_{12}P_{y,yx} + (b_{44} + b_{77})P_{x,yy} + (b_{44} - b_{77})P_{y,xy} \\ + (d_{12} + 2d_{44})u_{x,xx} + d_{12}u_{y,yx} + d_{44}(u_{x,yy} + u_{y,xy}) - \varphi_{,x} = 0 \quad (2.34)$$

$$-aP_y + (b_{12} + 2b_{44})P_{y,yy} + b_{12}P_{x,xy} + (b_{44} + b_{77})P_{y,xx} + (b_{44} - b_{77})P_{x,yx} \\ + (d_{12} + 2d_{44})u_{y,yy} + d_{12}u_{x,xy} + d_{44}(u_{x,yx} + u_{y,xx}) - \varphi_{,y} = 0 \\ -\varepsilon_0(\varphi_{,xx} + \varphi_{,yy}) + P_{x,x} + P_{y,y} = 0 \text{ in } V, \quad (2.35)$$

$$\varphi_{,xx} + \varphi_{,yy} = 0 \text{ in } V',$$

Τέλος, στην περίπτωση ενός ημιεπιπέδου, του οποίου το ευθύγραμμο σύνορο ορίζεται από το μοναδιαίο κανονικοποιημένο διάνυσμα $n = (0,1)$ οι συνοριακές συνθήκες στην (2.27) λαμβάνουν την ακόλουθη μορφή:

$$-d_{44}(P_{x,y} + P_{y,x}) - c_{44}(u_{x,y} + u_{y,x}) = t_x, \\ -d_{12}P_{x,x} - (d_{12} + 2d_{44})P_{y,y} - c_{12}u_{x,x} - (c_{12} + 2c_{44})u_{y,y} = t_y \\ (b_{44} + b_{77})P_{x,y} + (b_{44} - b_{77})P_{y,x} + d_{44}(u_{x,y} + u_{y,x}) = \Pi_x, \quad (2.36)$$

$$b_{12}P_{x,x} + (b_{12} + 2b_{44})P_{y,y} + d_{12}u_{x,x} + (d_{12} + 2d_{44})u_{y,y} + b_0 = \Pi_y,$$

$$-\varepsilon_0 \llbracket \varphi_{,y} \rrbracket + P_y = q$$

2.5 Εφαρμογή του Μετασχηματισμού Fourier

Προκειμένου να επιλυθεί πρόβλημα συνοριακών τιμών, υπό συνθήκες επίπεδης παραμόρφωσης που αφορά ημιεπίπεδο χωρίο D με ευθύγραμμο όριο L , ορίζουμε τον ευθύ και τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier ως (Debnath & Bhatta, 2007),

$$\hat{f}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\xi x} dx, \quad f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\xi) e^{-i\xi x} d\xi \quad (2.37)$$

Συνεπώς, οι εξ. (2.33) γράφεται ως:

$$\begin{aligned} -\xi^2 (c_{12} + 2c_{44}) \hat{u}_x + c_{44} \hat{u}_{x,yy} - i\xi (c_{12} + c_{44}) \hat{u}_{y,y} \\ - \xi^2 (d_{12} + 2d_{44}) \hat{P}_x + d_{44} \hat{P}_{x,yy} - i\xi (d_{12} + d_{44}) \hat{P}_{y,y} = 0, \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} -i\xi (c_{12} + c_{44}) \hat{u}_{x,y} - \xi^2 c_{44} \hat{u}_y + (c_{12} + 2c_{44}) \hat{u}_{y,yy} \\ - i\xi (d_{12} + d_{44}) \hat{P}_{x,y} + (d_{12} + 2d_{44}) \hat{P}_{y,yy} - \xi^2 d_{44} \hat{P}_y = 0, \end{aligned}$$

Οι εξ. (2.34) γράφεται ως:

$$\begin{aligned} -\xi^2 (d_{12} + 2d_{44}) \hat{u}_x + d_{44} \hat{u}_{x,yy} - i\xi (d_{12} + d_{44}) \hat{u}_{y,y} \\ - (a + \xi^2 (b_{12} + 2b_{44})) \hat{P}_x + (b_{44} + b_{77}) \hat{P}_{x,yy} - i\xi (b_{12} + b_{44} - b_{77}) \hat{P}_{y,y} + i\xi \hat{\phi} = 0 \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} -i\xi (d_{12} + d_{44}) \hat{u}_{x,y} + (d_{12} + 2d_{44}) \hat{u}_{y,yy} - \xi^2 d_{44} \hat{u}_y \\ - i\xi (b_{12} + b_{44} - b_{77}) \hat{P}_{x,y} - (\xi^2 (b_{44} + b_{77}) + a) \hat{P}_y + (b_{12} + 2b_{44}) \hat{P}_{y,yy} - \hat{\phi}_{,y} = 0 \end{aligned}$$

Οι εξ. (2.35) γράφεται ως:

$$\begin{aligned} -\varepsilon_0 (-\xi^2 \hat{\phi} + \hat{\phi}_{,yy}) - i\xi \hat{P}_x + \hat{P}_{y,y} = 0 \text{ in } V, \\ -\xi^2 \hat{\phi} + \hat{\phi}_{,yy} = 0 \text{ in } V', \end{aligned} \quad (2.40)$$

Υπό αυτήν την έννοια, το μετασχηματισμένο E_{ij} μπορεί να γραφτεί από την (2.31) ως:

$$\begin{aligned}
\hat{E}_{xx} &= -i\xi(b_{12} + 2b_{44})\hat{P}_x + b_{12}\frac{d\hat{P}_y}{dy} - i\xi(d_{12} + 2d_{44})\hat{u}_x + d_{12}\frac{d\hat{u}_y}{dy} + b_0\delta(\xi) \\
\hat{E}_{yy} &= -i\xi b_{12}\hat{P}_x + (b_{12} + 2b_{44})\frac{d\hat{P}_y}{dy} - i\xi d_{12}\hat{u}_x + (d_{12} + 2d_{44})\frac{d\hat{u}_y}{dy} + b_0\delta(\xi) \\
\hat{E}_{xy} &= -i\xi(b_{44} + b_{77})\hat{P}_y + (b_{44} - b_{77})\frac{d\hat{P}_x}{dy} + d_{44}\left(\frac{d\hat{u}_x}{dy} - i\xi\hat{u}_y\right) \\
\hat{E}_{yx} &= (b_{44} + b_{77})\frac{d\hat{P}_x}{dy} - i\xi(b_{44} - b_{77})\hat{P}_y + d_{44}\left(\frac{d\hat{u}_x}{dy} - i\xi\hat{u}_y\right)
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Συνεπώς, οι μετασχηματισμένες τάσεις μπορούν να γραφτούν από το (2.32) ως:

$$\begin{aligned}
\hat{T}_{xx} &= -i\xi(d_{12} + 2d_{44})\hat{P}_x + d_{12}\frac{d\hat{P}_y}{dy} - i\xi(c_{12} + 2c_{44})\hat{u}_x + c_{12}\frac{d\hat{u}_y}{dy} \\
\hat{T}_{yy} &= -i\xi d_{12}\hat{P}_x + (d_{12} + 2d_{44})\frac{d\hat{P}_y}{dy} - i\xi c_{12}\hat{u}_x + (c_{12} + 2c_{44})\frac{d\hat{u}_y}{dy} \\
\hat{T}_{xy} = \hat{T}_{yx} &= d_{44}\left(\frac{d\hat{P}_x}{dy} - i\xi\hat{P}_y\right) + c_{44}\left(\frac{d\hat{u}_x}{dy} - i\xi\hat{u}_y\right)
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Οι εξισώσεις (2.38), (2.39) και (2.40) μπορούν να γραφτούν με την ακόλουθη μορφή πίνακα ως:

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} & \alpha_{15} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} & \alpha_{25} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} & \alpha_{34} & \alpha_{35} \\ \alpha_{14} & \alpha_{24} & \alpha_{34} & \alpha_{44} & \alpha_{45} \\ \alpha_{15} & \alpha_{25} & \alpha_{35} & \alpha_{45} & \alpha_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.43}$$

όπου ο παραπάνω πίνακας είναι συμμετρικός και έχει τα εξής στοιχεία:

$$\begin{aligned}
\alpha_{11} &= -\xi^2(c_{12} + 2c_{44}) + c_{44}d^2, \quad \alpha_{22} = -\xi^2 c_{44} + (c_{12} + 2c_{44})d^2, \quad \alpha_{33} = -(a + \xi^2(b_{12} + 2b_{44})) + (b_{44} + b_{77})d^2, \\
\alpha_{44} &= -(a + \xi^2(b_{44} + b_{77})) + (b_{12} + 2b_{44})d^2, \quad \alpha_{55} = \varepsilon_0(d^2 - \xi^2) \\
\alpha_{12} &= -i\xi(c_{12} + c_{44})d, \quad \alpha_{13} = -\xi^2(d_{12} + 2d_{44}) + d_{44}d^2, \quad \alpha_{14} = -i\xi(d_{12} + d_{44})d, \quad \alpha_{15} = 0 \\
\alpha_{23} &= \alpha_{12}, \quad \alpha_{24} = (d_{12} + 2d_{44})d^2 - \xi^2 d_{44}, \quad \alpha_{25} = \alpha_{15} \\
\alpha_{34} &= -i\xi(b_{12} + b_{44} - b_{77})d, \quad \alpha_{35} = i\xi \\
\alpha_{45} &= -d
\end{aligned}$$

Εφαρμόζουμε περαιτέρω τις ακόλουθες αντικαταστάσεις:

$$b = b_{12} + 2b_{44}, \quad c = c_{12} + 2c_{44}, \quad d = d_{12} + 2d_{44}, \quad B = b_{77} + b_{44} \quad (2.44)$$

έτσι η (2.43) μπορεί να γραφτεί ως:

$$\begin{bmatrix} c_{44} d^2 - c\xi^2 & -i(c - c_{44})\xi d & d_{44} d^2 - d\xi^2 & -i(d - d_{44})\xi d & 0 \\ -i(c - c_{44})d\xi & cd^2 - c_{44}\xi^2 & -i(d - d_{44})\xi d & d d^2 - d_{44}\xi^2 & 0 \\ d_{44} d^2 - d\xi^2 & -i(d - d_{44})d\xi & -a + B d^2 - b\xi^2 & -i(b - B)\xi d & i\xi \\ -i(d - d_{44})\xi d & d d^2 - d_{44}\xi^2 & -i(b - B)\xi d & -a + b d^2 - B\xi^2 & -d \\ 0 & 0 & i\xi & -d & \varepsilon_0(d^2 - \xi^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

Τότε οι συνοριακές συνθήκες στο (2.36) μετασχηματίζονται ως εξής:

$$-c_{44}(\hat{u}_x - i\xi \hat{u}_y) - d_{44}(\hat{P}_x - i\xi \hat{P}_y) = \hat{t}_x,$$

$$i\xi(c - 2c_{44})\hat{u}_x - cd\hat{u}_y + i\xi(d - 2d_{44})\hat{P}_x - dd\hat{P}_y = \hat{t}_y$$

$$d_{44}(\hat{u}_x - i\xi \hat{u}_y) + Bd\hat{P}_x - i\xi(2b_{44} - B)\hat{P}_y = \hat{\Pi}_x, \quad (2.46)$$

$$-i\xi(d - 2d_{44})\hat{u}_x + dd\hat{u}_y - i\xi(b - 2b_{44})\hat{P}_x + bd\hat{P}_y = \hat{\Pi}_y - b_0\delta(\xi),$$

$$-\varepsilon_0 d\hat{\phi} + \hat{P}_y = \hat{q},$$

Εναλλακτικά, η (2.46) μπορεί να γραφτεί σε μορφή πίνακα ως:

$$\begin{bmatrix} -c_{44}d & i\xi c_{44} & -d_{44}d & i\xi d_{44} & 0 \\ i\xi(c - 2c_{44}) & -cd & i\xi(d - 2d_{44}) & -dd & 0 \\ d_{44}d & -i\xi d_{44} & Bd & -i\xi(2b_{44} - B) & 0 \\ -i\xi(d - 2d_{44}) & dd & -i\xi(b - 2b_{44}) & bd & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -\varepsilon_0 d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{t}_x \\ \hat{t}_y \\ \hat{\Pi}_x \\ \hat{\Pi}_y - b_0\delta(\xi) \\ \hat{q} \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

Η λύση της Εξ. (2.45) οδηγεί στην ακόλουθη μορφή των μετασχηματισμένων συνιστωσών μετατόπισης και πόλωσης καθώς και του μετασχηματισμένου δυναμικού του αυτοπεδίου Maxwell $\hat{\phi}$ (Τραχανάς, 1989):

$$\begin{aligned}
\hat{u}_x(y) &= (A_1 + A_2 y + A_3 y^2) e^{-|\xi|y} + A_4 e^{-z_1 y} + A_5 e^{-z_2 y}, \\
\hat{u}_y(y) &= (B_1 + B_2 y + B_3 y^2) e^{-|\xi|y} + B_4 e^{-z_1 y} + B_5 e^{-z_2 y}, \\
\hat{P}_x(y) &= (C_1 + C_2 y + C_3 y^2) e^{-|\xi|y} + C_4 e^{-z_1 y} + C_5 e^{-z_2 y}, \\
\hat{P}_y(y) &= (D_1 + D_2 y + D_3 y^2) e^{-|\xi|y} + D_4 e^{-z_1 y} + D_5 e^{-z_2 y}, \\
\hat{\phi}(y) &= (E_1 + E_2 y + E_3 y^2) e^{-|\xi|y} + E_4 e^{-z_1 y} + E_5 e^{-z_2 y},
\end{aligned} \tag{2.48}$$

όπου,

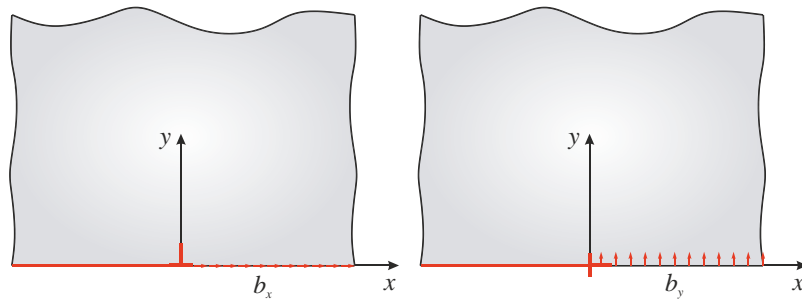
$$z_1 = \sqrt{\frac{ac_{44}}{Bc_{44} - d_{44}^2} + \xi^2}, \quad z_2 = \sqrt{\frac{c(1 + a\varepsilon_0)}{(bc - d^2)\varepsilon_0} + \xi^2}. \tag{2.49}$$

Η εξίσωση (2.45) παρέχει πληροφορίες σχετικά με είκοσι από τις συνολικές είκοσι πέντε σταθερές όπως ορίζονται στην (2.48), ενώ οι υπόλοιπες πέντε σταθερές θα υπολογιστούν από τις αντίστοιχες συνοριακές συνθήκες (2.47), οι οποίες σχετίζονται με το πρόβλημα συνοριακών τιμών που αντιμετωπίζεται.

$$\begin{aligned}
A_3 = 0, \quad A_4 &= -\frac{iD_4 d_{44} \sqrt{\frac{ac_{44}}{Bc_{44} - d_{44}^2} + \xi^2}}{c_{44} \xi}, \quad A_5 = -\frac{idD_5 \xi}{c \sqrt{\frac{c}{bc - d^2} \frac{1 + a\varepsilon_0}{\varepsilon_0} + \xi^2}}, \\
B_1 &= -\frac{i \left(\frac{(c + c_{44})}{c - c_{44}} A_2 + A_1 |\xi| \right)}{\xi}, \quad B_2 = -\frac{iA_2 \xi}{\sqrt{\xi^2}}, \quad B_3 = 0, \quad B_4 = -\frac{D_4 d_{44}}{c_{44}}, \quad B_5 = -\frac{dD_5}{c} \\
C_2 = 0, \quad C_3 = 0, \quad C_4 &= \frac{iD_4 \sqrt{\frac{ac_{44}}{Bc_{44} - d_{44}^2} + \xi^2}}{\xi}, \quad C_5 = \frac{iD_5 \xi}{\sqrt{\frac{c}{bc - d^2} \frac{1 + a\varepsilon_0}{\varepsilon_0} + \xi^2}} \\
D_1 &= -\frac{iC_1 \xi}{\sqrt{\xi^2}}, \quad D_2 = 0, \quad D_3 = 0, \quad E_1 = -\frac{iaC_1}{\xi} - \frac{i \left(2A_2 (cd_{44} - c_{44}d) \sqrt{\xi^2} \right)}{(c - c_{44}) \xi}, \\
E_2 = 0, \quad E_3 = 0, \quad E_4 = 0, \quad E_5 &= -\frac{D_5}{\varepsilon_0 \sqrt{\frac{c}{bc - d^2} \frac{1 + a\varepsilon_0}{\varepsilon_0} + \xi^2}}
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Κεφ. 3: Εξάρμωση ακμών

Η κίνηση μιας εξάρμωσης (dislocation) κατά μήκος μιας κρυσταλλογραφικής κατεύθυνσης ονομάζεται ολίσθηση (glide ή slip). Η εξάρμωση ολίσθησης επιτρέπει την πλαστική παραμόρφωση να συμβεί με πολύ μικρότερη τάση από αυτή που θα απαιτούνταν για να μετακινηθεί ένα ολόκληρο επίπεδο ατόμων πέρα από ένα άλλο. Από την άλλη, η εξάρμωση αναρρίχησης (climb) απαιτεί διάχυση και γι' αυτό συμβαίνει μόνο όταν η θερμοκρασία είναι υψηλότερη από $0.3 T_m$ όπου το T_m είναι το σημείο τήξης ή όπου οι τάσεις είναι πολύ υψηλές (Hull, 2011). Επομένως, εκτός από ειδικές περιπτώσεις, η ολίσθηση είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός κίνησης.



Σχήμα 6: (α) Μετατόπιση ολίσθησης και (β) μετατόπισης αναρρίχησης.

3.1 Εξάρμωση ολίσθησης

Έστω D το ανοιχτό ημιεπίπεδο ($-\infty < x < \infty$, $y > 0$) με ευθύγραμμο όριο L ($y = 0$). Για την περίπτωση της εξάρμωσης ολίσθησης εφαρμόζουμε τις ακόλουθες συνοριακές συνθήκες στο $y = 0$:

$$\begin{aligned}
 u_x &= b_x H(x), & -\infty < x < \infty \\
 t_y &= 0, & -\infty < x < \infty \\
 P_x &= 0, & -\infty < x < \infty \\
 \Pi_y &= 0, & -\infty < x < \infty \\
 \varphi &= 0, & -\infty < x < \infty
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

όπου, $H(x)$ είναι η συνάρτηση Heaviside και b_x είναι οι x - συνιστώσες του διανύσματος Burger (Sadd, 2009).

Στη συνέχεια, οι συνοριακές συνθήκες στην (3.1) μετασχηματίζονται ως εξής (βλ. (2.47)):

$$\begin{aligned}
\hat{u}_x - b_x \frac{i}{\xi} &= 0, \\
i\xi(c - 2c_{44})\hat{u}_x - cd\hat{u}_y + i\xi(d - 2d_{44})\hat{P}_x - d\hat{P}_y &= 0, \\
\hat{P}_x &= 0, \\
i\xi(d - 2d_{44})\hat{u}_x - d\hat{u}_y + i\xi(b - 2b_{44})\hat{P}_x - b\hat{P}_y &= b_0\delta(\xi), \\
\hat{\phi} &= 0,
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Οι εξισώσεις (3.2) μπορούν να γραφτούν με την ακόλουθη μορφή υποθέτοντας ότι $b_0 = 0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i\xi(c - 2c_{44}) & -cd & i\xi(d - 2d_{44}) & -d & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ i\xi(d - 2d_{44}) & -d & i\xi(b - 2b_{44}) & -b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_x \frac{i}{\xi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

Η λύση της (3.3) ορίζει τις επιπλέον πέντε σταθερές ως:

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{i}{|\xi|} b_x + \frac{2id(c_{44}d - cd_{44})}{c^2} \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0} b_x |\xi| \\
A_2 &= i \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) b_x, \\
C_1 &= -\frac{2i(c_{44}d - cd_{44})}{c} \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0} b_x \xi, \\
D_4 &= 0,
\end{aligned} \tag{3.4}$$

$$D_5 = \frac{2(c_{44}d - cd_{44})}{c} \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0} b_x \sqrt{\frac{c}{bc - d^2} \frac{1 + a\varepsilon_0}{\varepsilon_0} + \xi^2}.$$

Έχοντας ορίσει τις είκοσι πέντε σταθερές για το συγκεκριμένο πρόβλημα συνοριακών τιμών, προχωράμε στην αντιστροφή των εξισώσεων (2.48). Εφαρμόζουμε περαιτέρω τις ακόλουθες αντικαταστάσεις:

$$\eta = \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0}, \quad \Gamma = 1 - \frac{c}{c_{44}} \frac{d_{44}}{d}, \quad \ell^2 = \frac{bc - d^2}{c} \eta, \quad \ell_0^2 = \frac{d^2 \eta}{c}, \quad \xi = \frac{\zeta}{\ell}, \quad x = r\ell, \quad y = z\ell \tag{3.5}$$

Σε αυτήν την περίπτωση, οι συνιστώσες κανονικοποιημένης μετατόπισης, οι συνιστώσες κανονικοποιημένης πόλωσης, καθώς και το δυναμικό του αυτοπεδίου Maxwell φ μπορούν να γραφούν ως:

$$\begin{aligned} \bar{u}_x(r, z) = \frac{\pi}{b_x} u_x(r, z) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{1}{\zeta} e^{-z\zeta} \sin(r\zeta) d\zeta + \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \int_0^\infty e^{-z\zeta} z \sin(r\zeta) d\zeta + \\ + \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \left(\int_0^\infty \zeta e^{-z\zeta} \sin(r\zeta) d\zeta - \int_0^\infty \zeta e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sin(r\zeta) d\zeta \right), \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \bar{u}_y(r, z) = \frac{\pi}{b_x} u_y(r, z) = \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \int_0^\infty e^{-z\zeta} z \cos(r\zeta) d\zeta - \frac{1}{2} \frac{c_{44}}{c} \int_0^\infty \frac{e^{-z\zeta}}{\zeta} \cos(r\zeta) d\zeta + \\ + \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \left(\int_0^\infty e^{-z\zeta} \zeta \cos(r\zeta) d\zeta - \int_0^\infty e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sqrt{1+\zeta^2} \cos(r\zeta) d\zeta \right), \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\bar{P}_x(r, z) = \frac{\pi d}{b_x c_{44} \Gamma} \left(\frac{\ell}{\ell_0} \right)^2 P_x(r, z) = - \int_0^\infty e^{-z\zeta} \zeta \sin(r\zeta) d\zeta + \int_0^\infty \zeta e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sin(r\zeta) d\zeta, \quad (3.8)$$

$$\bar{P}_y(r, z) = \frac{\pi d}{b_x c_{44} \Gamma} \left(\frac{\ell}{\ell_0} \right)^2 P_y(r, z) = - \int_0^\infty e^{-z\zeta} \zeta \cos(\zeta r) d\zeta + \int_0^\infty e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sqrt{1+\zeta^2} \cos(\zeta r) d\zeta, \quad (3.9)$$

$$\bar{\varphi}(r, z) = \frac{\pi \varepsilon_0}{b_x c_{44} \Gamma} \frac{\ell}{\ell_0} \sqrt{\frac{c}{\eta}} \varphi(r, z) = - \int_0^\infty e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \cos(\zeta r) d\zeta + \int_0^\infty e^{-z\zeta} \cos(\zeta r) d\zeta, \quad (3.10)$$

Μετά από κάποιους αλγεβρικούς χειρισμούς λαμβάνουμε το κανονικοποιημένο διάνυσμα μετατόπισης, το κανονικοποιημένο διάνυσμα πόλωσης, καθώς και το κανονικοποιημένο δυναμικό του αυτοπεδίου Maxwell φ σε κλειστή μορφή ως **(Debnath, Bhatta, 2007)**:

$$\bar{u}_x(r, z) = -\frac{1}{2} \text{Arctan} \left(\frac{r}{z} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{r z}{s^2} + \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \frac{r z}{s^2} \left(\frac{2}{s^2} - K_2[s] \right), \quad (3.11)$$

$$\bar{u}_y(r, z) = \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{z^2}{s^2} + \frac{1}{2} \frac{c_{44}}{c} \log|s| - \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \left(\frac{z^2}{s^2} K_0[s] + \frac{r^2 - z^2}{s^3} \left(\frac{1}{s} - K_1[s] \right) \right), \quad (3.12)$$

$$\bar{P}_x(r, z) = -\frac{r z}{s^2} \left(\frac{2}{s^2} - K_2[s] \right), \quad (3.13)$$

$$\bar{P}_y(r, z) = \frac{r^2 - z^2}{s^4} + \left(\frac{z^2}{s^2} K_0[s] - \frac{r^2 - z^2}{s^3} K_1[s] \right), \quad (3.14)$$

$$\bar{\varphi}(r, z) = \frac{z}{s} \left(\frac{1}{s} - K_1[s] \right), \quad (3.15)$$

Σημειώνοντας ότι:

$$s = \sqrt{r^2 + z^2}, \quad c_{44} = \mu, \quad c = c_{12} + 2c_{44} = \frac{2\mu(1-\nu)}{1-2\nu}, \quad \frac{c}{c_{44}} = \frac{2(1-\nu)}{1-2\nu} \quad (3.16)$$

Επιπλέον, υπολογίζουμε τις συνιστώσες του ταυνοστή τάσης:

$$\begin{aligned} \bar{T}_{xx} = \frac{\pi c \ell}{b_x c_{44}^2} T_{xx} = & \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{z(3r^2 + z^2)}{s^4} - \\ & - 2\Gamma^2 \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{z(3r^2 - z^2)}{s^4} \left(\frac{2}{s^2} - K_0[s] - \frac{6r^2 - (2+r^2)z^2 - z^4}{s(3r^2 - z^2)} K_1[s] \right) \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{yy} = \frac{\pi c \ell}{b_x c_{44}^2} T_{yy} = & - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{z(r^2 - z^2)}{s^4} + \\ & + 2\Gamma^2 \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{z}{s^3} \left(2 \frac{(3r^2 - z^2)}{s^3} - r^2 K_1[s] - \frac{(3r^2 - z^2)}{s} K_2[s] \right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{xy} = \bar{T}_{yx} = \frac{\pi c \ell}{b_x c_{44}^2} T_{xy} = & - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{r(r-z)(r+z)}{s^4} + \\ & + 2\Gamma^2 \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{r(r^2 - 3z^2)}{s^4} \left(\frac{2}{s^2} - K_0[s] - \frac{2r^2 - (6+r^2)z^2 - z^4}{s(r^2 - 3z^2)} K_1[s] \right) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Σημειώνεται ότι στις παραπάνω σχέσεις ως $K_0[s]$, $K_1[s]$ και $K_2[s]$ ορίζουμε τις συναρτήσεις Bessel, δευτέρου είδους και τάξης 0, 1 και 2 αντίστοιχα.

Επίσης, μπορούμε να αναφέρουμε πως στο όριο $\Gamma \rightarrow 0$ ή/και $\ell_0/\ell \rightarrow 0$ λαμβάνονται οι αντίστοιχες λύσεις της κλασικής ελαστικότητας για το αντίστοιχο πρόβλημα ως:

$$\bar{u}_x(r, z) = -\frac{1}{2} \text{Arctan} \left(\frac{r}{z} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{r z}{s^2} \quad (3.20)$$

$$\bar{u}_y(r, z) = \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{z^2}{s^2} + \frac{1}{2} \frac{c_{44}}{c} \log|s| \quad (3.21)$$

$$\bar{T}_{xx} = \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{z(3r^2 + z^2)}{s^4} \quad (3.22)$$

$$\bar{T}_{yy} = - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{z(r^2 - z^2)}{s^4} \quad (3.23)$$

$$\bar{T}_{xy} = \bar{T}_{yx} = - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{r(r-z)(r+z)}{s^4} \quad (3.24)$$

3.2 Εξάρμοση αναρρίχησης

Αναρρίχηση είναι η κίνηση μιας εξάρμοσης ακμής κάθετη στο επίπεδο ολίσθησής της. Η διαδικασία απαιτεί την προσθήκη ή την αφαίρεση ατόμων από το επιπλέον μισό επίπεδο της εξάρμοσης με διαδικασίες διάχυσης. Η αναρρίχηση επομένως εννοείται σε υψηλές θερμοκρασίες όπου τα σημειακά ελαττώματα είναι κινητά και ο αριθμός τους είναι μεγάλος (Hull, 2011).

Για την περίπτωση της εξάρμοσης αναρρίχησης εφαρμόζουμε τις ακόλουθες συνοριακές συνθήκες ($y = 0$):

$$\begin{aligned}
 t_x &= 0, \quad -\infty < x < \infty \\
 u_y &= b_y H(x), \quad -\infty < x < \infty \\
 \Pi_x &= 0, \quad -\infty < x < \infty \\
 P_y &= 0, \quad -\infty < x < \infty \\
 q &= 0, \quad -\infty < x < \infty
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

όπου, b_y είναι οι y -συνιστώσες του διανύσματος Burger (Sadd, 2009).

Στη συνέχεια, οι συνοριακές συνθήκες στην (2.36) μετασχηματίζονται ως εξής:

$$\begin{aligned}
 -c_{44}d\hat{u}_x + c_{44}i\xi\hat{u}_y - d_{44}d\hat{P}_x + d_{44}i\xi\hat{P}_y &= 0, \\
 \hat{u}_y - b_y \frac{i}{\xi} &= 0 \\
 -d_{44}d\hat{u}_x + d_{44}i\xi\hat{u}_y - B d\hat{P}_x + i\xi(2b_{44} - B)\hat{P}_y &= 0, \\
 \hat{P}_y &= 0, \\
 d\hat{\phi} &= 0,
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Η εξίσωση (3.26) μπορεί να γραφτεί με την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{bmatrix} -c_{44}d & i\xi c_{44} & -d_{44}d & i\xi d_{44} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -d_{44}d & i\xi d_{44} & -B d & i\xi(2b_{44} - B) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ b_y \frac{i}{\xi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.27}$$

Η λύση του (3.27) ορίζει τις επιπλέον πέντε σταθερές:

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{c_{44}}{c} b_y \frac{1}{|\xi|} + \frac{2d(c_{44}d - cd_{44})}{c^2} \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0} b_y |\xi| \\
A_2 &= \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) b_y, \\
C_1 &= -\frac{2(c_{44}d - cd_{44})}{c} \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0} b_y |\xi|, \\
D_4 &= 0, \\
D_5 &= -\frac{2i(c_{44}d - cd_{44})}{c} \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0} b_y \xi.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Έχοντας ορίσει τις είκοσι πέντε σταθερές για το συγκεκριμένο πρόβλημα συνοριακής τιμής προχωράμε στην αντιστροφή της (48). Εφαρμόζουμε περαιτέρω τις ακόλουθες αντικαταστάσεις:

$$\eta = \frac{\varepsilon_0}{1 + a\varepsilon_0}, \quad \Gamma = 1 - \frac{c}{c_{44}} \frac{d_{44}}{d}, \quad \ell^2 = \frac{bc - d^2}{c} \eta, \quad \ell_0^2 = \frac{d^2 \eta}{c}, \quad \xi = \frac{\zeta}{\ell}, \quad x = r\ell, \quad y = z\ell \tag{3.29}$$

Σε αυτήν την περίπτωση, οι συνιστώσες κανονικοποιημένης μετατόπισης, οι συνιστώσες κανονικοποιημένης πόλωσης, καθώς και το δυναμικό του αυτοπεδίου Maxwell φ μπορούν να γραφούν ως:

$$\begin{aligned}
\bar{u}_x(r, z) &= \frac{\pi}{b_y} u_x(r, z) = \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \int_0^\infty z e^{-z\zeta} \cos(r\zeta) d\zeta + \frac{1}{2} \frac{c_{44}}{c} \int_0^\infty \frac{1}{\zeta} e^{-z\zeta} \cos(r\zeta) d\zeta \\
&\quad + \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \left(\int_0^\infty \zeta e^{-z\zeta} \cos(r\zeta) d\zeta - \int_0^\infty \frac{\zeta^2}{\sqrt{1+\zeta^2}} e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \cos(r\zeta) d\zeta \right),
\end{aligned} \tag{3.30}$$

$$\begin{aligned}
\bar{u}_y(r, z) &= \frac{\pi}{b_y} u_y(r, z) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{1}{\zeta} e^{-\zeta z} \sin(r\zeta) d\zeta - \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \int_0^\infty z e^{-\zeta z} \sin(r\zeta) d\zeta - \\
&\quad - \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \left(\int_0^\infty \zeta e^{-\zeta z} \sin(r\zeta) d\zeta - \int_0^\infty \zeta e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sin(r\zeta) d\zeta \right),
\end{aligned} \tag{3.31}$$

$$\bar{P}_x(r, z) = \frac{\pi d}{b_y c_{44} \Gamma} \left(\frac{\ell}{\ell_0} \right)^2 P_x(r, z) = -\int_0^\infty \zeta e^{-z\zeta} \cos(r\zeta) d\zeta + \int_0^\infty \frac{\zeta^2}{\sqrt{1+\zeta^2}} e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \cos(r\zeta) d\zeta, \tag{3.32}$$

$$\bar{P}_y(r, z) = \frac{\pi d}{b_y c_{44} \Gamma} \left(\frac{\ell}{\ell_0} \right)^2 P_y(r, z) = \int_0^\infty \zeta e^{-\zeta z} \sin(\zeta r) d\zeta - \int_0^\infty \zeta e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sin(\zeta r) d\zeta \tag{3.33}$$

$$\bar{\varphi}(r, z) = \frac{\pi \varepsilon_0}{b_y c_{44} \Gamma} \frac{\ell}{\ell_0} \sqrt{\frac{c}{\eta}} \varphi(r, z) = -\int_0^\infty e^{-z\zeta} \sin(\zeta r) d\zeta + \int_0^\infty \frac{\zeta}{\sqrt{1+\zeta^2}} e^{-z\sqrt{1+\zeta^2}} \sin(\zeta r) d\zeta \tag{3.34}$$

Μετά από κάποιους αλγεβρικούς χειρισμούς λαμβάνουμε το κανονικοποιημένο διάνυσμα μετατόπισης, το κανονικοποιημένο διάνυσμα πόλωσης, καθώς και το κανονικοποιημένο δυναμικό του αυτοπεδίου Maxwell φ σε κλειστή μορφή ως (Debnath, Bhatta, 2007):

$$\bar{u}_x(r, z) = \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{z^2}{s^2} - \frac{1}{2} \frac{c_{44}}{c} \log(s) + \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \left(\frac{r^2}{s^2} K_0[s] - \frac{r^2 - z^2}{s^3} \left(\frac{1}{s} - K_1[s] \right) \right) \quad (3.35)$$

$$\bar{u}_y(r, z) = \frac{1}{2} \text{Arctan} \left(\frac{r}{z} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{rz}{s^2} - 2\Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \frac{rz}{s^2} \left(\frac{1}{s^2} - K_2[s] \right) \quad (3.36)$$

$$\bar{P}_x(r, z) = \frac{r^2 - z^2}{s^4} - \left(\frac{r^2}{s^2} K_0[s] + \frac{r^2 - z^2}{s^3} K_1[s] \right) \quad (3.37)$$

$$\bar{P}_y(r, z) = \frac{2rz}{s^4} - \frac{rz}{s^2} K_2[s] \quad (3.38)$$

$$\bar{\varphi}(r, z) = -\frac{r}{s} \left(\frac{1}{s} - K_1[s] \right) \quad (3.39)$$

Σημειώνοντας ότι:

$$s = \sqrt{r^2 + z^2}, \quad c_{44} = \mu, \quad c = c_{12} + 2c_{44} = \frac{2\mu(1-\nu)}{1-2\nu}, \quad \frac{c}{c_{44}} = \frac{2(1-\nu)}{1-2\nu} \quad (3.40)$$

Επιπλέον, υπολογίζουμε τις συνιστώσες του τανυστή τάσης:

$$\begin{aligned} \bar{T}_{xx} = \frac{\pi c \ell}{b_y c_{44}^2} T_{xx} = & - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{r(r-z)(r+z)}{s^4} + \\ & + 2\Gamma^2 \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{r(r^2 - 3z^2)}{s^4} \left(\frac{2}{s^2} + \frac{s z^2}{r^2 - 3z^2} K_1[s] - K_2[s] \right) \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{yy} = \frac{\pi c \ell}{b_y c_{44}^2} T_{yy} = & - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{r(r^2 + 3z^2)}{s^4} - \\ & - 2\Gamma^2 \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{r(r^2 - 3z^2)}{s^4} \left(\frac{2}{s^2} - K_0[s] + \frac{r^4 - 6z^2 + r^2(2 + z^2)}{s(r^2 - 3z^2)} K_1[s] \right) \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{xy} = \bar{T}_{yx} = \frac{\pi c \ell}{b_y c_{44}^2} T_{xy} = & - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{z(r^2 - z^2)}{s^4} + \\ & + \Gamma^2 \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{z(3r^2 - z^2)}{s^4} \left(\frac{2}{s^2} - K_0[s] - \frac{r^4 - 2z^2 + r^2(6 + z^2)}{s(3r^2 - z^2)} K_1[s] \right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Σημειώνεται ότι στις παραπάνω σχέσεις ως $K_0[s]$, $K_1[s]$ και $K_2[s]$ ορίζουμε τις συναρτήσεις Bessel, δευτέρου είδους και τάξης 0, 1 και 2 αντίστοιχα.

Επίσης, μπορούμε να αναφέρουμε πως στο όριο $\Gamma \rightarrow 0$ ή/και $\ell_0/\ell \rightarrow 0$ λαμβάνονται οι αντίστοιχες λύσεις της κλασικής ελαστικότητας για το αντίστοιχο πρόβλημα ως:

$$\bar{u}_x(r, z) = \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{z^2}{s^2} - \frac{1}{2} \frac{c_{44}}{c} \log|s| \quad (3.44)$$

$$\bar{u}_y(r, z) = \frac{1}{2} \text{Arctan} \left(\frac{r}{z} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{c_{44}}{c} - 1 \right) \frac{rz}{s^2} \quad (3.45)$$

$$\bar{T}_{xx} = - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{r(r-z)(r+z)}{s^4} \quad (3.46)$$

$$\bar{T}_{yy} = - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{r(r^2 + 3z^2)}{s^4} \quad (3.47)$$

$$\bar{T}_{xy} = \bar{T}_{yx} = - \left(\frac{c}{c_{44}} - 1 \right) \frac{z(r^2 - z^2)}{s^4} \quad (3.48)$$

Κεφ. 4: Αποτελέσματα και συζήτηση

Σύμφωνα με τις αναλυτικές λύσεις που εισήχθησαν προηγουμένως μπορούμε να αναφέρουμε τα ακόλουθα:

Οι μετατοπίσεις και για τις δύο εξαρμόσεις παρουσιάζονται σε αδιάστατη μορφή ως $\frac{\pi u_i}{b_{x,y}}$ και

περιλαμβάνουν τον καθαρά μηχανικό όρο, στον οποίο αθροίζεται ο όρος που αφορά την επίδραση του διηλεκτρικού φαινομένου και στην συγκεκριμένη περίπτωση ο όρος που αφορά στην εισαγωγή της

βαθμίδας της πόλωσης. Ο δεύτερος όρος περιλαμβάνει το γινόμενο $\Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} = \Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{2(1-\nu)}{1-2\nu}$. Καθώς

το γινόμενο $\Gamma \left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \frac{c_{44}}{c} \rightarrow 0$, λαμβάνονται τα αποτελέσματα της κλασικής ελαστικότητας. Όσον αφορά

την αδιάστατη παράμετρο, $\Gamma = 1 - \frac{c}{c_{44}} \frac{d_{44}}{d}$ παρατηρούμε ότι $\Gamma \rightarrow 0$ όταν $\frac{c}{c_{44}} \frac{d_{44}}{d} \rightarrow 1$ ή $c d_{44} \rightarrow c_{44} d$

ενώ $\Gamma \rightarrow 1$ όταν $\frac{c}{c_{44}} \frac{d_{44}}{d} \rightarrow 0$. Με δεδομένο ότι $\frac{c_{44}}{c} = \frac{2(1-\nu)}{1-2\nu} \neq 0, \forall \nu$ εκτός της περίπτωσης $\nu = 0.5$,

τότε για $\Gamma \rightarrow 1$ αρκεί $\frac{d_{44}}{d} \rightarrow 0$ ή $d \gg d_{44} \Rightarrow d_{12} + 2d_{44} \gg d_{44} \Rightarrow d_{12} + d_{44} \gg 0$. Όσον αφορά την

πόλωση, έχει αδιαστατοποιηθεί με τον όρο $\frac{\pi d}{b_{x,y} c_{44} \Gamma \left(\frac{\ell}{\ell_0} \right)^2}$. Εάν θέλουμε υψηλή πόλωση σε ένα υλικό

με δεδομένο διάνυσμα Burger μιας εξάρμοσης, τότε το $\left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \Gamma \frac{c_{44}}{d}$ πρέπει να λάβει την μέγιστη δυνατή

τιμή στα πλαίσια πάντα της θετικά ορισμένης ενέργειας. Τέλος, οι τάσεις έχουν αδιαστατοποιηθεί ως

$\frac{\pi c \ell}{b_{x,y} c_{44}^2} T_{ij}$ και η αδιάστατη τάση περιλαμβάνει, εκτός από τον καθαρά μηχανικό όρο, τον όρο $\left(\frac{\ell_0}{\ell} \right)^2 \Gamma^2$

που σχετίζεται με το διηλεκτρικό φαινόμενο. Καθώς ο τελευταίος όρος αυξάνεται, η αδιάστατη τάση αποκλίνει από την αντίστοιχη της κλασικής ελαστικότητας.

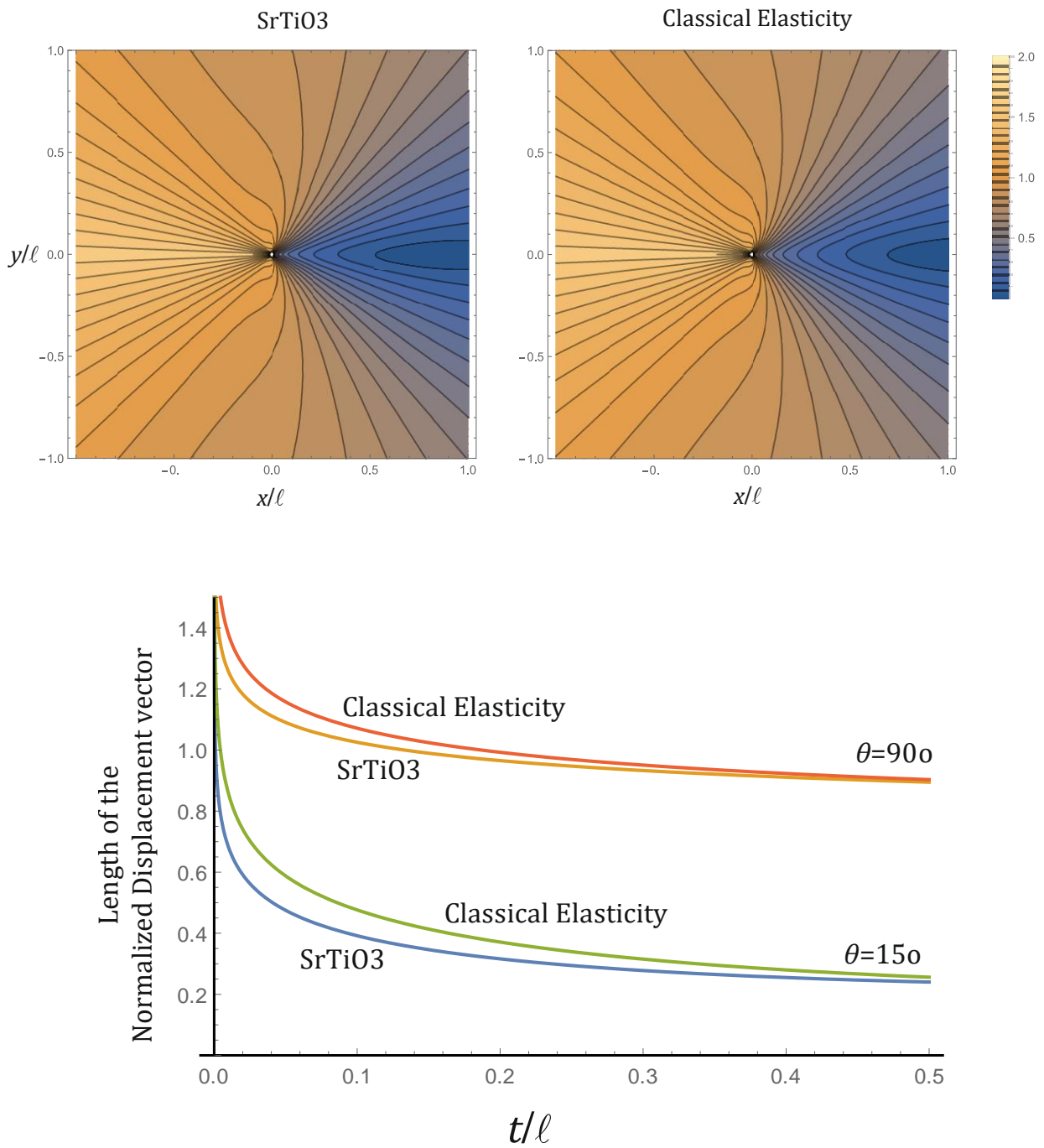
Επίσης, σε σχέση με τα διηλεκτρικά υλικά που αναφέρονται στον **Πίνακα 1**, μπορούμε να υπολογίσουμε:

Πίνακας 3		
	$\Gamma\left(\frac{\ell_0}{\ell}\right)^2$	$\Gamma^2\left(\frac{\ell_0}{\ell}\right)^2$
<i>NaCl</i>	0.00272516	0.0134162
<i>GaAs</i>	0.011908	0.004242
<i>BaTiO₃</i>	-0.050923	1.01846
<i>SrTiO₃</i>	-0.204802	0.461615

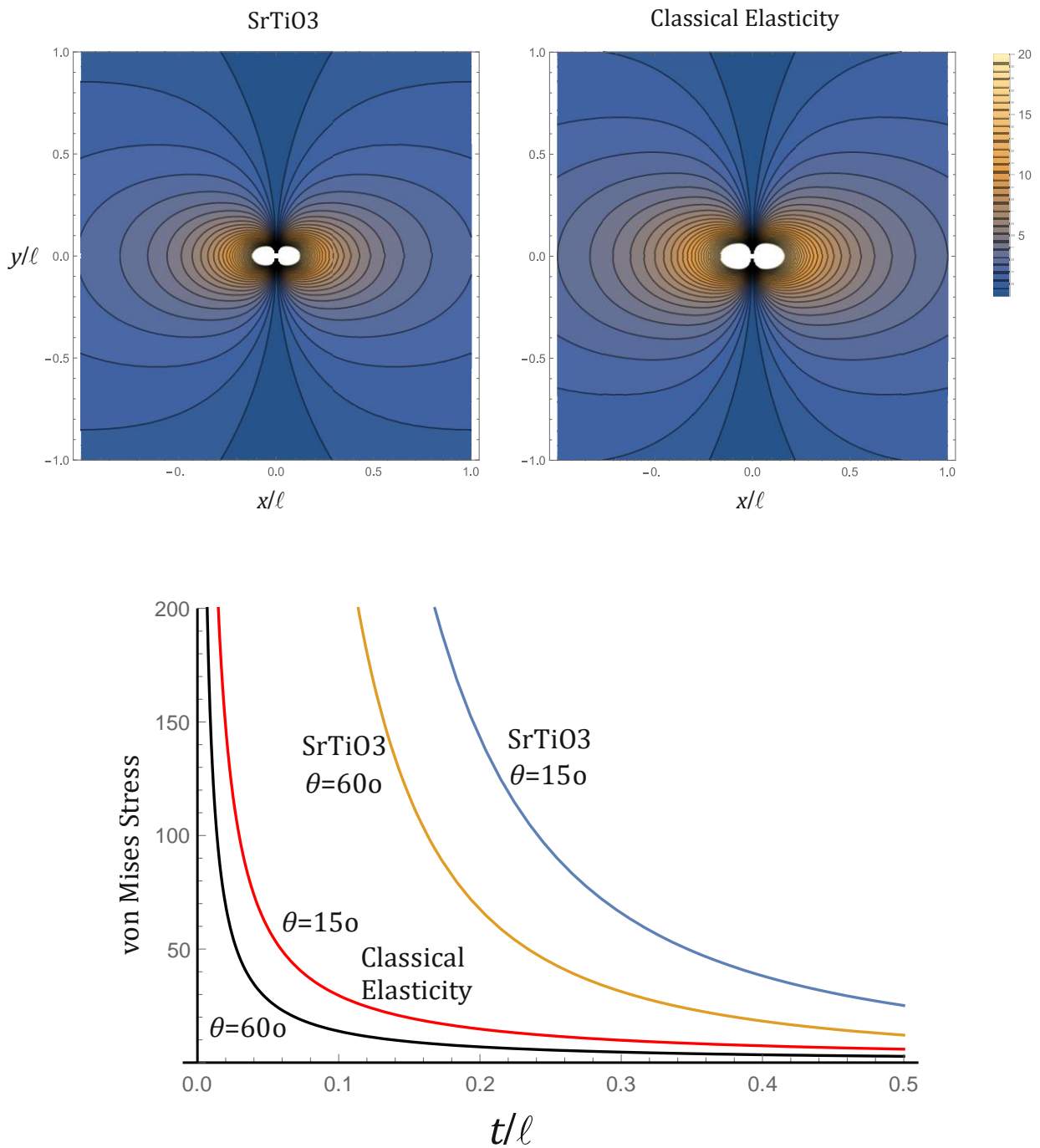
Παρακάτω παρουσιάζονται αποτελέσματα του μέτρου του διανύσματος της μετατόπισης, των τάσεων von Mises και του μέτρου του διανύσματος της πόλωσης, σε αδιάστατη μορφή. Τα αποτελέσματα αφορούν το υλικό *SrTiO₃*, καθώς και τα αντίστοιχα αποτελέσματα της κλασικής ελαστικότητας. Για την περίπτωση της κλασικής ελαστικότητας, θεωρούμε τις ίδιες μηχανικές ιδιότητες με το *SrTiO₃*, μηδενίζοντας τους όρους Γ και $\left(\frac{\ell_0}{\ell}\right)^2$, ώστε να προκύψουν οι κλασικές λύσεις για την περίπτωση της εξάρμοσης. Στα αποτελέσματα παρουσιάζεται μόνο η περίπτωση της εξάρμοσης ολίσθησης ενώ τα αποτελέσματα για την εξάρμοση αναρρίχησης είναι ανάλογα.

Στο **Σχήμα 7** παρουσιάζονται οι ισοϋψείς του μέτρου του διανύσματος τη μετατόπισης σε αδιάστατη μορφή, ενώ παρουσιάζεται και η εξάρτηση της ίδιας ποσότητας σε γωνίες $\theta = 15^\circ$ και 90° ως συνάρτηση της απόστασης $t = \sqrt{x^2 + y^2}$ από την θέση της εξάρμοσης. Παρατηρείται η διαφορά μεταξύ των αποτελεσμάτων της κλασικής ελαστικότητας και της παρούσας θεωρίας, με τις διαφορές να είναι έντονες έως και την απόσταση $t = 0.5\ell$ από την εξάρμοση, ενώ σε μεγαλύτερες αποστάσεις από την εξάρμοση τα αποτελέσματα συγκλίνουν. Η παρούσα θεωρία, ουσιαστικά, προβλέπει ότι το υλικό παρουσιάζει μικρότερες μετατοπίσεις (υψηλότερη δυσκαμψία, stiffness), σε περιοχές που βρίσκονται αρκετά κοντά στον πυρήνα της εξάρμοσης. Ποιοτικά, όμως, η συμπεριφορά των δύο θεωριών ως προς τις μετατοπίσεις είναι ανάλογη.

Όσον αφορά τις τάσεις von Mises (**Σχήμα 8**), η παρούσα θεωρία προβλέπει ανάπτυξη υψηλότερων τάσεων από την αντίστοιχη κλασική ελαστικότητα, με αποτέλεσμα το *SrTiO₃* να είναι πιο δύσκαμπτο σε σχέση με το αντίστοιχο υλικό στα πλαίσια της κλασικής ελαστικότητας. Παρόμοια συμπεριφορά έχει παρατηρηθεί και στα πιεζοηλεκτρικά υλικά. Τέλος, στο **Σχήμα 9** παρουσιάζεται το αδιάστατο μέτρο του διανύσματος της πόλωσης. Σε αυτήν την περίπτωση, προφανώς, δεν υπάρχει αντίστοιχο αποτέλεσμα στα πλαίσια της κλασικής ελαστικότητας.

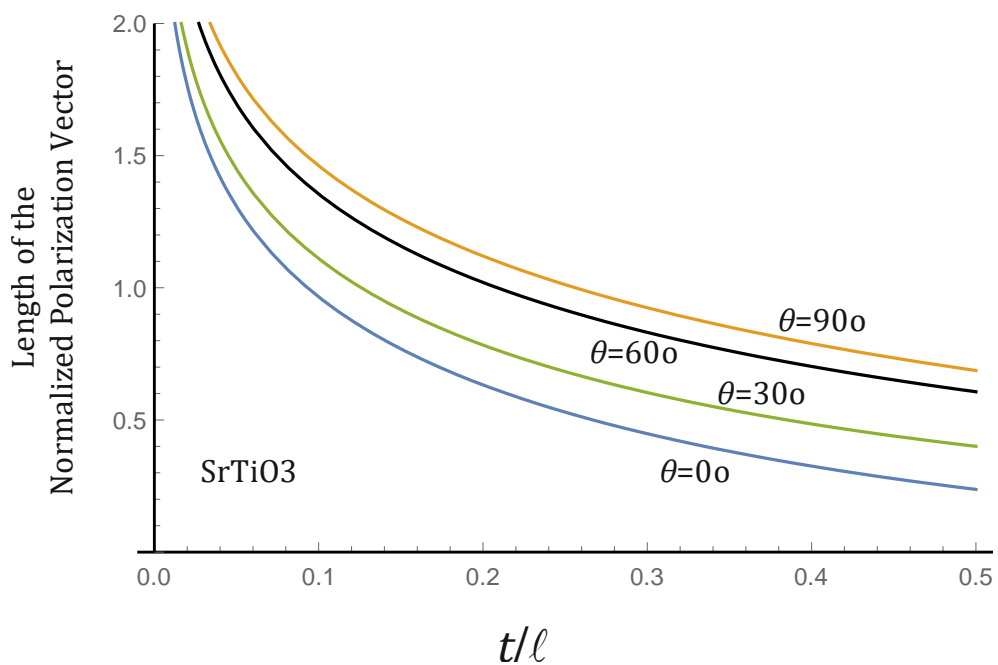
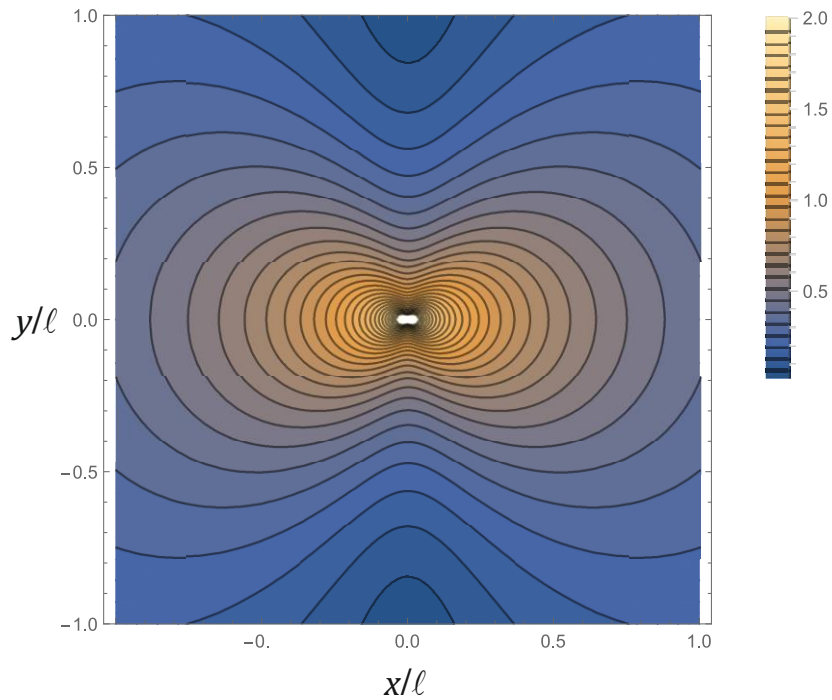


Σχήμα 7: Εξάρμωση ολίσθησης. Ισοϋψείς καμπύλες και μέτρο της τάσης ως προς την απόσταση $t = \sqrt{x^2 + y^2}$ για επιλεγμένες γωνίες για το αδιάστατο μέτρο του διανύσματος της μετατόπισης, για το υλικό $SrTiO_3$.



Σχήμα 8: Εξάρμωση ολίσθησης. Ισοϋψείς καμπύλες και μέτρο της τάσης ως προς την απόσταση $t = \sqrt{x^2 + y^2}$ για επιλεγμένες γωνίες για την τάση von Mises, για το υλικό $SrTiO_3$.

SrTiO₃



Σχήμα 9: Εξάρμωση ολίσθησης. Ισοϋψείς καμπύλες και μέτρο της τάσης ως προς την απόσταση $t = \sqrt{x^2 + y^2}$ για επιλεγμένες γωνίες για το αδιάστατο μέτρο του διανύσματος της πόλωσης, για το υλικό SrTiO₃.

Παράρτημα Α1

Απόδειξη των εξισώσεων (2.25)

$$\begin{aligned}
 -\bar{E}_j &\equiv \frac{\partial W^L}{\partial P_j} = \frac{1}{2} a P_i \frac{\partial P_i}{\partial P_j} + \frac{1}{2} a P_i \frac{\partial P_i}{\partial P_j} = \frac{1}{2} a \left(P_i \frac{\partial P_i}{\partial P_j} + P_i \frac{\partial P_i}{\partial P_j} \right) = \frac{1}{2} a (P_i \delta_{ij} + P_i \delta_{ij}) \\
 &= \frac{1}{2} a (P_j + P_j) = a P_j.
 \end{aligned} \tag{A1.1}$$

$$\begin{aligned}
 E_{ij} &\equiv \frac{\partial W^L}{\partial P_{j,i}} = b_0 \frac{\partial P_{m,m}}{\partial P_{j,i}} + \frac{1}{2} b_{12} \left(P_{n,n} \frac{\partial P_{m,m}}{\partial P_{j,i}} + P_{m,m} \frac{\partial P_{n,n}}{\partial P_{j,i}} \right) + \frac{1}{2} (b_{44} + b_{77}) \left(P_{n,m} \frac{\partial P_{n,m}}{\partial P_{j,i}} + P_{n,m} \frac{\partial P_{n,m}}{\partial P_{j,i}} \right) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (b_{44} - b_{77}) \left(P_{m,n} \frac{\partial P_{n,m}}{\partial P_{j,i}} + P_{n,m} \frac{\partial P_{m,n}}{\partial P_{j,i}} \right) + d_{12} \frac{\partial P_{m,m}}{\partial P_{j,i}} S_{mn} + 2d_{44} \frac{\partial P_{n,m}}{\partial P_{j,i}} S_{mn} = \\
 &= b_0 \delta_{ij} + \frac{1}{2} b_{12} (P_{n,n} \delta_{ij} + P_{m,m} \delta_{ij}) + \frac{1}{2} (b_{44} + b_{77}) (P_{j,i} + P_{j,i}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (b_{44} - b_{77}) (P_{i,j} + P_{j,i}) + d_{12} \delta_{ij} S_{mn} + 2d_{44} S_{ij} = \\
 &= b_0 \delta_{ij} + b_{12} P_{k,k} \delta_{ij} + (b_{44} + b_{77}) P_{j,i} + \frac{1}{2} (b_{44} - b_{77}) (P_{i,j} + P_{j,i}) + d_{12} \delta_{ij} S_{kk} + 2d_{44} S_{ij}.
 \end{aligned} \tag{A1.2}$$

$$\begin{aligned}
 T_{ij} &\equiv \frac{\partial W^L}{\partial S_{ij}} = \frac{1}{2} c_{12} \left(S_{mn} \frac{\partial S_{mn}}{\partial S_{ij}} + S_{mn} \frac{\partial S_{mn}}{\partial S_{ij}} \right) + c_{44} \left(S_{mn} \frac{\partial S_{mn}}{\partial S_{ij}} + S_{mn} \frac{\partial S_{mn}}{\partial S_{ij}} \right) \\
 &\quad + d_{12} P_{m,m} \frac{\partial S_{mn}}{\partial S_{ij}} + 2d_{44} P_{n,m} \frac{\partial}{\partial S_{ij}} \left(\frac{1}{2} (S_{mn} + S_{nm}) \right) \\
 &= \frac{1}{2} c_{12} (S_{mn} \delta_{mi} \delta_{nj} + S_{mn} \delta_{ni} \delta_{mj}) + c_{44} (S_{mn} \delta_{mi} \delta_{nj} + S_{mn} \delta_{ni} \delta_{mj}) + d_{12} P_{m,m} \delta_{ni} \delta_{nj} + d_{44} P_{n,m} \left(\frac{\partial S_{mn}}{\partial S_{ij}} + \frac{\partial S_{nm}}{\partial S_{ij}} \right) \\
 &= \frac{1}{2} c_{12} (S_{kk} \delta_{ij} + S_{kk} \delta_{ij}) + c_{44} (S_{ij} + S_{ij}) + d_{12} P_{k,k} \delta_{ij} + 2d_{44} P_{j,i} \\
 &= c_{12} S_{kk} \delta_{ij} + 2c_{44} S_{ij} + d_{12} P_{k,k} \delta_{ij} + d_{44} P_{n,m} (\delta_{mi} \delta_{nj} + \delta_{ni} \delta_{mj}) \\
 &= c_{12} S_{kk} \delta_{ij} + 2c_{44} S_{ij} + d_{12} P_{k,k} \delta_{ij} + d_{44} (P_{n,m} \delta_{mi} \delta_{nj} + P_{n,m} \delta_{ni} \delta_{mj}) \\
 &= c_{12} S_{kk} \delta_{ij} + 2c_{44} S_{ij} + d_{12} P_{k,k} \delta_{ij} + d_{44} (P_{j,i} + P_{i,j})
 \end{aligned} \tag{A1.3}$$

Παράρτημα Α2

Η παραμορφωσιακή πυκνότητα ενέργειας μπορεί να γραφτεί σε μορφή πίνακα ως (Gourgiotis & Georgiadis, 2014):

$$\mathbf{W}^L = \frac{1}{2} \mathbf{R} \mathbf{M} \mathbf{R}^T \quad (\text{A2.1})$$

όπου

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{33} & \mathbf{0}_{33} & \mathbf{0}_{33} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathbf{0}_{33} & \mathbf{B}_{33} & \mathbf{0}_{33} & \cdot & \mathbf{D}_{99} & \cdot \\ \mathbf{0}_{33} & \mathbf{0}_{33} & \mathbf{C}_{33} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \mathbf{E}_{99} & \cdot & \cdot & \mathbf{F}_{99} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \quad (\text{A2.2})$$

και

$$\mathbf{R}^T = [\mathbf{e}_{11} \quad \mathbf{e}_{22} \quad \mathbf{e}_{33} \quad \mathbf{e}_{12} \quad \mathbf{e}_{23} \quad \mathbf{e}_{13} \quad \mathbf{P}_1 \quad \mathbf{P}_2 \quad \mathbf{P}_3 \quad \mathbf{P}_{11} \quad \mathbf{P}_{22} \quad \mathbf{P}_{33} \quad \mathbf{P}_{12} \quad \mathbf{P}_{23} \quad \mathbf{P}_{31} \quad \mathbf{P}_{21} \quad \mathbf{P}_{32} \quad \mathbf{P}_{13}] \quad (\text{A2.3})$$

Στην εξίσωση, (A2.2) οι δείκτες 33 και 99 συμβολίζουν τις διαστάσεις του πίνακα. Επιπλέον έχουμε ορίσει ως:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2\bar{c} & 2(\bar{c} - 2c_{44}) & 2(\bar{c} - 2c_{44}) \\ 2(\bar{c} - 2c_{44}) & 2\bar{c} & 2(\bar{c} - 2c_{44}) \\ 2(\bar{c} - 2c_{44}) & 2(\bar{c} - 2c_{44}) & 2\bar{c} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 8c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 8c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 8c_{44} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 2a & 0 & 0 \\ 0 & 2a & 0 \\ 0 & 0 & 2a \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 2\bar{d} & 2(\bar{d} - 2d_{44}) & 2(\bar{d} - 2d_{44}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\bar{d} - 2d_{44}) & 2\bar{d} & 2(\bar{d} - 2d_{44}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\bar{d} - 2d_{44}) & 2(\bar{d} - 2d_{44}) & 2\bar{d} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 2\bar{d} & 2(\bar{d}-2d_{44}) & 2(\bar{d}-2d_{44}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\bar{d}-2d_{44}) & 2\bar{d} & 2(\bar{d}-2d_{44}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\bar{d}-2d_{44}) & 2(\bar{d}-2d_{44}) & 2\bar{d} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4d_{44} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 2\bar{b} & 2(\bar{b}-2b_{44}) & 2(\bar{b}-2b_{44}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\bar{b}-2b_{44}) & 2\bar{b} & 2(\bar{b}-2b_{44}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\bar{b}-2b_{44}) & 2(\bar{b}-2b_{44}) & 2\bar{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2b^* & 0 & 0 & 2(2b_{44}-b^*) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2b^* & 0 & 0 & 2(2b_{44}-b^*) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2b^* & 0 & 0 & 2(2b_{44}-b^*) \\ 0 & 0 & 0 & 2(2b_{44}-b^*) & 0 & 0 & 2b^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2(2b_{44}-b^*) & 0 & 0 & 2b^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(2b_{44}-b^*) & 0 & 0 & 2b^* \end{bmatrix}$$

Από τις Εξ. (A2.1) και (A2.2), ο 18x18 πίνακας \mathbf{M} συμβολίζει τον ισότροπο τανυστή των υλικών σταθερών. Για να οριστεί θετικά ο προαναφερθής πίνακας, πρέπει όλες οι δευτερεύουσες ορίζουσες (minor determinants) του να είναι θετικές. Αν πάρουμε την τρίτη, την έκτη και την ένατη δευτερεύουσα ορίζουσα του θετικού πίνακα \mathbf{M} τότε έχουμε:

$$(1) \quad |\mathbf{A}_{33}| > 0$$

$$(2) \quad \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{33} & \mathbf{0}_{33} \\ \mathbf{0}_{33} & \mathbf{B}_{33} \end{vmatrix} > 0$$

$$(3) \quad \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{33} & \mathbf{0}_{33} & \mathbf{0}_{33} \\ \mathbf{0}_{33} & \mathbf{B}_{33} & \mathbf{0}_{33} \\ \mathbf{0}_{33} & \mathbf{0}_{33} & \mathbf{C}_{33} \end{vmatrix} > 0$$

Από το (1) - (3) παίρνουμε αντίστοιχα τις παρακάτω ανισώσεις:

$$c_{44} > 0 \quad , \quad 3c_{12} + 2c_{44} > 0 \quad , \quad a > 0 \quad , \quad (A2.4)$$

Αντίστοιχα, από τις τρεις επόμενες ορίζουσες (δέκατη-δωδέκατη) παίρνουμε:

$$\begin{aligned} (b_{12} + b_{44})(3c_{12} + 2c_{44}) - 3c_{44}d_{12}^2 - 4c_{44}d_{12}d_{44} - 4(c_{12} + c_{44}) &> 0 \quad , \\ b_{44} > \frac{d_{44}^2}{c_{44}} \quad , \quad 3b_{12} + 2b_{44} > \frac{(3d_{12} + 2d_{44})^2}{3c_{12} + 2c_{44}} \quad , \end{aligned} \quad (A2.5)$$

Επιπλέον, ορίζοντας τη δέκατη έκτη και καθοριστική θετική παίρνουμε:

$$b_{77} > 0 \quad (\text{A2.6})$$

Αξίζει να σημειωθεί, πως στους παραπάνω πίνακες έχουμε λάβει υπόψη ότι:

$$\bar{x} = x_{12} + 2x_{44} \quad (\text{όπου } \bar{x} = \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}) \quad (\text{A2.7})$$

και

$$b^* = b_{44} + b_{77} \quad (\text{A2.8})$$

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ξένη βιβλιογραφία

- Askar, A., Lee, P. C. Y., & Cakmak, A. S., 1970. *Lattice-dynamics approach to the theory of elastic dielectrics with polarization gradient*. Physical Review B, 1(8), 3525.
- Askar, A., Lee, P. C. Y., & Cakmak, A. S., 1971. *The effect of surface curvature and discontinuity on the surface energy density and other induced fields in elastic dielectrics with polarization gradient*. International Journal of Solids and Structures, 7(5), pp. 523-537.
- Bilby, B. and Eshelby, J. D., 1968, *Dislocations and the Theory of Fracture*, Academic Press, New York, pp. 99-182.
- Bonilla, L. L., Carpio, A., & Plans, I., 2007. *Dislocations in cubic crystals described by discrete models*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 376, pp. 361-377.
- Bower, A. F, 2010. *Applied Mechanics of Solids*. Taylor and Francis Group, LLC.
- Callister, W. D. Jr., 2005. "Fundamentals of Materials Science and Engineering," John Wiley & Sons, Inc. Danvers, MA.
- Chowdhury, K. L. 1982. *On an axisymmetric boundary value problem for an elastic dielectric half-space*. International Journal of Solids and Structures, 18(3), pp. 263-271.
- Chowdhury, K. L., & Glockner, P. G., 1974. *Representations in elastic dielectrics*. International Journal of Engineering Science, 12(7), pp. 597-606.
- Chowdhury, K. L., & Glockner, P. G., 1976. *Some problems in plane elastic dielectrics*. Journal of Elasticity, 6(3), pp. 295-311.
- Chowdhury, K. L., & Glockner, P. G., 1977. *Point charge in the interior of an elastic dielectric half space*. International Journal of Engineering Science, 15(8), pp. 481-493.
- Chowdhury, K. L., & Glockner, P. G., 1980. *On a boundary value problem for an elastic dielectric half-plane*. Acta Mechanica, 37(1), pp. 65-74.

- Crouch, S. L. and Starfield, A. M., 1983, *Boundary Element Methods in Solid Mechanics*, George Allen & Unwin, London.
- Debnath L., & Bhatta, D., 2007. *Integral Transforms and Their Applications. Second Edition*. Taylor and Francis Group, LLC.
- Deeg, W. F., 1980, *The Analysis of Dislocation, Crack and Inclusion Problems in Piezoelectric Solids*, Ph.D. thesis, Stanford University, Stanford, CA.
- Delfino, M., 1978. *A comprehensive optical second harmonic generation study of the non-centrosymmetric character of biological structures*. *Journal of Biological Physics*, 6.3, pp. 105-117.
- Glockner, P. G., & Chowdhury, K. L., 1979. *Stress functions for elastic dielectrics*. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 59(10), pp. 501-508.
- Gou, P. F., 1971. *Effects of gradient of polarization on stress-concentration at a cylindrical hole in an elastic dielectric*. *International Journal of Solids and Structures*, 7(11), pp. 1467-1476.
- Gourgiotis, P. A., & Georgiadis, H. G., 2007. *Distributed dislocation approach for cracks in couple-stress elasticity: shear modes*. *International Journal of Fracture*, 147, pp. 83-102.
- Gourgiotis, P. A., & Georgiadis, H. G., 2008. *An approach based on distributed dislocations and disclinations for crack problems in couple-stress elasticity*. *International Journal of Solids and Structures*, 45(21), pp. 5521-5539.
- Gourgiotis, P. A., & Georgiadis, H. G., 2015. *Torsional and SH surface waves in an isotropic and homogenous elastic half-space characterized by the Toupin–Mindlin gradient theory*. *International Journal of Solids and Structures*, 62, pp. 217-228.
- Hellwege, K. H., & Hellwege, A. M., (Eds.) 1981. *Landolt Bornstein: Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology, Vol. 16*. Springer, Heidelberg. Part a, pp. 59-67.
- Hull, D., & Bacon, D. J., 2011. *Introduction to dislocations (Vol. 37)*. Elsevier.

- Iijima, K., Terashima, T., Yamamoto, K., Hirata, K., & Bando, Y., 1990. *Preparation of ferroelectric BaTiO₃ thin films by activated reactive evaporation*. Applied physics letters, 56(6), pp. 527-529.
- Kasap, S. O., 2006. *Electronic materials and Devices*. McGraw-Hill New York.
- Kroupa F., 1966. *DISLOCATION DIPOLES AND DISLOCATION LOOPS*. Journal de Physique Colloques, 27 (C3), pp. C3-154-C3-167.
- Li, Y., Xie, L., Yu, et al. 2015. *Core structures of <001> {110} edge dislocations in BaTiO₃*. AIP Advances, 5(7), 077172.
- Lin, W. J., Tseng, T. Y., Lu, H. B., Tu, S. L., Yang, S. J., & Lin, I. N. (1995). *Growth and ferroelectricity of epitaxial-like BaTiO₃ films on single-crystal MgO, SrTiO₃, and silicon substrates synthesized by pulsed laser deposition*. Journal of applied physics, 77(12), pp. 6466-6471.
- Mason, W. P. 1966. *Crystal physics of interaction processes* (Vol. 23). Academic Press.
- Mindlin, R. D., 1964. *Micro-Structure in linear elasticity*. Arch. Ration. Mech. Anal. 16, pp. 51-78.
- Mindlin, R. D., 1968. *Polarization gradient in elastic dielectrics*. International Journal of Solids and Structures, 4(6), pp. 637-642.
- Mindlin, R. D., 1972. *A continua theory of diatomic elastic dielectric*. Int. J. Solids Struct. 8, pp. 369-383.
- Mindlin, R. D., 1972. *Coupled elastic and electromagnetic fields in diatomic, dielectric continuum*. Int. J. Solids Struct. 8, pp. 401-408.
- Mindlin, R. D., Eshel, N.N., 1968. *On first-gradient theories in linear elasticity*. Int. J. Solids Struct. 4, pp. 109-124.
- Mindlin, R. D., Tiersten, H.F., 1962. *Effects of couple-stresses in linear elasticity*. Arch. Ration. Mech. Anal. 11, pp. 415-448.

- Nakamura, A., Yasufuku, et al., 2017. *Room-temperature plastic deformation of strontium titanate crystals grown from different chemical compositions*. Crystals, 7(11), pp. 351.
- Nowacki, J. P., & Hsieh, R. K. T., 1986. Lattice defects in linear isotropic dielectrics. International journal of engineering science, 24(10), pp. 1655-1666.
- Pak Y. E., 1990, *Force on a Piezoelectric Screw Dislocation*, J. Appl. Mech., vol. 57, pp. 863-869.
- Pak Y. E., 1992, *Linear Electroelastic Fracture Mechanics of Piezoelectric Materials*, Int. J. Fracture, vol. 54, pp. 79-100.
- Pouvreau, C., 2007. Indentation fracture of gallium arsenide (No. 3864 THESIS). EPFL.
- Raghavan, V., 2015. *Materials Science and Engineering: A first course*. PHI Learning Pvt. Ltd.
- Rajapakse, R. K. N. D., 1999. Closed-form solutions for edge dislocations in piezoelectric solids. Mechanics of Composite Materials and Structures, 6(2), pp. 97-115.
- Sadd H. M., 2009. *Elasticity. Theory, Applications, and Numerics*. Academic Press.
- Saghayezhian, M., et al. 2021. *Formation of dislocations via misfit strain across interfaces in epitaxial BaTiO₃ and SrIrO₃ heterostructures*. Journal of Physics: Condensed Matter, 33(27), 275003.
- Sahin, E., & Dost, S., 1988. A strain-gradients theory of elastic dielectrics with spatial dispersion. International journal of engineering science, 26(12), pp. 1231-1245.
- Schwartz, J., 1969. *Solutions of the equations of equilibrium of elastic dielectrics: stress functions, concentrated force, surface energy*. International Journal of Solids and Structures, 5(11), pp. 1209-1220.
- Strunk, H. P., & Bauser, E. 1995. *Bethge and Frank Step Sources in Solution Growth of GaAs*. Physica Status Solidi (a), 147(2), pp. 301–312.
- Suzuki, T., Nishi, Y., & Fujimoto, M., 1999. *Analysis of misfit relaxation in heteroepitaxial BaTiO₃ thin films*. Philosophical Magazine A, 79(10), pp. 2461-2483.

- Toupin R. A., 1956, *The Elastic Dielectric*. Journal of Rational Mechanics and Analysis , 1956, Vol. 5, No. 6, pp. 849-915.
- Toupin, R. A., 1962. *Perfectly elastic materials with couple stresses*. Arch. Ration. Mech. Anal. 11, pp. 385-414 .
- Toupin, R. A., 1963. *A dynamical theory of elastic dielectrics*, Int. J. Engng. Sei. Vol. 1, pp. 101-126.
- Vukobrat, M. D., 1994. *On the J-integral and energy release rate in an elastic dielectric*. International journal of engineering science, 32, pp. 1151-1151.
- Vukobrat, M. D., 1994. *On the J-integral and energy release rate in an elastic dielectric*. International journal of engineering science, 32, pp. 1151-1151.
- Ward, T., Sánchez, A. M., et al., 2014. *Design rules for dislocation filters*. Journal of Applied Physics, 116(6), 063508.
- Yang, X. M., Hu, Y. T., & Yang, J., 2004. *Electric field gradient effects in anti-plane problems of polarized ceramics*. International Journal of Solids and Structures, 41(24-25), pp. 6801-6811.
- Zhang, J., et al, 1997. *Structural behavior of thin BaTiO₃ film grown at different conditions by pulsed laser deposition*. Japanese journal of applied physics, 36(1R), 276.

Ελληνική βιβλιογραφία

- Glitsis, I., 2020. *Ηλεκτρομαγνητικά Πεδία Β*. Διδακτικές σημειώσεις. Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών & Μηχανικών Υπολογιστών, ΕΜΠ.
- Σωτηρόπουλος Χ., 2021. *Γενικευμένη Θεωρία Φλεξοηλεκτρικών Υλικών*. Διπλωματική εργασία στον Τομέα Μηχανικής (Επιβλέπων Καθηγητής Α. Ζήσης ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ).
- Τραχανάς Σ., 1989. *Διαφορικές Εξισώσεις, Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις, Μέθοδοι Λύσης και Εφαρμογές*. Τόμος Α'. Ηράκλειο, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Kiritsis A. 2021. *NEA ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΑ ΥΛΙΚΑ*. Διδακτικές σημειώσεις. ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ.