

Grzegorz Jurczak

Anizotropia sprężysta kryształów.
Analiza i modelowanie numeryczne metodą elementów
skończonych

Praca doktorska

wykonana pod kierunkiem dr hab. inż. Pawła Dłużewskiego

Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polskiej Akademii Nauk

Warszawa 2005

Spis treści

1	Wstęp	4
2	Wprowadzenie	9
2.1	Klasyczna teoria sprężystości	13
2.2	Anizotropowa sprężystość	20
2.3	Symetria materiału	21
2.4	Skończone deformacje	22
2.5	Hipersprężystość	26
2.5.1	Funkcja energii odkształcenia	30
2.5.2	Materiał St. Venanta-Kirchhoffa	34
2.5.3	Materiał Murnaghana	36
2.5.4	Materiał Ogdena	37
3	Proponowany model materiału sprężystego dla kryształów	40
3.1	Nieliniowa anizotropia hipersprężysta	41
3.2	Stałe sztywności	50
4	Metoda elementów skończonych	56
4.1	Podstawy algorytmu MES	58
4.2	Pochodna $\frac{\partial \nabla \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}}$	61
5	Przykłady numeryczne	62
5.1	Dyslokacje niedopasowania w heterostrukturze GaAs/ZnTe/CdTe	66
5.2	Dyslokacja krawędziowa w kryształach miedzi	72
5.3	Dyslokacja 60° w kryształach miedzi	79
5.4	Określanie koncentracji indu w studniach kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$	84
5.5	Dyskusja otrzymanych wyników	92
6	Podsumowanie	96
A	Przeliczanie stałych sztywności przy zmianie miary odkształcenia	118

B	Wyznaczanie dystorsji źródłowych	124
B.1	Regularna siatka w konfiguracji lagranżowskiej	124
B.2	Regularna siatka w konfiguracji lokalnie odciążonej	126
C	Wybór parametru miary odkształcenia	128

Rozdział 1

Wstęp

W okresie ostatnich kilkunastu lat jesteśmy świadkami niezwyklego przełomu inżynierskiego i technologicznego dokonującego się w życiu codziennym, nauce i przemyśle. W dniu dzisiejszym nie wyobrażamy już sobie życia bez komputerów, sterowników mikroprocesorowych kontrolujących działanie urządzeń gospodarstwa domowego, przyrządów opartych na układach półprzewodnikowych, itp. U źródeł nienotowanego dotąd w historii cywilizacji ludzkiej postępu, leży powszechne wykorzystanie najnowszych zdobyczy techniki i nauki, w tym komputerów umożliwiających przeprowadzenie złożonych obliczeń i symulacji numerycznych. Wśród wielu dziedzin nauki i techniki, niezwykle skutecznie i intensywnie wykorzystujących nowe możliwości jakie niesie ze sobą postęp techniczny wskazać możemy również mechanikę ciała stałego.

W urządzeniach technicznych najnowszych generacji powszechnym zaczyna być wykorzystywanie efektów kwantowych, które odgrywają istotną rolę gdy wymiary elementów aktywnych w tych urządzeniach stają się coraz to mniejsze i mniejsze, osiągając wymiary rzędu nm. Powszechna miniaturyzacja rodzi zapotrzebowanie na nowe modele teoretyczne opisujące specyficzne efekty, charakterystyczne dla nanometrowych struktur półprzewodnikowych, jak np. zmiany energii emisji w naprężonych studniach i kropkach kwantowych InGaN/GaN. Postęp techniczny jaki dokonuje się w dziedzinie technik wytwarzania heterostruktur połączony jest jednocześnie z rozwojem technik badawczych struktury, które to osiągają dziś rozdzielczość pojedynczego atomu, np. nowe odmiany mikroskopii elektronowej (*EDS*, *EELS*, *HAADF*). Ciągły rozwój technologii wytwarzania heterostruktur generuje zapotrzebowanie na nowe, dokładniejsze modele teoretyczne i narzędzia obliczeniowe pozwalające matematycznie ująć zachowanie się urządzeń opartych na tego typu strukturach krystalicznych podczas pracy. Zapotrzebowanie przemysłu stoi u podstaw znaczącego postępu naukowego i technologicznego, właśnie dzięki silnemu wzajemnemu sprzężeniu zwrotnemu pomiędzy rozwojem technologii wytwarzania nanostruktur o nowych doskonałych właściwościach fizycznych (ze szczególnym uwzględnieniem optoelektroniki), a wiedzą na temat zjawisk zachodzących w materiałach w mikro- i nanoskali. Warunkiem niezbędnym bowiem do opracowania nowych, jak również optymalizacji znanych już procesów technologicznych wytwarzania i eksploatacji heterostruktur są interdyscyplinarne badania podstawowe niezbędne dla zrozumienia mechanizmów rządzących zachowaniem się heterostruktur i ujęcia ich w ścisłe, matematyczne formuły. Jedynie dzięki takiemu

komplementarnemu podejściu możliwe będzie zaspokojenie lawinowo rosnącego popytu na urządzenia wykorzystujące najnowsze zdobycze techniki. Opis zachowania się heterostruktur o wymiarach rzędu nanometrów, gdzie istotne jest uwzględnienie wzajemnych oddziaływań komórek atomowych, czy nawet pojedynczych atomów wchodzących w skład struktury stawia bowiem niezwykle wysokie wymagania nowym modelom teoretycznym. W klasycznym podejściu, rozważając wpływ mikrostruktury na zachowanie się makroskopowego ciała pod obciążeniem, świadomie zakładamy całkowitą przypadkowość w rozkładzie orientacji ziarn tworzących ciało. To założenie prowadzi do wniosków, że ciało ma takie same właściwości bez względu na kierunek obciążenia. Założenie izotropii właściwości fizycznych, doskonale upraszczające opis matematyczny i sprawdzające się w praktyce inżynierskiej, zawodzi jednak gdy mamy do czynienia np. metalami po obróbce plastycznej, szturmem zdobywającym rynek w ostatnich latach kompozytami czy też będącymi przedmiotem zainteresowania niniejszej pracy strukturami krystalicznymi. Struktury krystaliczne z bardzo małą gęstością dyslokacji (10^2 cm^{-2}) lub wręcz wolne od defektów (tzw. *whiskersy*) wraz z rozwojem technik ich wytwarzania są coraz częściej wykorzystywane w technice. Ich podstawową zaletą jest fakt, że struktury takie zdolne są do deformacji sprężystych daleko wykraczających poza granice, które zwykliśmy traktować jako małe, zob. Crump i Mitchell (1970), Hill (1975). Deformacja kryształu w ogólnym przypadku obciążenia jest niezwykle złożona ze względu na wyraźną anizotropię właściwości fizycznych i różne zachowanie się kryształu podczas rozciągania i ściskania. Powoduje to poważne trudności przy modelowaniu zachowania takiego materiału. Wpływ efektów związanych ze specyfiką budowy kryształów, np. silny efekt piezoelektryczny, czy też polaryzacja spontaniczna w kryształach o strukturze heksagonalnej dodatkowo komplikuje problem. W przypadku modelowania heterostruktur, kiedy zależy nam na uwzględnieniu oddziaływań atomowych, czy też wyznaczeniu konfiguracji atomowej naturalnym wydaje się użycie metod dyskretnych np. statyki i dynamiki molekularnej czy też obliczeń *ab-initio*. Do tego celu wykorzystać możemy jeden z całego szeregu potencjałów atomowych (np. *Stillinger-Webera*, *Lenarda-Jonesa*, *Tersoffa*, *Barafa*, *TB-SMA* i wiele innych), z których każdy ma specyficzne cechy predestynujące go do użycia dla ściśle określonej grupy materiałów. Odmienne podejście do opisu oddziaływań atomowych prezentuje metoda atomu osadzonego (tzw. *EAM*, *MEAM*), wspomniane już metody oparte na pierwszych zasadach (*ab-initio*) czy też metody empiryczne (np. przybliżenie k^*p). Mimo postępującej miniaturyzacji półprzewodnikowych urządzeń elektronicznych na ich strukturę ciągle składa się ogromna liczba atomów, stąd cechą charakterystyczną obliczeń molekularnych tego typu struktur jest ogromne zapotrzebowanie na moc obliczeniową. Dodatkowo jeśli zwiększymy stopień złożoności oddziaływań atomowych, np. poprzez założenie istnienia niecentralnych oddziaływań atomów czy zwiększenie zasięgu tych oddziaływań (tzw. *cut off* potencjału) otrzymamy niezwykle złożony i czasochłonny problem do rozwiązania. Z tego też powodu obliczenia takie napotykają na naturalne ograniczenie w postaci ilości atomów mogących brać jednocześnie udział w symulacji. Jednym ze sposobów na ominięcie wspomnianego ograniczenia jest wykorzystanie metod mechaniki kontinuum do symulacji zachowania się homo- i heterostruktur lub stworzenie rozwiązań hybrydowych łączących w sobie dokładność symulacji ruchu pojedynczych atomów metodami dyskretnymi z efektywnością metod mechaniki ośrodków ciągłych. W celu geometrycznego powiązania kine-

matyki, dyskretnej w swej naturze struktury krystalicznej z ciągłym kontinuum konieczne jest przyjęcie uproszczenia, idealizacji struktury krystalicznej, np. hipotezy Cauchy'ego-Borna, zob. Born i Huang (1956), Ericksen (1984), Tadmor i in. (1996), Ortiz i Philips (1999), Abeyarante i in. (2001). Matematyczny aparat mechaniki ośrodków ciągłych użyty do modelowania nanostruktur krystalicznych, musi uwzględniać cechy charakterystyczne kryształu, jak np. asymetrię pomiędzy procesem rozciągania i ściskania czy też anizotropię właściwości fizycznych. W niniejszej pracy został użyty aparat anizotropowej hipersprężystości opartej na uogólnionej mierze odkształcenia pozwalający uwzględnić nieliniowości geometryczną i fizyczną kryształu, jak również anizotropię jego właściwości fizycznych. Proces wytwarzania nanostruktur (np. heterostrukтуры epitaksjalne) jest czynnikiem mającym decydujący wpływ na właściwości eksploatacyjne urządzeń zbudowanych na ich bazie. To właśnie w czasie wzrostu w heterostrukturach powstają naprężenia residualne, których obecność spowodowana jest głównie niedopasowaniem sieciowym i dezorientacją sieci krystalograficznej podłoża i hodowanej warstwy. Na poziom naprężeń residualnych, a więc na jakość hodowanego kryształu, ma również wpływ wiele innych czynników takich jak, stopień zdefektowania podłoża - dyslokacje powielają się w hodowanej strukturze, typ wzrostu - wyspowy (*Stranski-Krastanow*) czy warstwowy (*Frank-van der Merwe*), temperatura wzrostu, obróbka cieplno-mechaniczna heterostrukтуры i wiele innych. Wykorzystując matematyczny aparat anizotropowej hipersprężystości w metodzie elementów skończonych otrzymujemy nowe, efektywne narzędzie obliczeniowe pozwalające wyznaczać stan odkształcenia i naprężenia, rozkłady pól sprzężonych, np. rozkład potencjału elektrostatycznego w kryształach o symetrii heksagonalnej. Dzięki znajomości naprężeń residualnych obecnych w heterostrukturach jesteśmy w stanie określić stopień zdefektowania struktury, opracować lub też zweryfikować techniki redukcji naprężeń residualnych, np. poprzez dobór innych materiałów na podłożu. Dzięki znajomości rozkładu potencjału elektrostatycznego będącego wynikiem deformacji struktury o symetrii heksagonalnej jesteśmy w stanie przewidzieć zmiany struktury pasmowej w urządzeniach optoelektronicznych.

Cel pracy. Celem pracy jest opracowanie efektywnego narzędzia obliczeniowego opartego na matematycznym aparacie mechaniki kontinuum przeznaczonego do modelowania stanu naprężenia i odkształcenia w zdefektowanych heterostrukturach epitaksjalnych. Aby poprawnie opisać mechaniczne zachowanie się materiału o wymiarach rzędu pojedynczej komórki elementarnej kryształu wykorzystany został aparat nieliniowej, anizotropowej hipersprężystości i metoda elementów skończonych. Zaproponowany model matematyczny opisujący skończone deformacje struktury krystalicznej uwzględnia nieliniowość zarówno geometryczną, korzystając z uogólnionej miary odkształcenia, jak i nieliniowość fizyczną wykorzystując stałe sprężystości wyższych rzędów. Proponowany model zachowania się ciała, w przeciwieństwie do innych stosowanych w literaturze modeli np. hiposprężystych, bilansuje energię na zamkniętych cyklach obciążenia. Przy modelowaniu anizotropii kryształu posłużono się anizotropowymi stałymi sztywności drugiego i trzeciego rzędu ogólnie dostępnymi w literaturze.

Zakres pracy. W niniejszej pracy przedstawiono metodę rozwiązywania zagadnień

brzegowych metodą elementów skończonych opartą na skończonych deformacjach nieliniowego anizotropowego hipersprężystego ośrodka. Przedstawiona w następnych rozdziałach metodyka wyznaczania stanu napreżeń residualnych w samonapreżonych nanostrukturach zilustrowana została przykładami obliczeń napreżeń niedopasowania w heterostrukturze półprzewodnikowej GaAs/ZnTe/CdTe oraz studium stanu naprężenia wokół dyslokacji krawędziowej i dyslokacji Schockleya w kryształach miedzi. Procedura wyznaczania napreżeń residualnych składa się z następujących etapów:

- Analiza danych eksperymentalnych, np. obrazów wysokorozdzielczego mikroskopu elektronowego (HRTEM),
- Wybór materiału referencyjnego dla poszczególnych składników heterostruktury,
- Opis geometrii heterostruktury,
- Dyskretyzacja modelowanego obszaru heterostruktury,
- Identyfikacja składu chemicznego, parametrów sieci i stałych materiałowych poszczególnych elementów skończonych,
- Przyjęcie odpowiednich warunków brzegowych,
- Rozwiązanie tak sformułowanego zadania brzegowego,
- Analiza wyników numerycznych.

Prezentowana, zintegrowana metoda obliczeń uwzględnia zarówno nieliniowość geometryczną, jak i fizyczną poprzez uwzględnienie m. in. stałych sprężystości trzeciego rzędu. Zakres potencjalnych zastosowań prezentowanej metody nie ogranicza się wyłącznie do pól mechanicznych, ale może obejmować również pole elektryczne poprzez uwzględnienie efektu piezoelektrycznego. Podejście takie pozwala na kompleksowe modelowanie zachowania się kryształów i ocenę wpływu poszczególnych efektów.

Zawartość pracy. Praca składa się z 6-ciu rozdziałów i 3-ch dodatków. Po krótkim wstępie, w rozdziale drugim przedstawiono krótki rys historyczny i wprowadzenie do teorii sprężystości wraz z przeglądem istniejących w literaturze modeli materiału hipersprężystego. Rozdział trzeci prezentuje proponowany hipersprężysty model zachowania kryształu i wyprowadzone zależności opisujące tensor naprężenia Cauchy'ego, przy czym kinematyka ośrodka uwzględnia skończone deformacje ciała. W rozdziale czwartym opisana została implementacja numeryczna prezentowanego sformułowania oraz podano układ równań metody elementów skończonych. W rozdziale piątym przedstawiono przykłady zastosowania metody, opisano warunki brzegowe wraz z uzasadnieniem przyjęcia ich postaci oraz przedstawiona została dyskusja otrzymanych wyników. W podsumowaniu zawarto wnioski z przeprowadzonej w pracy analizy. Dodatek A zawiera analizę wpływu zmiany współczynnika miary odkształcenia "m" przy zmianie miary odkształcenia na wartości stałych sztywności trzeciego rzędu. Dodatek B zawiera metodę wyznaczania dystorsji

sieci koniecznych do poprawnego zdefiniowania problemu naprężeń residualnych zdefektowanej heterostruktury. Dodatek C zawiera propozycję doboru miary odkształcenia ze względu na warunek stałości współczynnika sztywności objętościowej.

Rozdział 2

Wprowadzenie

W otaczającym nas świecie ciała stałe stanowią niezwykle liczną i różnorodną pod względem właściwości fizyko-chemicznych grupę materiałów. Ponieważ większość materiałów konstrukcyjnych jest ciałami stałymi o budowie krystalicznej, dlatego też wydaje się w pełni uzasadnionym fakt, że materiałom tym poświęca się ogromną uwagę i stanowią one przedmiot badań wielu naukowców na całym świecie. Z drugiej strony, poszukiwania nowych modeli opisujących zachowanie się ciał odkształcalnych w szerokim spektrum skali wymiarowej (od makro-, poprzez mezo-, do mikro- i nanoskali) stanowią stały bodziec rozwoju nie tylko mechaniki ale również wielu dziedzin z nią związanych, jak np. matematyki, inżynierii materiałowej, technik badawczych oraz wielu innych.

Pierwszym historycznie modelem opisującym zachowanie się ciała poddanego działaniu obciążeń zewnętrznych jest model ciała sprężystego. Model ten, jak wszystkie modele mechaniki, jest pewną idealizacją rzeczywistego zachowania się ciała odkształcalnego. Wraz z rozwojem techniki i metod badawczych oczywistym stało się, że w świecie panuje wielka różnorodność i mniejsze lub większe odstępstwa od tego modelu są na porządku dziennym. Mimo to, teoria sprężystości pozostaje nadal efektywnym narzędziem, za pomocą którego jesteśmy w stanie rozwiązać skomplikowane niejednokrotnie problemy, zapewniając przy tym akceptowalną zgodność wyników z eksperymentem. W przypadku praktyki inżynierskiej teoria sprężystości oparta na małych deformacjach do dziś pozostaje podstawowym narzędziem wykorzystywanym do obliczeń konstrukcji mechanicznych.

Cechą charakterystyczną ciał odkształcalnych jest to, że w pewnym zakresie deformacji, po ustaniu działania obciążenia, ciała te powracają do pierwotnego, wolnego od odkształceń i naprężeń stanu naturalnego. Ciała wykazujące tą cechę w całym zakresie obciążenia nazywamy sprężystymi w odróżnieniu od materiałów plastycznych, dla których odwrotny proces odkształcenia sprężystego zachodzi jedynie w pewnym skończonym, zwykle niewielkim zakresie deformacji. I choć dla niektórych rzeczywistych materiałów zakres sprężysty jest mocno ograniczony, to jednak ze względu na fakt, że większość konstrukcji mechanicznych pracuje wyłącznie w zakresie sprężystym, to stosowanie powyższego modelu jest uzasadnione i mimo daleko posuniętej idealizacji dość dobrze sprawdza się w praktyce. Pojęcie *sprężystość* po raz pierwszy pojawiło się prawdopodobnie w pracy Hooke'a (1676) sformułowane za pomocą łacińskiego anagramu *ceiinoosssttuw* - popularnej wówczas metody prezentacji odkryć za pomocą rebusu słownego mającego skłonić do

zastanowienia innych badaczy. Wkrótce Hooke (1678) podaje rozwiązanie wspomnianego rebusu w postaci słownej:

Ut tensio sic vis,

co tłumaczy się: *siła ciała sprężystego jest proporcjonalna do jego wydłużenia*. Prawo to dało podstawę matematycznej teorii sprężystości, która stanowi dzisiaj jedną z ważniejszych gałęzi mechaniki.

Niewiele wcześniej Steno (1669) publikuje rozprawę, w której zawiera szczegółową analizę przekrojów próbek kryształów kwarcu. Od tejże pracy datuje się początek nauki o budowie wewnętrznej kryształów - krytalografii. Za następne kroki milowe krytalografii można uznać pracę Haüy'a (1784) wprowadzającego *molécules intégrantes* - pierwowzór komórki elementarnej oraz Bravais'go (1848) definiującego podział komórek kryształu ze względu na charakterystyczne dla nich symetrie. Mechanika ciał odkształcalnych powszechnie czerpie dziś inspirację i weryfikuje wyniki na podstawie rozważań krytalograficznych. Wiedza na temat budowy wewnętrznej ciał krytalicznych daje niezwykle cenne wytyczne przy budowaniu fenomenologicznych teorii opisujących makroskopową deformację ciała krytalicznego i jest konieczna do poprawnego opisu specyficznych właściwości fizycznych kryształu.

Sięgając wstecz odnajdziemy, że jednym z wielu przyczynków do rozwoju mechaniki ciał odkształcalnych była potrzeba zrozumienia i opanowania zjawisk pękania budowli. Pierwszymi próbami rozwiązania problemu były koncepcje Galileusza dotyczące proporcjonalności obciążenia do powierzchni przekroju ciała i test rozciągania prętów opracowany przez Leonarda da Vinci, choć przed odkryciem Hooke'a konstrukcje pod obciążeniem były traktowane jak ciała idealnie sztywne, np. wspomniane podejście Galileusza, zob. Westergaard (1952). Niezależnie od Hooke'a, opierając się na doświadczeniach ze zginaniem belek Mariott'e (1680) dochodzi do podobnego wniosku, wyznaczając przy okazji położenie osi neutralnej w zginanej belce. Niedługo później pojawia się pojęcie będące pierwowzorem naprężenia, wyrażone przez Leibniz'a (1684) w poglądzie, że w obciążonych ciałach istnieje napięcie działające prostopadle do powierzchni ciała. Pogląd ten powtórzony został następnie przez Bernoulli'ego (1705) proponującego opis obciążenia ciała za pomocą siły na jednostkę powierzchni i opis deformacji za pomocą rozciągnięcia jednostkowego włókna materialnego ciała. Coulomb na bazie prac Bernoulli'ego i Euler'a wyprowadza wzór na naprężenie w zginanej sprężystości belce, Parent (1713) wprowadza pojęcie naprężeń ścinających dla uzupełnienia opisanych już naprężeń normalnych. Euler (1727) proponuje liniową zależność pomiędzy naprężeniem a odkształceniem w postaci:

$$s = E e,$$

gdzie parametr materiałowy E zwany jest dziś *modułem Young'a*. W roku 1744 Euler, badając deformację zginanych belek, wprowadza pojęcie gęstości energii odkształcenia, którą definiuje jako energię na jednostkę długości zginanej belki. Jest ona kwadratową funkcją krzywizny i uważana jest przez Eulera za analog energii potencjalnej w układach mechanicznych. W przełomowym dla mechaniki klasycznej wieku XIX następuje burzliwy rozwój teorii sprężystości. Brewster (1816) publikując wyniki swych prac kładzie

podwaliny dla nowej gałęzi nauki - elastooptyki. Metody tej używano, jeszcze do niedawna bardzo powszechnie do wyznaczania rozkładu naprężeń w skomplikowanych geometrycznie konstrukcjach inżynierskich, np. w konstrukcjach lotniczych do wykrywania i eliminowania punktów spiętrzenia naprężeń. Dzisiaj, za sprawą szybkiego rozwoju metod numerycznych wypierana jest z praktyki inżynierskiej ze względu na swoją pracochłonność i wysokie koszty. Cauchy wprowadza fundamentalne pojęcia *naprężenie* i *odkształcenie* zastępujące pierwotną siłę i wydłużenie, formułując jednocześnie prawo Hooke'a w znanej do dziś formie czyli liniowej zależności między naprężeniami a odkształceniami. Wprowadzając pojęcie ośrodka ciągłego, będącego zbiorem punktów identyfikowanych z cząsteczkami ciała tworzącymi obiekt geometryczny w przestrzeni euklidesowej tworzy się podwaliny pod nową gałąź nauki zwaną mechaniką ośrodka ciągłego. Rozróżnione zostają moduły odpowiadające jednoosiowemu rozciąganiu i skręcaniu zdefiniowany zostaje moduł ściśliwości objętościowej. Navier (1826), Cauchy (1829) i Poisson (1829), każdy z osobna, wyprowadzają równania opisujące kinematykę deformacji ciała sprężystego. Niezależnie od siebie zakładają, że modelowe ciało jest jednorodne pod względem struktury wewnętrznej, izotropowe pod względem właściwości sprężystych, a przemieszczenia cząstek ciała są na tyle małe, że można przyjąć liniową zależność pomiędzy naprężeniem a odkształceniem. Początkowo, rozwój teorii sprężystości ma na celu opis *eteru* - medium zaproponowanego przez Fresnela dla wyjaśnienia zjawiska rozchodzenia się światła. Teoria mająca na celu analityczny opis drgań poprzecznych w sprężystym ośrodku została natychmiast zaadoptowana do opisu zjawisk typowych dla praktyki inżynierskiej, takich jak: zginanie belek, skręcanie prętów, ugięcie płyt, drgania mechaniczne, itp. Navier do opisu właściwości ciał sprężystych używa jednej stałej, podczas gdy Cauchy i Poisson używają dwóch stałych: modułu Younga i współczynnika, zwanego dzisiaj *współczynnikiem Poissona*. Wartość drugiej, bezwymiarowej stałej materiałowej szacowana np. przez Cauchy'ego na podstawie analizy sił cząsteczkowych wynosi $\frac{1}{4}$. Green (1839) publikuje przełomową pracę, w której wprowadza funkcję właściwej energii odkształcenia będącej kwadratową funkcją odkształcenia. Dzięki rozważaniom Greena możliwe staje się wyznaczenie ilości niezależnych stałych sztywności dla ogólnego przypadku anizotropii. Liczba niezależnych stałych sztywności ustalona zostaje na 21, podczas gdy model proponowany przez Cauchy'ego oparty na centralnych oddziaływaniach cząsteczkowych posiadał jedynie 15-cie niezależnych stałych sztywności. Lord Kelvin (1855) prowadząc badania dotyczące sprężystości na gruncie termodynamiki wykazuje, że funkcja właściwej energii odkształcenia musi istnieć dla odwracalnego, izotermicznego lub adiabatycznego procesu deformacji. Lamé i Clapeyron (1833) w pracy poświęconej wydrążonym cylindrom i kulom dla materiału izotropowego używają dwóch parametrów materiałowych znanych dzisiaj jako stałe Lamego. Airy (1862) wprowadza funkcję naprężeń definiującą naprężenia w stanie równowagi, uogólnioną później przez Maxwella. Castigliano (1870) formułuje założenia metody energetycznej wyznaczania stanu naprężenia konstrukcji sprężystych - minimum energii wewnętrznej. Mohr wprowadza konstrukcję geometryczną graficznie przedstawiającą stan naprężenia w ciele opartą na kołach, która pozwala wyznaczyć kierunki naprężeń głównych. Volterra (1907) wprowadza pojęcie dyslokacji - pola odkształceń sprężystych spowodowanych przemieszczeniami w ciałach, które zostaje szybko wykorzystane do wyjaśnienia różnic pomiędzy eksperymentem a teoretycznymi przewidywaniami wielkości

naprężeń ścinających powodujących deformację plastyczną kryształów. W wieku XX-tym rośnie zainteresowanie praktycznym zastosowaniem teorii sprężystości. Rozwój budownictwa i przemysłu maszynowego kładzie nacisk na rozwój badań eksperymentalnych. Voigt (1889) podaje zestawy stałych sprężystych dla różnych materiałów. Bridgman bada zachowanie się materiałów pod ekstremalnie wysokim ciśnieniem. Zbadana i opisana *granica plastyczności* wprowadza dodatkowe ograniczenie stosowalności teorii sprężystości oprócz istniejącego już w praktyce inżynierskiej ograniczenia do małych deformacji i ugięć. Rozwój technik numerycznych pod koniec XX-tego wieku całkowicie rewolucjonizuje praktykę w wielu dyscyplinach wiedzy, w tym również w mechanice ośrodka ciągłego. Spośród wielu stosowanych technik numerycznych na szczególne wyróżnienie zasługuje metoda elementów skończonych, której początków można szukać już w pierwszej połowie XX-tego wieku. Założenia tej metody sformułowali Hrennikoff (1941) i Courant (1943), a rozwinięta i zastosowana praktycznie została w latach 50-tych do obliczeń struktur lotniczych przez Turnera, Clougha, Martina i Toppa w Stanach Zjednoczonych oraz Argyrisa i Kelsey'a w Europie. Metoda elementów skończonych jak i inne techniki numeryczne (metoda różnic skończonych, metoda elementu brzegowego) przyczyniła się do zmian w wielu dziedzinach praktyki inżynierskiej. Dziś, dzięki narzędziom numerycznym jesteśmy w stanie zmierzyć się z niezwykle skomplikowanymi problemami natury matematycznej pojawiającymi się na skutek stosowania bardziej wyrafinowanych modeli zachowania się ciała. Dodatkowo, zastosowanie metod numerycznych do obliczeń powoduje, że grono beneficjentów korzystających ze zdobyczy nauki i techniki rośnie nie ograniczając się, jak to było dotąd, do wąskiej grupy wysoce wykwalifikowanych specjalistów.

Jednym z możliwych, nowych zastosowań mechaniki kontinuum jest przeżywająca ostatnimi laty rozkwit nanotechnologia. Jej celem jest analiza, projektowanie i rozwój mikro- i nanometrycznych homo- i heterostruktur, które znajdują zastosowanie w komputerach nowej generacji, urządzeniach elektronicznych, fotonice, biomechanice, medycynie, astronautyce i wielu innych dziedzinach techniki. Ze względu jednak na znaczny stopień skomplikowania, rozwój tej dziedziny stanowi nie lada wyzwanie dla całej nauki. Nowe, niezwykle złożone zjawiska zachodzące w tego typu strukturach wymagają nowych, bardziej wyrafinowanych modeli teoretycznych aby poprawnie przewidzieć i opisać ich właściwości. Dlatego też mocne podstawy teoretyczne i efektywne narzędzia numeryczne stają się nieodzowne przy projektowaniu tychże urządzeń, będąc jednocześnie potężnym narzędziem redukcji kosztów wytwarzania i wdrożenia do produkcji gotowych urządzeń. Biorąc pod uwagę dzisiejsze tempo postępu technicznego w tej dziedzinie można przewidzieć, że elementy aktywne urządzeń elektronicznych jutra będą miały charakterystyczne rozmiary rzędu kilku nanometrów, więc zrozumienie procesów zachodzących w tak małych strukturach oprócz tego, że będzie kluczowe dla ich wykorzystania, pozwoli jednocześnie uzyskać wysoką powtarzalność parametrów oraz zapewni długi czas pracy tychże urządzeń. Defekty struktury powszechnie występujące w kryształach, na skutek ciągłego zmniejszania się wymiarów charakterystycznych urządzeń będą odgrywały coraz istotniejszą rolę, modyfikując zarówno mechaniczne jak i optoelektroniczne parametry takich struktur. Mimo wymagań nanotechnologii, rozwój odpowiednich metod badania właściwości mechanicznych nanostruktur, celem potwierdzenia lub zanegowania przewidywań teoretycznych, jest mocno ograniczony do nanoindentacji, zob. Loubet i in. (1986), Wu i in. (1993), Suresh i

in. (1999) czy działania wysokich ciśnień. Dla odmiany dobrze rozwinięte są metody badań pośrednich, np. pomiar naprężeń residualnych za pomocą promieni Roentgena, zob. James (1980), Segmueller i Murakami (1988) czy prześwietleniowej i dyfrakcyjnej mikroskopii elektronowej, np. Kret i in. (2000), Gopal i in. (2001), Hýtch i in. (2003). Konieczne jest zatem opracowanie nowych metod eksperymentalnego badania mikro- i nanostruktur oraz nowych metod multidyscyplinarnego ich modelowania. Z pomocą przychodzi tu modelowanie numeryczne, które staje się wiarygodnym i wygodnym uzupełnieniem badań eksperymentalnych. W przypadkach gdy zrozumienie dualnego zachowania się materiałów (kontynualnego w skali makro i dyskretnego w nanoskali) jest podstawą do multidyscyplinarnego modelowania kryształów zastosowanie modelowania numerycznego pozwala kompletnie analizować zjawiska zachodzące w obu skalach wymiarów. Siłą analitycznych metod obliczeniowych jest możliwość redukcji złożoności zjawisk (defektów struktury, granic ziarn) do relatywnie prostych formuł łączących przyczynę ze skutkiem. Pomimo tych niezaprzeczalnych zalet mechanika kontinuum nadal słabo radzi sobie z opisem takich zjawisk, jak np: dyslokacje, bifurkacje, nukleacje pęknięć zmęczeniowych, itp.

2.1 Klasyczna teoria sprężystości

Ciało idealnie sprężyste to takie, w którym stan naprężenia nie zależy ani od skali czasu, ani od historii deformacji, a zależy jedynie od aktualnego stanu odkształcenia. Podczas deformacji ciała sprężystego nie zachodzi dyssypacja energii, a praca wykonana przez obciążenie zewnętrzne magazynowana jest przez deformujące się ciało w postaci energii odkształcenia. Energia odkształcenia może zostać zwrócona do otoczenia poprzez pracę wykonaną przez to ciało. Aby opisać zachowanie się ciała sprężystego przypisujemy mu następujące właściwości:

- ciało sprężyste posiada stan naturalny, wolny od odkształceń i naprężeń, do którego powraca po ustaniu działania obciążenia;
- odkształcenia mierzone są od stanu naturalnego, w którym przyjmujemy że wartości naprężenia i odkształcenia są równe zeru;
- zależność łącząca naprężenie z odkształceniem jest lokalna w czasie i przestrzeni.

Ciało sprężyste będące przedmiotem naszych rozważań jak i wszystkie ośrodki ciągłe, podlegają zasadom zachowania. Pomijając momenty masowe i powierzchniowe dla dowolnego ciała i dowolnego procesu spełnione są związki, za Eringenem (1971):

- zasada zachowania masy

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \, dv = 0, \quad (2.1)$$

- zasada zachowania pędu

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \mathbf{v} \, dv = \int_v \rho \mathbf{f} \, dv + \int_{\partial v} \mathbf{t}_{(n)} \, d(\partial v), \quad (2.2)$$

- zasada zachowania momentu pędu

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \mathbf{x} \times \mathbf{v} \, dv = \int_v \rho \mathbf{x} \times \mathbf{f} \, dv + \int_{\partial v} \mathbf{x} \times \mathbf{t}_{(n)} \, d(\partial v), \quad (2.3)$$

- I prawo termodynamiki

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_v \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \, dv + \frac{d}{dt} \int_v \rho \psi \, dv = \\ \int_v \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, dv + \int_{\partial v} \mathbf{t}_{(n)} \cdot \mathbf{v} \, d(\partial v) + \int_v \rho r \, dv - \int_{\partial v} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, d(\partial v), \end{aligned} \quad (2.4)$$

- II prawo termodynamiki

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \eta \, dv + \int_{\partial v} \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, d(\partial v) - \int_v \rho \frac{r}{T} \, dv \geq 0, \quad (2.5)$$

gdzie ρ , \mathbf{v} , $\boldsymbol{\nu}$, \mathbf{f} , $\mathbf{t}_{(n)}$, \mathbf{x} , ψ , \mathbf{q} , η , r oraz T oznaczają odpowiednio: gęstość masy, wektor prędkości, wektor normalny do powierzchni, gęstość sił masowych, wektor sił powierzchniowych, wektor położenia cząstki, gęstość energii wewnętrznej, wektor strumienia ciepła, gęstość entropii, wydajność źródeł promieniowania i temperaturę. Operatory „ \cdot ” i „ \times ” oznaczają zaś iloczyn skalarny i wektorowy. Równania powyższe prowadzą do lokalnych zasad zachowania i nierówności Clausiusa-Duchema:

- równanie ciągłości

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (2.6)$$

- równania ruchu

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = \rho \dot{\mathbf{v}}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T, \quad (2.7)$$

- równanie bilansu energii

$$\rho \dot{\psi} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - \operatorname{div} \mathbf{q}, \quad (2.8)$$

- nierówność Clausiusa - Duhema

$$\rho \dot{\eta} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{T} \geq 0, \quad (2.9)$$

gdzie \mathbf{d} oznacza symetryczną część gradientu prędkości:

$$\mathbf{d} \stackrel{\text{df}}{=} \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v}). \quad (2.10)$$

Cztery równania (2.6)-(2.9) są uniwersalne dla dowolnego continuum materialnego, w którym tensor naprężenia Cauchy'ego jest symetryczny. Ograniczając się do procesów odwracalnych możemy pominąć nierówność Clausiusa - Duhema. Przyjmując dodatkowe ograniczenia dotyczące rozważanych procesów, np. założenie adiabatyczności procesu możemy w równaniu bilansu energii (2.8) pominąć człon związany ze strumieniem ciepła \mathbf{q} . W przypadku pominięcia sił masowych i rozważania procesów quasistatycznych dodatkowo uprości się postać równań ruchu. W takim przypadku możemy zapisać te równania w nowej postaci:

- równania równowagi

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T, \quad (2.11)$$

- równanie bilansu energii

$$\rho \dot{\psi} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}, \quad (2.12)$$

Równania równowagi (2.11) i zasada zachowania masy (2.6) stanowią cztery równania skalarnie i są niewystarczające do pełnego opisu deformującego się ciała, który wymaga dziesięciu zmiennych (6 składowych naprężenia, 3 współrzędne położenia i gęstość masy). Dodatkowo nie ma w tym opisie informacji o właściwościach deformującego się ciała - nie rozróżnimy płynu od ciała stałego, a gumy od stali. Brakujące równania uzupełniane są poprzez *prawo konstytutywne*, które opisuje lokalne właściwości ciała i reakcję tegoż ciała na wymuszenie, łącząc naprężenie Cauchy'ego z historią deformacji ciała. Zależność konstytutywna definiuje naprężenie $\boldsymbol{\sigma}$ w każdym punkcie ciała, w każdym momencie czasu t dla zadanego ruchu ciała. Przyjęty model ciała, pomimo założonej mniej lub dalej idącej idealizacji powinien możliwie wiernie oddawać zachowanie się ciała rzeczywistego dlatego też konstruowanie prawa konstytutywnego można przeprowadzić na różne sposoby, zob. Eringen (1967):

- w oparciu o podejście statystyczne, traktujące ciało jako zbiór molekuł połączonych wzajemnymi więzami oddziaływań molekularnych, które opisywane są przez prawa mechaniki newtonowskiej lub relatywistycznej oraz teorię elektromagnetyzmu,
- na podstawie warunków stawianych przez aparat matematyczny materiałowi sprężystemu przy wykorzystaniu informacji wynikających z rozwiązania problemu początkowo - brzegowego,
- na bazie praw termodynamiki, z których wynikają ograniczenia, a które opisywany proces deformacji musi spełniać,
- na podstawie fizyki procesu z wykorzystaniem właściwości mikroskopowych materiału i badań eksperymentalnych.

Tworzone w ten sposób dodatkowe 6 równań skalarnych domyka zestaw równań (2.6)-(2.9). Bardzo pomocne w tym momencie stają się badania eksperymentalne pozwalające sformułować bardziej adekwatne do rzeczywistości związki konstytutywne lub weryfikujące poprawność już istniejących. W ramach matematycznego modelu ciała można też wprowadzić do zależności konstytutywnej dodatkową informację o wpływie mikrostruktury na makroskopowe zachowanie się ciała. Równania konstytutywne oprócz oczywistego wymagania dotyczącego poprawnego opisu zjawiska muszą spełniać pewne postulaty fizyczne. Najważniejsze z nich wynikają z aksjomatów Nolla (1974):

- zasada oznaczoności łącząca zachowanie się cząstki ciała (zwykle przez zachowanie rozumiane jest naprężenie) w chwili t z historią ruchu tego ciała;
- zasada lokalnego działania pomijająca wpływ ruchu pozostałych cząstek ciała położonych w skończonej odległości na zachowanie się badanej cząstki ciała;

- zasada materialnej obiektywności żądająca aby dwaj niezależni od siebie obserwatorzy tego samego procesu wyciągali te same wnioski o stanie ciała podczas jego deformacji.

Najczęściej stosowaną w mechanice zasadą jest ostatnia z wyżej wymienionych, zwana inaczej zasadą materialnej niezależności od układu odniesienia. Równania konstytutywne niezmiennicze względem zmiany układu odniesienia spełniają powyższy postulat. Dodatkowe matematyczne ograniczenia wynikają z samego procesu rozwiązywania problemu brzegowego czy też początkowo - brzegowego. Ograniczenia takie najczęściej mają formę nierówności związanych z warunkami istnienia rozwiązania spełniającego równania różniczkowe i zadane warunki brzegowe. W przypadku zadania brzegowego, sprężyste deformujące się ciało poddane działaniu sił zewnętrznych i przepisanych przemieszczeń spełnia równanie równowagi (2.11) przy czym dopuszczalne są takie deformacje, które zgodne są z zasadą zachowania masy (2.6), por. Ogden (1984). Aby jednoznacznie rozwiązać problem potrzeba dodatkowych informacji opisujących konfigurację ciała i jego powierzchni. Są to warunki brzegowe, które mogą być zadane w postaci przemieszczeniowej (warunki Neumana), naprężeniowej (warunki Dirichleta) lub mieszanej:

$$u_i = u_i^0 \text{ dla } v, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^0 \text{ dla } \partial v. \quad (2.13)$$

W przypadku zagadnień początkowo-brzegowych, gdzie problem zależny jest od czasu, wprowadza się dodatkowo odpowiednie informacje o prędkościach, np:

$$\dot{u}_i = \dot{u}_i^0. \quad (2.14)$$

Klasyczna - liniowa teoria sprężystości opisuje zachowanie się pewnej klasy materiałów przy założeniu geometrycznej i fizycznej liniowości modelu. Założenia te ograniczają stosowalność modelu jedynie do małych odkształceń i liniowego prawa konstytutywnego. Dopuszczalne są jedynie takie deformacje ciała, które w stosunku do jego wymiarów charakterystycznych są małe, przy czym problemem samym w sobie jest wyznaczenie granicy rozdzielającej małe deformacje od skończonych.

Ze względu na poczynione założenie geometrycznej liniowości modelu znika różnica pomiędzy opisem przestrzennym i materialnym a procesy deformacji opisujemy tensorem małych odkształceń:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (2.15)$$

Fizyczna liniowość modelu oznacza że zależność konstytutywna łącząca naprężenie $\boldsymbol{\sigma}$ z odkształceniem $\boldsymbol{\varepsilon}$, zgodnie z twierdzeniem o reprezentacji funkcji liniowych, zob. Rychlewski (1969), ma postać:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.16)$$

Równoważna jej zależność odwrotna wykorzystująca tensor podatności \mathbf{s} ma postać:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.17)$$

gdzie \mathbf{c} i \mathbf{s} są tensorami czwartego rzędu, odpowiednio stałych sztywności i podatności spełniającymi odpowiednie warunki narzucane na ich składowe, zob. np. Teodosiu (1982).

Równanie (2.16) nazywane jest uogólnionym prawem Hooke'a, które w zapisie indeksowym przyjmuje postać:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (2.18)$$

W praktyce często wykorzystujemy symetrię tensorów naprężenia i odkształcenia, stosując zapis skrócony, np. konwencję Voigta (1910) upraszczając tym samym postać prawa Hooke'a (2.18). Możemy zapisać je wtedy jako liniową sześciowymiarową transformację:

$$\sigma_i = c_{ij} \varepsilon_j, \quad (2.19)$$

lub w pełnym zapisie macierzowym:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2 \varepsilon_4 \\ 2 \varepsilon_5 \\ 2 \varepsilon_6 \end{bmatrix}, \quad (2.20)$$

gdzie przejście od notacji czteroindeksowej do dwuindeksowej odbywa się wg schematu: $11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2, 33 \rightarrow 3, 23 \rightarrow 4, 13 \rightarrow 5, 12 \rightarrow 6$. Prawo Hooke'a możemy wyrazić przyjmując również inne notacje, np. za Mehrabadi i Cowin (1990), Cowin i in. (1999):

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sqrt{2} \sigma_4 \\ \sqrt{2} \sigma_5 \\ \sqrt{2} \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & \sqrt{2} c_{14} & \sqrt{2} c_{15} & \sqrt{2} c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & \sqrt{2} c_{24} & \sqrt{2} c_{25} & \sqrt{2} c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & \sqrt{2} c_{34} & \sqrt{2} c_{35} & \sqrt{2} c_{36} \\ \sqrt{2} c_{41} & \sqrt{2} c_{42} & \sqrt{2} c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ \sqrt{2} c_{51} & \sqrt{2} c_{52} & \sqrt{2} c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ \sqrt{2} c_{61} & \sqrt{2} c_{62} & \sqrt{2} c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \sqrt{2} \varepsilon_4 \\ \sqrt{2} \varepsilon_5 \\ \sqrt{2} \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

Różnica pomiędzy powyższymi notacjami sprowadza się do występowania współczynnika $\sqrt{2}$ przy odpowiednich składowych naprężenia, odkształcenia i stałych sztywności. Zapis w formie indeksowej pozostaje taki sam jak poprzednio (2.19), ale dla zaznaczenia różnic pomiędzy składowymi nowe macierze oznaczmy " \sim ", tj: $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\mathbf{c}} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Symetryczne macierze sztywności $\tilde{\mathbf{c}}$ i $\tilde{\mathbf{s}} = \tilde{\mathbf{c}}^{-1}$ są reprezentacjami tensorów drugiego rzędu w sześciowymiarowej przestrzeni i transformują się zgodnie z prawami transformacyjnymi:

$$\tilde{\mathbf{c}}' = \tilde{\mathbf{Q}} \tilde{\mathbf{c}} \tilde{\mathbf{Q}}^T, \quad \tilde{\mathbf{s}}' = \tilde{\mathbf{Q}} \tilde{\mathbf{s}} \tilde{\mathbf{Q}}^T, \quad (2.22)$$

podczas gdy tensory \mathbf{c} i $\mathbf{s} = \mathbf{c}^{-1}$ (2.16) nie posiadają takich właściwości, zob. Mehrabadi i Cowin (1990), Cowin i Mehrabadi (1995). Tensor drugiego rzędu $\tilde{\mathbf{Q}}$ reprezentuje ortogonalną transformację w sześciowymiarowej przestrzeni i jest bezpośrednio związany z ortogonalnym tensorem w przestrzeni trójwymiarowej.

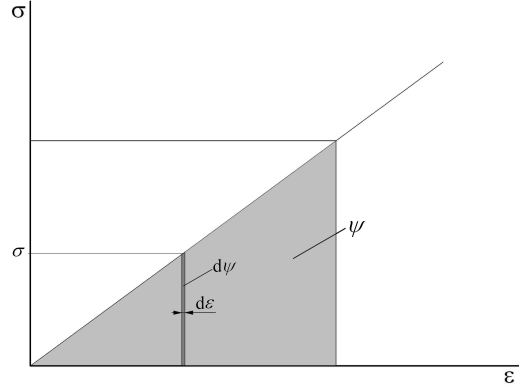
Energię zgromadzoną przez ciało w dowolnym procesie sprężystej deformacji można wyrazić wzorem, por. rys.(2.1):

$$\psi = \int \boldsymbol{\sigma} \, d\varepsilon. \quad (2.23)$$

Po wykorzystaniu zależności pomiędzy naprężeniem a odkształceniem dla prawa Hooke'a, zob. (2.16) lub (2.17), energię sprężystą ciała możemy wyrazić jako kwadratową funkcję odkształcenia lub naprężenia:

$$\psi = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{c} : \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.24)$$

Z faktu symetrii tensorów $\boldsymbol{\sigma}$ i $\boldsymbol{\varepsilon}$ i symetrii wyrażenia na energię odkształcenia (2.24)



Rysunek 2.1: Energia odkształcenia zmagazynowana w procesie deformacji ciała.

wynikają pewne ograniczenia nakładane na postać tensora stałych sztywności \mathbf{c} . Macierz reprezentacji tensora c_{ijkl} w dowolnej bazie musi spełniać następujące warunki symetrii:

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}. \quad (2.25)$$

Po uwzględnieniu symetrii tensorów naprężenia i odkształcenia z ogólnej liczby 81 składowych anizotropowego tensora czwartego rzędu stałych sztywności \mathbf{c} istotnie różnie pozostaje jedynie 36 składowych. Ze względu na odwracalność procesu deformacji sprężystej liczba ta redukuje się do jedynie 21 niezależnych stałych sztywności, koniecznych do opisu pełnej anizotropii materiału.

W przypadku liniowej teorii sprężystości bardzo częstym założeniem dotyczącym materiału jest założenie izotropii jego właściwości sprężystych. Do opisu właściwości mechanicznych ośrodka sprężystego można w takim przypadku przyjąć dwa parametry materiałowe zwane stałymi Lamégo, zob. Lamé i Clapeyron (1833):

$$c_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (2.26)$$

Prawo Hooke'a przyjmuje wtedy postać:

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.27)$$

Z powyższego równania wynika, że brakowi odkształceń odpowiadają zerowe naprężenia i odwrotnie. Jest więc to stan naturalny od którego mierzone są odkształcenia.

Zamiast stałych Lamego można wprowadzić inne stałe, np: moduł Younga - E i moduł Poissona - ν :

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad \text{oraz} \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}, \quad (2.28)$$

oraz moduł ściśliwości objętościowej - K i moduł ścinania - G :

$$K = \frac{(3\lambda + 2\mu)}{3} = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \quad \text{oraz} \quad G = \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (2.29)$$

Z rozważań fizycznych wynikają następujące ograniczenia na wprowadzone stałe materiałowe, zob. np. Eringen (1971):

$$\begin{aligned} 0 < \mu &\leq \infty, & -\frac{2}{3}\mu < \lambda &\leq \infty, \\ 0 < E &\leq 3\mu, & -1 < \nu &\leq \frac{1}{2}, \\ 0 < K &\leq \infty, & 0 < G &\leq \infty. \end{aligned}$$

Jeśli na materiał narzucimy warunek nieściśliwości otrzymamy, dodatkowe ograniczenia na stałe materiałowe:

$$\nu = \frac{1}{2}, \quad K = \infty, \quad \lambda = \infty, \quad (2.30)$$

i w takim przypadku zachowanie się materiału można opisać jedną stałą materiałową E , μ lub G .

W przypadku małych odkształceń słuszne jest założenie $\nabla \mathbf{u} \ll 1$ z którego wynika równoważność:

$$\mathbf{d} \approx \dot{\boldsymbol{\epsilon}}. \quad (2.31)$$

Wykorzystajmy zależność (2.31) i w lokalnej zasadzie zachowania energii, zob. (2.12) wprowadźmy zamiast gradientu prędkości $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$. Otrzymujemy w ten sposób nową postać bilansu energii dla liniowego ośrodka sprężystego:

$$\rho \dot{\psi} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}. \quad (2.32)$$

W teorii sprężystości zakłada się, że gęstość energii wewnętrznej ψ jest analityczną funkcją składowych tensora odkształcenia $\boldsymbol{\epsilon}$, stąd:

$$\dot{\psi}(\boldsymbol{\epsilon}) = \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon_{ij}} \dot{\epsilon}_{ij}. \quad (2.33)$$

Porównując ze sobą wyrażenia (2.12) i (2.33) otrzymamy, że dla dowolnego symetrycznego tensora odkształcenia $\dot{\epsilon}_{ij}$ spełniona jest równość:

$$\sigma_{ij} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon_{ij}}. \quad (2.34)$$

Jeśli ośrodek jest jednorodny ($\rho = \text{const}$), to naprężenia $\boldsymbol{\sigma}$ możemy opisać wzorem:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial(\rho\psi)}{\partial \epsilon_{ij}}, \quad (2.35)$$

gdzie wielkość opisywana przez $\rho\psi$ jest energią odkształcenia na jednostkę objętości i stanowi potencjał dla naprężeń. Zakładając postać funkcji opisującej energię odkształcenia w formie:

$$\psi = \frac{\lambda}{2}(tr\boldsymbol{\epsilon})^2 + \mu(tr^2\boldsymbol{\epsilon}), \quad (2.36)$$

po zróżniczkowaniu względem $\boldsymbol{\epsilon}$ otrzymamy prawo Hooke'a w formie równania (2.27). Ze względu na założoną liniowość geometryczną i fizyczną, zależność konstytutywna dla procesów izotermicznych lub adiabatycznych może być wyrażona w liniowej sprężystości m.in. na następujące, równoważne sobie sposoby:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \\ \sigma_{ij} &= \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad \psi = \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}, \\ \sigma^{\nabla}_{ij} &= c_{ijkl} d_{kl}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

gdzie tensor stałych sztywności c_{ijkl} jest dodatnio określony i nieosobliwy. Pochodna $\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}$ może być dowolną pochodną obiektywną, np. Zaremby-Jaumana (1911), Oldroyda (1950), Truesdella (1952) i in. Stałe sztywności c_{ijkl} są niezależne od stanu naprężenia i odkształcenia, choć w ogólnym przypadku mogą zależeć od temperatury.

2.2 Anizotropowa sprężystość

Anizotropowa sprężystość w przypadku małych odkształceń była przedmiotem zainteresowania wielu autorów, zob. np. Green i Adkins (1960), Smith i in. (1963), Spencer i Rivlin (1962), Spencer i Rivlin (1965), Eringen (1971), Teodosiu (1982), Christensen (1994), Horgan i Baxter (1996), Ting i Lee (1997), Ting (1999). Bazują one na funkcji wielomianowej nieredukowalnych niezmienników tensorowych. Inne podejście do anizotropii materiału polega na użyciu koncepcji tensorów strukturalnych, których idea polega na opisie anizotropii materiału poprzez izotropową funkcję tensora odkształcenia i innych niezmienniczych tensorów, które odzwierciedlają symetrię materiału, zob. np. Boehler (1987), Betten (1991), Boehler i in. (1994), Zheng (1994), Hackl (1999). Trójwymiarowe uogólnienie liniowej sprężystości opiera się zwykle na możliwości dekompozycji tensorów drugiego rzędu na część kulistą i dewiatorową. Na tej podstawie Mehrabadi i Cowin (1990) oraz Sutcliffe (1992) wyprowadzili tensory definiujące stany własne anizotropowych symetrii jak również ich niezmienniki. Sadegh i Cowin (1991) położyli szczególny nacisk na ortotropię, a dodatkowe warunki narzucane na funkcję energii wewnętrznej dla kilku grup symetrii są podane w pracy Mehrabadi i in. (1993). Na bazie liniowej teorii sprężystości otrzymano wiele cennych wyników teoretycznych. Na szczególne podkreślenie zasługuje tu płaski stan odkształcenia i naprężenia dzięki którego prostocie udało się osiągnąć wiele doskonałych wyników. Mimo wątpliwości co do zasadności jej stosowania w niektórych przypadkach modelowania sprężystego zachowania się kryształów, stanowi do dziś podstawowe narzędzie używane przez fizyków do kontynualnego modelowania zachowania się struktur krystalicznych, zob. Hull (1965), Nabarro (1967), Hirth i Lothe (1982), O'Reilly

(1989), Yu i in. (1992), Freund (1999), Ting (2000), Hýtch i in. (2003). Dzięki teorii sprężystości możliwe było określenie, z dość dobrą dokładnością, pól naprężeń i odkształceń wokół defektów sieci, energii zdefektowanej struktury, sił oddziaływań między defektami i innych ważnych cech struktur krystalicznych. Siłą tego modelu jest jego prostota, lecz w wielu przypadkach staje się ona jego słabą stroną, gdyż zbyt prosty model daje wyniki nieadekwatne do rzeczywistego zachowania się kryształów. Ograniczenia narzucane przez model nastęrczają wiele trudności matematycznych np. przy badaniu właściwości rdzeni dyslokacji czy też traktowanie kryształu jako materiału izotropowego. Zaniedbując wyraźną na poziomie nanometrycznym różnicę w zachowaniu się kryształu przy rozciąganiu i ściskaniu model liniowy nie jest w stanie np. przewidzieć przyrostu objętości materiału wokół rdzenia dyslokacji krawędziowej, zob. Horodon i Averbach (1961), Hirth i Lothe (1982), Dłużewski i in. (2001), Dłużewski i in. (2004) czy też pochodzących od dyslokacji napięć powierzchniowych deformujących cienkie kryształy, np. Spaepen (2000), Dłużewski i in. (2002a).

2.3 Symetria materiału

Teoria niezmienników odgrywa niezwykle ważną rolę w wielu dziedzinach matematyki i fizyki, np. w mechanice ciał odkształcalnych czy mechanice kwantowej. Teoria niezmienników algebraicznych w XIX wieku była szybko rozwijającą się dziedziną wiedzy i była ona przedmiotem wielu prac, np. Grace i Young (1903), Elliot (1913), Weitzenböck (1923), Weyl (1939). Zastosowanie niezmienników w mechanice ciała odkształcalnego datuje się od prac Reiner (1945), Rivlin (1948a), Rivlin (1948b), Oldroyd (1950), Rivlin (1955), Green i Adkins (1957), Noll (1958). Smith i Rivlin (1958) wykazali, że właściwa energia sprężysta ψ jest niezmiennicza względem obrotów \mathcal{O}^+ należących do grupy właściwych ortogonalnych tensorów, jeśli zależy ona od odkształcenia ciała poprzez określoną liczbę parametrów skalarnych I_1, I_2, \dots, I_n , które są niezmiennie względem obrotu \mathcal{O}^+ :

$$\psi = \psi(I_1, I_2, \dots, I_n). \quad (2.38)$$

Jeśli założymy funkcję ψ w postaci wielomianu zależnego od składowych tensora odkształcenia Greena \mathbf{E} możemy wówczas równoznacznie wyrazić ją jako funkcję niezmienników \mathbf{E} , zob. Smith i Rivlin (1958), Smith (1962). Otrzymamy w ten sposób rozszerzony zestaw niezmienników opisujących energię kryształu o symetrii, np. kubicznej czy heksagonalnej, które są typowymi strukturami dla wielu powszechnie spotykanych związków chemicznych. Dla często spotykanego w praktyce inżynierskiej przypadku izotropii transwersalnej, za Ericksenem i Rivlinem (1954), możemy napisać, że energia odkształcenia ciała (preferowana oś - x_3) zależy od:

$$\psi = \psi(I_1, I_2, I_3, E_3, E_4^2 + E_5^2), \quad (2.39)$$

gdzie:

$$I_1 = \operatorname{tr} \mathbf{E} = E_1 + E_2 + E_3, \quad (2.40)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \left[(\operatorname{tr} \mathbf{E})^2 - \operatorname{tr} \mathbf{E}^2 \right] = E_1 E_2 + E_2 E_3 + E_1 E_3 - \frac{1}{4} (E_4^2 + E_5^2 + E_6^2), \quad (2.41)$$

$$I_3 = \det \mathbf{E} = E_1 E_2 E_3 + \frac{1}{4} (E_4 E_5 E_6 - E_1 E_4^2 - E_2 E_5^2 - E_3 E_6^2), \quad (2.42)$$

są niezmiennikami podstawowymi tensora \mathbf{E} , a E_1, E_2, \dots, E_6 oznaczają składowe tensora odkształcenia w notacji Voigta. Materiały izotropowe w przeciwieństwie do anizotropowych nie posiadają wyróżnionych kierunków w stanie nieodkształconym, dlatego energię odkształcenia takich ciał możemy wyrazić jako funkcję jedynie niezmienników podstawowych:

$$\psi = \psi(I_1, I_2, I_3). \quad (2.43)$$

2.4 Skończone deformacje

Pojęcie skończonych deformacji, nierozzerwalnie wiążące się z nieliniową sprężystością, było przedmiotem zainteresowania badaczy już w XIX w. Spośród pionierskich teorii dotyczących skończonych deformacji zacytować można prace Fingera (1894), Cosseratów (1896; 1909), Brillouina (1925; 1928), Murnagana (1937). Jednakże wyodrębnione z klasycznej teorii sprężystości zostało zupełnie niedawno, głównie na skutek znaczących osiągnięć w latach 40, 50 i 60-tych XX wieku związanych z pracami teoretycznymi Truesdella (1952), Doyle'a i Ericksena (1956), Smitha i Rivlina (1958) podsumowującymi i krytycznie oceniającymi stan dotychczasowej wiedzy. Wtedy to intensywne badania nad zachowaniem się gumy i materiałów polimerowych w zastosowaniach inżynierskich nadały impet tej dziedzinie, która szybko znalazła zastosowanie do analizy deformacji nie tylko gum i elastomerów ale również w ogólnym przypadku materiałów zdolnych do dużych odkształceń sprężystych, np. tworzyw sztucznych (polietylen PE, polipropylen PP), tkanek biologicznych i wielu innych. Spośród wielu prac poświęconych tej dziedzinie wiedzy można tu wymienić najważniejsze z nich, takie jak: Green i Zerna (1954, 1968, 1992), Green i Adkins (1960), Truesdell i Noll (1965), Green i Adkins (1970), Wang i Truesdell (1973), Chadwick (1976), Marsden i Hughes (1988, 1994), Ogden (1984, 1997), Ciarlet (1988), Antman (1995).

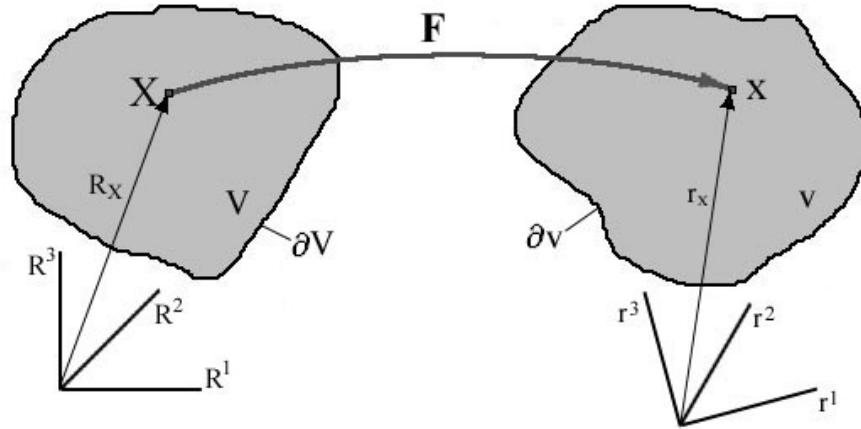
Przyjmijmy do rozważań dowolny otwarty podzbiór \mathcal{B} trójwymiarowej przestrzeni Euklidesowej \mathcal{E}^3 . Punkty leżące w obrębie zbioru \mathcal{B} nazywane są punktami materialnymi. Przy użyciu jednoparametrowej rodziny odwzorowań $x_t : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{E}^3$ można określić przekształcenie punktów $X \in \mathcal{B}$ w punkty $x \in \mathcal{E}^3$ takie, że:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t), \quad (2.44)$$

oraz odwzorowanie odwrotne:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t), \quad (2.45)$$

zob. Truesdell i Toupin (1960). Stopień różniczkowalności funkcji (2.44) i (2.45) jest odpowiedni dla dalszych przekształceń. W przypadku specyfikowania czasu wyróżnimy dwie konfiguracje zbioru \mathcal{B} : początkową (Lagrange'a) dla $t = 0$, oraz aktualną (Eulera) dla czasu t , zob. rys. (2.2). Oprócz dwóch wymienionych konfiguracji ciała, na dalszych eta-



Rysunek 2.2: Układ współrzędnych.

pach analizy ruchu ciała wprowadza się do opisu dodatkowe konfiguracje pośrednie, np. konfigurację lokalnie odciążoną $\hat{\mathbf{x}}$, będącą lokalną konfiguracją beznapreżeniową, zob. rys. (3.2). Deformację ciała możemy opisywać w oparciu o konfigurację początkową \mathbf{X} (opis Lagrange'a - materialny) lub w oparciu o konfigurację aktualną \mathbf{x} (opis Eulera - przestrzenny). Każdemu punktowi ciała \mathcal{B} przypisany jest wektor wodzący, który w globalnym, kartezyjskim układzie współrzędnych Z dla punktu X przyjmuje postać:

$$\mathbf{R}_X = R^I \mathbf{Z}_I, \quad I = 1, 2, 3; \quad (2.46)$$

gdzie R^I oznacza i -tą współrzędną punktu X w układzie z bazą \mathbf{Z}_I . Dla punktu x wektor wodzący ma analogiczną postać:

$$\mathbf{r}_x = r^i \mathbf{Z}_i, \quad i = 1, 2, 3; \quad (2.47)$$

gdzie r^i oznacza współrzędną punktu x w bazie \mathbf{Z}_i . Po zróźniczkowaniu równań (2.44) i (2.45) w odpowiednim układzie współrzędnych otrzymamy gradient deformacji \mathbf{F} zdefiniowany jako:

$$\mathbf{F} \stackrel{df}{=} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (2.48)$$

i jego odwrotność:

$$\mathbf{F}^{-1} \stackrel{df}{=} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}}. \quad (2.49)$$

Gradient deformacji możemy jednoznacznie rozłożyć w polibazach:

$$\mathbf{F} = F^{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = F^i_j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}^j = F_i^j \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}_j = F_{ij} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j. \quad (2.50)$$

Wektor przemieszczenia \mathbf{u} , będący różnicą wektorów wodzących \mathbf{r}_x i \mathbf{R}_X określony jest jako:

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}_x - \mathbf{R}_X. \quad (2.51)$$

Gradient deformacji i jego odwrotność mogą być wyrażone poprzez odpowiednie gradienty przemieszczenia w konfiguracji początkowej i aktualnej jako:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial(\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) + \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \text{GRAD } \mathbf{u} + \mathbf{1}, \quad (2.52)$$

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{\partial(\mathbf{x} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{1} - \text{grad } \mathbf{u}. \quad (2.53)$$

Rezygnując w ten sposób z ograniczeń liniowej teorii sprężystości, dzięki którym wyprowadzono trzy równoważne sobie formuły (2.37) otrzymamy w efekcie nierównoważne związki konstytutywne, będące trzema nowymi modelami sprężystego zachowanie się ciała, za Truesdell'em zwanymi: *sprężystością*, *hipersprężystością* i *hiposprężystością*.

Definicja 1 Materiał jest *sprężysty* (lub też sprężysty w sensie Cauchy'ego), jeśli posiada jednorodny i wolny od naprężeń *stan naturalny*. Dodatkowo w otoczeniu tego stanu zachodzi jednoznaczna zależność między tensorem naprężenia Cauchy'ego $\boldsymbol{\sigma}$ a tensorem deformacji Cauchy'ego \mathbf{c} :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}(\mathbf{c}). \quad (2.54)$$

Przy ograniczeniu się tylko do ciał izotropowych, zgodnie z twierdzeniem o reprezentacji funkcji izotropowych, związek (2.54) możemy przedstawić w formie trójmianu kwadratowego:

$$\boldsymbol{\sigma} = a_0 \mathbf{I} + a_1 \mathbf{c} + a_2 \mathbf{c}^2, \quad (2.55)$$

gdzie a_0, a_1, a_2 są dowolnymi funkcjami skalarnymi, których postać specyfikuje właściwości sprężyste ciała. Dla ciał anizotropowych naprężenie $\boldsymbol{\sigma}$ zależy dodatkowo od bazy układu współrzędnych w stanie naturalnym \mathbf{G}_K .

Definicja 2 Materiał jest *hipersprężysty* (lub też sprężysty w sensie Greena), jeśli istnieje dla niego funkcja właściwej (na jednostkę objętości) energii odkształcenia ψ stanowiąca potencjał dla naprężeń. Potencjał ψ jest analityczną funkcją tensora odkształcenia $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ odniesionego do jednorodnego, beznapięciowego stanu naturalnego. W przypadku procesu deformacji sprężystej na bilans energii składa się przyrost energii odkształcenia równoważony pracą wykonaną przez naprężenia:

$$\rho \dot{\psi} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}, \quad (2.56)$$

gdzie ρ jest gęstością masy w konfiguracji aktualnej, a \mathbf{d} jest tensorem prędkości deformacji, zob. (2.10).

Definicja 3 Materiał jest *hiposprężysty*, jeśli składowe prędkości naprężeń zależą od prędkości deformacji:

$$\boldsymbol{\sigma}^\nabla = \mathbf{f}(\mathbf{d}), \quad (2.57)$$

gdzie $\boldsymbol{\sigma}^\nabla$ jest dowolną, obiektywną pochodną naprężenia, np. Zaremby-Jaumana, Oldroyda, Truesdella, a tensor \mathbf{d} jest tensorem prędkości deformacji. Aby materiał hiposprężysty można było traktować jako sprężysty prędkość zmiany naprężenia powinna być jednorodną liniową funkcją składowych prędkości deformacji, stąd:

$$\boldsymbol{\sigma}^\nabla = \mathbf{C} : \mathbf{d}. \quad (2.58)$$

Tensor czwartego rzędu \mathbf{C} może zależeć od tensora naprężenia ale nie zależy od prędkości deformacji \mathbf{d} .

Pierwsza z przedstawionych definicji opiera się na podejściu Cauchy'ego i przyjmuje, że stan naturalny, w którym wszystkie składowe tensorów naprężenia i odkształcenia są równe zeru jest stanem równowagi termodynamicznej. Zakłada jednoznaczność zależność między naprężeniem i odkształceniem, a po ustaniu działania obciążenia ciało wraca do stanu naturalnego. Druga z podanych definicji opiera się na podejściu Greena. W warunkach adiabatycznych gdy spełnione jest prawo bilansu (2.56) temperatura T nie pojawia się jawnie, ale równie dobrze ψ może istnieć w innych warunkach termodynamicznych i koniecznym staje się wtedy wyrażenie jej jako funkcji nie tylko składowych odkształcenia ale i temperatury T . Stan odniesienia definiuje się jako wolny od naprężeń przy stałej temperaturze T_0 a składowe odkształcenia określa się względem tego stanu. W przypadku odkształceń skończonych na funkcję energii ψ narzuca się dodatkowe warunki wynikające np. z typu struktury krystalicznej i aksjomatów niezmienniczości. Aby spełnić zasadę obiektywności eliminujemy zależność funkcji energii odkształcenia ψ od ruchu sztywnego i obrotu ciała oraz zmiany układu współrzędnych. Funkcja ψ zależy więc od położenia cząstki ciała w stanie naturalnym \mathbf{X} , tensora będącego miarą deformacji ciała (np. tensory deformacji Cauchy-Greena \mathbf{C} , \mathbf{c} lub tensory odkształcenia Lagrange'a \mathbf{E} i Eulera \mathbf{e}) oraz w przypadku anizotropii dodatkowo od bazy lokalnego układu współrzędnych \mathbf{G}_K :

$$\psi = \psi_1(\mathbf{X}, \mathbf{G}_K, \mathbf{C}) = \psi_2(\mathbf{X}, \mathbf{G}_K, \mathbf{c}) = \psi_3(\mathbf{X}, \mathbf{G}_K, \mathbf{E}) = \psi_4(\mathbf{X}, \mathbf{G}_K, \mathbf{e}). \quad (2.59)$$

Warto zwrócić tu uwagę na fakt, że w literaturze tematu opartej na założeniach termodynamicznych termin *sprężystość* odnosi się zwykle do hipersprężystości, zob. Ogden (1984), gdyż z punktu widzenia termodynamiki poddaje się często w wątpliwość poprawność i sens istnienia materiałów sprężystych w sensie Cauchy'ego ze względu na dopuszczalną produkcję i anihilację energii przez ciało na zamkniętych cyklach deformacji. Jest to powodem, dla którego materiały hipersprężyste znajdują coraz to szersze zastosowanie, a pod względem aplikacyjnym wychodzą poza ramy tradycyjnie już przyjętych dziedzin zastosowania takich jak gumy i materiały gumopodobne, zob. np. Ortiz i Philips (1999), Abeyarante i in. (2001), Fu i Ogden (2001), Dłużewski i in. (2004). Trzecia definicja oparta jest na koncepcji przyrostów naprężenia, która definiuje materiał "pamiętający" stan, który właśnie minął w przeciwieństwie do innych modeli pamiętających jedynie swój stan naturalny. Ponieważ pochodna naprężenia po czasie $\partial\sigma_{ij}/\partial t$ ani też pochodna materialna $d\sigma_{ij}/dt$ nie są równe zeru dla ciała poruszającego się jako bryła sztywna (w przeciwieństwie do dobrze określonego tensora prędkości deformacji d_{ij}), nie mogą służyć jako obiektywna miara przyrostu naprężenia. Jest to powód dla którego wprowadza się

pojęcie pochodnej obiektywnej, która spełnia warunek niezmienniczości względem obrotów bryły sztywnej. Istnieje kilka różnych definicji pochodnej obiektywnej naprężenia, zob np. Jaumann (1911), Oldroyd (1950), Truesdell (1955), Cotter i Rivlin (1955) ale różnice te nie są istotne przy formułowaniu prawa konstytutywnego w postaci (2.58). Sprężystość, hiper- i hiposprężystość nie są wzajemnie równoważne sobie jakkolwiek dowodzi się, że izotropowy materiał hipersprężysty jest szczególnym przypadkiem materiału sprężystego w sensie Cauchy’ego, a ten z kolei jest szczególnym przypadkiem materiału hiposprężystego, zob. Eringen (1962). Równania konstytutywne w skończonych deformacjach dla kilku szczególnych przypadków anizotropii materiału można znaleźć w pracach np. Pipkina (1959), Boehlera (1987), Smitha (1994), Elata (1994).

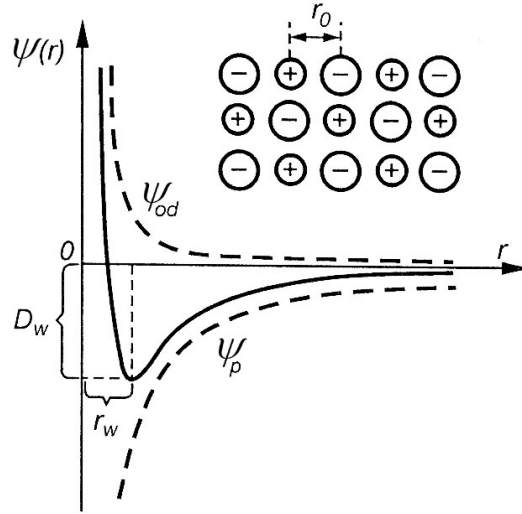
2.5 Hipersprężystość

Hipersprężyste modele zachowania się ciał znajdują coraz to więcej zastosowań praktycznych, np. do modelowania zachowania tkanek miękkich w biomechanice, deformujących się kryształów. Mechaniczne właściwości ciał hipersprężystych opisywane są poprzez funkcję właściwej energii odkształcenia - potencjału dla naprężeń. Jedną z często podkreślanych w literaturze zalet hipersprężystości, decydującą o zastosowaniu tego, a nie innego modelu jest, np. łatwość modelowania zjawiska umacniania się materiałów przy dużych deformacjach poprzez zadanie odpowiedniej postaci potencjału sprężystego. W przypadku gum zjawisko umocnienia związane jest ściśle z budową wewnętrzną tych materiałów składających się z bezładnie ułożonych mikrowłókien, które zaczynają stawiać duży opór w momencie osiągnięcia przez nie maksymalnego rozciągnięcia. Spośród wielu modeli opisujących to zjawisko można dla przykładu podać modele, np. Ogden (1984), Gent (1996), Horgan i Saccomandi (2002). W przypadku tych materiałów, przy konstruowaniu postaci funkcji energii odkształcenia wykorzystuje się zwykle fenomenologiczne podejście mechaniki kontinuum i używa się niezmienników odkształcenia. Nieco inaczej jest w przypadku ciał o budowie krystalicznej, gdzie zgodnie z rozkładem potencjału oddziaływań cząsteczkowych w funkcji odległości atomowych, patrz Rys.(2.3), sztywność materiału zmniejsza się przy rozciąganiu na skutek osłabienia sił oddziaływań międzyatomowych a wzmacnia na skutek wzrostu sił odpychających atomy przy ściskaniu. Wyraźnie widoczna, w tym przypadku asymetria w zachowaniu się kryształu przy ściskaniu i rozciąganiu powoduje że w wielu wypadkach przyjmuje się zależność konstytutywna materiału hipersprężystego opartą na potencjałach atomowych opisujących oddziaływania międzyatomowe, zob. Cutino i Ortiz (1992), Ortiz (1996), Tadmor i in. (1996), Zhu i in. (2004). W takich przypadkach, funkcja energii odkształcenia opisująca stan ciała jest zwykle kwadratową funkcją odległości międzyatomowych:

$$\psi = \psi(r^2). \quad (2.60)$$

Moc naprężeń na jednostkę objętości, dla materiałów sprężystych w sensie Cauchy’ego, może być wyrażona za pomocą I-szego tensora Pioli-Kirchhoffa \mathbf{T} , zob. Ogden (1984):

$$\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{f}(\mathbf{F}) : \dot{\mathbf{F}}, \quad (2.61)$$



Rysunek 2.3: Zależność energii potencjalnej wiązania ψ w zależności od wzajemnej odległości r cząstek w kryształ. D_w - energia wiązania, r_w - odległość równowagowa wiązania, ψ_{od} , ψ_p - składowe potencjału: odpychająca i przyciągająca.

gdzie $\mathbf{f}(\mathbf{F})$ oznacza funkcję tensorową argumentu tensorowego opisującą odpowiedź materiału sprężystego w sensie Cauchy'ego. W ogólności nie istnieje funkcja $\psi(\mathbf{F})$ taka, że spełniony jest warunek:

$$\dot{\psi} = \mathbf{f}(\mathbf{F}) : \dot{\mathbf{F}}, \quad (2.62)$$

gdyż wyrażenie $\mathbf{f}(\mathbf{F}) : d\mathbf{F}$ nie jest poprawną różniczką. W przypadku kiedy istnieje taka skalarna funkcja ψ tensora gradientu deformacji \mathbf{F} , że:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}}, \quad (2.63)$$

i jeśli składowe $\dot{\mathbf{F}}$ są niezależne dla materiału bez narzuconych ograniczeń, porównując (2.62) z (2.63) możemy zapisać:

$$\mathbf{f}(\mathbf{F}) = \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}}, \quad (2.64)$$

Potencjał ψ reprezentuje gęstość energii deformacji sprężystej ciała na jednostkę objętości w ten zwany jest często funkcją energii odkształcenia, por. Ogden (1984). Pochodna potencjału sprężystego $\dot{\psi}$ opisuje prędkość zmiany energii odkształcenia lub inaczej moc naprężeń na jednostkę objętości w konfiguracji odniesienia. Całkowita energia sprężysta zmagazynowana przez ciało wynosi:

$$\int_V \psi \, dV = \int_v \psi \det \mathbf{F}^{-1} \, dv. \quad (2.65)$$

Jeśli dla danego ciała istnieje potencjał sprężysty zwany jest on *sprężystym w sensie Greena* lub *hipersprężystym*. Właściwości mechaniczne takiego ciała reprezentowane są

poprzez postać potencjału sprężystego ψ , a I-szy tensor Pioli-Kirchhoffa związany jest z gradientem deformacji wzorem:

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}}. \quad (2.66)$$

W przypadku zdefiniowania ψ na jednostkę masy prawą stronę wzoru (2.66) należy przemnożyć przez skalarną gęstość ρ_0 . Jeśli dla materiału hipersprężystego moc naprężeń opisana jest wzorem (2.63), to wynika z tego, że praca wykonana na drodze deformacji od konfiguracji startowej B_0 (stan naturalny - gradient deformacji jest równy $\mathbf{F}_0 = \mathbf{I}$) do stanu aktualnego opisanego gradientem deformacji \mathbf{F} , jest równa:

$$\psi(\mathbf{F}) - \psi(\mathbf{F}_0) = \int_{\mathbf{F}_0}^{\mathbf{F}} \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} : d\mathbf{F}^T. \quad (2.67)$$

Zmiana energii jest więc niezależna zarówno od prędkości deformacji, jak również od ścieżki deformacji pomiędzy konfiguracjami opisanymi przez gradient deformacji \mathbf{F}_0 i \mathbf{F} . Zmiana energii odkształcenia zależna jest jedynie od różnicy wartości potencjału sprężystego w stanie naturalnym i aktualnym, analogicznie jak w przypadku klasycznej energii potencjalnej. Jednocześnie naprężenie nominalne \mathbf{T} i gradient deformacji \mathbf{F} skoniugowane są ze sobą poprzez potencjał sprężysty, zob. (2.66). Moc naprężeń może być zapisana za pomocą dowolnej pary naprężenia i odkształcenia skoniugowanych ze sobą, np:

$$\mathbf{T} : \dot{\mathbf{F}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(1)} : \dot{\mathbf{U}}, \quad (2.68)$$

gdzie $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(1)}$ oznacza tensor naprężenia skoniugowany z miarą odkształcenia Biota - $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(1)} = (\mathbf{U} - \mathbf{1})$, zob. (3.5). Możemy zatem zapisać, że:

$$\dot{\psi} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(1)} : \dot{\mathbf{U}}. \quad (2.69)$$

Całkując powyższe równanie otrzymamy, że potencjał sprężysty jest niezależny od sztywnego obrotu ciała \mathbf{R} , a jest funkcją jedynie tensora rozciągnięcia \mathbf{U} :

$$\psi(\mathbf{F}) = \psi(\mathbf{U}). \quad (2.70)$$

Jeśli dla materiału izotropowego moc naprężeń $\dot{\psi}$ nie zależy od obrotu ciała \mathbf{R} , jest więc wielkością obiektywną spełniającą warunek:

$$\psi(\mathbf{QF}) = \psi(\mathbf{F}). \quad (2.71)$$

Warunek obiektywności wymaga spełnienia równania (2.71) dla wszystkich właściwych tensorów ortogonalnych \mathbf{Q} i dowolnie przyjętej właściwej deformacji \mathbf{F} . W przypadku gdy $\mathbf{F} = \mathbf{I}$ i przy takim wyborze konfiguracji odniesienia, że odpowiada ona stanowi naturalnemu otrzymamy, że:

$$\psi(\mathbf{QI}) = \psi(\mathbf{I}) = \psi_0, \quad (2.72)$$

stąd opis stanu ciała staje się niejednoznaczny, gdyż tracimy informację o obrocie ciała. Aby uniknąć tej niejednoznaczności możemy użyć lagranżowskich tensorów odkształcenia $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$:

$$\boldsymbol{\sigma}^{(m)} = \frac{\partial \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(m)})}{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(m)}}, \quad (2.73)$$

gdzie m oznacza parametr przyjętej miary odkształcenia, zob. (3.5). Wartość energii sprężystej zmagazynowanej przez ciało nie zależy od wyboru miary odkształcenia, gdyż:

$$\psi_1(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(m)}) = \psi_2(\mathbf{U}). \quad (2.74)$$

Potencjał sprężysty ψ jest funkcją sprzęgającą naprężenie $\mathbf{T}^{(m)}$ z odkształceniem $\boldsymbol{\epsilon}^{(m)}$ i tak np. I-szy tensor Pioli-Kirchhoffa \mathbf{T} jest sprzężony (przez pracę) z gradientem deformacji \mathbf{F} , zob. (2.66). Tensory naprężenia Cauchy'ego $\boldsymbol{\sigma}$ i Kirchhoffa $\boldsymbol{\tau}$, opisujące stan naprężenia w konfiguracji aktualnej i w konfiguracji odniesienia, otrzymamy korzystając z relacji wiążących je z I-szym tensorem Pioli-Kirchhoffa:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F} = \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^T. \quad (2.75)$$

Zakładając postać funkcji opisującej energię odkształcenia ψ , jako funkcję tensora odkształcenia $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ należy zapewnić dostatecznie dobrą zgodność wyników obliczeń z eksperymentem dla możliwie najszerszej gupy materiałów i różnych kombinacji obciążenia. Dla uproszczenia modelu i ograniczenia zakresu wymaganych do weryfikacji doświadczalnej modelu badań dokonuje się wielu założeń upraszczających, np:

- zakłada się jednorodność materiału, parametry materiałowe wyznaczane są na podstawie badań próbek jednorodnych, ciała niejednorodne są opisywane jako kombinacja części lokalnie jednorodnych,
- wyznacza się symetrię materiału, która pozwala na ograniczenie liczby niezależnych parametrów materiałowych co zmniejsza pracochłonność badań eksperymentalnych potrzebnych do ich wyznaczenia a jednocześnie upraszcza się opis matematyczny zachowania ciała,
- wprowadza się ograniczenia wewnętrzne, np. założenie nieściśliwości materiału, które dodatkowo upraszczają opis matematyczny ciała.

W przypadku przyjęcia założenia o jednorodności materiału, energia odkształcenia ψ , która w ogólnym przypadku ma postać (2.59), nie zależy od wyboru konfiguracji odniesienia \mathbf{X} . Jeśli dodatkowo założymy, że materiał jest izotropowy, to możemy pominąć zależność od bazy wektorowej \mathbf{G}_K . Możemy zatem zapisać, że energia odkształcenia izotropowego, jednorodnego ciała sprężystego zależy jedynie od lagranżowskiego tensora odkształcenia:

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}). \quad (2.76)$$

Przyjmując za miarę deformacji ciała różne tensory odkształcenia otrzymamy różne postacie równania łączącego naprężenie z odkształceniem:

- postać Kelvina-Cosseratów otrzymujemy jeśli założymy, że energia odkształcenia ψ jest analityczną funkcją tensora odkształcenia Greena \mathbf{E} , stąd otrzymamy:

$$\frac{d}{dt} \psi(\mathbf{E}) = \frac{\partial \psi(\mathbf{E})}{\partial E_{KL}} \frac{dE_{KL}}{dt}, \quad (2.77)$$

Po wykorzystaniu zależności:

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} = \frac{\rho}{\rho_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}}, \quad (2.78)$$

gdzie \mathbf{S} oznacza II tensor Pioli-Kirchhoffa i po podstawieniu (2.77) do bilansu energii (2.12) otrzymamy:

$$\left(S_{KL} - \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{E})}{\partial E_{KL}} \right) \frac{\partial E_{KL}}{\partial t} = 0. \quad (2.79)$$

Ze względu na symetrię wyrażenia w nawiasie i niezależność od prędkości deformacji otrzymamy związek konstytutywny postaci:

$$S_{KL} = \rho_0 \frac{\partial \psi(\mathbf{E})}{\partial E_{KL}}; \quad (2.80)$$

- postać Boussinesque'a otrzymamy jeśli tensor naprężenia Cauchy'ego $\boldsymbol{\sigma}$ wyrazimy poprzez drugi tensor Pioli-Kirchhoffa \mathbf{S} :

$$\sigma_{ij} = \frac{\rho}{\rho_0} F_{iK} S_{KL} F_{jL} = \rho F_{iK} \frac{\partial \psi(\mathbf{E})}{\partial E_{KL}} F_{jL}; \quad (2.81)$$

- postać Neumanna-Kirchhoffa otrzymamy gdy przyjmiemy, że energia odkształcenia ψ jest analityczną funkcją gradientu deformacji \mathbf{F} :

$$\sigma_{ij} = \frac{\rho}{\rho_0} T_{iK} F_{jK} = \rho \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial F_{iK}} F_{jK}, \quad (2.82)$$

gdzie \mathbf{T} oznacza I tensor Pioli-Kirchhoffa;

- postać Hamela otrzymamy dla energii odkształcenia będącej funkcją odwrotności gradientu deformacji \mathbf{F}^{-1} :

$$\sigma_{ij} = -\rho \frac{\partial \psi(\mathbf{F}^{-1})}{\partial F^{-1}_{K,i}} F^{-1}_{K,j}; \quad (2.83)$$

2.5.1 Funkcja energii odkształcenia

W literaturze można znaleźć wiele specyficznych postaci energii odkształcenia opracowanych specjalnie w celu opisu zachowania się danego materiału. Często są to potencjały dedykowane określone typowi deformacji i warto tu dodatkowo nadmienić, że większość z nich dotyczy materiału izotropowego. Próby opisu zachowania się materiałów anizotropowych ograniczane są zwykle do transversalnej izotropii z jednym lub dwoma preferowanymi kierunkami, które odpowiadają często spotykanym w praktyce inżynierskiej kompozytom z włókien szklanych czy węglowych oraz tkankom biologicznym. Można tu wymienić dla przykładu prace Smitha i Rivlina (1958), Greena i Adkinsa (1960,1970), Spencera (1972,1984), Humpreya (1995) czy też Ogdena (1997).

Pierwsze prace, w których przeprowadzono rozważania nad energią sprężystą deformowanego kryształu datują się na I-szą połowę XX-tego wieku. Można tu podać dla przykładu pionierskie prace Borna (1940) oraz Borna i Huanga (1956). Początkowo energia deformującego się kryształu wyznaczana była przy użyciu modelu dyskretnego oddziaływań międzyatomowych. Born zauważył, że anizotropowe kryształy o strukturze kubicznej (kryształ monoatomowy - komórka prymitywna) spełniają dodatkowy warunek, zaproponowany przez Cauchy'ego, dotyczący symetrii stałych sztywności:

$$c_{ijkl} = c_{ikjl}. \quad (2.84)$$

Spełnianie powyższego warunku redukuje ogólną ilość niezależnych stałych sztywności z 21 do 15. Większość kryształów wieloatomowych niestety nie wykazuje takiej symetrii, choć można podać kilka wyjątków np. *sole halogenków*. Wielu badaczy np. Polanyi (1921), Zwicky (1923), Born i Furth (1940), Girifalco i Weizer (1959), Thurston (1964), Tyson (1966), Lincoln i in. (1967), Leamy (1967), Milstein (1971), Macmillan i Kelly (1972) używało potencjałów atomowych (np. *Morse'a*, *Borna-Mayera*, *Barafa*, *Tersoffa*) czy też pseudopotencjałów empirycznych (*Lennarda-Jones'a 6-12*) do modelowania sprężystego zachowania się kryształów idealnych pod obciążeniem. Starano się w ten sposób wyznaczyć teoretyczne wartości wytrzymałości na rozciąganie, ściskanie, współczynnik sztywności objętościowej czy też badano proces przemian fazowych struktury. Z drugiej strony potencjały używane są z powodzeniem do modelowania efektów sprężystych związanych z występowaniem w strukturze krystalicznej defektów budowy krystalicznej, np. defekty punktowe, zob. Johnson (1964), Doyama i Cotteril (1965); dyslokacje, zob. Cotteril i Doyama (1966), Gehlen i in. (1968) czy też badania asymetrii występującej przy ścisaniu i rozciąganiu kryształów, zob. Drechsler i Nicholas (1967). Zalety takiego podejścia to:

- modele oddziaływań atomowych mimo stosunkowo prostego opisu (np. modele oddziaływań parowych) pozwalają dość dokładnie opisać wiele cech charakterystycznych kryształów;
- możliwość modelowania dużej liczby atomów tworzących strukturę przy zachowaniu dobrej dokładności (dokładniejsze w stosunku do potencjałów molekularnych metody *ab-initio* ze względu na trudności obliczeniowe są bezużyteczne w tym przypadku);
- parametry potencjałów są tak dobierane, aby możliwie najdokładniej opisać rzeczywiste zachowanie się kryształów;
- możliwe jest uzyskanie jakościowego jak i ilościowego opisu dowolnych deformacji struktury.

Rozwój teorii fenomenologicznych anizotropowego materiału hipersprężystego jest przedmiotem badań już od kilku dekad. Formułowanie związków konstytutywnych dla materiału izotropowego nierozdzielnie związane jest z teorią niezmienników. W przypadku anizotropii trudności natury matematycznej spowodowane są faktem, że związek pomiędzy naprężeniem a odkształceniem staje się relacją zespoloną na skutek różnic w kierunkach głównych tensora odkształcenia i naprężenia. Klasyczne podejście do modelowania ciała hipersprężystego polega na uwzględnieniu w funkcji energii sprężystej tensorów strukturalnych

(niosących informację o symetrii materiału) poprzez wzbogacony zestaw niezmienników odkształcenia. Energia odkształcenia ψ ciała izotropowego wyrażana jest jako izotropowa funkcja skalarna argumentu tensorowego \mathbf{U} lub \mathbf{V} . Energię odkształcenia można również przedstawić jako funkcję niezmienników tensora rozciągłości I_1 , I_2 oraz I_3 :

$$\psi(\mathbf{U}) = \psi(I_1, I_2, I_3), \quad (2.85)$$

lub równoważnie, jako funkcję wartości własnych tegoż tensora $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$:

$$\psi(\mathbf{U}) = \psi(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3). \quad (2.86)$$

Związki łączące niezmienniki z wartościami własnymi mają postać:

$$\begin{aligned} I_1 &= \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3, \\ I_2 &= \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1, \\ I_3 &= \lambda_1\lambda_2\lambda_3. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Funkcja opisująca energię odkształcenia ψ spełnia więc, następujące warunki symetrii:

$$\psi(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \psi(\lambda_1, \lambda_3, \lambda_2) = \psi(\lambda_3, \lambda_1, \lambda_2). \quad (2.88)$$

Zmiana orientacji ciała bez zmiany wartości własnych tensora rozciągłości nie powinna powodować zmiany energii odkształcenia. W przypadku sprężystych materiałów izotropowych jedynym ograniczeniem matematycznym nakładanym na postać funkcji energii odkształcenia jest wymóg aby energia odkształcenia ψ była symetryczną funkcją wartości własnych $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$. Dodatkowo, należy zapewnić znikanie potencjału sprężystego dla stanu naturalnego reprezentowanego przez $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1$, co w efekcie spowoduje brak naprężeń. Aby spełnić ten wymóg potencjał ψ musi spełniać następujące warunki:

$$\psi(1, 1, 1) = 0, \quad \text{oraz} \quad \frac{\partial \psi(1, 1, 1)}{\partial \lambda_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.89)$$

Żądanie, by funkcja ψ była nieskończenie wiele razy różniczkowalna względem I_1, I_2, I_3 możemy spełnić budując potencjał sprężysty w postaci szeregu potęgowego, za Ogdenem (1984):

$$\psi(I_1, I_2, I_3) = \sum c_{pqr} (I_1 - 3)^p (I_2 - 3)^q (I_3 - 1)^r, \quad (2.90)$$

gdzie $p, q, r = 0, 1, 2, \dots$ a c_{pqr} oznacza parametry materiałowe. Warunek zerowania się potencjału w momencie gdy ciało zajmuje konfigurację odniesienia (wówczas niezmienniki $I_1 = I_2 = 3; I_3 = 1$) jest spełniony poprzez przyjęcie w szeregu (2.90) współczynnika $c_{000} = 0$. Istnienie stanu beznaprężeniowego zapewnione jest poprzez odpowiedni dobór pozostałych współczynników tak aby: $c_{100} + 2c_{010} + c_{001} = 0$. Dobierając, odpowiednią do potrzeb modelowania sprężystego zachowania się ciał, ilość wyrazów szeregu i pamiętając, że wpływ kolejnych wyrazów szeregu jest mniejszy niż poprzednich możemy uzyskać postać potencjałów często spotykanych w literaturze, np. *Mooney'a-Rivlina*, *neo-Hookean*, *Genta*. Znajdują one szerokie zastosowanie w nieliniowej sprężystości i wielu zastosowaniach praktycznych. Przyjmując słuszność założenia o nieściśliwości materiału ($I_3 = 1$)

otrzymujemy, że potencjał sprężysty zależy jedynie od dwóch niezależnych niezmienników deformacji. W praktyce (2.90) możemy zastąpić poprzez następujące równanie:

$$\psi(I_1, I_2) = \Sigma c_{pq}(I_1 - 3)^p(I_2 - 3)^q, \quad (2.91)$$

Pamiętając o wspomnianych powyżej ograniczeniach nakładanych na postać potencjału sprężystego, przyjmując $c_{00} = 0$ i pomijając wyrazy wyższych rzędów otrzymamy, np. funkcję energii odkształcenia dla materiału zwanego *neo-Hookean*:

$$\psi(I_1, I_2) = \Sigma c_{10}(I_1 - 3), \quad (2.92)$$

czy też funkcję energii odkształcenia materiału *Mooney'a-Rivlina*:

$$\psi(I_1, I_2) = \Sigma c_{10}(I_1 - 3) + c_{01}(I_2 - 3). \quad (2.93)$$

Postać funkcji energii odkształcenia w kryształach można sobie łatwo wyobrazić na przykładzie kryształu "jednowymiarowego", w którym siły oddziaływań atomowych mają kierunek zgodny z kierunkiem rozciągnięcia struktury, za Hillem (1975) możemy zapisać:

$$\psi = f(a^2) = f(1 + 2e_{ij}\alpha_i\alpha_j), \quad (2.94)$$

gdzie e_{ij} jest tensorem odkształcenia Green'a, a oznacza zaś długość zdeformowanego wektora jednostkowego α_i w konfiguracji beznaprężeniowej. Zgodnie z warunkami (2.89) funkcja f musi spełniać następujące warunki:

$$\psi(1) = \psi'(1) = 0. \quad (2.95)$$

Różniczkując równanie (2.94) względem odkształcenia e_{ij} otrzymamy skoniugowane z odkształceniem naprężenie i moduły sztywności w postaci:

$$t_{ij} = 2\psi'(a^2)\alpha_i\alpha_j, \quad c_{ijkl} = 4\psi''(a^2)\alpha_i\alpha_j\alpha_k\alpha_l. \quad (2.96)$$

Funkcja właściwej energii odkształcenia ψ , opisująca ciało hipersprężyste posiada pewne charakterystyczne właściwości wynikające nie tylko z założenia istnienia stanu naturalnego

$$\psi(\mathbf{1}) = 0, \quad (2.97)$$

praw termodynamicznych, zasady obiektywności

$$\psi(\mathbf{E}) = \psi(\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^T) \quad (2.98)$$

i budowy krystalicznej ciała

$$\psi(\mathbf{E}, \mathbf{M}) = \psi(\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^T, \mathbf{Q} \mathbf{M}), \quad (2.99)$$

gdzie \mathbf{QM} oznacza obrót tensora parametrycznego \mathbf{M} , którego grupa symetrii jest równa grupie symetrii materiału hipersprężystego. Dodatkowo funkcja ψ powinna spełniać również ograniczenia wynikające z intuicyjnego rozumienia reakcji ciała sprężystego na obciążenie, tj:

- wzrost składowych odkształcenia powinien powodować wzrost związanych z nimi składowych naprężeń,
- ekstremalnym odkształceniom powinny towarzyszyć ekstremalne naprężenia,
- powinno istnieć rozwiązanie problemu początkowo - brzegowego dla równań ruchu,
- możliwość opisu zjawisk utraty stateczności, np. wyboczenia,
- przewidywać rozwiązania o charakterze falowym,
- parametry materiałowe powinny być możliwe do określenia za pomocą nieskomplikowanych badań laboratoryjnych,
- wyniki jakościowe i ilościowe modelu powinny być zgodne z badaniami doświadczalnymi.

Niektóre z powyższych ograniczeń są łatwe do spełnienia m. in. dzięki doborowi odpowiedniej miary odkształcenia spośród wielu możliwych tensorów poprawnie opisujących odkształcenie oraz naprężenia z nim skoniugowanego. Wypukłość funkcji energii sprężystej, zapewniająca spełnienie (dla izotropowego materiału podczas izotermicznej deformacji) warunku:

$$\dot{\sigma} \dot{\epsilon} > 0, \quad (2.100)$$

ma podstawowe znaczenie w zakresie nieliniowej sprężystości, zob. Hill (1970). Funkcja energii sprężystej ψ wyrażona jako funkcja analityczna tensora rozciągnięcia \mathbf{U} lub jego wartości własnych, ze względu na (2.100) musi być funkcją wypukłą. Mimo tego pojawia się wiele modeli opisujących materiał hipersprężysty za pomocą funkcji energii odkształcenia nie spełniającej warunku wypukłości. Przypadki takie analizował Fosdick i Serrin (1979). Brak wypukłości funkcji w sensie Hilla (1970; 1975) jest z drugiej strony tą cechą funkcji energii odkształcenia, którą z powodzeniem możemy wykorzystać do modelowania, np. niestabilności kryształów - tworzenia i anihilacji defektów sieci czy przemian fazowych.

2.5.2 Materiał St. Venanta-Kirchhoffa

Model materiału sprężystego zaproponowanego przez St Venanta (1844) i Kirchhoffa (1852) jest najprostszym spośród szerokiej gamy hipersprężystych modeli nieliniowych. Model materiału hipersprężystego, nazywany dzisiaj materiałem St Venanta-Kirchhoffa (**SVK**), jest szeroko stosowany w obliczeniach numerycznych ze względu na nieskomplikowaną postać funkcji energii odkształcenia i wymaga znajomości jedynie dwu stałych materiałowych potrzebnych do opisu zachowania się ciał izotropowych. Funkcja energii odkształcenia ψ modelu **SVK** jest funkcją tensora odkształcenia Greena. Z warunku (2.98) i twierdzeń o reprezentacji skalarnej izotropowej funkcji tensorowej, zob. Wang (1969, 1970, 1971) wynika, że energia odkształcenia ψ może być wyrażona jako funkcja trzech nieredukowalnych, izotropowych niezmienników tensora odkształcenia Greena:

$$\psi = \psi(\mathbf{E}) = \psi(I_1, I_2, I_3). \quad (2.101)$$

Przyjmując odpowiednio regularny potencjał energia odkształcenia ψ dla materiału **SVK** ma postać:

$$\psi = \psi(\mathbf{E}) = \frac{1}{2}[\lambda (tr\mathbf{E})^2 + 2\mu tr\mathbf{E}^2]. \quad (2.102)$$

Różniczkując powyższe równanie względem odkształcenia otrzymamy zależność konstytutywną w postaci:

$$S_{KL} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial E_{KL}} + \frac{\partial\psi}{\partial E_{LK}}\right), \quad (2.103)$$

lub w postaci najczęściej spotykanej w literaturze:

$$\mathbf{S} = \lambda(tr\mathbf{E})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}. \quad (2.104)$$

Do opisu właściwości sprężystych izotropowego materiału **SVK** konieczna jest znajomość dwóch stałych Lamego - λ i μ . Zamiast stałych Lamego można wykorzystać inne pary stałych, np. (2.28) czy (2.29). Model **SVK** sprowadza się do kwadratowej aproksymacji funkcji energii odkształcenia względem tensora odkształcenia Greena \mathbf{E} . Wszystkie izotropowe modele hipersprężyste wyższych rzędów w przybliżeniu kwadratowym sprowadzają się właśnie do materiału **SVK**. Zapisując powyższe równanie z wykorzystaniem izotropowego tensora czwartego rzędu stałych sztywności \mathbf{c} otrzymamy równoważną do (2.104) postać

$$S_{kl} = c^{klmn} E_{mn}. \quad (2.105)$$

Tensor \mathbf{c} jest izotropowym, symetrycznym i dodatnio określonym tensorem, zob. Gurtin (1974), Pericak-Spector i Spector (1995) w postaci:

$$\mathbf{c} = \lambda\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2\mu\mathbf{1} = 3K\left(\frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}\right) + 2\mu\left(1 - \frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}\right), \quad (2.106)$$

gdzie $\mathbf{1}$ oznacza tensor jednostkowy czwartego rzędu. Aby tensor stałych sztywności \mathbf{c} materiału izotropowego był dodatnio określony, zapewniając tym samym wypukłość funkcji energii odkształcenia (2.102) konieczne jest spełnienie następującego warunku:

$$3K \geq 3\lambda + 2\mu, \quad 2\mu > 0. \quad (2.107)$$

Moduły K i μ stanowią odpowiednio jednokrotną i pięciokrotną wartość własną tensora \mathbf{c} , zob. Rychlewski (1983). Po zastosowaniu zapisu Voigta macierz reprezentacji tensora stałych sztywności przyjmuje postać identyczną z (2.20) dla liniowej teorii sprężystości. Ze względu na swoją prostotę model **SVK** jest dziś podstawowym hipersprężystym modelem nieliniowym. Niestety w przypadku dostatecznie dużych rozciągnięć i odpowiednio wybranej wartości ν możemy otrzymać niespodziewaną, ujemną (!?) zmianę objętości ciała. Ze względu na wspomniany niepoprawny opis sprężystych właściwości deformującego się ciała przy znacznej zmianie objętości, zastosowanie modelu **SVK** jest ograniczone do umiarkowanych deformacji lub też małych deformacji i dużych obrotów, zob. Jemioło (2002). Mimo swoich mankamentów, model **SVK** dzięki prostocie (do opisu zachowania się materiału wystarczą bowiem jedynie dwie stałe materiałowe) jest często stosowanym modelem hipersprężystym, ale z wyraźnym ograniczeniem zakresu jego stosowalności do umiarkowanie dużych deformacji lub skończonych obrotów. Stałe materiałowe - stałe sztywności są identyczne jak w uogólnionym prawie Hooke'a czyli wyznaczane podczas standartowych prób wytrzymałościowych.

2.5.3 Materiał Murnaghana

Model izotropowego, hipersprężystego materiału Murnaghana (1951) jest logicznym rozwinięciem modelu St. Venanta-Kirchhoffa. Model Murnaghana (\mathbf{M}) wynika z dokładniejszej aproksymacji funkcji energii odkształcenia. W rozwinięciu w szereg Taylora względem tensora odkształcenia Greena uwzględnione są wyrazy rzędu 3-go, co daje w efekcie postać funkcji energii odkształcenia ψ :

$$\psi = \psi(\mathbf{E}) = \frac{1}{2}\lambda (tr\mathbf{E})^2 + \mu tr\mathbf{E}^2 + \frac{1}{6}\nu_1 (tr\mathbf{E})^3 + \nu_2 tr\mathbf{E} tr\mathbf{E}^2 + \frac{4}{3}\nu_3 tr\mathbf{E}^3, \quad (2.108)$$

gdzie ν_i - nazywane są stałymi Murnaghana II-go rzędu. Stałe Lamego λ , μ będące parametrami materiałowymi w modelu **SVK** w tym modelu używane są jako stałe I-go rzędu. Liczba stałych materiałowych opisująca sprężyste właściwości materiału \mathbf{M} , wynosi 5 (2 + 3). Związek konstytutywny ma następującą postać:

$$\mathbf{S} = \left[\left(\lambda + \frac{1}{2}\nu_1 tr\mathbf{E} \right) tr\mathbf{E} + \nu_2 tr\mathbf{E}^2 \right] \mathbf{I} + 2(\mu + \nu tr\mathbf{E}) \mathbf{E} + 4\nu_3 \mathbf{E}^2. \quad (2.109)$$

Stałe materiałowe modelu \mathbf{M} dla wielu materiałów można znaleźć, np. w pracy Lurie (1990). W zastosowaniach praktycznych wprowadza się pewne uproszczenia modelu \mathbf{M} polegające na pominięciu wyrazów wyższych rzędów gradientu przemieszczenia, zob. Kleiber (1985). Ponieważ tensor odkształcenia Greena ma postać:

$$\mathbf{E} = (\bar{\nabla}\mathbf{U} + \bar{\nabla}^T\mathbf{U} + \bar{\nabla}^T\mathbf{U} \bar{\nabla}\mathbf{U}), \quad (2.110)$$

gdzie operator $\bar{\nabla}$ oznacza gradient względem konfiguracji lagranżowskiej. Po podstawieniu do (2.109) i pogrupowaniu wyrazów otrzymamy:

$$\mathbf{S} = \lambda(tr\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E} + \left[\frac{1}{2}\nu_1 (tr\boldsymbol{\epsilon})^2 + \nu_2 tr\boldsymbol{\epsilon}^2 \right] \mathbf{I} + 2\nu_2 (tr\boldsymbol{\epsilon}) \boldsymbol{\epsilon} + 4\nu_3 \boldsymbol{\epsilon}^2 + O(\nabla\mathbf{U})^3, \quad (2.111)$$

gdzie $\boldsymbol{\epsilon}$ oznacza tensor małych odkształceń. Wyznaczenie stałych sztywności II-go rzędu dla modelu \mathbf{M} jest niezwykle kłopotliwe a uzyskane wyniki są trudne do zweryfikowania, gdyż brak im jednoznacznej interpretacji mechanicznej poza czysto teoretyczną, wynikającą z aproksymacji wielomianowej potencjału sprężystego. W przypadku metali, gdzie zakres sprężystej deformacji ciała jest niewielki, zależność konstytutywna (2.111) stosowana jest również do wyznaczania stałych sprężystych, zob. Fukuoka i Toda (1977). Model \mathbf{M} jest szeroko stosowany w złożonych zagadnieniach falowych, jak również stanowi bazę do formułowania modeli wykraczających poza teorię hipersprężystości. Porównując zachowanie się modeli **SVK** i \mathbf{M} dochodzimy do wniosku, że w przypadku rozciągnięć rzędu 1% wyniki przewidywań obu modeli są praktycznie identyczne, zob. Jemioło (2002). Przy rozciągnięciach rzędu 10% sytuacja ulega diametralnej zmianie i przewidywania obu modeli stają się jakościowo różne. Dlatego też, mimo, że model \mathbf{M} wynika z dokładniejszej aproksymacji potencjału sprężystego, ze względu na regularność funkcji opisującej energię sprężystą modelu **SVK** (2.102) i trudności w poprawnym wyznaczeniu stałych materiałowych II-go rzędu dla modelu \mathbf{M} sensowne wyniki dla większego zakresu deformacji ciała otrzymamy dla modelu **SVK**.

2.5.4 Materiał Ogdena

Przedstawione w poprzednich podrozdziałach modele hipersprężyste, ze względu na trudności w poprawnym określeniu dopuszczalnego zakresu stosowalności (zwłaszcza w przypadku materiałów mało ściśliwych - $\nu \approx 0.5$) wymagają indywidualnego podejścia, uwzględniającego specyfikę danego problemu inżynierskiego, rodzaj modelowanego materiału jak i samego sformułowania zagadnienia brzegowego. Innym sposobem otrzymania poprawnej funkcji opisującej energię odkształcenia jest zaproponowanie szczególnej postaci potencjału sprężystego, np. w formie wielomianowej i sprawdzenie zgodności takiego modelu z eksperymentem. Rivlin w pracy (1948c) i późniejszej (1949) zaproponował następującą postać funkcji opisującej energię odkształcenia materiału hipersprężystego:

$$\psi = \psi(I_i) = \sum A_{klm} (I_1 - 3)^k (I_2 - 3)^l (I_3 - 1)^m, \quad (2.112)$$

gdzie A_{klm} są stałymi materiałowymi, które wyznacza się aproksymując wyniki eksperymentalne. Trudność w zastosowaniu powyższego modelu wynika z faktu, że konsekwentny wybór kolejnych wyrazów wyższego rzędu wielomianu (2.112) nie prowadzi do zadowalającej zgodności modelu z eksperymentem, co zauważył, np. Ogden (1972a; 1972b). Przyjmując w funkcji (2.112) niezerowe stałe:

$$A_{100} = \mu, \quad A_{010} = -\frac{\mu}{2}, \quad A_{200} = \frac{1}{24}(4\mu + 3K), \quad (2.113)$$

otrzymamy w efekcie funkcję energii sprężystej materiału **SVK**. Podobnie postępując, można otrzymać funkcję energii sprężystej materiału **M**. Inne podejście zastosował Barsoum, zob. Voyadis i in. (1994), konstruując potencjał sprężysty w postaci:

$$\psi = \psi(I_i) = \sum B_{klm} (I_1^{a_k} I_2^{b_l} I_3^{c_m} - 3^{a_k+b_l}). \quad (2.114)$$

Parametry B_{klm} , a_k , b_l i c_m wyznaczone są metodami optymalizacji wyników eksperymentalnych celem otrzymania dodatnio określonej energii odkształcenia dla dowolnie przyjętej deformacji ciała. W porównaniu z modelem opisanym poprzez równanie (2.112) jej zaletą jest konieczność stosowania mniejszej ilości wyrazów szeregu celem uzyskania tej samej dokładności aproksymacji wyników doświadczalnych. Często spotykanym w literaturze potencjałem sprężystym będącym funkcją wartości własnych tensora wydłużenia a właściwie ich logarytmów jest potencjał energii odkształcenia postaci **LN**, zob. Bone i Woods (1997), Bruhns i in. (2000):

$$\psi = \psi(\lambda_i) = \mu \left[(\ln \lambda_1)^2 + (\ln \lambda_2)^2 + (\ln \lambda_3)^2 \right] + \frac{\lambda}{2} (\ln J)^2, \quad (2.115)$$

gdzie J oznacza zmianę objętości ciała ($J = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$), wobec czego możemy zapisać, że $\ln J = \ln \lambda_1 + \ln \lambda_2 + \ln \lambda_3$. Parametry λ i μ są zaś stałymi Lamego identycznymi jak w klasycznym prawie Hooke'a (2.19). Funkcja ta nie jest poliwypukła dla $J > e$, gdzie e jest postawą logarytmu naturalnego, czyli jej zakres stosowania w przypadku deformacji objętościowych powinien być ograniczony co najmniej do takich właśnie deformacji, zob. Jemioło (2002). Model ten mimo swej prostoty poprawnie opisuje właściwości ściśliwych

materiałów hipersprężystych w zakresie umiarkowanie dużych odkształceń (rzędu kilkudziesięciu procent), zob. Anand (1979, 1986). Funkcja (2.115) nie jest zgodna z hipotezą Valandisa i Landela (1967), która zakłada że energia sprężysta jest sumą niezależnych funkcji wartości własnych tensora rozciągnięcia:

$$\psi = \psi(\lambda_i) = f_1(\lambda_1) + f_2(\lambda_2) + f_3(\lambda_3). \quad (2.116)$$

Jeśli założymy, że izotropowy materiał jest nieściśliwy ($\nu = 0.5$) to najprostszym modelem hipersprężystym opisującym zachowanie się takiego materiału jest neo-Hookean (**NH**) zdefiniowany za pomocą następującej funkcji energii:

$$\psi = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3). \quad (2.117)$$

W modelu tym, do opisu sprężystych właściwości materiału wystarcza jeden parametr materiałowy wyznaczony np. w próbie jednoosiowego rozciągania. Ze względu na fakt, że warunek $\nu = 0.5$ nie jest warunkiem wystarczającym, aby każda skończona deformacja była deformacją izochoryczną (jedynie dla małych deformacji) wobec czego zakres stosowności tego modelu podobnie jak modelu **SVK** ogranicza się do stosunkowo małych deformacji. Dodając do funkcji energii odkształcenia (2.117) człon liniowy względem drugiego niezmiennika I_2 otrzymamy model hipersprężystego nieściśliwego materiału Mooney'a-Rivlina (**MR**), zob. Mooney (1940), Rivlin (1948c):

$$\psi = C_{10}(I_1 - 3) + C_{01}(I_2 - 3). \quad (2.118)$$

Modele **NH** jak i **MR** jakościowo dobrze opisują proces jednoosiowego ściskania materiału, ale już dla rozciągnięcia zadowalająca zgodność z eksperymentem zachodzi jedynie dla stosunkowo małych wydłużeń. Oba modele nie są w stanie przewidzieć typowego np. dla gumy zjawiska stopniowego umacniania się materiału dla dużych deformacji, rzędu kilkuset procent. Blatz i Ko (1962) zaproponowali na podstawie własnych badań elastomerów funkcję właściwej energii odkształcenia postaci:

$$\psi = \psi(I_i) = \frac{1}{2}cb \left[I_1 + \frac{1}{a}(I_3^{-a} - 1) - 3 \right] + \frac{1}{2}c(1-b) \left[I_2 I_3^{-1} + \frac{1}{a}(I_3^a - 1) - 3 \right], \quad (2.119)$$

gdzie I_1, I_2, I_3 są podstawowymi niezmiennikami prawego tensora deformacji Cauchy-Greena ($\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$), zaś parametry materiałowe a, b, c mają wartości:

$$a = \frac{\nu}{1 - 2\nu}, \quad b \in [0, 1], \quad c = \nu. \quad (2.120)$$

Warto tu zauważyć, że dla $\nu = 0.5$ model **BK** nie opisuje materiału nieściśliwego. Model materiału hipersprężystego Ogdena posiada potencjał sprężysty postaci, zob. Ogden (1972b):

$$\psi = \psi(\lambda_i, J) = \sum \frac{2\mu_m}{a_m^2} \left[\left(\lambda_1^{a_m} + \lambda_2^{a_m} + \lambda_3^{a_m} \right) + \frac{1}{b_m} \left(J^{-a_m b_m} - 1 \right) \right]. \quad (2.121)$$

Można zauważyć, że po przyjęciu jedynie dwóch wyrazów szeregu i przy odpowiednim doborze paramterów materiałowych a, μ :

$$a_1 = 2, \quad a_2 = -2, \quad \mu_1 = \mu b, \quad \mu_2 = \mu(1 - b), \quad (2.122)$$

otrzymamy postać energii odkształcenia modelu **BK**.

W przypadku anizotropii materiału energia odkształcenia jest funkcją nie tylko gradientu deformacji, ale również zależy od wektora jednostkowego \mathbf{M} opisującego kierunek anizotropii, stąd możemy zapisać, że:

$$\psi = \psi(\mathbf{F}, \mathbf{M}). \quad (2.123)$$

Aby analitycznie wyrazić postać energii odkształcenia dla przypadku transversalnej izotropii czyli np. dla kompozytu wzomocnionego włóknem w jednym z kierunków, konieczne jest wyrażenie jej jako funkcji pięciu niezmienników:

$$\psi = \psi(I_1, I_2, I_3, I_4, I_5), \quad (2.124)$$

gdzie I_1, I_2, I_3 są klasycznymi niezmiennikami podstawowymi tensora odkształcenia Cauchy-Greena, zaś:

$$I_4 = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{C}\mathbf{M}), \quad I_5 = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{C}^2\mathbf{M}) \quad (2.125)$$

Po dokonaniu odpowiedniego różniczkowania otrzymamy, że I-szy tensor Pioli-Kirchhoffa ma postać:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & 2\psi_1\mathbf{F}^T + 2\psi_2(I_1\mathbf{I} - \mathbf{C})\mathbf{F}^T + 2I_3\psi_3\mathbf{F}^{-1} + \\ & 2\psi_4\mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{M} + 2\psi_5(\mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{C}\mathbf{M} + \mathbf{C}\mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{M}), \end{aligned} \quad (2.126)$$

gdzie ψ_i oznacza $(\partial\psi/\partial I_i)$ dla $i = 1, \dots, 5$. W przypadku wzmocnienia materiału włóknem w dwóch kierunkach funkcja energii odkształcenia zależna będzie już od dwóch wektorów opisujących kierunki anizotropii i 8-miu niezmienników postaci:

$$I_6 = \mathbf{M}' \cdot (\mathbf{C}\mathbf{M}'), \quad I_7 = \mathbf{M}' \cdot (\mathbf{C}^2\mathbf{M}'), \quad I_8 = \mathbf{M} \cdot (\mathbf{C}\mathbf{M}'). \quad (2.127)$$

Niezmiennik I_8 opisuje interakcję pomiędzy dwoma wyróżnionymi kierunkami deformacji. Wzór opisujący naprężenia Pioli-Kirchhoffa ma wówczas postać:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & 2\psi_1\mathbf{F}^T + 2\psi_2(I_1\mathbf{I} - \mathbf{C})\mathbf{F}^T + 2I_3\psi_3\mathbf{F}^{-1} + \\ & 2\psi_4\mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{M} + 2\psi_5(\mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{C}\mathbf{M} + \mathbf{C}\mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{M}) + \\ & 2\psi_6\mathbf{M}' \otimes \mathbf{F}\mathbf{M}' + 2\psi_7(\mathbf{M}' \otimes \mathbf{F}\mathbf{C}\mathbf{M}' + \mathbf{C}\mathbf{M}' \otimes \mathbf{F}\mathbf{M}') + \\ & \psi_8(\mathbf{M}' \otimes \mathbf{F}\mathbf{M} + \mathbf{M} \otimes \mathbf{F}\mathbf{M}'). \end{aligned} \quad (2.128)$$

Jak widać wraz ze wzrostem stopnia anizotropii nieproporcjonalnie szybko rośnie stopień skomplikowania wzorów analitycznych opisujących funkcję właściwej energii odkształcenia.

Rozdział 3

Proponowany model materiału sprężystego dla kryształów

Zależność wiążąca tensor naprężenia z tensorem odkształcenia, zwana zależnością konstytutywną, stanowi dodatkowe 6 równań brakujących do stworzenia zamkniętego układu równań materiału sprężystego, uzupełniając równania (2.11) i (2.12). Dysponując całą gamą urządzeń służących pomiarowi właściwości mechanicznych i geometrii próbek badanych materiałów jesteśmy w stanie dokładnie zbadać i opisać zachowanie deformowanego ciała. Dzięki badaniom eksperymentalnym jesteśmy w stanie określić zachowanie materiału dla najróżniejszych kombinacji obciążenia w różnych temperaturach, przy różnych prędkościach deformacji i historii obciążenia. Testy prętów o kołowym przekroju z precyzyjnym pomiarem ich wydłużenia są typowe dla metali, polimerów czy też ceramiki technicznej. Dla skały, gruntów czy betonu pracujących zwykle na ściskanie typowym testem jest ściskanie próbki cylindrycznej wzdłuż osi symetrii. Często ze względu na brak bezpośrednich możliwości pomiarów wykorzystuje się pomiary pośrednie, których wyniki dzięki mechanicznej interpretacji pozwalają wyznaczyć niektóre parametry materiałowe występujące w równaniach konstytutywnych, np. pomiar twardości metali pozwalający oszacować wytrzymałość materiału, czy też pomiar prędkości rozchodzenia się fal ultradźwiękowych, dzięki którym obliczamy stałe sztywności. W niektórych, szczególnych przypadkach zależność pomiędzy naprężeniem a odkształceniem może być wyznaczona bezpośrednio z praw rządzących mikrostrukturą poprzez przejście ze skali mikro do makro, np. w materiałach kompozytowych. W skali mikro możemy traktować osnowę i włókna zbrojenia jako osobne materiały, każde z nich posiadające indywidualne cechy opisane przez zależności konstytutywne. W przypadku makroskopowych ciał krystalicznych poddanych deformacji, zależność konstytutywna otrzymywana jest po dokonaniu homogenizacji przypadkowo zorientowanego agregatu polikrystalicznego. Innym przypadkiem jest guma i elastomery, które zbudowane są na bazie przypadkowo rozmieszczonych łańcuchów molekuł. Dla takich materiałów zależność konstytutywna może być otrzymana stosując podejście termodynamiki statystycznej i traktując materiał jako sieć wzajemnie skrzyżowanych łańcuchów cząsteczkowych deformujących się pod obciążeniem. W przypadku ciał monokrystalicznych, np. krzem, aluminium, stopy żarowytrzymałe na łopatki turbin lotniczych, prawa rządzące zachowaniem komórki elementarnej w mikroskali mogą

być bezpośrednio przeniesione do skali makro. Rozwój metod obliczeniowych dyskretnych struktur kryształu, jak np. metoda gęstości funkcjonału (*DFT*), metody *ab initio* czy potencjały atomowe pozwalają analitycznie przewidzieć i opisać makroskopowe zachowanie się ciała krystalicznego przy zachowaniu informacji o pojedynczym atomie. Modelując sprężyste zachowanie kryształu przyjmujemy, że związki między składowymi tensorów odkształcenia i naprężenia są niezależne od czasu i temperatury. W ten sposób tworzymy równanie konstytutywne opisujące model wyidealizowanego w pewnym stopniu kryształu.

3.1 Nieliniowa anizotropia hipersprężysta

Rozważmy zależność konstytutywną, definiującą tensor naprężenia Cauchy'ego, wychodząc z bilansu energii (2.12). Z twierdzenia o rozkładzie polarnym (biegunowym) dowolnego, nieosobliwego tensora drugiego rzędu wynika, że gradient deformacji \mathbf{F} można jednoznacznie przedstawić w postaci:

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}, \quad (3.1)$$

gdzie \mathbf{R} , \mathbf{U} , \mathbf{V} oznaczają odpowiednio tensor obrotu, prawy i lewy tensor rozciągnięcia.

Definicja: Pod pojęciem uogólnionych tensorów odkształceń: Lagrange'a - $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ i Eulera - $\boldsymbol{\varepsilon}$ rozumiemy odpowiednio, dwie izotropowe funkcje tensorowe postaci:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = f(u_i) \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i \quad \text{oraz} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = f(v_i) \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i, \quad (3.2)$$

gdzie u_i , \mathbf{u}_i , v_i , \mathbf{v}_i oznaczają odpowiednio i -tą wartość i i -ty wektor własny prawego tensora rozciągnięcia \mathbf{U} oraz i -tą wartość i i -ty wektor własny lewego tensora rozciągnięcia \mathbf{V} . Funkcja $f(\cdot)$ oznacza dowolnie wybraną, monotonicznie rosnącą funkcję klasy C^1 spełniającą następujące warunki:

$$f(x) \Big|_{x=1} = 0, \quad (3.3)$$

$$\frac{df(x)}{dx} \Big|_{x=1} = 1, \quad (3.4)$$

zob. Hill (1968). Warunki te zapewniają zgodność z liniową teorią dla małych deformacji. Na podstawie tej definicji można wprowadzić całą klasę tensorów symetrycznych, które mogą być przyjęte za tensorową miarę odkształceń, zob. Doyle i Ericksen (1956), Seth (1964), Hill (1968), Ogden (1984). Tensory te możemy zapisać w ogólnej postaci:

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{m}(\mathbf{U}^m - \mathbf{1}) \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \ln \mathbf{U} \end{cases} \quad \text{oraz} \quad \begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{m}(\mathbf{V}^m - \mathbf{1}) & \text{dla } m \neq 0, \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \ln \mathbf{V} & \text{dla } m = 0, \end{cases} \quad (3.5)$$

gdzie m jest rzeczywistym parametrem miary odkształcenia. Przedstawiona rodzina miar odkształceń spełnia warunki (3.2)-(3.4). Dzięki przyjęciu jednej ze zdefiniowanych powyżej miar, jako miary odkształcenia otrzymujemy prosty związek pomiędzy deformacją

próbki a wartościami własnymi tensorów rozciągnięcia \mathbf{U} i \mathbf{V} . Dodatkowo, dzięki izotropowości funkcji $f(\cdot)$, wektory własne tensorów odkształcenia i rozciągnięcia zachowują współosiowość. Z punktu widzenia mechaniki continuum, powyższe miary odkształcenia są poprawne, gdyż dają się zapisać tensorowo, stosują się do nich prawa transformacji, a sztywny obrót ciała nie wpływa na wartości odkształceń zarówno $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ jak i $\boldsymbol{\epsilon}$. Przedstawiona definicja miar odkształcenia, jakkolwiek obejmuje bardzo dużą liczbę miar, w tym tych najczęściej stosowane *Hencky'ego*, *Greena*, *Almansięgo*, *Biota*, nie wyczerpuje zupełnie tematu możliwych miar odkształcenia. Można bowiem zdefiniować inne miary spełniające odpowiednie warunki dla odkształceń, np:

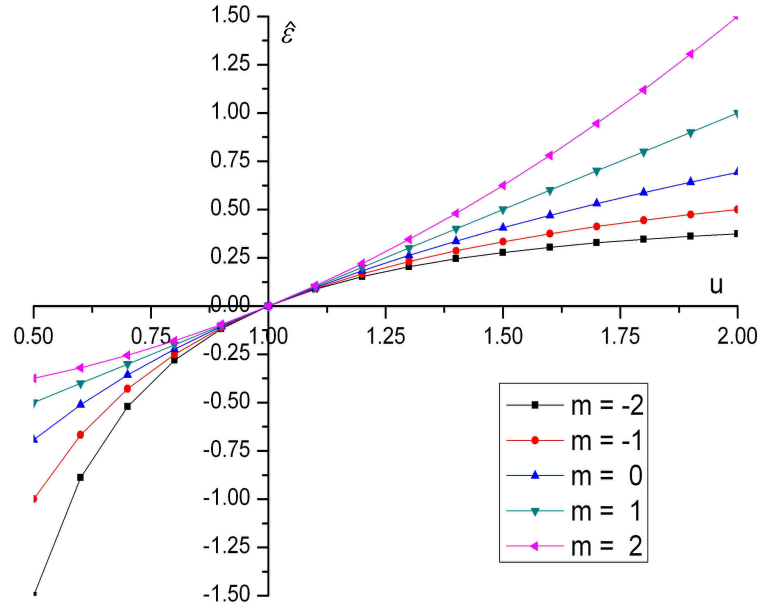
$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = \frac{1}{4}\mathbf{U}^2 + \frac{1}{2}\mathbf{U} - \frac{3}{4}\mathbf{1}.$$

Stopień nieliniowości geometrycznej materiału zależy od wyboru konkretnej miary odkształcenia a więc w przypadku (3.5) od przyjętego parametru m miary odkształcenia. Na etapie analizy teoretycznej nie ma wyraźnych powodów do wyróżnienia jednej z miar, gdyż związane są ze sobą w sposób jednoznaczny poprzez tensor rozciągnięcia \mathbf{U} lub \mathbf{V} , a zakres ich stosowalności powinien być rozważany indywidualnie w zależności od rodzaju materiału i typu problemu. Z drugiej strony przyjęcie odpowiedniej wartości parametru odkształcenia m może być pomocne przy uwzględnianiu niuansów zachowania się materiału, np. zmiana objętości kryształu w otoczeniu dyslokacji wynikająca z asymetrii zachowania się kryształu przy ściskaniu i rozciąganiu, zob. Dłużewski i in. (2004). Na podstawie (3.5), podstawiając za parametr m dowolną liczbę całkowitą otrzymamy m.in. następujące miary odkształcenia:

$$\begin{aligned} m = -2 &\rightarrow \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(-2)} \stackrel{df}{=} \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{U}^{-2}) - \text{tensor odkształcenia Almansięgo} \\ m = -1 &\rightarrow \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(-1)} \stackrel{df}{=} (\mathbf{1} - \mathbf{U}^{-1}) - \text{tensor odkształcenia Swaingera} \\ m = 0 &\rightarrow \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(0)} \stackrel{df}{=} \ln \mathbf{U} - \text{tensor odkształcenia Hencky'ego} \\ m = 1 &\rightarrow \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(1)} \stackrel{df}{=} (\mathbf{U} - \mathbf{1}) - \text{tensor odkształcenia Biota} \\ m = 2 &\rightarrow \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{(2)} \stackrel{df}{=} \frac{1}{2}(\mathbf{U}^2 - \mathbf{1}) - \text{tensor odkształcenia Greena} \end{aligned}$$

Aby podkreślić różnice między poszczególnymi miarami odkształcenia warto sprawdzić jak zmieniają się wartości odkształcenia dla wybranych miar odkształcenia przy tej samej deformacji ciała, np. podczas testu jednoosiowego rozciągania, gdzie $\hat{\epsilon}_{11} = f(u_{11})$. Różnice te pokazane są na rys.(3.1) a w tabeli (3.1) znajdują się wartości odkształceń próbki (w %) dla kilku miar odkształcenia i kilku wydłużeń. Wyraźnie widoczne są różnice występujące pomiędzy poszczególnymi miarami odkształcenia, pogłębiające się w miarę wzrostu wydłużenia/skrócenia próbki.

Każdy kryształ składa się z atomów oddziaływujących na siebie siłami elektromagnetycznymi, które zwane są wiązaniami łączącymi ze sobą atomy i jony tworząc ciała stałe. Analizując wykres energii potencjalnej wiązania, zob. rys.(2.3) przedstawiający rozkład energii dla wiązania jonowego, dochodzimy do wniosku, że kryształ powinien inaczej zachowywać się podczas ściskania a inaczej przy rozciąganiu. Z wykresu tego wynika, że



Rysunek 3.1: Odształcenie $\hat{\varepsilon}$ jako funkcja rozciągania próbki u dla różnych parametrów m miary odkształcenia podczas testu jednoosiowego rozciągania.

$m =$	-2	-1	0	1	2
$u = 0.5$	-150%	-100%	-69.3%	-50%	-37.5%
$u = 0.9$	-11.73%	-11.11%	10.54%	-10%	-9.5%
$u = 1.1$	8.68%	9.09%	9.53%	10%	10.5%
$u = 2$	37.5%	50%	69.3%	100%	150%

Tablica 3.1: Wartość odkształcenia $\hat{\varepsilon}_{11}$ w zależności od parametru miary odkształcenia m i wydłużenia próbki dla jednoosiowego testu rozciągania.

rzeczywiste kryształy łatwiej poddają się rozciąganiu niż ścisaniu ze względu na osłabienie sił wzajemnego oddziaływania atomów wraz ze wzrostem odległości między nimi i gwałtowny wzrost sił odpychających atomy przy zbliżaniu się do siebie. Dlatego też poprawnie dobrana miara odkształcenia powinna możliwie dokładnie oddać tę cechę deformującego się kryształu. W przypadku deformacji materiału hipersprężystego konieczne jest założenie odpowiedniej postaci funkcji opisującej energię odkształcenia ψ . Funkcja opisująca ψ w kryształach, np. w heterostrukturach półprzewodnikowych zależy może od wielu parametrów termodynamicznych, takich jak np. odkształcenie, temperatura, pola elektryczne, magnetyczne, zmienny skład chemiczny struktury, gęstość defektów struktury i wielu innych:

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}, T, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, x_1, \dots, x_n, \mathbf{E}, \mathbf{H} \dots), \quad (3.7)$$

gdzie $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ oznacza lagranżowski tensor odkształcenia, T - temperaturę, $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ - tensorową miarę gęstości defektów, x_i - molowe udziały pierwiastków w heterostrukturze, \mathbf{E} , \mathbf{H} - natężenie

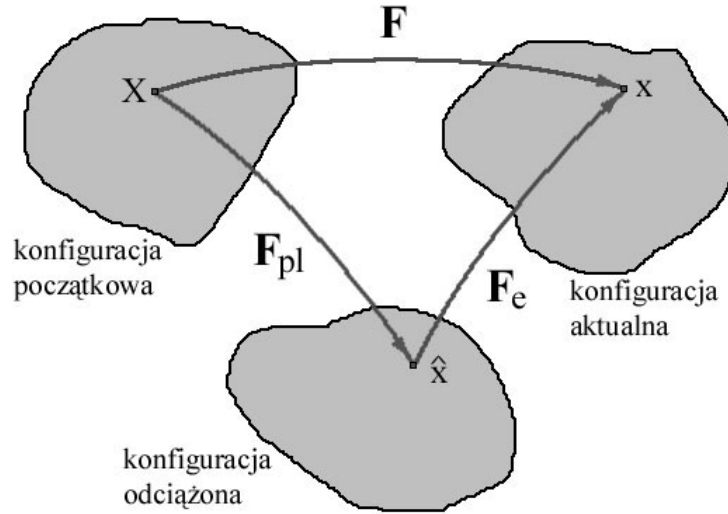
pól elektrycznego i magnetycznego. Wszystkie wielkości względne (oznaczone $\hat{\cdot}$), odniesione są do lokalnie odciążonej konfiguracji $\hat{\mathbf{x}}$. Konfiguracja $\hat{\mathbf{x}}$, zob. rys.(3.2), pojawia się w sposób naturalny w przypadku heterostruktur, kiedy konieczne jest dokonanie wyboru referencyjnego obszaru struktury do obliczania odkształceń sieci krystalicznej. Przyjmując multiplikatywną dekompozycję gradientu deformacji otrzymamy:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_{ch} \mathbf{F}_{pl}, \quad (3.8)$$

gdzie tensor \mathbf{F}_e oznacza sprężystą część deformacji, \mathbf{F}_{ch} - deformację chemiczną wynikającą ze zmian składu struktury i \mathbf{F}_{pl} - deformację odpowiadającą plastycznej (trwałej) przebudowie kryształu. Powyższe tensory deformacji, wyrażone w postaci gradientów odpowiednich zmiennych mają postać:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{1} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}}, \\ \mathbf{F}_e \mathbf{F}_{ch} &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \hat{\mathbf{x}}} = \mathbf{1} - \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \hat{\mathbf{x}}}, \\ \mathbf{F}_{pl} &= \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{1} - \frac{\partial (\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}})}{\partial \mathbf{X}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Reprezentacja tensora deformacji chemicznej \mathbf{F}_{ch} dla kryształów, np. o symetrii kubicznej



Rysunek 3.2: Schemat wyodrębnionych konfiguracji ciała.

ma postać:

$$\mathbf{F}_{ch}^{\text{kub}} = \begin{bmatrix} \frac{a}{a_{ref}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a}{a_{ref}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{a}{a_{ref}} \end{bmatrix}, \quad (3.10)$$

a dla symetrii heksagonalnej, (oś "c" kryształu zorientowana wzdłuż osi X_3 globalnego układu współrzędnych):

$$\mathbf{F}_{ch}^{\text{hex}} = \begin{bmatrix} \frac{a}{a_{ref}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a}{a_{ref}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c}{c_{ref}} \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

gdzie a i c oznaczają odpowiednie stałe sieciowe kryształu a index ref oznacza stałą sieciową odniesienia. Ze względów natury matematycznej przy rozważaniu fizycznej deformacji tego typu struktur uwzględniamy jedynie te efekty fizyczne, które mają znaczący wpływ na zachowanie się struktury w danym przypadku obciążenia. I tak w przypadku deformacji ciała jednorodnego możemy przyjąć, że energia odkształcenia zależy jedynie od stanu odkształcenia tegoż ciała i temperatury, dodatkowo przyjęcie założenia quasistatyczności deformacji skutkuje wyłączeniem temperatury jako parametru termodynamicznego. W przypadku zdefektowanej heterostruktury konieczne jest uwzględnienie zmienności składu chemicznego struktury i gęstości dyslokacji (w ogólności defektów) pojawiających się zwykle na interfejsie rozgraniczającym dwa różne materiały jako parametrów termodynamicznych. Kiedy ciało znajduje się pod wpływem pola elektromagnetycznego konieczne będzie uwzględnienie tychże pól, zwłaszcza gdy ciało zbudowane jest z kryształów o symetrii heksagonalnej (wurcyt), która charakteryzuje się występowaniem silnego efektu piezoelektrycznego.

W przypadku quasistatycznej, izotermicznej sprężystej deformacji heterostruktury funkcję właściwej energii odkształcenia ψ możemy wyrazić jako funkcję odkształcenia lagranżowskiego:

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}), \quad (3.12)$$

stąd po wykorzystaniu tej zależności w bilansie energii (2.12) (proces adiabatyczny - brak zewnętrznych źródeł ciepła) otrzymamy:

$$\rho \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}} : \dot{\hat{\boldsymbol{\epsilon}}} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}. \quad (3.13)$$

Można dowieść, zob. Hill (1970), że pochodna materialna tensora odkształcenia Lagrange'a $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ ma postać:

$$\dot{\hat{\boldsymbol{\epsilon}}} = \hat{\mathbf{A}} : (\mathbf{R}^T \mathbf{dR}), \quad (3.14)$$

gdzie, tensor skalujący $\hat{\mathbf{A}}$, walencji cztery, rozłożony w bazie wektorów własnych \mathbf{u}_k tensora rozciągnięcia \mathbf{U} jest reprezentowany przez następujące niezerowe składowe:

$$\hat{A}_{IJJJ} = \hat{A}_{JJJI} = \hat{A}_{JIII} = \begin{cases} \delta_{IJ} u_I f'(u_I) & \text{dla } u_I = u_J \text{ oraz } I = J, \\ \frac{1}{2} \delta_{IJ} u_I f'(u_I) & \text{dla } u_I = u_J \text{ oraz } I \neq J, \\ \frac{u_I u_J [f(u_I) - f(u_J)]}{u_I^2 - u_J^2} & \text{dla } u_I \neq u_J, \end{cases} \quad (3.15)$$

gdzie, $f'(u) = \left. \frac{df(u)}{du} \right|_{u=u_I}$, zob. Ogden (1984). Szczegółowe wyprowadzenie wzoru (3.15) przedstawił Scheidler (1991), potwierdzone później przez wielu innych autorów. Dla loga-

rytmicznej miary odkształcenia składowe tensora $\hat{\mathbf{A}}$ przyjmują postać:

$$\hat{A}_{IJIJ} = \begin{cases} \delta_{IJ} & \text{dla } \hat{\varepsilon}_I = \hat{\varepsilon}_J \text{ oraz } I = J, \\ \frac{1}{2}\delta_{IJ} & \text{dla } \hat{\varepsilon}_I = \hat{\varepsilon}_J \text{ oraz } I \neq J, \\ \frac{2(\hat{\varepsilon}_I - \hat{\varepsilon}_J)}{e^{\hat{\varepsilon}_I} - e^{\hat{\varepsilon}_J} - e^{\hat{\varepsilon}_J} - e^{\hat{\varepsilon}_I}} & \text{dla } \hat{\varepsilon}_I \neq \hat{\varepsilon}_J, \end{cases} \quad (3.16)$$

Zależność (3.14) odnotował Hill (1970), ale termodynamiczne konsekwencje tej relacji wpływające na naprężenie w materiałach anizotropowych zostały pominięte poprzez zastosowanie rozkładu addytywnego:

$$\frac{d}{dt} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{R}^T \mathbf{dR} + O(E^2), \quad (3.17)$$

gdzie, $O(E^2)$ w przedziale $0.75 < \frac{\lambda_i}{\lambda_j} < 1.25$ jest pomijana jako człon wyższego rzędu, zob. Rice (1975), Hill (1978). Podstawiając pochodną materialną tensora odkształcenia Lagrange'a w postaci (3.14) do bilansu energii (3.13) otrzymamy:

$$\frac{\rho}{\hat{\rho}} \left(\hat{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}} \right) : \hat{\mathbf{A}} : (\mathbf{R}^T \mathbf{dR}) - \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} = 0, \quad (3.18)$$

Powyzsza relacja musi być spełniona dla dowolnie wybranej prędkości deformacji \mathbf{d} , stąd naprężenie Cauchy'ego $\boldsymbol{\sigma}$ określone jest wzorem:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}(\hat{\mathbf{A}} : \hat{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}) \mathbf{R}^T \det \mathbf{F}^{-1}, \quad (3.19)$$

gdzie $\rho/\hat{\rho} = \det \mathbf{F}^{-1}$. Używając naprężenia $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ skoniugowanego z tensorem odkształcenia Lagrange'a $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ możemy powyższe równanie zapisać w nowej postaci:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}(\hat{\mathbf{A}} : \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{R}^T \det \mathbf{F}^{-1}, \quad (3.20)$$

gdzie naprężenie skoniugowane $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ jest równe:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}, \quad (3.21)$$

por. (2.33). Przy konstruowaniu postaci funkcji opisującej właściwą energię sprężystą ψ należy uwzględnić warunek dodatniej określoności stawiany na potencjał sprężysty - będący logiczną konsekwencją założenia istnienia stanu naturalnego. Dla dowolnego, różnego od zera $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ spełniona powinna być zatem nierówność:

$$\psi > 0. \quad (3.22)$$

Dla quasistatycznej, izotermicznej deformacji, dla której właściwa energia odkształcenia jest funkcją lagranżowskiego tensora odkształcenia $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ po przyjęciu założenia (3.12) w okolicy stanu naturalnego możemy rozwinąć ψ w szereg potęgowy:

$$\psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \frac{1}{\hat{\rho}} \left[\frac{1}{2!} \hat{C}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} + \frac{1}{3!} \hat{C}^{ijklmn} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} \hat{\varepsilon}_{mn} + \dots \right], \quad (3.23)$$

gdzie \hat{c}^{ijkl} i \hat{C}^{ijklmn} oznaczają stałe sztywności, odpowiednio drugiego i trzeciego rzędu, wyznaczone dla danej miary odkształcenia $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(m)}$. Uwzględniając w rozważaniach jedynie pierwszy wyraz rozwinięcia i odrzucając wyrazy rzędów wyższych otrzymamy funkcję właściwej energii odkształcenia ψ materiału hipersprężystego w postaci:

$$\psi = \frac{1}{2\hat{\rho}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} : \hat{\mathbf{c}} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (3.24)$$

Przeprowadzając przepisane w równaniu (3.21) różniczkowanie otrzymujemy zależność konstytutywną łączącą skoniugowane naprężenie z odkształceniem:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{ij} = \hat{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\varepsilon}_{ij}} = \hat{c}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{kl}. \quad (3.25)$$

Wykorzystując tensor podatności materiału $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{c}}^{-1}$ możemy zapisać zależność odwrotną:

$$\hat{\varepsilon}^{ij} = \hat{s}^{ijkl} \hat{\sigma}_{kl}. \quad (3.26)$$

Wstawiając zależność (3.25) do równania (3.20) otrzymamy wyrażenie na naprężenia Cauchy'ego:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}(\hat{\mathbf{A}} : \hat{\mathbf{c}} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}})\mathbf{R}^T \det\mathbf{F}^{-1}. \quad (3.27)$$

Tensor naprężenia Kirchhoffa $\boldsymbol{\tau}$ opisujący stan naprężenia przeskalowany do konfiguracji odniesienia jest równy:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} \det\mathbf{F} = \mathbf{R}(\hat{\mathbf{A}} : \hat{\mathbf{c}} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}})\mathbf{R}^T. \quad (3.28)$$

Zależność powyższa, wyrażona za pomocą wielkości w konfiguracji aktualnej ma postać:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{A} : \mathbf{c} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (3.29)$$

gdzie:

$$A_{ijij} = R_i^I R_j^J \hat{A}_{IJIJ}, \quad (3.30)$$

$$c^{klmn} = R^k_K R^l_L R^m_M R^n_N \hat{c}^{KLMN}, \quad (3.31)$$

$$\varepsilon_{ij} = R_i^I R_j^J \hat{\varepsilon}_{IJ}. \quad (3.32)$$

Zależność konstytutywna (3.25) zakłada zależność pomiędzy tensorem naprężenia i odkształcenia. W tym przypadku możemy mówić o zależności liniowej, por. Rychlewski (1969). Z warunku symetrii tensorów $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ i $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ oraz symetrii wyrażenia na energię (3.24) wynikają pewne matematyczne ograniczenia narzucone na składowe tensora sztywności $\hat{\mathbf{c}}$. Macierz reprezentacji tensora $\hat{\mathbf{c}}$ – \hat{c}^{ijkl} musi spełniać następujące warunki symetrii:

$$\hat{c}^{ijkl} = \hat{c}^{jikl} = \hat{c}^{ijlk} = \hat{c}^{klij}, \quad (3.33)$$

Z powyższych relacji symetrii wynika, że spośród wszystkich - 81 składowych tensora czwartego rzędu $\hat{\mathbf{c}}$ jedynie 21 jest istotnie różnych i tyle wystarczy do opisu całkowitej anizotropii sprężystej materiału.

W przypadku konieczności matematycznego ujęcia fizykalnej nieliniowości materiału hipersprężystego, np. po to by uwzględnić zmianę sztywności materiału w trakcie procesu deformacji uwzględniamy wyrazy wyższych rzędów występujące w rozwinięciu (3.23). Po odrzuceniu wyrazów szeregu stopnia wyższego niż trzeci funkcja ψ materiału hipersprężystego ma postać:

$$\psi = \frac{1}{2\hat{\rho}} \hat{c}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} + \frac{1}{6\hat{\rho}} \hat{C}^{ijklmn} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} \hat{\varepsilon}_{mn}. \quad (3.34)$$

Po wykonaniu przepisanej równaniem (3.21) różniczkowania równania (3.34) otrzymujemy zależność konstytutywną postaci:

$$\hat{\sigma}^{ij} = \hat{c}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{kl} + \frac{1}{2} \hat{C}^{ijklmn} \hat{\varepsilon}_{kl} \hat{\varepsilon}_{mn}, \quad (3.35)$$

a równanie opisujące naprężenia Cauchy'ego przyjmie postać:

$$\sigma_{ij} = R_i^I \left[\hat{A}_{IJKL} (\hat{c}^{KLMN} \hat{\varepsilon}_{MN} + \frac{1}{2} \hat{C}^{KLMNOP} \hat{\varepsilon}_{MN} \hat{\varepsilon}_{OP}) \right] R_j^J \det \mathbf{F}^{-1}. \quad (3.36)$$

Znając postać funkcji ψ (3.24) oraz (3.34) możemy teraz, korzystając z warunku dodatniej jej określoności ((3.22)), zapisać, że:

$$\hat{c}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} > 0, \quad \text{oraz} \quad \hat{c}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} + \hat{C}^{ijklmn} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} \hat{\varepsilon}_{mn} > 0. \quad (3.37)$$

Dzięki temu, że prędkość rozchodzenia się fal ultradźwiękowych w materiałach zależy od ich chwilowej sztywności dysponujemy wygodną metodą eksperymentalnego wyznaczania występujących w powyższych równaniach stałych sztywności trzeciego rzędu. Dodatkowo w ostatnich latach, dzięki rozwojowi metod obliczeniowych bazujących na metodach *ab initio* (np. środowisko obliczeniowe *CASTEP*) możliwe stało się również analityczne wyznaczenie stałych sztywności trzeciego rzędu, zobacz prace np. Kato i Hama (1994), Wright (1997), Łepkowski i Majewski (2004).

W przypadku gdy posługujemy się dwiema różnymi miarami odkształcenia, które jednoznacznie opisane są poprzez parametr miary odkształcenia m i m' :

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{m} (\mathbf{U}^m - \mathbf{1}), \quad \text{oraz} \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}' = \frac{1}{m'} (\mathbf{U}^{m'} - \mathbf{1}), \quad (3.38)$$

możemy wyznaczyć funkcję opisującą zależność jednej miary odkształcenia od drugiej poprzez tensor rozciągnięcia \mathbf{U} :

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}') = \frac{1}{m} [(m' \hat{\varepsilon}'_i + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1] \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i. \quad (3.39)$$

Po podstawieniu powyższego wzoru do (3.23) otrzymamy postać właściwej energii sprężystej będącej funkcją miary odkształcenia z parametrem m' :

$$\begin{aligned} \psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')) &= \frac{1}{\hat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2!} \hat{c}^{ijkl} \frac{1}{m^2} [(m' \hat{\varepsilon}'_{ij} + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1] [(m' \hat{\varepsilon}'_{kl} + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3!} \hat{C}^{ijklmn} \frac{1}{m^3} [(m' \hat{\varepsilon}'_{ij} + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1] [(m' \hat{\varepsilon}'_{kl} + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1] [(m' \hat{\varepsilon}'_{mn} + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Stałe sztywności: drugiego $\hat{\mathbf{c}}'$ i trzeciego rzędu $\hat{\mathbf{C}}'$ materiału hipersprężystego są odpowiednio drugą i trzecią pochodną funkcji energii sprężystej ψ względem odkształcenia $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'$:

$$\hat{\mathbf{c}}' = \frac{\hat{\rho}}{2!} \frac{\partial^2 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{(\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}')^2} \text{ oraz } \hat{\mathbf{C}}' = \frac{\hat{\rho}}{3!} \frac{\partial^3 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{(\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}')^3} \quad (3.41)$$

Wyznamy kolejne pochodne energii sprężystej w postaci (3.40) według wzorów (3.41). Korzystając z wzorów na pochodną tensorowej funkcji izotropowej względem symetrycznego tensora drugiego rzędu, zob. Ogden (1984) otrzymamy odpowiednio, że stałe sztywności drugiego rzędu nie zależą od wyboru miary odkształcenia:

$$\hat{\mathbf{c}}' = \hat{\mathbf{c}},$$

zaś stałe trzeciego rzędu wraz ze zmianą miary odkształcenia zmieniają się według następujących zależności (dla kryształu o symetrii blendy cynkowej - kryształ kubiczny, mającego 6 niezależnych stałych sztywności trzeciego rzędu):

$$\begin{aligned} \hat{C}'_{111} &= \hat{C}_{111} + 3(m - m')\hat{c}_{11}; & \hat{C}'_{112} &= \hat{C}_{112} + (m - m')\hat{c}_{12}; \\ \hat{C}'_{123} &= \hat{C}_{123}; & \hat{C}'_{144} &= \hat{C}_{144} + \frac{1}{2}(m - m')\hat{c}_{12}; \\ \hat{C}'_{155} &= \hat{C}_{155} + \frac{1}{4}(m - m')[\hat{c}_{11} + \hat{c}_{12} + 4\hat{c}_{44}]; & \hat{C}'_{456} &= \hat{C}_{456} + \frac{3}{4}(m - m')\hat{c}_{44}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

por. Dłużewski (2000). Kryształy o symetrii heksagonalnej charakteryzują się odmienną budową komórki elementarnej dlatego też, posiadają inną liczbę niezależnych stałych sztywności drugiego jak i trzeciego rzędu. Dodatkowo jedna z niezależnych stałych sztywności w kryształach kubicznych przestaje być niezależna dla kryształu heksagonalnego:

$$\hat{C}^{456} = \frac{1}{2}(\hat{C}^{155} - \hat{C}^{144}). \quad (3.44)$$

Korzystając z podobnego schematu obliczeniowego autor rozprawy otrzymał dalsze (w stosunku do kryształu kubicznego) wzory opisujące zmianę niezależnych stałych sztywności trzeciego rzędu kryształu o symetrii wurcytu przy zmianie miary odkształcenia:

$$\begin{aligned} \hat{C}'^{113} &= \hat{C}^{113} + (m - m')\hat{c}^{13}; & \hat{C}'^{133} &= \hat{C}^{133} + (m - m')\hat{c}^{13}; \\ \hat{C}'^{222} &= \hat{C}^{222} + 3(m - m')\hat{c}^{11}; & \hat{C}'^{333} &= \hat{C}^{333} + 3(m - m')\hat{c}^{33}; \\ \hat{C}'^{344} &= \hat{C}^{344} + \frac{1}{4}(m - m')[\hat{c}^{13} + \hat{c}^{33} + 2\hat{c}^{44}]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Według aktualnej wiedzy autora, wzory (3.45) przedstawione zostały po raz pierwszy. Stałe sztywności wyznaczane są zwykle dla prawa konstytutywnego łączącego drugi tensor Pioli-Kirchhoffa - \mathbf{S} z tensorem odkształcenia Greena - $\mathbf{E}^{(2)}$ ($m = 2$), zob. prace m. in. Huntington (1958), Brugger (1964), Thurston (1964), Hiki i Granato (1966), Walker i in. (1985), dlatego też przy korzystaniu z innej miary odkształcenia należy przeliczyć stałe sztywności występujące we wzorach (3.34)-(3.37) do używanej aktualnie miary odkształcenia zgodnie z powyższymi wzorami.

Dokładniejszą analizę metodyki przeliczania stałych sztywności przy zmianie miary odkształcenia zamieszczono w dodatku **A** niniejszej pracy.

3.2 Stałe sztywności

Analizując zachowanie ciała pod dowolnie wybranym obciążeniem można tak dobrać przypadek obciążenia, że stan naprężenia nie zmienia się w trakcie ruchu ciała. Stąd ważną kwestią do rozważenia przy konstruowaniu związku konstytutywnego jest metoda ujęcia symetrii materiału oraz wykorzystanie jej do ograniczenia ilości stałych materiałowych opisujących sprężyste zachowanie się ciała. Kryształy stanowią tutaj doskonały przedmiot badań ze względu na ściśle zdefiniowaną budowę wewnętrzną, której cechy charakterystyczne znajdują swoje odzwierciedlenie w postaci tensorów stałych sztywności \mathbf{c} i podatności \mathbf{s} opisujących anizotropowe właściwości materiału. Ciała bezpostaciowe (np. szkło, stopiona i ochłodzona krzemionka, tworzywa sztuczne) to substancje, których atomy, cząsteczki lub jony nie są rozmieszczone w regularnej sieci przestrzennej, a o ich położeniu decyduje przypadek. Substancje te, określone często jako ciecze przechłodzone o dużej lepkości wykazują niektóre cechy charakterystyczne dla ciał stałych, takie jak twardość czy zdolność zachowywania swego kształtu ale najłatwiej dostrzegalną cechą fizyczną odróżniającą ciała bezpostaciowe od krystalicznego jest brak ściśle określonej temperatury topienia. Ciała bezpostaciowe ogrzewane mięknią i rozplývają się stopniowo wraz ze wzrostem temperaury podczas gdy ciała krystaliczne topią się w ściśle określonej temperaturze. Ze względu na przypadkowość budowy molekularnej ciała bezpostaciowe są zwykle izotropowe co oznacza, że wykazują one we wszystkich kierunkach identyczną sztywność, wytrzymałość mechaniczną, rozszerzalność cieplną, przewodnictwo elektryczne, itp. Kryształy wykazują w ściśle określonych kierunkach przestrzeni regularne i powtarzające się periodycznie kombinacje atomów tworzących sieć krystaliczną. Dzięki swej uporządkowanej strukturze komórka elementarna kryształu przyjmuje kształt wielościanu prawidłowego, o płaskich ścianach. Rezultatem przestrzennej budowy komórki elementarnej kryształu jest fakt, że większość kryształów wykazuje różne właściwości fizyczne w różnych kierunkach. Tę cechę kryształów nazywamy anizotropią właściwości fizycznych. Aby poprawnie opisać budowę wewnętrzną kryształu, wystarczy określić konfigurację najprostszego elementu przestrzennego tworzącego kryształ - komórki elementarnej, której wielokrotne powielenie tworzy idealny makroskopowy monokryształ. Wielkość i geometria komórki elementarnej opisane są długością trzech jej krawędzi a , b , c i trzema kątami α , β , γ między tymi krawędziami. Komórki elementarne kryształu wykazują symetrie, które wpływają na właściwości fizyczne kryształu, m.in. na właściwości sprężyste, redukując liczbę niezależnych stałych sztywności c_{ijkl} (c_{ij}) potrzebnych do opisu sprężystego zachowania się kryształu. Symetrię kryształów można analizować ze względu na:

- środek symetrii,
- płaszczyznę symetrii,
- płaszczyznę obrotu,
- n-krotną oś obrotu,
- n-krotną oś śrubową,

- n-krotną oś inwersji.

Sprawdzenie wszystkich możliwych kombinacji daje w wyniku 230 grup przestrzennych symetrii kryształu. Sprawdzając wspomniane grupy przestrzenne pod kątem symetrii w otoczeniu punktu sieci można wykazać, że istnieją jedynie 32 klasy krystalograficzne charakteryzujące makroskopowe elementy symetrii i orientację ścian kryształu, zob. Teodosiu (1982). Wspomniane 32 klasy krystalograficzne zgrupowane zostały w 7 grup, na które składa się jedenaście układów krystalograficznych zawierających kryształy posiadające pewne cechy wspólne. Należą do nich:

- układ regularny (kubiczny) - cztery osie trójkątne ułożone jak przekątne w sześcianie

$$a = b = c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

- układ rombowy - trzy wzajemnie prostopadłe osie dwukrotne

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

- układ jednoskośny - jedna oś dwukrotna

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$

- układ trygonalny - jedna oś trzykrotna

$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \quad \gamma = 120^\circ$$

- układ tetragonalny - jedna oś czterokrotna

$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

- układ heksagonalny - jedna oś sześciokrotna

$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \quad \gamma = 120^\circ$$

- układ trójskośny - oś jednokrotna

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$$

Komórkę elementarną, a zatem i sieć przestrzenną z niej zbudowaną, w której atomy leżą tylko w narożach komórki określa się jako prostą. W takich sieciach komórka elementarna zawiera średnio tylko jeden atom, ponieważ każdy z 8-miu narożnych atomów w jednokowej mierze należy do ośmiu sąsiadujących komórek elementarnych, które się w tym punkcie stykają. Dalsze atomy w innych typach komórek elementarnych, poza narożami, mogą znajdować się m.in. na środkach ścian i w środku objętości komórki elementarnej. Takie sieci nazywane są odpowiednio płasko i przestrzennie centrowanymi. Zbiór 14 możliwych kombinacji prostych, płasko i przestrzennie centrowanych sieci kryształu nazywa

się sieciami translacyjnymi lub sieciami Bravais'go.

Każdy kryształ posiada charakterystyczną dla siebie symetrię struktury, na której bazuje anizotropowa sprężystość. Kryształy należące do tej samej grupy charakteryzują się podobnymi makroskopowymi właściwościami sprężystymi. Spośród wielu typów kryształów kryształy o symetrii kubicznej posiadają najwyższy możliwy stopień symetrii, trójkliniczne zaś najniższą. Właściwości sprężyste tych kryształów, przy założeniu liniowego prawa konstytutywnego, opisują odpowiednio 3 i 21 niezależnych stałych sztywności, zob. tab. (3.2). Pomiedzy tymi dwoma typami kryształów lokują się kryształy, np. o symetrii heksagonalnej, którym do opisu właściwości sprężystych potrzeba 5-ciu niezależnych stałych sztywności. Jak już wcześniej pokazano (2.25) do opisu sprężystych właściwości materiałów izotropowych potrzeba jedynie 2-ch stałych. Jeśli mówimy o izotropowym materiale na poziomie nanometrycznym mamy zwykle na myśli materiały amorficzne, które nie wykazują uporządkowania struktury lub klaster przypadkowo zorientowanych polikryształów. Typ symetrii materiału, który charakteryzuje np. metale z teksturą, tkanki biologiczne jest zwykle trudny do określenia ze względu na dużą przypadkowość tych struktur. Chcąc określić stałe sztywności dla takiego materiału, ze względu na dużą liczbę niezależnych paramterów materiałowych w ogólnym przypadku, ustalana jest zwykle przybliżona reprezentacja takiego materiału z ustaloną wcześniej dopuszczalną tolerancją. Innym poważnym problemem często występującym w praktyce inżynierskiej jest dobór odpowiednich wartości stałych sztywności charakterystycznych dla wyższej symetrii a opisującego właściwości sprężyste materiału o niższej symetrii. Stosowane w tym przypadku jest podejście aproksymacji stałych sztywności - Voigta (1910), Reussa (1929) lub Scattergooda i Bacona (1974). Przykładem mogą być rozważania nad warunkami aproksymacji stałych sztywności materiału o symetrii trójklinicznej i ortotropowej w pracach Hilla (1952) oraz Cowina i in. (1999). Wykorzystując analizowane anizotropowe właściwości kryształów możemy skutecznie ograniczyć ilość stałych materiałowych koniecznych do ich opisu właściwości sprężystych kryształów opisywanych przez tensor stałych sztywności \hat{c} , zob. Rychlewski (1995), Teodosiu (1982), Sutcliffe (1992).

Z matematycznych rozważań nad hipersprężystym zachowaniem kryształu oraz ze względu na fakt nieujemności potencjału sprężystego (3.22) wynika, że wartość stałych sztywności nie może być dowolna. Przykładowo dla kryształu należącego do klasy regularnej stałe sztywności powinny spełniać warunek:

$$c_{11} + 2c_{12} > 0, \quad c_{11} > |c_{12}|, \quad c_{44} > 0, \quad (3.53)$$

a dla kryształu heksagonalnego:

$$(c_{11} + c_{12})c_{33} > 2c_{13}^2, \quad c_{11} > |c_{12}|, \quad c_{44} > 0. \quad (3.54)$$

Reprezentacja tensorów naprężenia i odkształcenia w normalnej postaci jest macierzą kwadratową 3×3 . Możemy je jednak potraktować jako dziewięciowymiarowe wektory postaci:

$$\varepsilon = \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \varepsilon_{23}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{32}, \varepsilon_{31}, \varepsilon_{21}\}; \quad (3.55)$$

dla odkształcenia. W tej notacji reprezentacja tensora stałych sztywności ma postać macierzy 9×9 . Ponieważ naprężenie i odkształcenie są tensorami symetrycznymi więc 3 z

	izotropia	regularny	heksagonalny	tetragonalny	rombowy	jednoskośny	trygonalny
c_{11}	$\lambda + 2\mu$	11	11	11	11	11	11
c_{12}	λ	12	12	12	12	12	12
c_{13}	λ	12	13	13	13	13	13
c_{14}	0	0	0	0	0	0	14
c_{15}	0	0	0	0	0	0	15
c_{16}	0	0	0	0	0	16	16
c_{22}	$\lambda + 2\mu$	11	11	11	22	22	22
c_{23}	λ	12	13	13	23	23	23
c_{24}	0	0	0	0	0	0	24
c_{25}	0	0	0	0	0	0	25
c_{26}	0	0	0	0	0	26	26
c_{33}	$\lambda + 2\mu$	11	33	33	33	33	33
c_{34}	0	0	0	0	0	0	34
c_{35}	0	0	0	0	0	0	35
c_{36}	0	0	0	0	0	36	36
c_{44}	μ	44	44	44	44	44	44
c_{45}	0	0	0	0	0	45	45
c_{46}	0	0	0	0	0	0	46
c_{55}	μ	44	44	44	55	55	55
c_{56}	0	0	0	0	0	0	56
c_{66}	μ	44	$\frac{1}{2}(11-12)$	66	66	66	66
	2	3	5	6	9	13	21

Tablica 3.2: Niezależne stałe sztywności dla różnych klas symetrii kryształu.

9-ciu wartości własnych tensora sztywności, zapisanego w takiej postaci, są równe zero. Pozostałe 6 wartości własnych, ze względu na dodatnią określoność tensora sztywności, są rzeczywiste i dodatnie. Korzystamy z rozkładu spektralnego tensora stałych sztywności, zob. np. Rychlewski (1983), Sutcliffe (1992) i możemy zapisać:

$$\mathbf{c} = \lambda_I \mathbf{w}^I \otimes \mathbf{w}^I + \lambda_{II} \mathbf{w}^{II} \otimes \mathbf{w}^{II} + \dots + \lambda_V \mathbf{w}^V \otimes \mathbf{w}^V + \lambda_{VI} \mathbf{w}^{VI} \otimes \mathbf{w}^{VI}, \quad (3.56)$$

gdzie λ_i jest i -tym modułem sztywności a tensor \mathbf{w}^i - i -tym sprężystym stanem własnym. Dla przykładu kryształy o symetrii kubicznej posiadają trzy niezależne stany własne o wartościach:

$$\lambda_1 = c_{11} + 2c_{12}, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = c_{11} - c_{12}, \quad \lambda_5 = \lambda_6 = 2c_{44}. \quad (3.57)$$

Wektory własne dla tych stanów mają następującą postać:

$$\mathbf{w}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad (3.58)$$

$$w_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad w_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad w_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.59)$$

$$w_5 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad w_6 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.60)$$

Kryształy o symetrii heksagonalnej posiadają cztery niezależne stany własne o wartościach:

$$\lambda_1, \quad \lambda_2, \quad \lambda_3 = \lambda_4, \quad \lambda_5 = \lambda_6. \quad (3.61)$$

Wektory własne dla tych stanów mają postać:

$$w_1 = k_1 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{k_2}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.62)$$

$$w_2 = k_2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{k_1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.63)$$

$$w_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad w_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.64)$$

$$w_5 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad w_6 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.65)$$

W początkowym okresie rozwoju nowoczesnej teorii sprężystości Navier, Poisson, Cauchy oraz wielu innych zakładało, że ciało sprężyste ma budowę molekularną, zob. Todhunter (1960), stąd przyjęcie odpowiedniego typu oddziaływań pomiędzy molekułami tworzącymi ciało pozwala wyznaczyć dodatkowe 6 zależności pomiędzy 21 niezależnymi składowymi tensora sztywności opisującego ciało anizotropowe, zob. Cauchy (1830). Dziś zależności te zwane są związkami Cauchy'ego, a podejście zakładające słuszność związków Cauchy'ego i wymagające do kompletnego opisu ciała anizotropowego jedynie 15-tu niezależnych stałych sztywności zwana jest teorią *rari-constant*. Za Schoutenem (1989), możemy związki te zapisać:

$$c^{ijkl} = c^{(ijkl)} \rightarrow c^{ijkl} = c^{ikjl}, \quad (3.66)$$

gdzie (\cdot) oznacza całkowitą symetrię tensora stałych sztywności \mathbf{c} po dowolnej parze indeksów. Dla odróżnienia teoria używająca 21 niezależnych stałych sztywności zwana jest teorią *multi-constant*. Wyniki teoretycznych rozważań nad wzajemnym oddziaływaniem pomiędzy atomami lub molekułami, zob. Leibfried (1955) dotyczącymi prostych kryształów, gdzie można stosować podejście sił centralnych, np. sól kuchenna *NaCl* dowodzi, że związki Cauchy'ego dla tych kryształów są spełnione. W ogólnym przypadku, zwłaszcza dla kryształów o bardziej skomplikowanym składzie chemicznym i budowie, związki

Cauchy'ego nie są spełnione, zob. Haussühl (1967). Dla przypadku izotropii spełnienie związków Cauchy'ego prowadzi do warunku $\lambda = \mu$ co dla większości izotropowych materiałów sprężystych nie jest spełnione, zob. Hehl i Itin (2002). Sama informacja o spełnianiu lub nie związków Cauchy'ego może być ważną wskazówką na temat możliwości stosowania takiego czy innego modelu oddziaływań molekularnych do opisu danego kryształu.

Rozdział 4

Metoda elementów skończonych

Korzenie metody elementów skończonych (*MES*) sięgają lat 40-tych ubiegłego wieku. Pierwsze wysiłki przy tworzeniu podstaw teoretycznych metody skupiały się na poprawieniu algorytmów w celu osiągnięcia zadowalającej zbieżności, dobrej dokładności i wysokiej sprawności, zob. rys historyczny metody w pracach Johnsona (1987), Zienkiewicza (1994), Huebnera (1995). Jednocześnie z rozwojem metody elementów skończonych rosła złożoność i wielkość rozwiązywanych zadań m.in. zagadnień brzegowych mechaniki kontinuum. Śledząc trendy w aktualnej literaturze tego tematu oczywistym staje się fakt, że metoda elementów skończonych na stałe znalazła swoje miejsce jako wiarygodne narzędzie w praktyce inżynierskiej. *MES* jest dziś efektywnym narzędziem rozwiązywania złożonych układów równań różniczkowych budowanych przez aparat mechaniki kontinuum. Rozwojowi tej metody towarzyszy pogłębianie wiedzy na temat wzajemnych relacji pomiędzy modelem teoretycznym, dyskretyzacją a wynikami rozwiązania. Za pomocą metody elementów skończonych rozwiązywane są liniowe jak i nieliniowe układy równań, zob. Simo i Taylor (1984), uwzględniane są więzy kinematyczne, zob. Engelman i in. (1982), następuje rozwój w kierunku wykorzystania przetwarzania równoległego a wszystko to ma na celu rozwiązywanie coraz to większych, bardziej złożonych problemów z jednoczesnym zwiększeniem dokładności, nawet w przypadkach które do tej pory pozwalały jedynie na analizę jakościową. Jednym z kierunków, na który aktualnie kładziony jest wielki nacisk jest dokładniejsza analiza struktury wewnętrznej materiału i zdefiniowanie właściwości materiału na poziomie mikro. Jeszcze innym kierunkiem rozwoju metody elementów skończonych jest połączenie procesów projektowania i wytwarzania urządzeń (*CAD/CAM*) usprawniające procesy technologiczne. Oczekiwania co do *MES* są ogromne, czego przykładem może być rozwój narzędzi obliczeniowych związanych z plastycznością, tarcieniem, przepływem ciepła i dyfuzją, zob. Chenot i in. (1992), Shen i Dawson (1995), Teodosiou (1997), Huetink i Baaijens (1998), Dawson (2000). Pojawiły się modele uwzględniające strukturę wewnętrzną materiału przy modelowaniu makroskopowego zachowania ciała, jak również przewidujące ewolucję struktury. Możliwe jest uwzględnienie dendrytów, granic ziarn, dyslokacji i ich struktury, pustek czy też inkluzji. Obecne wysiłki skierowane są na rozwój metod łączących strukturę wewnętrzną materiału z makroskopowym zachowaniem ciała. Zakres możliwej do uwzględnienia struktury materiału rozciąga się od poziomu atomów aż do makroskopowych wymiarów ciała czyli kilka poziomów wymiarów charakterystycznych.

Celem tych zabiegów jest stworzenie i rozwój narzędzia obliczeniowego tzw. *multiscale modeling*, który opisywałby makroskopowo zachowanie materiału poprzez konsekwentny opis materiału na różnych poziomach wymiarów. Idąc od najmniejszej cząstki materii - atomu, poprzez informację o ich ułożeniu w pojedyncze kryształy, kolumny atomowe, poszczególne fazy materiału docierając aż do makroskopowych wymiarów ciała. Reakcja materiału w mikroskali uśredniana jest zwykle do mezoskali by dać opis materiału na tym i wyższych poziomach, podczas gdy kinematyka jest "przenoszona" w odwrotnym kierunku - na niższy poziom wymiarowy. Modele takie powinny uwzględniać defekty struktury oraz ich orientację przestrzenną. Defekty struktury wyższego poziomu mogą, choć nie muszą nakładać się na defekty niższego poziomu, np. granice ziarn mogą nakładać się na wakansy i dyslokacje. Kierunki rozwoju, formalizm i konwencje jak dotąd jeszcze nie okrzepły. Część koncepcji, zwłaszcza w mikroskali jest czysto intuicyjna, dlatego też precyzja w terminologii potrzebna jest aby ściślej powiązać różne metodologie stosowane na różnych poziomach modelowania, zob. Dawson (2000). Jakkolwiek warto nadmienić, że na dzień dzisiejszy dopracowane modele mechaniki kontinuum pozwalają modelować obszary zawierającą tysiące komórek elementarnych kryształu wraz z granicami ziarn. Obszar ten jednak, ciągle jest znacząco większy w porównaniu z możliwościami metod dyskretnych, które umożliwiają modelowanie obszarów porównywalnych z długością wektora Burgersa dyslokacji. W tym obszarze (tzn. makro i mezoskali) MES oparty na modelach mechaniki kontinuum ma niewątpliwą przewagę nad modelami dyskretnymi, które ograniczone są do stosunkowo niewielkich obszarów struktury. Silnym bodźcem rozwoju metod numerycznych jest konieczność przewyciężenia barier prostych, choć na pewnym etapie oczekiwani doskonale spełniających swoje zadanie, makroskopowych teorii. Pierwsze podejście do tematu modelowania numerycznego struktury ograniczone było do teorii geometrycznie i fizycznie liniowych, stopniowy wzrost złożoności sformułowań usuwa to ograniczenie. Dziś wyzwaniem staje się poprawny opis anizotropowych właściwości materiału czy jego silnie nieliniowego zachowania się przy dużych deformacjach.

Metoda elementów skończonych znalazła dziś wiele różnorodnych zastosowań w wielu gałęziach przemysłu. Jest stosowana wszędzie tam, gdzie modelowanie zachodzącego procesu spełnia niezwykle ważną rolę, jak np. w przypadku obróbki plastycznej metali gdzie symulacje numeryczne pozwalają przewidzieć zachowanie materiału w trakcie formowania. Dzięki temu jesteśmy w stanie tak prowadzić proces deformacji plastycznej aby unikać uszkodzeń materiału. Innym przykładem może być modelowanie niezwykle wolno zachodzących procesów, jak np. migracja pustek, inicjacja pęknięć zmęczeniowych i wiele innych. Jeszcze innym problemem gdzie MES znajduje zastosowanie jest modelowanie umocnienia plastycznego materiałów gdzie rozkład i ilość dyslokacji odgrywa główną rolę. Dokładny opis przestrzennego rozkładu dyslokacji tworzących ściany czy bariery, w stosunku do uśrednionej gęstości dyslokacji daje w efekcie lepszy opis umocnienia materiału. Metoda elementów skończonych obok metod dynamiki molekularnej przyjęła się jako narzędzie do wyznaczania naprężeń residualnych w samonaprzężonych heterostrukturach półprzewodnikowych. Dzięki szerokiej dostępności i elastyczności pakietów komercyjnych MES stanowi doskonale narzędzie do rozwiązywania problemów ze skomplikowaną geometrią i warunkami brzegowymi. Zdecydowana większość obliczeń samonaprzężonych heterostruktur nie uwzględnia nieliniowości geometrycznej i fizycznej charakterystycznej dla kryształów. O

ile ujęcie nieliniowości fizycznej ze względu na dużą rozbieżność w danych eksperymentalnych można przyjąć za usprawiedliwione względami natury technicznej o tyle pomijanie nieliniowości geometrycznej w przypadku wyznaczania naprężeń i konfiguracji równowagowej dyslokacji w heterostrukturach epitaksjalnych stanowi wg autora zbyt daleko idące uproszczenie modelu, zob. Hu (1997), Van Mieghem i in. (1994), Jain i in. (1995), Schwarz i Chidambarao (1999), Zang i Bower (1999). Niemniej jednak, podejście takie jest powszechne i stanowi użyteczne technologicznie rozwiązanie.

Przy opracowywaniu modelu numerycznego kryształu należy pamiętać o tym, że za pomocą elementów skończonych modelujemy materiał o wymiarach charakterystycznych znacznie mniejszych niż wymiar pojedynczego elementu skończonego. Dlatego też, należy zachować daleko idącą ostrożność przy uwzględnianiu struktury wewnętrznej materiału przy opisie zjawisk, takich jak warstwy z wtrąceniami czy w okolicach krawędzi pęknięcia, zob. Cuitino i Ortiz (1992), Ortiz (1996), dodatkowo zapewniając poprawność rozwiązania numerycznego, zob. Hutchinson (1976), Berveiller i Zaoui (1978), Prantil i in. (1995), Barton i in. (1999). Wysokie wymagania sprzętowe i długi czas obliczeń na razie mocno ograniczają możliwości takiego podejścia.

Metoda elementów skończonych użyta do komputerowej symulacji dużych deformacji sprężystych powinna spełniać kilka fundamentalnych założeń. Równania konstytutywne powinny zapewniać zachowawczość energii dla dowolnie wybranego zamkniętego cyklu sprężystej deformacji. Wiele modeli konstytutywnych uwzględnia zmiany konfiguracji ale ignoruje tę podstawową zasadę, por. modele hiposprężyste. Używając wspomnianych modeli do symulacji procesów zachodzących na zamkniętych pętlach deformacji otrzymamy nie więcej jak perpetuum mobile produkujące lub anihilujące (w zależności od kierunku cyklu obciążenia) energię. Aby uniknąć tak nierzeczywistego zachowania modeli materiału sprężystego można zastosować model hipersprężysty oparty na założeniu istnienia potencjału sprężystego opisującego właściwą energię odkształcenia, zmagazynowaną podczas deformacji.

4.1 Podstawy algorytmu MES

Wykorzystywany w pracy algorytm MES oparty jest na całkowaniu lokalnej postaci równania równowagi (2.11), w konfiguracji aktualnej:

$$\sigma_{ij,j} = 0. \quad (4.1)$$

gdzie tensor naprężenia Cauchy'ego σ jest nieliniową funkcją przemieszczenia \mathbf{u} , gradientu przemieszczenia $\nabla \mathbf{u}$ oraz dystorsji sieci $\boldsymbol{\beta}$ i ich gradientu $\nabla \boldsymbol{\beta}$ związanych z trwałą reorganizacją sieci krystalicznej. Stosując zasadę prac przygotowanych mnożymy powyższe równanie przez przemieszczenie przygotowane $\delta \mathbf{u}$, a następnie całkujemy po objętości ciała w konfiguracji aktualnej:

$$\int_v \delta \mathbf{u} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \, dv = \mathbf{0}. \quad (4.2)$$

Całkując przez części otrzymujemy:

$$\int_v \operatorname{div}(\delta \mathbf{u} \boldsymbol{\sigma}) \, dv - \int_v \nabla(\delta \mathbf{u}) \boldsymbol{\sigma} \, dv = \mathbf{0}, \quad (4.3)$$

po czym pierwszą z powyższych całek objętościowych zamieniamy na całkę powierzchniową:

$$\int_{\partial v} \delta \mathbf{u} \boldsymbol{\sigma} d(\partial v) - \int_v \nabla(\delta \mathbf{u}) \boldsymbol{\sigma} dv = \mathbf{0}. \quad (4.4)$$

Wprowadzamy funkcję wagową \mathbf{N}^u dla przemieszczenia przygotowanego, która określana jest lokalnie dla każdego elementu z osobna:

$$\delta u = N^u_i \delta u^i, \quad (4.5)$$

gdzie indeks i oznacza numer kolejny węzła elementu skończonego. Możemy zatem (4.4) zapisać w nowej postaci:

$$\int_{\partial v} N^u_i \delta u^i \boldsymbol{\sigma} d(\partial v) - \int_v \nabla(N^u_i \delta u^i) \boldsymbol{\sigma} dv = \mathbf{0}, \quad (4.6)$$

i wyłączyć przemieszczenie przygotowane spod całek:

$$\left[\int_{\partial v} \mathbf{N}^u \boldsymbol{\sigma} d(\partial v) - \int_v \nabla \mathbf{N}^u \boldsymbol{\sigma} dv \right] \delta \mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (4.7)$$

Ponieważ przemieszczenie przygotowane może przyjmować dowolne wartości, zatem spełnienie warunku (4.7) wymaga spełnienia równania:

$$\int_{\partial v} \mathbf{N}^u \boldsymbol{\sigma} d(\partial v) - \int_v \nabla \mathbf{N}^u \boldsymbol{\sigma} dv = \mathbf{0}. \quad (4.8)$$

Powyższy układ równań zapisany jako macierzowe równanie algebraiczne przyjmuje postać:

$$\mathbf{f} = \mathbf{P}(\mathbf{u}), \quad (4.9)$$

gdzie \mathbf{f} oznacza wektor sił obciążenia zewnętrznego:

$$f_i = \int_{\partial v} N^u_i \boldsymbol{\sigma} d(\partial v), \quad (4.10)$$

a $\mathbf{P}(\mathbf{u})$ oznacza wektor sił wewnętrznych:

$$P_i(\mathbf{u}) = \int_v \nabla N^u_i \boldsymbol{\sigma} dv. \quad (4.11)$$

Równanie powyższe rozwiązujemy iteracyjnie metodą Newtona-Raphsona (NR), zob. Rakowski i Kacprzyk (1993), Zienkiewicz i Taylor (1994) wykorzystując poniższy schemat rozwiązania:

$$\mathbf{P}(\mathbf{u}^{\omega+1}) = \mathbf{P}(\mathbf{u}^\omega) + \frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{u}^\omega)}{\partial \mathbf{u}} (\mathbf{u}^{\omega+1} - \mathbf{u}^\omega), \quad (4.12)$$

gdzie pochodna cząstkowa $\frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}$ jest macierzą sztywności \mathbf{K} układu. Macierz sztywności, zwana też macierzą styczną przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \int_v \nabla \mathbf{N} \boldsymbol{\sigma} dv}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \int_v \nabla \mathbf{N} \boldsymbol{\sigma} \frac{dv}{dV} dV}{\partial \mathbf{u}} = \int_v \frac{\partial [\nabla \mathbf{N} \boldsymbol{\sigma} \frac{dv}{dV}]}{\partial \mathbf{u}} dV \\ &= \int_v \frac{\partial \nabla \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}} \boldsymbol{\sigma} dv + \int_v \nabla \mathbf{N} \frac{\partial(\boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \det \mathbf{F}^{-1} dv. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Występujące w powyższym równaniu dwie całki związane z pochodnymi cząstkowymi możemy zinterpretować jako część geometryczną $\frac{\partial \nabla \mathbf{N}}{\partial \mathbf{a}}$ macierzy stycznej, która zależy od geometrii elementu skończonego, oraz część konstytutywną $\frac{\partial(\boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}}$ zależną od przyjętego modelu konstytutywnego. Ze względu na fakt, że część macierzy stycznej układu związana ze zmianami funkcji kształtu w porównaniu do części konstytutywnej nie wnosi istotnego wkładu do globalnej macierzy stycznej oraz nie wpływa w zauważalny sposób na proces zbieżności obliczeń, przyjmowana jest przybliżona macierz styczna postaci:

$$\mathbf{K} \cong \int_v \nabla \mathbf{N} \frac{\partial(\boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \det \mathbf{F}^{-1} dv. \quad (4.14)$$

Rozpisując równanie (4.14) w postaci indeksowej oraz wykorzystując zależność:

$$\frac{\partial F^i_J}{\partial u^k} = N^i_{k,J} \quad (4.15)$$

otrzymamy postać macierzy stycznej:

$$K_{mn} = \int_v N_{ij,m} \frac{\partial(\sigma^{ij} \det \mathbf{F})}{\partial F^k_L} N^k_{n,L} \det \mathbf{F}^{-1} dV. \quad (4.16)$$

Podstawiając za naprężenie Cauchy'ego (3.27) i dokonując przepisaniem równaniem (4.16) różniczkowania otrzymamy:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sigma^{ij} \det \mathbf{F})}{\partial F^a_A} &= \left(\frac{\partial R^i_I}{\partial F^a_A} R^j_J + R^i_I \frac{\partial R^j_J}{\partial F^a_A} \right) \hat{A}^{IJ}_{KL} \hat{c}^{KLMN} \hat{\varepsilon}_{MN} \\ &+ R^i_I R^j_J \left(\frac{\partial \hat{A}^{IJ}_{KL}}{\partial U^P_R} \hat{c}^{KLMN} \hat{\varepsilon}_{MN} + \hat{A}^{IJ}_{KL} \hat{c}^{KLMN} \frac{\partial \hat{\varepsilon}_{MN}}{\partial U^P_R} \right) \frac{\partial U^P_R}{\partial F^a_A}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Otrzymana w ten sposób analityczna postać pochodnej $\frac{\partial(\boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}}$ jest kłopotliwa do implementacji numerycznej głównie za sprawą czasochłonności obliczeń kolejnych pochodnych cząstkowych. Należy zwrócić uwagę na niezwykle złożoność powyższych formuł, np. pochodna $\frac{\partial \hat{\mathbf{A}}}{\partial \mathbf{U}}$ jest tensorem 6-tego rzędu. Dodatkowo tak obliczoną pochodną należy obrócić z układu wektorów własnych tensora rozciągnięcia do globalnego układu współrzędnych próbki, z którym związany jest tensor stałych sztywności $\hat{\mathbf{c}}$. Wiąże się to ze żmudnymi obliczeniami, stąd autor po analizie porównawczej zbieżności obliczeń przy użyciu pochodnej analitycznej i obliczeń przy wykorzystaniu metody różnicowej $\frac{\Delta(\boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\Delta \mathbf{F}}$ wykorzystywał tę drugą metodę. Uzyskano w ten sposób znaczący przyrost szybkości działania programu FEAP bez zauważalnego pogorszenia procesu zbieżności. Do obliczeń metodą różnicową parametr ΔF_{ij} przyjmowany jest zwykle równy 10^{-6} . Proces iteracji jest prowadzony do momentu, kiedy zmiana energii układu na kolejnym kroku obliczeń będzie mniejsza niż żądana tolerancja rozwiązania, która zwykle wynosi 10^{-16} .

Algorytm numeryczny diskutowany powyżej został zastosowany przez autora w programie FEAP - Zienkiewicz i Taylor (1994) w postaci elementów użytkownika 2D i 3D, tzw. *user elements*.

4.2 Pochodna $\frac{\partial \nabla \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}}$

Poszukujemy związków opisujących pochodną cząstkową gradientu funkcji kształtu $\nabla \mathbf{N}$ po przemieszczeniach węzłowych elementu skończonego \mathbf{u} . Dla danego punktu Gaussa możemy zapisać:

$$\frac{\partial N_{m,k}}{\partial u^i_j} = \frac{\partial}{\partial u^i_j} \left(N_{m,K} \bar{F}^{-1K}_k \right) = N_{m,K} \frac{\partial \bar{F}^{-1K}_k}{\partial u^i_j}, \quad (4.18)$$

gdzie m oznacza numer węzła elementu skończonego a i numer stopnia swobody j -tego węzła. W celu wyznaczenia poszukiwanej pochodnej rozpiszmy na wstępie równanie:

$$\frac{\partial(\mathbf{F}^{-1}\mathbf{F})}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{F}^{-1}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{F} + \mathbf{F}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{0}, \quad (4.19)$$

i wyznaczmy poszukiwaną pochodną cząstkową:

$$\frac{\partial \bar{F}^{-1K}_k}{\partial u^i_j} = - \bar{F}^{-1K}_l \frac{\partial F^l_L}{\partial u^i_j} \bar{F}^{-1L}_k. \quad (4.20)$$

Analizując wzór (4.20) możemy napisać, że w elemencie skończonym zachodzi relacja:

$$F^l_L = I^l_L + u^l_{,L} \Rightarrow F^l_L = I^l_L + u^l_i N_{i,L} \quad (4.21)$$

stąd wynika, że:

$$\frac{\partial F^l_L}{\partial u^i_j} = \frac{\partial(u^l_k N_{k,L})}{\partial u^i_j} = N_{k,L} \delta^l_i \delta_k^j. \quad (4.22)$$

Możemy zatem powyższą zależność wstawić do wzoru 4.18 i zapisać, że poszukiwana pochodna ma postać:

$$\frac{\partial N_{m,k}}{\partial u^i_j} = -N_{m,K} \bar{F}^{-1K}_l \frac{\partial F^l_L}{\partial u^i_j} \bar{F}^{-1L}_k = -N_{m,K} \bar{F}^{-1K}_l N_{n,L} \delta^l_i \delta_n^j \bar{F}^{-1L}_k. \quad (4.23)$$

Upraszczając powyższe równanie otrzymamy w efekcie wzór opisujący zmiany funkcji kształtu elementu jako funkcji zmiennych węzłowych, stanowiący część macierzy stycznej:

$$\frac{\partial N_{m,k}}{\partial u^i_j} = -N_{m,l} N_{n,k} \delta^l_i \delta_n^j. \quad (4.24)$$

Rozdział 5

Przykłady numeryczne

W idealnej sieci kryształu wszystkie atomy zajmują swoje ściśle określone położenia przestrzenne. W strukturze zachodzi równowaga sił między atomami i stan naprężenia wywołany jest jedynie działaniem zewnętrznego obciążenia. Rzeczywistym kryształom daleko jednak do wspomnianego ideału. Defekty struktury będące fizycznymi obiektami, wprowadzają lokalne zaburzenia porządku idealnej struktury krystalicznej. Defekty punktowe, liniowe, powierzchniowe i objętościowe są czynnikami, które zaburzają regularne położenia atomów w strukturze czego następstwem są naprężenia residualne. Defekty występują we wszystkich kryształach, nawet długotrwale wyżarzane kryształy zawierają sieć dyslokacji. Nieliczne, sztucznie hodowane kryształy nitkowe (*wiskers*) i sporadycznie kryształy krzemu nie zawierają defektów sieci. Typowa gęstość dyslokacji dla dobrze wyżarzonych metali wynosi zazwyczaj $10^6 \div 10^8 \text{ cm}^{-2}$, zob. Hull (1965). W przypadku typowych półprzewodnikowych heterostruktur epitaksjalnych gęstość dyslokacji wynosi $10^8 \div 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, zob. Ruterana i in. (2003). Poprzez dobranie optymalnych warunków wzrostu, zastosowanie odpowiedniego podłoża i wreszcie odpowiednią obróbkę termiczną wyhodowanej próbki jesteśmy w stanie otrzymać kryształy o gęstości dyslokacji rzędu 10^6 cm^{-2} .

Podstawowym źródłem defektów sieci jest sam proces hodowli kryształów. Defekty sieci zawarte w podłożu i przecinające powierzchnię wzrostu bez przeszkód przechodzą do hodowanego kryształu. Z drugiej strony w hodowanych kryształach defekty struktury powstają jako wynik specyfiki procesu wzrostu kryształu np. podczas łączenia się przypadkowo zarodkowanych i swobodnie rosnących wysp kryształu, np. wzrost typu *Stranski-Krastanow*. Najprostszym z defektów sieci jest defekt punktowy, ze względów geometrycznych traktowany jako defekt zerowymiarowy. Powstaje na skutek braku atomu na odpowiedniej pozycji w sieci krystalicznej lub też z nadmiarowym atomem w położeniu międzywęzłowym. Z tego względu defekty punktowe lokalizują się głównie w pobliżu węzłów sieci krystalicznej i rozróżniamy następujące ich typy:

- wakans - brak atomu w danym węźle sieci,
- atom międzywęzłowy - dodatkowy atom rodzimy w położeniu międzywęzłowym,
- atom podstawieniowy - obcy atom zajmujący miejsce atomu rodzimego w pozycji węzłowej,

- międzywęzłowy atom obcy - zajmujący pozycję międzywęzłową.

W przypadku kryształów o wiązaniach jonowych generowanie defektu punktowego związane jest z powstawaniem lokalnego, nierównoważonego ładunku elektrycznego stąd aby cały kryształ zachował równowagę elektryczną defekty punktowe powinny powstawać jako pary dwóch defektów o przeciwnych ładunkach. Stąd, dodatkowo możemy wyróżnić:

- defekt Frenkla - wakans z jonem międzywęzłowym o tym samym znaku ładunku,
- defekt Schottky'ego - para wakansów o przeciwnych znakach ładunku.

Powstawanie defektów punktowych spowodowane jest:

- działaniem promieniowania - cząstki o dużej energii wybijają atomy z ich położeń węzłowych, powstająca ilość wakansów równa jest liczbie atomów międzywęzłowych,
- odkształceniem plastycznym - powoduje wzrost wakansów jak i atomów międzywęzłowych,
- temperaturą - jej wzrost powoduje wzrost energii kryształu i zwiększenie amplitudy drgań cieplnych.

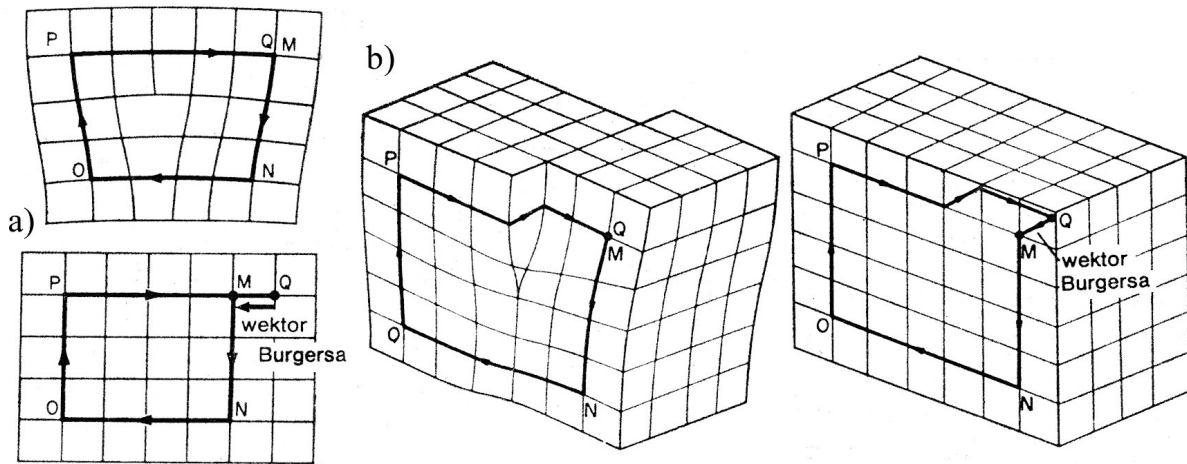
Ze względu na fakt, że wakanse w porównaniu z atomami międzywęzłowymi mają dość niską energię nukleacji ($\sim 1[eV]$) dominują w warunkach równowagowych i z tego względu głównie one są nośnikami dyfuzji w metalach. Wzrost prędkości dyfuzji wraz ze wzrostem temperatury jest ściśle związany ze wzrostem ilości wakansów w strukturze.

Koncepcja liniowego defektu sieci krystalicznej zwana dyslokacją powstała pierwotnie przy badaniu procesów deformacji plastycznej. Wielkością opisującą dyslokacje jest wektor Burgersa. Jest to wektor konieczny do zamknięcia konturu Burgersa - pętli łączącej atomy wokół dyslokacji, zob. rys.(5.1). Ze względu na orientację wektora Burgersa w stosunku do linii dyslokacji rozróżniamy:

- dyslokacje krawędziowe - wektor Burgersa jest prostopadły do linii dyslokacji,
- dyslokację śrubową - wektor Burgersa jest równoległy do linii dyslokacji,
- dyslokację mieszaną - wektor Burgersa z linią dyslokacji tworzy kąt z zakresu $0 \div 90^\circ$.

Powierzchnie czy też granice ziarn w kryształach są również defektami idealnej, nieskończonej z założenia sieci atomów. Granice tworzone są na powierzchniach rozdziału ziarn kryształu o różnej orientacji, gdzie powstają szeregi dyslokacji o częstości występowania proporcjonalnej do kąta dezorientacji między ziarnami. Innymi ciekawymi defektami powierzchniowymi sieci są bliźniaki, powstające przez dowolną transformację sieci atomów leżących poniżej pewnej linii. Najprostsze do zobrazowania jest lustrzane odbicie, a ponieważ położenia atomów na granicy bliźniaka odpowiadają węzłom sieci idealnej nadal mamy do czynienia z strukturą niskoenergetyczną.

Poprzez odpowiedni dobór odkształceń heterostruktury jesteśmy w stanie zmodyfikować szerokość przerwy energetycznej struktury pasmowej półprzewodnika. Podejście takie,



Rysunek 5.1: Kontur Burgersa w kryształcie zawierającym dyslokację: a) dyslokacja krawędziowa, b) dyslokacja śrubowa, wg Hull (1965).

zwane *band engineering* polegające na modyfikacji istniejących czy też wprowadzeniu nowych naprężeń residualnych do struktury półprzewodnikowej odgrywa znaczącą rolę w procesie projektowania i pracy urządzenia półprzewodnikowego. Dlatego też, ważna jest znajomość wartości naprężeń residualnych i ich wpływu na charakterystykę pracy urządzenia. Możemy odpowiednio sterować procesem wytwarzania heterostruktur poprzez dobór materiałów na interfejs, co ma kluczowy wpływ na stopień wzajemnego niedopasowania warstw epitaksjalnych a przez to na efekty kwantowe. Wpływ niejednorodnego pola naprężeń residualnych w heterostrukturach półprzewodnikowych na ich właściwości optoelektroniczne dla niskowymiarowych struktur (kropki, druty i studnie kwantowe) jest obecnie przedmiotem intensywnych badań ze względu na doniosły wpływ na charakterystyki pracy urządzeń opartych na ich bazie, zob. np. O'Reilly (1989), Yang i in. (1991), Yu i in. (1992), Freund (1999), Johnson i Freund (2001). Modelowanie zachowania dyslokacji w kryształcie stanowi poważne wyzwanie dla mechaniki kontinuum ze względu na skalę zjawiska zachodzącego na poziomie komórki elementarnej. W przypadku klasycznych rozważań dotyczących pojedynczej dyslokacji przyjmuje się, że obszar rdzenia obejmuje swym zasięgiem obszar o promieniu ok. 5-ciu wektorów Burgersa dyslokacji, a dopiero w odległości ok. $10^4 b$ można zaniedbać wpływ dyslokacji na strukturę i traktować ten obszar kryształu jako niezaburzony, zob. np. Hull (1965), Hirth i Lothe (1982). Z drugiej strony w półprzewodnikowych warstwach epitaksjalnych bez trudu można wskazać obszary, gdzie dyslokacje położone są w odległościach rzędu kilku stałych sieciowych, por. rys.(5.3) gdzie odległość między dyslokacjami wynosi ok. 7-miu stałych sieciowych. Mimo, że dyslokacje były i są nadal przedmiotem wielu badań, rdzeń dyslokacji nadal stanowi poważny problem przy modelowaniu metodami kontynualnymi, zob. np. Cottrell (1953), Seeger i Schoeck (1953), Teutonico (1962), Teutonico (1963), Duncan i Kuhlmann-Wilsdorf (1966), Head (1964), Nabarro (1967), Kret i in. (2000), Dłużewski i in. (2002a), Nabarro (2003), Dłużewski i

in. (2004), Maciejewski i Dłużewski (2004), Roy i Acharaya (2005). W tym przypadku z pomocą przychodzą metody statyki i dynamiki molekularnej, zob. np. Lepinoux i Kubin (1987), Guluoglu i in. (1989), Lubarda i in. (1993), Barts i Carlsson (1995), Wang i LeSar (1995), Lepinoux i in. (2000). Innym podejściem do modelowania zjawisk zachodzących w mikroskali są metody mechaniki statystycznej, zob. np. Walgraef i Aifantis (1985), Gregor i Kratochvil (1990), Kratochvil i Saxlova (1992), Saxlova i in. (1997), Hähner i in. (1998), Zaiser i in. (1998), Thomson i in. (2002), El-Azab (2000). Analizując układy dyslokacji występujących w heterostrukturach epitaksjalnych można dojść do wniosku, że takie struktury możliwe są do analizy jedynie przy pomocy metod dyskretnych. Niestety symulacje dyskretnych struktur atomowych ograniczone są jak dotąd przez maksymalną liczbę atomów, które można uwzględnić podczas symulacji. W chwili obecnej symulacje statyką i dynamiką molekularną przeprowadzane są dla obszarów o wymiarach charakterystycznych mniejszych niż 100 nm i skali czasu poniżej nanosekund, zob. Ghoniem i in. (2003). W tym przypadku wydaje się, że nieliniowa sprężystość może znaleźć tu swe zastosowanie jako kompromis pomiędzy dokładnością metod dyskretnych a elastycznością i szybkością metod kontynualnych. Dzięki uwzględnieniu nieliniowości możliwe staje się przewyciężenie ograniczeń klasycznego podejścia pozwalając na analizę struktur o dużej gęstości dyslokacji. Dopóki gęstość defektów jest kilka rzędów niższa niż gęstość upakowania atomów jesteśmy w stanie opisać oddziaływanie pomiędzy defektami poprzez siły oddziaływań nieliniowej sprężystości. Problem mechaniczny struktury z defektami może być dodatkowo uproszczony, gdyż przemieszczenia wszystkich atomów w kryształach nie są tak istotne jak przemieszczenie atomów w rdzeniu dyslokacji i jego okolicach. Dzięki temu liczba stopni swobody koniecznych do analizy zdeformowanej struktury kryształu gwałtownie maleje. Ze względu na gwałtowny rozwój metod numerycznych w ciągu ostatnich kilku dekad podejście to z czysto teoretycznych rozważań przeszło do praktycznych zastosowań. Pionierzy próbujący ująć w matematyczne formuły naturę defektów struktury, zob. Eshelby (1957), Kröner (1958), Mura (1968) skupiali się na opisie pól sprężystych wokół nieruchomych defektów, podczas gdy dziś modelowanie numeryczne rzeczywistych struktur próbuje opisać ewolucję defektów czy nawet całych grup defektów. Oprócz badań prowadzonych od wielu lat dotyczących wpływu defektów struktury na podstawowe właściwości mechaniczne materiałów, ostatnimi czasy poważnym wyzwaniem dla badaczy staje się zbadanie wpływu defektów na właściwości optoelektroniczne układów półprzewodnikowych. Przykładem może być oddziaływanie pola naprężeń związane z obecnością defektu struktury na nośniki ładunku elektrycznego a obserwowane już w stosunkowo dużych odległościach od defektów, patrz np. Alexander i Teichler (2000), SIA (2002). Stąd znajomość dokładnego rozkładu odkształceń i naprężeń sieci krystalicznej wokół defektu, uwzględniającego specyficzne właściwości kryształów, takich jak nieliniowość sprężystej deformacji czy też anizotropię właściwości sprężystych, pozwoli na dokładniejszy opis mechanicznych i optoelektronicznych właściwości struktur krystalicznych. Podstawową metodą bezpośredniej obserwacji defektów struktury jest prześwietleniowa mikroskopia elektronowa (*TEM*), która w ciągu ostatnich lat znacznie zwiększyła nasze możliwości badania struktur krystalicznych w skali atomowej. Osiągana dzisiaj dokładność pomiaru przemieszczeń kolumn atomowych przy pomocy HRTEM wynosi 0.03 Å, zob. Hýtch i in. (2003). Pomimo ogromnych możliwości jakie dają nam coraz dokładniejsze badania

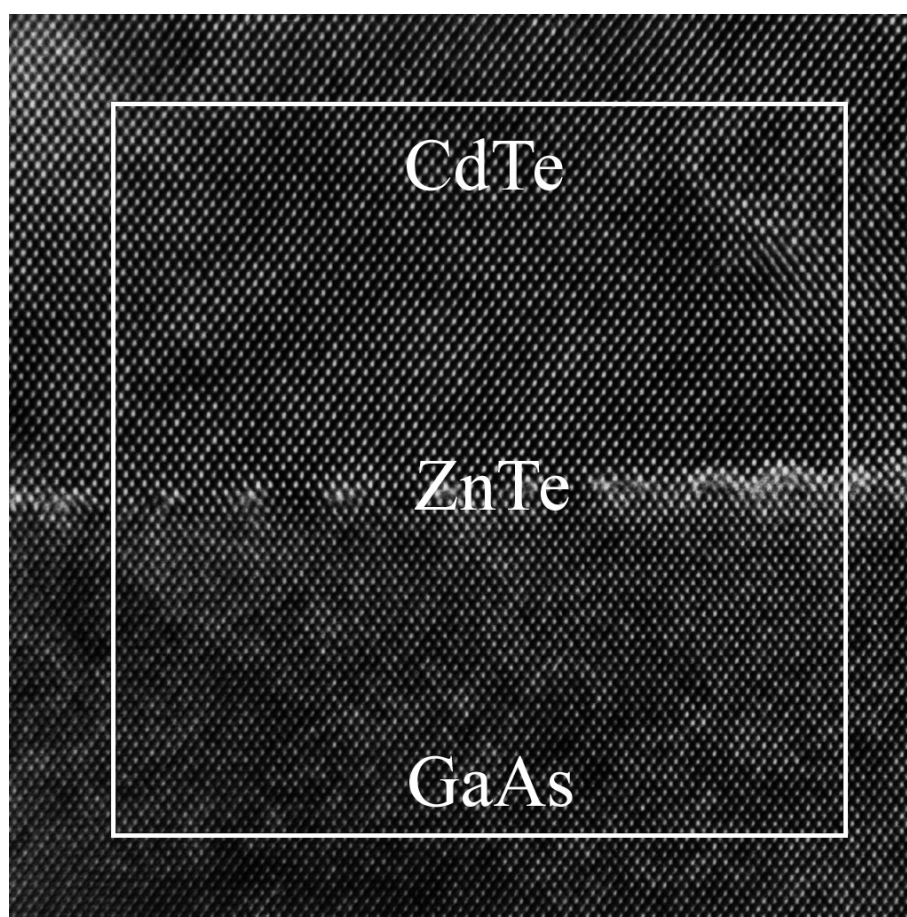
eksperymentalne, kontynualne modele obliczeniowe, którymi dysponujemy do symulacji zjawisk związanych z oddziaływaniem defektów na strukturę sieci krystalicznej opierają się w większości na analitycznych rozwiązaniach otrzymanych na bazie liniowej teorii sprężystości, np. Hirth i Lothe (1982). Z drugiej strony ogromna ilość symulacji numerycznych badających zachowanie się struktur krystalicznych wykorzystuje techniki statyki i dynamiki molekularnej oparte na tzw. potencjałach atomowych, zob. np. Born i Huang (1956), Macmillan i Kelly (1972), Milstein (1971), Angello i Mills (1995). Metody te doskonale sprawdzają się w przypadku badania przejść fazowych, symulacji pojedynczych defektów lecz w przypadku dużych obszarów ze względu na konieczność uwzględnienia ogromnej ilości atomów i wzajemnych oddziaływań pomiędzy nimi konieczne jest tworzenie metod hybrydowych łączących statykę i dynamikę molekularną z metodą elementów skończonych, zob. np. Rao i in. (1998). Defekty struktury krystalicznej i ich wpływ na zjawiska zachodzące w kryształach, np. pole odkształceń i naprężeń bliskiego i dalekiego zasięgu, wzrost energii kryształu związany z obecnością defektów, aktywacja zjawiska transportu w kryształach czy też oddziaływania pomiędzy defektami są niezwykle ważnym zagadnieniem na drodze do zrozumienia zasad rządzących zachowaniem kryształu na poziomie komórki elementarnej. Dlatego też, sformułowanie nowego numerycznego algorytmu obliczeniowego wykorzystującego aparat mechaniki kontinuum i uwzględniającego wspomnianą już specyfikę kryształów staje się potrzebą chwili.

5.1 Dyslokacje niedopasowania w heterostrukturze GaAs/ZnTe/CdTe

Do wyznaczania naprężeń w heterostrukturach półprzewodnikowych za pomocą metod analizy kontynualnej najczęściej stosuje się metodę elementów skończonych, zob. Cristfield (1997), Belytschko i in. (2000). Wyznaczanie odkształceń sieci krystalicznej na podstawie analizy obrazów wysokorozdzielczej transmisyjnej mikroskopii elektronowej *HRTEM* było w ostatnich latach przedmiotem wielu badań, zob. np. Kisielowski i in. (1997), Dłużewski i in. (2002b), Hýtch i in. (2003). Ze względu na obrazowanie położenia kolumn atomowych, obrazy mikroskopowe są doskonałym źródłem informacji na temat pól odkształceń sieci w skali atomowej. Analiza obrazów mikroskopowych okazała się szczególnie przydatna w odniesieniu do półprzewodnikowych warstw pseudomorficznych czy koherentnych wysp, zob. np. Bayle i in. (1993), Bierwolf i in. (1993), Robertson i in. (1995), Hýtch i in. (1998), Kret i in. (1998), Snoeck i in. (1998), Möbus i Wagner (1999). Połączenie *MES* z analizą obrazów *HRTEM* pozwala wyznaczyć wartość naprężeń residualnych w heterostrukturach. Wykorzystanie dystorsji sieci jako danych wejściowych przy wyznaczaniu naprężeń residualnych i konfiguracji równowagowej w zdefektowanej strukturze krystalicznej było przedmiotem prac, np. Dłużewski i in. (2002b), Maciejewski i Dłużewski (2004), Dłużewski i in. (2004). Jedną z metod analizy obrazów mikroskopowych jest metoda *fazy geometrycznej* zaproponowana przez Hýtcha (1997), w której przemieszczenia sieci krystalicznej mierzone są lokalnie, jako składowe prążków obrazu mikroskopowego w przestrzeni Fouriera, zob. Hýtch i in. (1998). Technika ta jest niezwykle pomocna w pomiarach silnie zdefektowanych sieci, np. wokół dyslokacji. Inną użyteczną techniką jest

metoda *peak finding*, czyli analiza uśrednionych wzdłuż grubości próbki położenia kolumn atomowych poprzez lokalizację na obrazach mikroskopowych obszarów o maksymalnej intensywności. Przy analizie tej zakładane jest istnienie bezpośredniego związku pomiędzy maksimum intensywności na obrazie a położeniem kolumny atomowej. Zmierzona mapa odległości pomiędzy kolumnami atomowymi porównywana jest z mapą idealnej struktury krystalicznej dzięki czemu otrzymujemy pole przemieszczeń sieci pomiędzy idealną a rzeczywistą strukturą kryształu poddanego analizie. Analizę obrazu mikroskopowego przeprowadza się zwykle za pomocą dedykowanych procedur graficznych w rozbudowanych środowiskach graficznych, np. OPTIMAS (1999).

W tym przypadku analizie poddano obraz mikroskopowy struktury GaAs/ZnTe/CdTe,



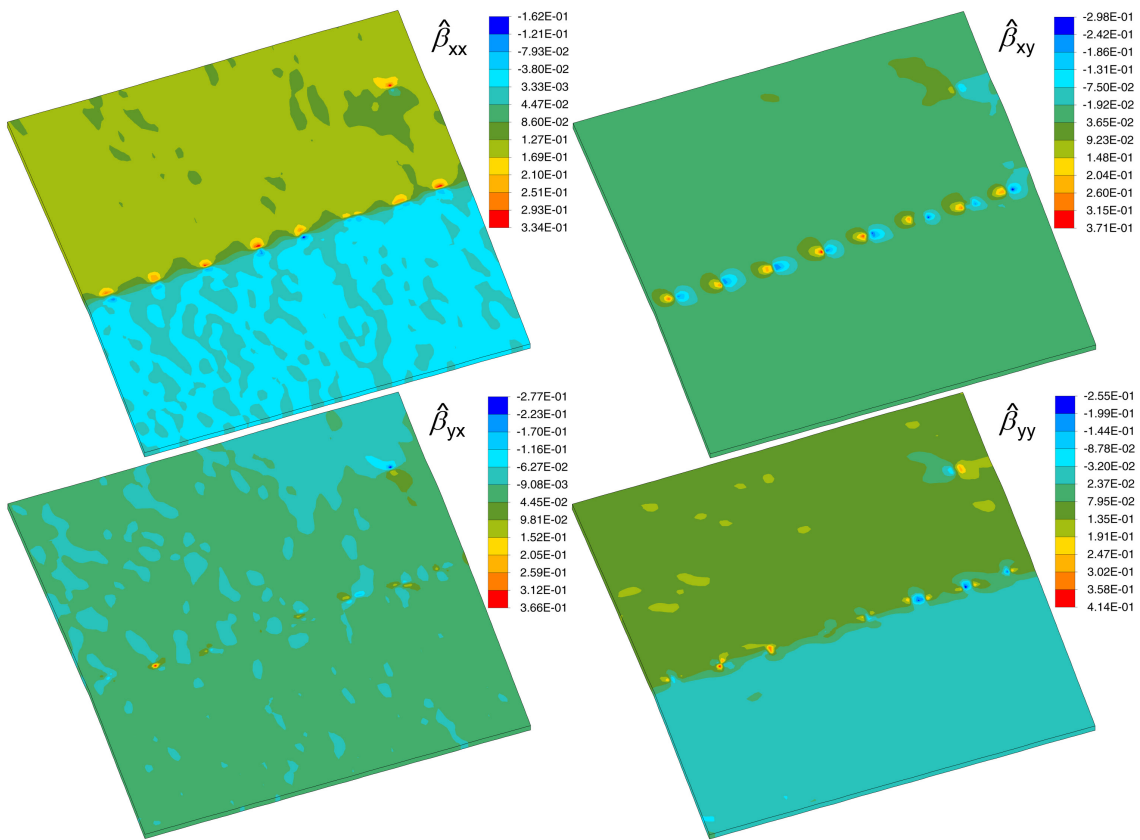
Rysunek 5.2: Obraz HRTEM heterostrukturze GaAs/ZnTe/CdTe z zaznaczonym obszarem obliczeń MES.

widoczny na rys.(5.2) zarejestrowany kamerą cyfrową. Do analizy trójwymiarowego stanu naprężenia w heterostrukturze przyjęto grubość próbki równą 2 stałym sieciowym kryształu GaAs, przyjętego jako kryształ referencyjny. Dodatkowo ze względów technicznych analizę numeryczną ograniczono do obszaru zaznaczonego na rysunku białą ramką. Ogra-

niczenie obszaru analizy wynika zarówno ze specyfiki samej metody fazy geometrycznej jak i możliwości technicznych przeprowadzenia obliczeń numerycznych w rozsądnym przedziale czasowym. Oryginalny rozmiar obrazu wynosi 1024×1024 pikseli wobec 820×820 pikseli obszaru roboczego. Na podstawie analizy obrazu mikroskopowego heterostruktury wyznaczone zostały cztery składowe tensora dystorsji sieci $\boldsymbol{\beta}^{HRTEM}$, które następnie przeskalowano do innego układu sieciowego (wymaganego przez algorytm *MES*), zob. rys.(5.3). Pomiędzy dystorsjami sieci w różnych układach zachodzi relacja:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}^{HRTEM})^{-1} - \mathbf{1}. \quad (5.1)$$

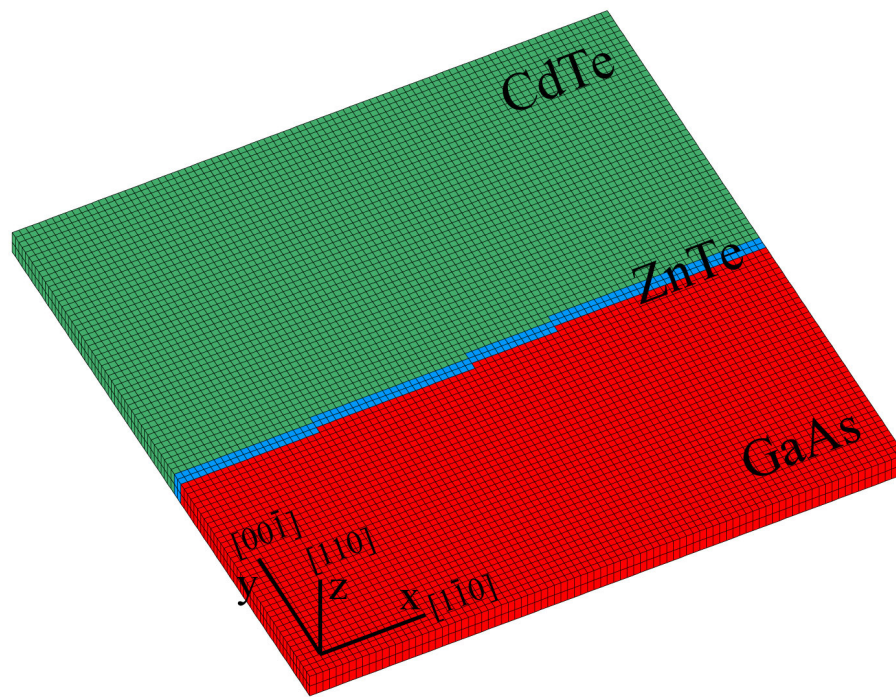
Przyjęto założenie, że pojedynczy element skończony odpowiada obszarowi 9×9 pik-



Rysunek 5.3: Wartości składowych tensora dystorsji źródłowych $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.

seli na obrazie mikroskopowym i na takim też obszarze dokonano uśredniania dystorsji sieci dla węzłów narożnych elementu skończonego. Wartości w węzłach pośrednich wyznaczone zostały stosując liniową interpolację $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ wzdłuż krawędzi elementu. Na podstawie analizy zmian kontrastu obrazu, położenia defektów oraz zaburzeń sieci wyznaczono rozkład składników struktury, zob. rys.(5.4). Mimo, że metoda wyznaczania składu chemicznego heterostruktury nie jest ścisła, konieczne jest możliwie precyzyjne określenie składu

chemicznego struktury ze względu na fakt, że rozkład ten znacząco wpływa na wyniki obliczeń. Pomiędzy podłożem (GaAs) i hodowanym kryształem (CdTe) występuje niedo-



Rysunek 5.4: Przyjęta do obliczeń siatka elementów skończonych wraz rozkładem materiału i orientacją krystalograficzną.

pasowanie sieciowe rzędu 14.5%. Ponieważ różnica ta mogłaby utrudnić proces wzrostu epitaksjalnego, aby go ułatwić posłużono się tzw. warstwą buforową (ZnTe) o pośredniej w stosunku do obu kryształów stałej sieciowej. Z drugiej strony, w niektórych przypadkach możliwe jest wyhodowanie heterostruktury nawet przy 20% niedopasowaniu pomiędzy składnikami. W prezentowanym trójskładnikowym układzie GaAs/ZnTe/CdTe niedopasowanie sieciowe wynosi odpowiednio 8% oraz 6.1% pomiędzy poszczególnymi warstwami, co znacząco zmniejsza stopień zdefektowania takiej struktury.

Do obliczeń przyjęto następujące parametry materiałowe:

stałe sieciowe

- **GaAs** - $a = 5.65325 \text{ \AA}$, Tu i in. (1992);
- **ZnTe** - $a = 6.1037 \text{ \AA}$, Lee (1970);
- **CdTe** - $a = 6.4770 \text{ \AA}$, Walker i in. (1985).

stałe sztywności

- **GaAs** - $c_{11} = 119.0 \text{ GPa}$, $c_{12} = 53.8 \text{ GPa}$, $c_{44} = 59.5 \text{ GPa}$, Tu i in. (1992);

- **ZnTe** - $c_{11} = 71.1$ GPa, $c_{12} = 40.7$ GPa, $c_{44} = 31.3$ GPa, Lee (1970);
- **CdTe** - $c_{11} = 53.7$ GPa, $c_{12} = 37.3$ GPa, $c_{44} = 16.4$ GPa, Walker i in. (1985).

Do obliczeń przyjęto następującą postać energii swobodnej materiału z dyslokacjami:

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}), \quad (5.2)$$

gdzie $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ jest tensorem odkształcenia sprężystego, w tym przypadku przyjęto logarytmiczną miarę odkształcenia (3.5), a $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ jest tensorem gęstości dyslokacji, za Dłużewskim (2004):

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \text{curl } \mathbf{F}_{lt}^{-1} \mathbf{F}_{lt}^{-T} \det \mathbf{F}_{lt}, \quad (5.3)$$

gdzie tensor $\mathbf{F}_{lt} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_{ch}$ oznacza odwracalną część deformacji struktury, zob. (3.8) i (3.9). Ponieważ $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ zależy od tensora deformacji sprężystej \mathbf{F}_e , por. Dłużewski i in. (2004) możemy zatem zapisać:

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{F}_e), \hat{\boldsymbol{\alpha}}(\text{grad } \mathbf{F}_e)). \quad (5.4)$$

Ze względu na obecność defektów struktury w analizowanym obszarze, postać energii swobodnej (3.23) zmodyfikowano tak, aby uwzględnić osłabienie materiału wprowadzane przez defekty:

$$\psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}) = \frac{1}{\hat{\rho}} \left[\frac{1}{2!} \hat{C}_\alpha^{ijkl} \hat{\epsilon}_{ij} \hat{\epsilon}_{kl} + \frac{1}{3!} \hat{C}_\alpha^{ijklmn} \hat{\epsilon}_{ij} \hat{\epsilon}_{kl} \hat{\epsilon}_{mn} + \dots \right]. \quad (5.5)$$

Do obliczeń przyjęto jedynie pierwszy wyraz szeregu (5.5) a zastępczy tensor sztywności \hat{C}_α ma postać:

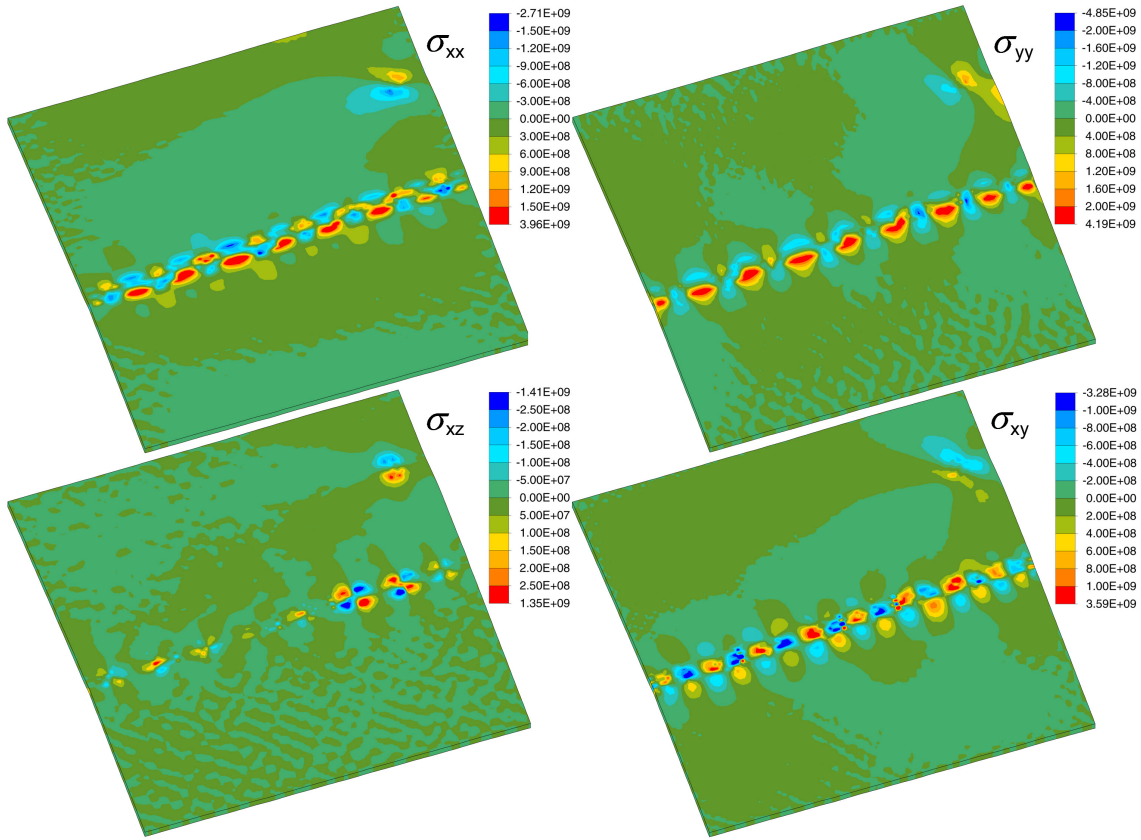
$$\hat{C}_\alpha = e^{r\hat{\alpha}} \hat{C}, \quad (5.6)$$

gdzie r oznacza parametr osłabienia materiału w rdzeniu dyslokacji, a $\hat{\alpha}$ skalarną miarę gęstości dyslokacji postaci:

$$\hat{\alpha} = \sqrt{\hat{\alpha}_{xz}^2 + \hat{\alpha}_{yz}^2 + \hat{\alpha}_{zz}^2}. \quad (5.7)$$

Dzięki tej modyfikacji rozróżniamy obszar kryształu idealnego, którego sztywność nie jest zaburzona obecnością defektu od obszaru o mniejszej sztywności odpowiadającemu rdzeniowi dyslokacji. Parametr osłabienia materiału r na podstawie dyskusji w pracy Dłużewski i in. (2004) przyjęto równy 20. Pozostawienie swobodnego brzegu próbki poprzez przyjęcie statycznie wyznaczalnych warunków brzegowych, zob. rys.(5.4), zapewnia brak wpływu tychże na wielkość naprężeń residualnych w heterostrukturze. Przyjęcie takiego modelu warunków brzegowych skutkuje również mniejszą wrażliwością naprężeń w strukturze na niedokładności przy wyznaczaniu rozkładu składników heterostruktury.

Na podstawie analizy płaskiego obrazu mikroskopowego (5.2) możliwe jest wyznaczenie jedynie 4-ch składowych: $\hat{\beta}_{xx}$, $\hat{\beta}_{yx}$, $\hat{\beta}_{xy}$, $\hat{\beta}_{yy}$ z ogólnej liczby 9-ciu składowych tensora dystorsji sieci $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. Z drugiej strony wiadomo, że na interfejsie heterostruktury tworzą się dyslokacje niedopasowania: pojedyncze 60° oraz krawędziowe o wektorze Burgersa $\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$, dysocjujące na dwie dyslokacje 60° o wektorach Burgersa odpowiednio: $\frac{1}{2}[10\bar{1}]$ i $\frac{1}{2}[0\bar{1}1]$ lub też $\frac{1}{2}[101]$ i $\frac{1}{2}[0\bar{1}\bar{1}]$. Ponieważ nie dysponujemy informacją, na podstawie której możliwa



Rysunek 5.5: Wartości składowych tensora naprężenia Cauchy'ego σ .

jest identyfikacja z jakim wariantem dysocjacji dyslokacji mamy do czynienia, przyjmujemy arbitralnie do obliczeń wariant pierwszy. Wektor Burgersa dyslokacji 60° można rozłożyć na składowe:

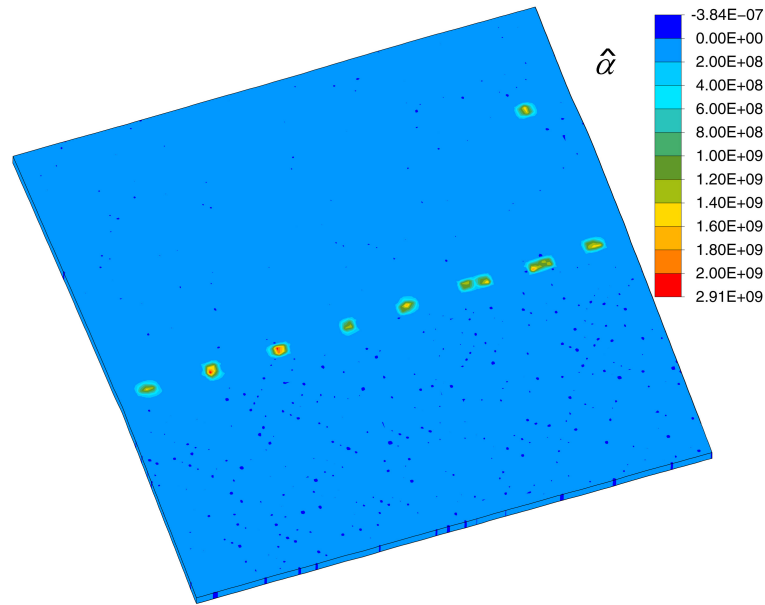
$$\frac{1}{2}[10\bar{1}] = \frac{1}{4}[1\bar{1}0] + \frac{1}{2}[00\bar{1}] + \frac{1}{4}[110], \quad (5.8)$$

$$\frac{1}{2}[0\bar{1}1] = \frac{1}{4}[1\bar{1}0] - \frac{1}{2}[00\bar{1}] - \frac{1}{4}[110]. \quad (5.9)$$

Składową na kierunku "z" wektora Burgersa dla dyslokacji mieszanej możemy wyznaczyć więc z liniowej relacji:

$$\hat{\beta}_z = \frac{\sqrt{2}}{2} \hat{\beta}_y. \quad (5.10)$$

Wykorzystując tą zależność możemy uzupełnić składowe tensora dystorsji sieci $\hat{\beta}$ do następującej postaci:

Rysunek 5.6: Skalarna gęstość dyslokacji $\hat{\alpha}$.

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{xx} & \hat{\beta}_{xy} & 0 \\ \hat{\beta}_{yx} & \hat{\beta}_{yy} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hat{\beta}_{yx} & \frac{\sqrt{2}}{2}\hat{\beta}_{yy} & 0 \end{bmatrix}.$$

Tak przyjęta reprezentacja tensora dystorsji sieci prowadzi do następującej zależności pomiędzy składowymi tensora gęstości dyslokacji:

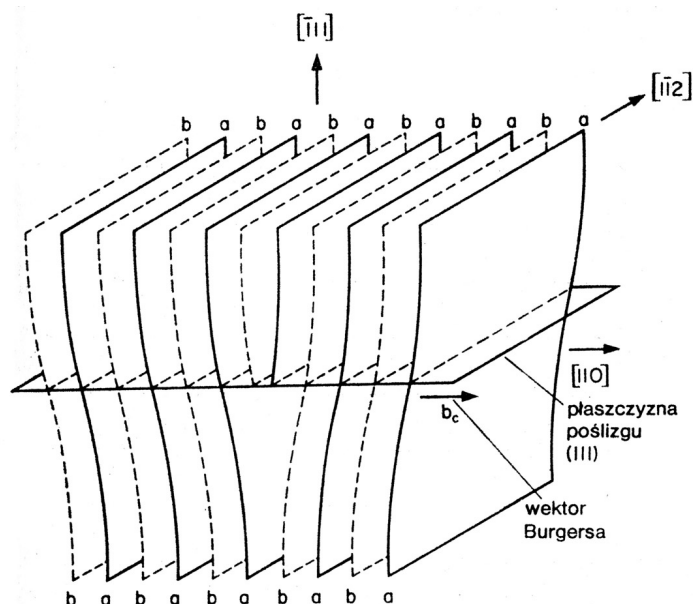
$$\hat{\alpha}_{zz} = \frac{\sqrt{2}}{2} \hat{\alpha}_{yz}, \quad (5.11)$$

Rozkład składowych $\hat{\beta}_{11}$, $\hat{\beta}_{21}$, $\hat{\beta}_{12}$ i $\hat{\beta}_{22}$ tensora dystorsji źródłowych $\hat{\beta}$ przyjęty do obliczeń przedstawiony został na rys.(5.3). W wyniku przeprowadzonych obliczeń otrzymano rozkłady naprężeń residualnych σ obecnych w heterostrukturze. Przedstawiono je na rys.(5.5) a skalarna gęstość dyslokacji $\hat{\alpha}$ opisana równaniem (5.7) przedstawiona jest na rys.(5.6). Plik wejściowy do obliczeń *MES* zawiera 16200 elementów 27-mio węzłowych (elementy lagranżowskie) co daje w efekcie 163805 węzłów. Zadanie rozwiązane zostało na komputerze klasy PC i wymagało, wraz z zapotrzebowaniem systemu operacyjnego 1 Gb pamięci operacyjnej. Czas trwania obliczeń wynosił ok. 48 godzin.

5.2 Dyslokacja krawędziowa w kryształach miedzi

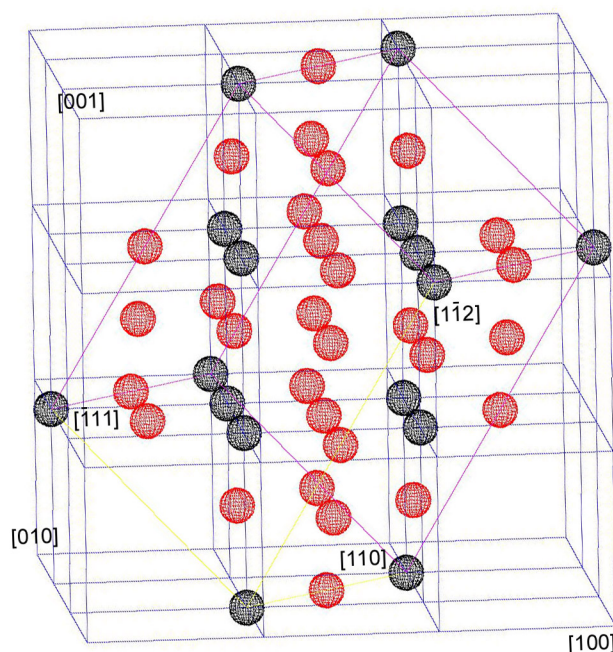
Wiele czystych metali m.in. miedź ma strukturę regularną ściennie centrowaną (*FCC*). W strukturze takiej najbardziej prawdopodobne wektory Burgersa dyslokacji to $\frac{1}{2}[110]$ i $[001]$.

Ponieważ energia dyslokacji jest proporcjonalna do kwadratu długości wektora Burgersa, zob. Frank (1949), stąd energetycznie bardziej prawdopodobna jest dyslokacja $\frac{1}{2}[110]$, por. Hull (1965). Każdy defekt sieci wprowadza zaburzenie do idealnej struktury krystalicznej, atomy przemieszczają się ze swoich położeń równowagowych co doprowadza do wytworzenia się pola przemieszczeń rozciągającego się na cały kryształ. Przemieszczenia sieci krystalicznej generują z kolei pole naprężeń. W przypadku dyslokacji krawędziowej, obszar zawierający dodatkową półpłaszczyznę atomów będzie znajdować się w stanie ściskania, podczas gdy obszar położony po przeciwnej stronie płaszczyzny poślizgu będzie rozciągany w celu dopasowania struktury do większej ilości płaszczyzn atomowych, zob. rys.(5.7). W niniejszym podrozdziale przedstawiona zostanie trójwymiarowa symulacja numeryczna pola odkształceń i naprężeń w strukturze miedzi wywołanych obecnością prostoliniowej dyslokacji krawędziowej o wektorze Burgersa $\frac{1}{2}[110]$. Podczas wstępnej analizy przyjęto



Rysunek 5.7: Typowa dyslokacja krawędziowa w kryształach o regularnej sieci centrowanej, wektor Burgersa $b = \frac{1}{2}[110]$, wg Seeger (1957).

konceptę przeprowadzenia obliczeń numerycznych przy użyciu siatki krystalograficznej. Wybór dyslokacji krawędziowej o wektorze Burgersa równym $\frac{1}{2}[110]$ oznacza w tym przypadku konieczność podziału siatki na kierunku $[110]$ na elementy skończone o wymiarze równym $\frac{\sqrt{2}}{2}$ stałej sieciowej kryształu miedzi. Dodatkowo w celu wzajemnego powiązania położeń węzłów siatki elementów skończonych z dyskretnymi połozeniami atomów konieczne jest uwzględnienie periodyczności sieci na pozostałych kierunkach, tj. $[\bar{1}11]$ i $[1\bar{1}2]$, zob. rys.(5.7). Rozważając periodyczność struktury w zadanych kierunkach krystalograficznych dochodzimy do wniosku, że wymiar pojedynczego elementu skończonego krystalograficznej siatki powinien być równy $\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt{3} \times \frac{\sqrt{6}}{2}$ stałej sieciowej, zob. rys.(5.8) i (5.9). Do obliczeń metodą elementów skończonych przyjęto próbkę składającą się z siatki



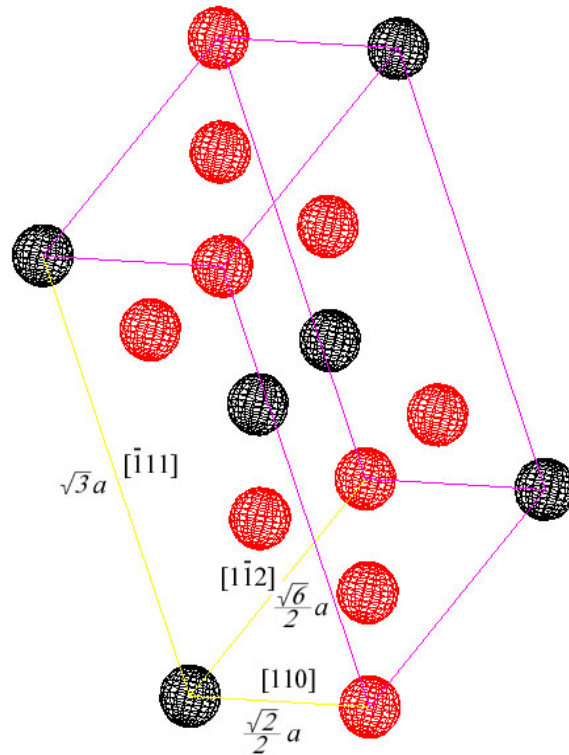
Rysunek 5.8: Orientacja siatki elementów skończonych w strukturze miedzi (*FCC*) z zaznaczonymi pozycjami atomów w obszarze $\sqrt{2} \times \sqrt{3} \times \sqrt{6} a$. Czarny kolor oznacza atom w położeniu narożnym komórki elementarnej, czerwony - środek ściany.

3232 elementów przedstawionych na rys.(5.9) co, biorąc pod uwagę wymiar elementów daje obszar $\sim 11 \times 12 \times 1.8$ nm. W trakcie przygotowywania próbki dokonano modyfikacji regularnej początkowo siatki celem stworzenia kontynualnego modelu dyslokacji krawędziowej. W tym celu usunięto jedną warstwę elementów skończonych a następnie sklejono pozostałe elementy ze sobą zwiększając w tym celu ich wymiar, zob. rys.(5.10). Powstała w rdzeniu dyslokacji "pustkę" wypełniono 18-to węzłowymi elementami pryzmowymi (kliny). Oba ww. typy elementów wykorzystywały kwadratową (odpowiednio 27 i 21 p-któw Gaussa) aproksymację przemieszczeń i liniową (odpowiednio 8 i 6 p-któw Gaussa) aproksymację dla naprężeń. Stałe materiałowe użyte podczas obliczeń przedstawione są w tab.(5.1). Ponieważ podczas obliczeń używana była logarytmiczna miara odkształceń,

a	c_{11}	c_{12}	c_{44}	C_{111}	C_{112}	C_{123}	C_{144}	C_{155}	C_{456}
3.6151	166.1	119.9	75.6	-1271	-814	-50	-3	-780	-95

Tablica 5.1: Parametr sieci (Å) i stałe sztywności (GPa) drugiego c i trzeciego rzędu C (miara Greena) dla miedzi, wg Teodosiu (1970).

zob. (3.5), konieczne było przeliczenie stałych sztywności trzeciego rzędu C za pomocą równań (3.43). Po przeliczeniu otrzymujemy zestaw stałych sztywności trzeciego rzędu



Rysunek 5.9: Zastosowany do obliczeń element skończony wraz z wymiarami i orientacją zapewniającą warunki sklejenia atomów w poprawną strukturę *FCC* wraz z naniesionymi położeniami atomów.

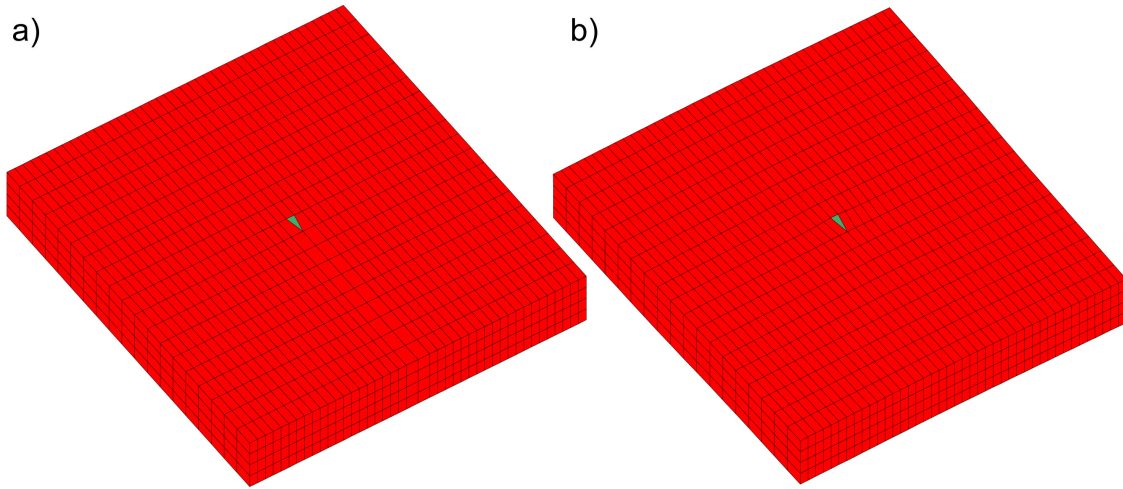
\mathbf{C} dla logarytmicznej miary odkształcenia przedstawiony w tab.(5.2). Poprzez usunięcie

C_{111}	C_{112}	C_{123}	C_{144}	C_{155}	C_{456}
-275	-574	-50	-3	-628	19

Tablica 5.2: Stałe sztywności trzeciego rzędu \mathbf{C} przeliczone dla logarytmicznej miary odkształcenia.

części elementów i późniejsze sklejenie pozostałych elementów skończonych siatki MES otrzymaliśmy siatkę krystalograficzną. Aby symulować obecność dyslokacji w strukturze konieczne jest wprowadzenie do próbki dystorsji źródłowych $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ w taki sposób, aby zdeformowana konfiguracja próbki odpowiadała rzeczywistej, zdeformowanej strukturze kryształu miedzi. Różnica w długościach konturu Burgersa dla siatki Lagranżowskiej i siatki w konfiguracji równowagowej (aktualnej), por. rys.(5.10), musi odpowiadać długości wektora Burgersa modelowanej dyslokacji krawędziowej:

$$b = \frac{\sqrt{2}}{2} a = \oint \mathbf{F}_{pl}^{-1} d\hat{\mathbf{x}}, \quad (5.12)$$



Rysunek 5.10: Założona do obliczeń siatka elementów skończonych a) początkowa konfiguracja lagranżowska \mathbf{X} , b) zdeformowana konfiguracja aktualna \mathbf{x} . Czerwonym kolorem oznaczono elementy 27-mio węzłowe, zielonym 18-to węzłowe.

Na podstawie zależności:

$$\mathbf{F}_{pl}^{-1} = \mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}, \quad (5.13)$$

zob. Dłużewski i in. (2004), wyznaczone zostały wartości dla założonego piłokształtnego rozkładu dystorsji źródłowych $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ modelujących dyslokację, zob. rys.(5.11). Do obliczeń przyjęto liniowy wzdłuż krawędzi elementów rozkład dystorsji, dzięki czemu możemy zamienić całkę okrężną (5.12) na całkę:

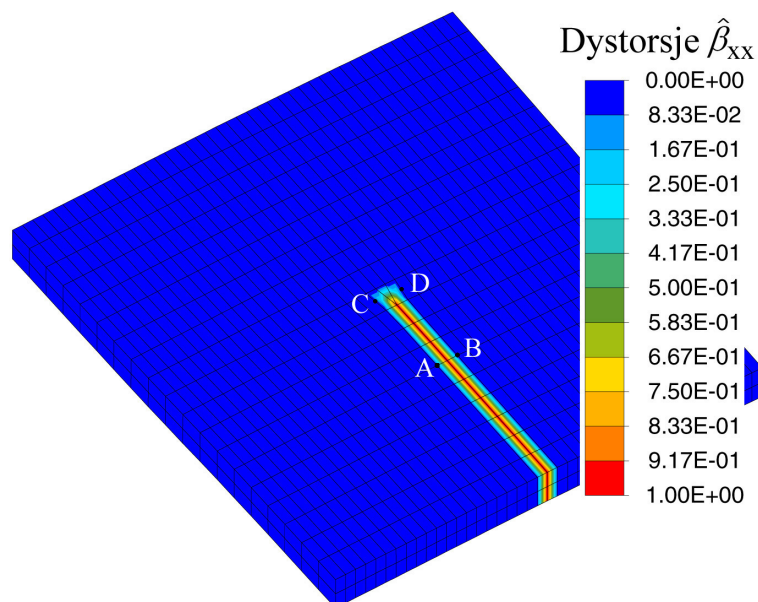
$$b = \int_A^B \mathbf{F}_{pl}^{-1} d\hat{\mathbf{x}}, \quad (5.14)$$

a następnie, po uwzględnieniu (5.13), na sumę pól dwóch trójkątów o podstawie równej szerokości elementu skończonego w lokalnie odciążonej konfiguracji $\hat{\mathbf{x}}$ i wysokości równej co do wartości $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.

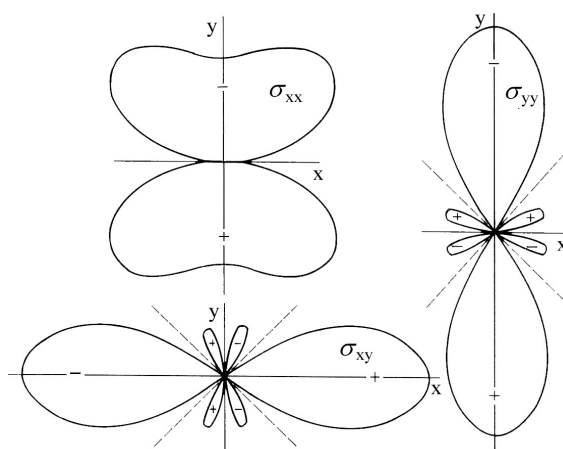
$$b = \frac{\sqrt{2}}{4} a = 2 \frac{1}{2} \hat{x} \hat{\beta}_{xx}, \quad (5.15)$$

Otrzymana deformacja plastyczna na elementach 27-mio węzłowych daje w efekcie wartość wektora Burgersa modelowanej dyslokacji. Rozkład dystorsji źródłowych - $\hat{\beta}_{xx}$ przedstawiony jest na rys.(5.11). Wartość dystorsji źródłowych w rdzeniu dyslokacji (elementy 18-to węzłowe) należy dobrać tak, aby w lokalnie odciążonej konfiguracji $\hat{\mathbf{x}}$ uzyskać regularną siatkę z liniowym rozkładem dystorsji wzdłuż krawędzi elementu. W rdzeniu dyslokacji wstawiony został element 18-to węzłowy, więc całkę okrężną (5.12) zamienić można dodając do (5.15) dodatkowe pole prostokąta wynikające z obecności elementu 18-to węzłowego, zob. rys.(5.11). Stąd wektor Burgersa w obszarze rdzenia dyslokacji jest równy:

$$b = \frac{\sqrt{2}}{2} a = \int_C^D \mathbf{F}_{pl}^{-1} d\hat{\mathbf{x}} = 2 \frac{1}{2} \hat{x}_1 \hat{\beta}_{xx} + \hat{x}_2 \hat{\beta}_{xx}, \quad (5.16)$$



Rysunek 5.11: Założony rozkład dystorsji źródłowych na konfiguracji aktualnej \mathbf{x} .

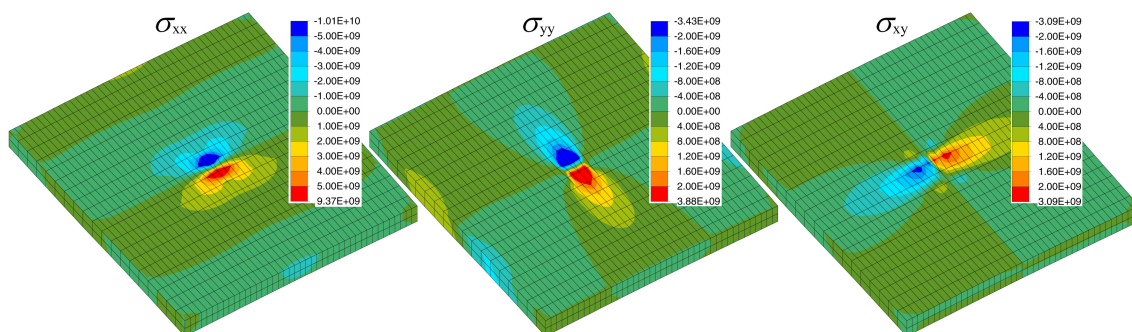


Rysunek 5.12: Izolinie naprężeń wokół prostoliniowej dyslokacji krawędziowej dla klasycznej teorii sprężystości i ośrodka izotropowego, za Hirth i Lothe (1982).

gdzie \hat{x}_1 i \hat{x}_2 oznaczają szerokości odpowiednio elementów 27-mio i 18-to węzłowych na linii łączącej p-pty "C" i "D", zob. rys.(5.11). Utrzymując w mocy założenie o liniowym rozkładzie dystorsji sieci wzdłuż krawędzi elementów pozostaje jeszcze wyznaczyć położenia geometryczne węzłów siatki deformowanych plastycznie elementów skończonych tak aby uzyskać wspomniany liniowy rozkład dystorsji w konfiguracji odciażonej $\hat{\mathbf{x}}$. Do tego celu skorzystamy ze wzorów (B.10) i (B.17) wyprowadzonych przez autora i podanych w

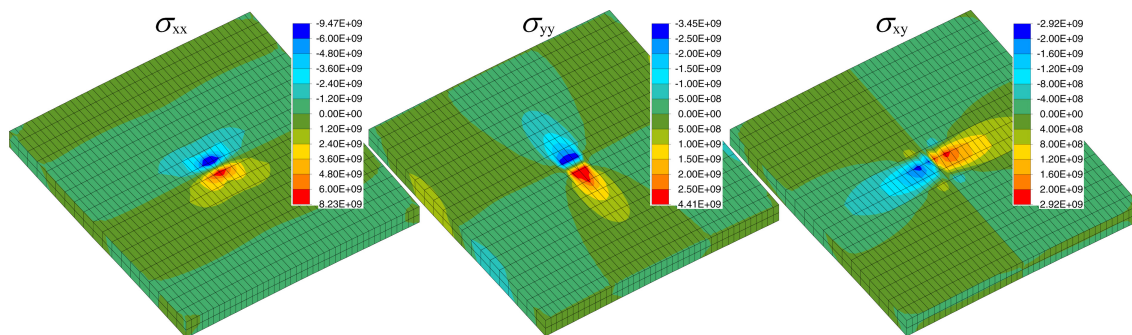
załączniku B niniejszej pracy.

Na rys.(5.12) przedstawione są izolinie naprężeń wokół prostoliniowej dyslokacji krawę-



Rysunek 5.13: Rozkłady naprężeń wokół dyslokacji krawędziowej dla stałych sztywności 2-go rzędu zob. tab.(5.1).

dziowej, wyznaczone na podstawie liniowej teorii sprężystości, zob. Hirth i Lothe (1982). W wielu przypadkach wyznaczone w ten sposób pole odkształceń i rozkład naprężenia w sieci krystalicznej z dostateczną dokładnością (pomijając rdzeń dyslokacji) opisują zachowanie się struktury z defektami. Możemy porównać je z rozkładami naprężeń wy-



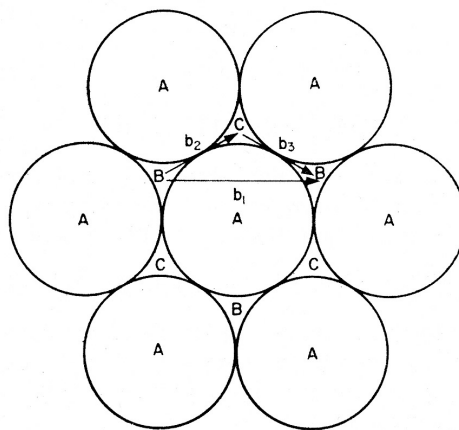
Rysunek 5.14: Rozkłady naprężeń wokół dyslokacji krawędziowej wyznaczone z uwzględnieniem stałych sprężystości 3-go rzędu, zob. tab.(5.2).

znaczonymi metodą elementów skończonych za pomocą anizotropowej hipersprężystości i logarytmicznej miary odkształceń. Do obliczeń wykorzystano stałe sprężystości 2-go rzędu, zob. rys.(5.13) oraz stałe 3-go rzędu, zob. rys.(5.14). Zastosowanie stałych 3-go rzędu powoduje spadek wartości maksymalnych naprężeń residualnych wokół modelowanej dyslokacji co jest energetycznie korzystne dla struktury przy czym charakter rozkładu naprężeń nie ulega zmianie. W porównaniu z klasycznym podejściem można zauważyć wyraźną asymetrię maksymalnych wartości naprężeń ściskających i rozciągających jak i

obszar zasięgu tych naprężeń - dzięki czemu jesteśmy w stanie opisać fenomen zmiany objętości materiału wokół dyslokacji, zob. Hirth i Lothe (1982), Dłużewski i in. (2004).

5.3 Dyslokacja 60° w kryształach miedzi

Na podstawie rys.(5.7) możemy stwierdzić, że w celu aktywacji poślizgu dyslokacji krawędziowej na kierunku $\langle 110 \rangle$ konieczne jest jednoczesne przesunięcie dwóch dodatkowych półpłaszczyzn atomowych (110) dyslokacji. Prosty eksperyment myślowy polegający na

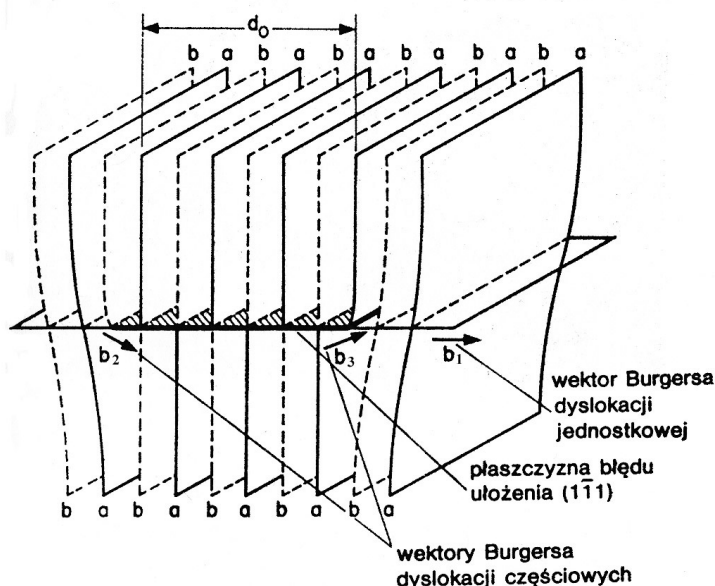


Rysunek 5.15: Mechanizm dysocjacji dyslokacji w kryształach *FCC*, wg Cottrell (1953).

zastąpieniu atomów leżących w płaszczyznach gęstego upakowania układem sztywnych kul leżących w położeniach A i B, zob. rys.(5.15) sugeruje, że ruch dyslokacji (wektor \mathbf{b}_1) łatwiejszy jest do zrealizowania jeśli dyslokację krawędziową rozdzielimy na dwie dyslokacje częściowe i ruch przeprowadzimy poprzez pośrednie położenie C. Pierwsza z dyslokacji ma wektor Burgersa \mathbf{b}_2 a druga \mathbf{b}_3 . Mamy zatem do czynienia z dysocjacją jednostkowej dyslokacji krawędziowej na dwie cząstkowe dyslokacje Shockleya, opisaną wzorem:

$$\frac{1}{2}[110] = \frac{1}{6}[211] + \frac{1}{6}[12\bar{1}]. \quad (5.17)$$

Stosując regułę Franka (1949) wiemy, że dyslokacja jednostkowa ma energię proporcjonalną do $b_1^2 = \frac{1}{2}a^2$ podczas gdy suma energii dwu dyslokacji cząstkowych jest proporcjonalna do $b_2^2 + b_3^2 = \frac{1}{3}a^2$. Rozszczepienie dyslokacji jest zatem korzystne pod względem energetycznym. Ze względu na fakt, że wektory \mathbf{b}_2 i \mathbf{b}_3 nie są wzajemnie prostopadłe, dyslokacje częściowe będą się odpychać i powstanie pomiędzy nimi wstęga błędu ułożenia podnosząca energię całkowitą struktury, co z kolei powoduje wzajemne przyciąganie się dyslokacji częściowych. W przypadku kryształów miedzi wzajemna równowaga sił działających na dyslokacje częściowe zachodzi gdy ich odległość od siebie wynosi $d_0 \cong 4$ wektory Burgersa dyslokacji jednostkowej, zob. rys.(5.16). W celu modelowania dysloka-



Rysunek 5.16: Dysocjacja dyslokacji krawędziowej na dwie cząstkowe dyslokacje Shockleya oddzielone błędem ułożenia, wg Seeger (1957).

cji 60°, obecnej w kryształach miedzi za pomocą metody elementów skończonych konieczne jest, podobnie jak w poprzednim podrozdziale, przyjęcie do obliczeń odpowiedniej, krystalograficznej siatki elementów skończonych pozwalającej na dokonanie operacji "usunięcia" półpłaszczyzny elementów skończonych w celu modelowania składowej krawędziowej oraz przesunięcia elementów względem siebie koniecznego do modelowania składowej śrubowej dyslokacji Shockleya. Podział próbki na elementy skończone determinowany jest przez geometryczne zależności opisujące wektor Burgersa dyslokacji, która w ortonormalnym układzie współrzędnych o osiach $[110][\bar{1}11][1\bar{1}2]$ przyjmuje składowe:

$$\frac{1}{6}[211] = x_1 [110] + y_1 [\bar{1}11] + z_1 [1\bar{1}2], \quad (5.18)$$

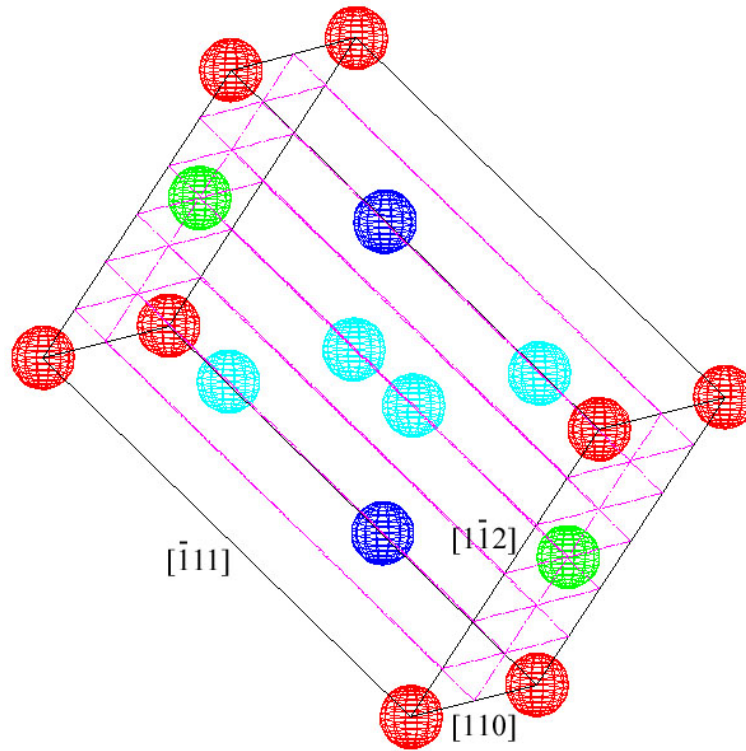
oraz podobnie dla drugiej dyslokacji Shockleya

$$\frac{1}{6}[12\bar{1}] = x_2 [110] + y_2 [\bar{1}11] + z_2 [1\bar{1}2]. \quad (5.19)$$

Rozwiązaniem są dwie trójki liczb:

$$\left[\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{12}\right] \quad \text{oraz} \quad \left[\frac{1}{4}, 0, -\frac{1}{12}\right], \quad (5.20)$$

definiujące składowe wektora Burgersa dyslokacji częściowych w zadanym układzie krystalograficznym. Aby zapewnić możliwość "sklejenia" siatki elementów skończonych konieczne jest aby elementy skończone miały wymiary będące całkowitą krotnością składowych wektora Burgersa dyslokacji Shockleya, a zatem: $\frac{\sqrt{2}}{4} \times \sqrt{3} \times \frac{\sqrt{6}}{12}$ stałej sieciowej kryształu

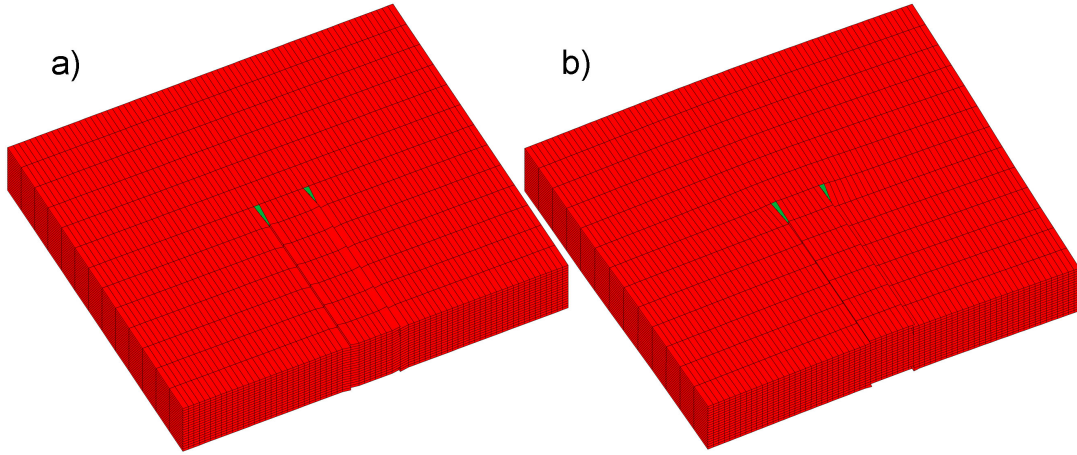


Rysunek 5.17: Położenia atomów w komórce translacji $\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt{3} \times \frac{\sqrt{6}}{2}$ stałej sieciowej, z naniesionymi elementami o wymiarach $\frac{\sqrt{2}}{4} \times \sqrt{3} \times \frac{\sqrt{6}}{12}$ stałej sieciowej.

miedzi. Na rys.(5.18) przedstawiona jest krystalograficzną siatką elementów skończonych w konfiguracji lagranżowskiej, którą otrzymano usuwając dwie półpłaszczyzny elementów skończonych (o szerokości $\frac{\sqrt{2}}{4}$ każda) odpowiadające wielkością, składowym krawędziowym dyslokacji Schockleya. Dodatkowo obszar próbki pomiędzy usuniętymi elementami został przemieszczony względem pozostałych elementów siatki na kierunku składowej śrubowej dyslokacji. Otrzymano w ten sposób podwójny uskok o wartości $\pm \frac{\sqrt{6}}{12}$ stałej sieciowej - charakterystyczny dla modelowanych dyslokacji Schockleya. Pozostaje teraz dobrać odpowiednie wartości dystorsji źródłowych koniecznych do zadania deformacji plastycznej tak otrzymanej siatki elementów skończonych. W przypadku obu dysocjujących dyslokacji Schockleya, składowa krawędziowa dyslokacji ma wektor Burgersa równy:

$$\hat{b}_x^1 = \hat{b}_x^2 = \frac{1}{4}[110]. \quad (5.21)$$

Podobnie jak w poprzednim przykładzie, deformację plastyczną elementów skończonych modelującą składową krawędziową dyslokacji generuje składowa $\hat{\beta}_{xx}$ tensora dystorsji sieci. Możemy zatem zapisać, że deformacja plastyczna materiału z założonym polem dystorsji sieci odpowiada co do wartości składowej krawędziowej wektora Burgersa dyslokacji



Rysunek 5.18: Krystalograficzna siatka elementów skończonych układu dyslokacji Schockleya w konfiguracji a) lagranżowskiej \mathbf{X} , b) aktualnej \mathbf{x} .

Schockleya i wynosi:

$$\hat{b}_x^1 = \hat{b}_x^2 = \int_A^B \mathbf{F}_{pl}^{-1} d\hat{\mathbf{x}} = \frac{\sqrt{2}}{4} a. \quad (5.22)$$

Korzystając z założenia o liniowym rozkładzie dystorsji sieci wzdłuż krawędzi elementu, powyższą całkę możemy zamienić na sumę pól dwóch trójkątów o podstawie równej szerokości elementu skończonego i wysokości równej wartości dystorsji $\hat{\beta}_{xx}$, zob. rys.(5.19). Po podstawieniu odpowiednich wartości otrzymujemy wartość $\hat{\beta}_{xx} = 1$. Z rozważań geometrycznych wynika, że do wywołania deformacji postaciowej przeciwnej do występującej w siatce elementów skończonych uskośnienia na kierunku "z" konieczne jest zadanie niezerowej wartości składowej dystorsji $\hat{\beta}_{xz}$, takiej aby spełniony był warunek:

$$\hat{b}_z^1 = -\hat{b}_z^2 = \int_A^B \mathbf{F}_{pl}^{-1} d\hat{\mathbf{x}} = \frac{\sqrt{6}}{12} a. \quad (5.23)$$

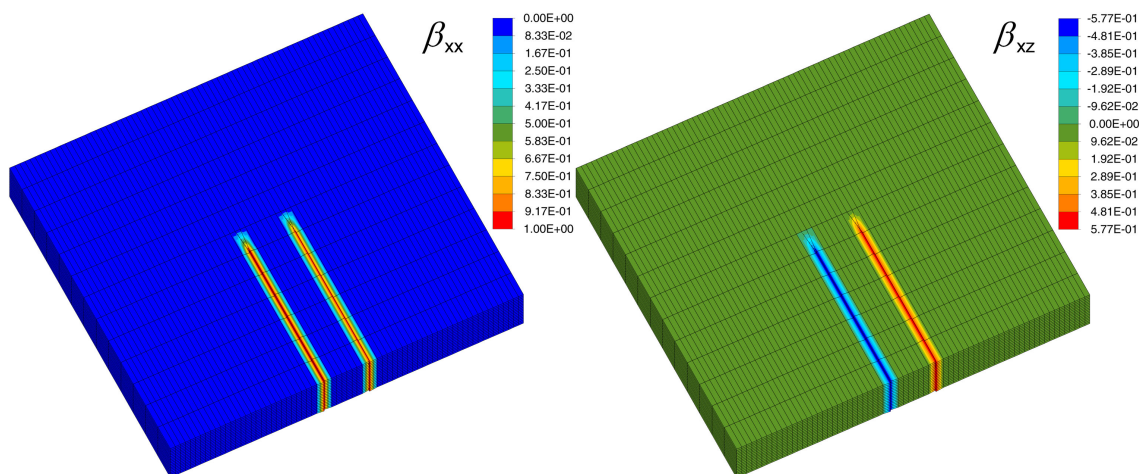
Po zamianie całki na pole trójkąta i podstawieniu odpowiednich wartości, zob. rys.(5.19), otrzymamy:

$$\frac{\sqrt{6}}{12} a = 2 \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{4} a \hat{\beta}_{xz}. \quad (5.24)$$

Wartość dystorsji źródłowych wynosi więc $\frac{\sqrt{3}}{3}$. Taka wartość dystorsji "przywraca" pierwotną geometrię elementu skończonego. Rozkład przestrzenny dystorsji plastycznych, zarówno $\hat{\beta}_{xx}$ jak i $\hat{\beta}_{xz}$ pokazany jest na rys.(5.19). Sprawdźmy jeszcze czy spełnione są warunki geometryczne, które powinny zachodzić pomiędzy składowymi dyslokacji Schockleya:

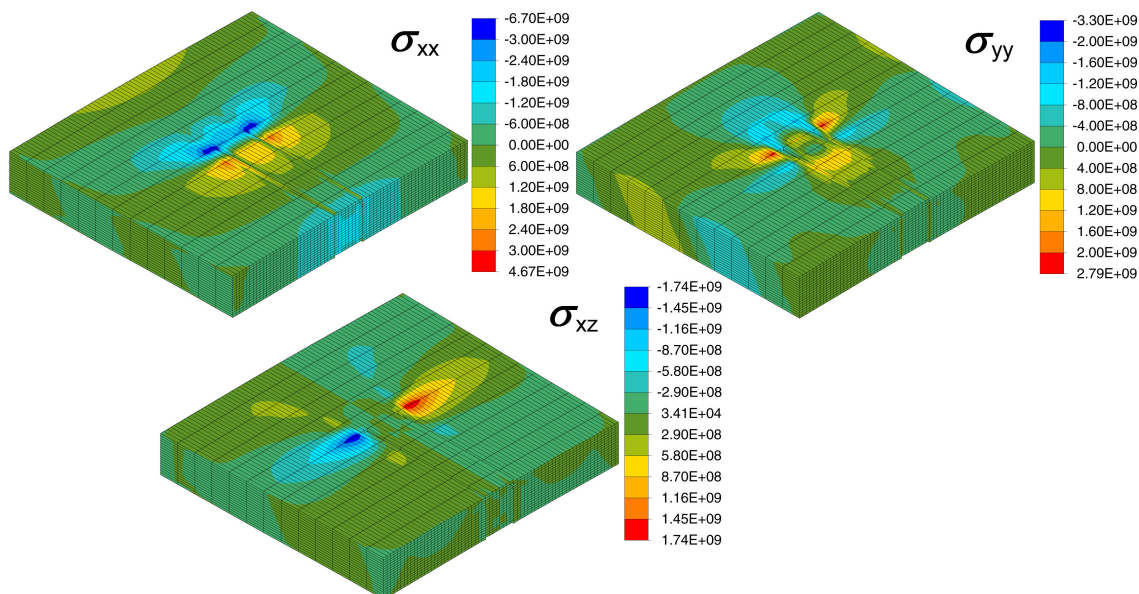
$$\frac{\hat{b}_x^2}{\hat{b}_z^2} = -\frac{\hat{b}_x^3}{\hat{b}_z^3} = \frac{\hat{\beta}_{xx}}{\hat{\beta}_{xz}}. \quad (5.25)$$

Po podstawieniu wartości składowych wektora Burgersa pojedynczej dyslokacji Schockleya oraz dystorsji sieci odpowiednio $\frac{\sqrt{2}}{4}$, $\pm \frac{12}{\sqrt{6}}$ oraz 1 i $\frac{\sqrt{3}}{3}$ otrzymamy, że warunki geometryczne



Rysunek 5.19: Założony rozkład dystorsji źródłowych naniesiony na konfigurację lagranżowską \mathbf{X} a) składowa krawędziowa - $\hat{\beta}_{xx}$, b) składowa śrubowa - $\hat{\beta}_{xz}$.

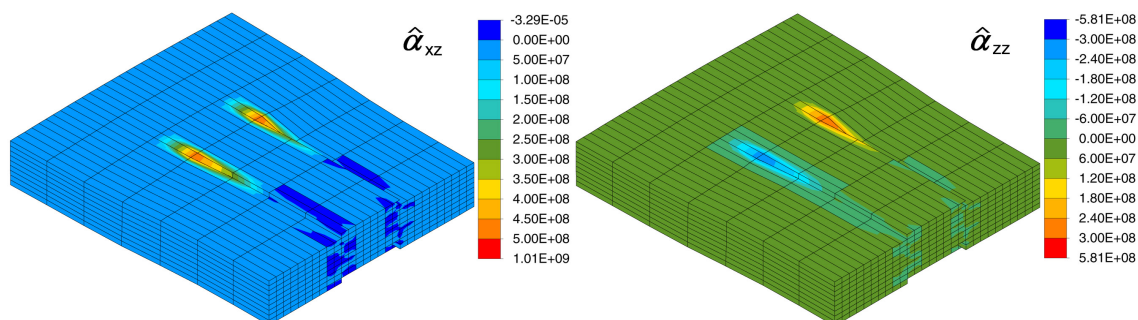
między składowymi dyslokacji Schockleya są spełnione. Wartości pozostałych danych materiałowych jak, np. stałe sztywności 2-go rzędu przyjęto identyczne z tymi w poprzednim przykładzie. Otrzymany w efekcie rozwiązania problemu brzegowego rozkład naprężeń wokół dyslokacji Schockleya przedstawiony jest na rys.(5.20). Na rysunku (5.21) przed-



Rysunek 5.20: Rozkład naprężeń residualnych wokół dyslokacji Schockleya.

stawiono rozkład gęstości dyslokacji $\hat{\alpha}$. Składowe $\hat{\alpha}_{xz}$ obu dyslokacji, tak jak składowe

krawędziowe tych dyslokacji mają te same wartości. Składowe $\hat{\alpha}_{zz}$ mają znaki przeciwne, co wynika ze zwrotów składowej śrubowej każdej z dyslokacji Schockleya. Widoczny też jest uskoki na siatce elementów skończonych odpowiadający błędowi ułożenia pomiędzy dyslokacjami.



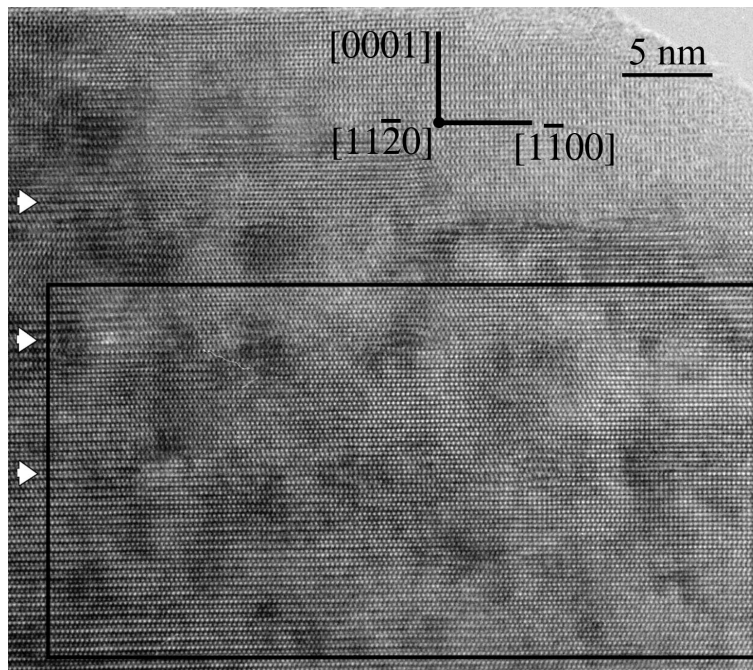
Rysunek 5.21: Składowe tensora gęstości dyslokacji, składowa krawędziowa $\hat{\alpha}_{xz}$ i śrubowa $\hat{\alpha}_{zz}$. Widoczny na rysunku obszar jest wycinkiem próbki ograniczonym do okolic dyslokacji.

5.4 Określanie koncentracji indu w studniach kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Skład chemiczny heterostruktury półprzewodnikowej jest niezwykle ważny z punktu widzenia właściwości fizycznych struktury a w przypadku półprzewodników azotkowych jest kluczem do wyjaśnienia zjawiska fotoemisji, zob. Nakamura i Fazol (1997), Narukawa i in. (1997), Singh i in. (1997), Mceluskey i in. (1998). W literaturze tematu znaleźć można opis wielu metod określania składu chemicznego heterostruktury, zob. np. Oleś (1998), Kisielowski i in. (1997), Gerthsen i in. (2000), Ruterana i in. (2002), Watanabe i in. (2003). Spośród wielu technik, ze względu na wysoką dokładność pomiaru na wzmiankę zasługują takie techniki, jak *EDS* - energorozdzielcza spektroskopia promieniowania RTG, *EELS* - spektroskopia strat energii elektronów czy też *HAADF* - metoda wysoko-kątowych pierścieni ciemnego pola, które jednakże ograniczone są wielkością badanej próbki do obszarów o wymiarach rzędu kilku nm. Inne stosowane techniki wykorzystują, np. efekt powstawania lokalnych różnic (wzorków) na wysokorozdzielczych obrazach mikroskopowych na skutek dynamicznej interakcji pomiędzy ugiętymi wiązkami elektronów do których zaliczyć możemy *DFTEM*- mikroskopię ciemnego kontrastu, pozwalającą uchwycić zmiany w obrazie mikroskopowym przy przejściu pomiędzy warstwami o różnym składzie chemicznym. Problem sprężystej relaksacji heterostruktury był przedmiotem studiów analitycznych, np. Gibbison i in. (1985), Treacy i Gibbison (1986) oraz analizy numerycznej metodą elementów skończonych, np. Tillmann i in. (2000), Kret i in. (2003). W tym przykładzie przeprowadzona zostanie analiza numeryczna sprężystej relaksacji heterostruktury

epitaksjalnej InGaN/GaN celem porównania otrzymanych wyników z obrazami eksperymentalnymi HRTEM.

Dzięki względnej prostocie pomiaru i braku szczególnych wymagań co do jakości obrazu



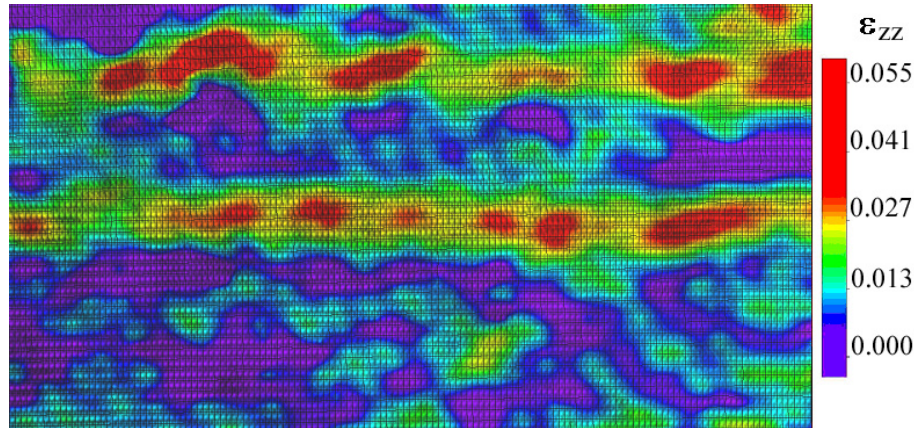
Rysunek 5.22: Obraz HRTEM studni kwantowych In_xGa_{1-x}N (zaznaczone strzałkami) w próbce MOCVD GaN. Dzięki uprzejmości dr S. Kreta, IFPAN.

mikroskopowego dużą popularność zdobyła metoda określania składu chemicznego układów trójskładnikowych na podstawie pomiarów tetragonalnych dystorsji sieci krystalicznej. Metoda ta polega na wyznaczeniu położenia kolumn atomowych (lub przestrzeni międzyatomowych - zależnie od warunków obrazowania - normalny lub odwrócony kontrast) na obrazie mikroskopowym i na podstawie zmian odległości międzyatomowych określa się dwuwymiarową mapę odkształceń sieci, definiującą skład chemiczny kryształu. Wykorzystuje się zwykle w tym celu gotowe środowiska obliczeniowe, np. OPTIMAS (1999) z zaimplementowanymi algorytmami poszukiwania położenia kolumn atomowych na wysokorozdzielczych obrazach mikroskopowych, zob. np. metoda *peak-finding*, zob. Bierwolf i in. (1993). Wykorzystując tę metodę możliwe jest wyznaczenie składu chemicznego praktycznie na dowolnym elektronowym mikroskopie transmisyjnym bez konieczności przystosowywania mikroskopu do wykonywania specjalnych obrazów HRTEM, co jest konieczne przy stosowaniu innych metod. Dodatkowo atutem tej metody jest niewielka wrażliwość na zaszumienie obrazu nieodłącznie towarzyszące obrazom wysokiej rozdzielczości, które często powoduje, że nie możemy wykorzystać innej metody badania składu chemicznego struktury. Jest to duża zaleta tej metody, stąd jej powszechne wykorzystywanie w wielu laboratoriach na całym świecie. Mierząc bezpośrednio na obrazie mikroskopowym lokalne zmiany odległości pomiędzy kolumnami atomowymi ($a - a_{ref}$) wyznaczamy, uśrednioną

po grubości próbki, mapę odkształceń względnych sieci krystalicznej, odniesionych do arbitralnie wybranej sieci referencyjnej a_{ref} :

$$\varepsilon = \frac{a - a_{ref}}{a_{ref}}. \quad (5.26)$$

Znając wartości parametrów materiałowych składników bazowych AC i BC możemy wy-



Rysunek 5.23: Odkształcenia sieci ε_{zz} [0001], wyznaczone dla obszaru na rys.(5.22). Wyraźnie widoczne kolorowe studnie kwantowe z lokalnymi koncentracjami In. W tle widoczny czarno-biały obraz HRTEM. Dzięki uprzejmości dr S. Kreta, IFPAN.

znaczyć parametry materiałowe układu trójskładnikowego pierwiastków $A_xB_{1-x}C$. Wykorzystujemy w tym celu liniowe prawo Vegarda, zakładające:

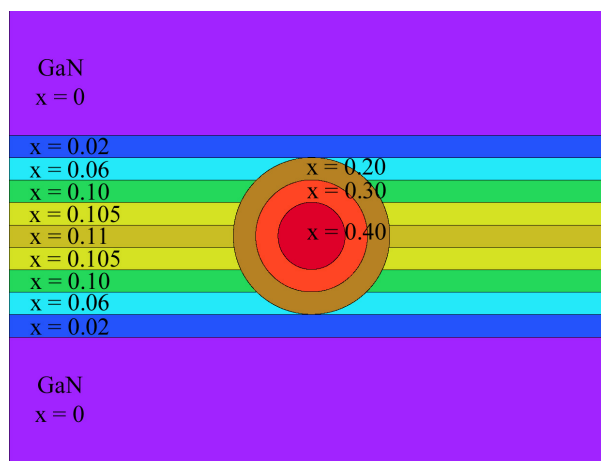
$$a_{A_xB_{1-x}C} = a_{AC} + x(a_{BC} - a_{AC}), \quad (5.27)$$

gdzie a oznacza dowolny parametr materiałowy np. stała sieciowa, współczynniki sztywności a $x \in (0, 1)$ oznacza udział jednego ze składników układu. Dysponując zmierzonym rozkładem odkształceń sieci krystalicznej np. ε_{zz} , zob. rys.(5.23) oraz znając parametry materiałowe kryształu odniesienia możliwe jest określenie składu chemicznego w heterostrukturze na podstawie wzoru:

$$x = \frac{\varepsilon_{zz} a_{ref}}{a - a_{ref}}, \quad (5.28)$$

gdzie a_{AC} oznacza stałą sieci materiału referencyjnego. Dokładność metody zależy od wielu czynników, np: geometrii próbki (grubość próbki, zmiany grubości związane z procesem preparacji próbki), parametrów materiałowych kryształu (stałych sztywności), kierunku pomiaru odkształceń sieci i wielu innych. Ponieważ odkształcenia sieci wyznaczone są w oparciu o obszar referencyjny sieci, więc jego poprawny wybór na obrazie *HRTEM* ma podstawowe znaczenie dla dokładności wyników. W celu zwiększenia precyzji metody należy uwzględnić wpływ efektów towarzyszących relaksowaniu się niejednorodnej próbki podczas procesu przygotowania jej do obrazowania w mikroskopie elektronowym. Przykładem takiej analizy jest oznaczenie składu chemicznego w studniach kwantowych CdTe/ZnTe czy też MnTe/CdTe, badanie procesu dyfuzji na interfejsie układów

$Zn_xCd_{1-x}Se/ZnSe$ czy studni kwantowych $Cd_xMn_{1-x}Te/CdTe$, zob. Ruterana i in. (2003). W okresie ostatniej dekady przedmiotem intensywnych badań stały się półprzewodniki na bazie związków azotu, w szczególności GaN, InN oraz AlN. Z wymienionymi związkami azotu krystalizującymi w układzie heksagonalnym wiązane są wielkie nadzieje w przemyśle optoelektronicznym. Już dziś, na bazie wielokrotnych studni kwantowych $In_xGa_{1-x}N/GaN$ budowane są diody i lasery o barwie niebieskiej pracujące w temperaturze pokojowej. Na razie lasery takie mają niską sprawność i trwałość, ale trwają intensywne badania wspomnianych struktur mające na celu wyjaśnienie procesów rządzących fotoemisją. Przeprowadzone dotychczas badania ww. struktur dowodzą istnienia w studniach kwantowych obszarów silnej koncentracji indu, dochodzącej do 80% o wymiarach rzędu $1\div 5$ nm, podczas gdy nominalna koncentracja In w studni kwantowej wynikająca z warunków wzrostu epitaksjalnego wynosi 10-20%. Wydzielenia indu, zachowują się jak kropki kwantowe i według wielu badaczy odpowiedzialne są za doskonałe parametry optoelektroniczne urządzeń zbudowanych na ich bazie, zob. Narukawa i in. (1997). Efektywność świecenia studni kwantowych stoi bowiem w sprzeczności z wysokim stopniem zdefektowania struktury (wzrost na szafirze Al_2O_3) sięgającym $10^8 - 10^{10}m^{-2}$, który zwykle obniża sprawność świecenia. Natura i sposób tworzenia się tych wydzieleni jest jak na razie nierozstrzygnięta. Część badań eksperymentalnych wiąże proces tworzenia się wydzieleni indu z procesem wzrostu, zob. Singh i in. (1997) podczas gdy inni twierdzą, że segregacja indu następuje podczas wygrzewania i normalizacji próbki, zob. Mceluskey i in. (1998). W celu zrozumienia mechanizmu rządzącego tworzeniem się obszarów aktywnych optycznie w studniach kwantowych $In_xGa_{1-x}N/GaN$ konieczne jest precyzyjne ustalenie koncentracji indu w wydzieleniach i ich geometrii. Wykorzystana zostanie do tego celu analiza składu chemicznego na podstawie pomiarów odkształceń sieci na wysokorozdzielczych obrazach mikroskopowych wraz z modelowaniem sprężystego procesu relaksacji heterostruktur epitaksjalnych. Podczas procesu przygotowania próbki do badań mikroskopowych *TEM* polegającego



Rysunek 5.24: Przyjęty do obliczeń model geometrii wydzielenia wraz z koncentracją indu - x w studni kwantowej.

początkowo na mechanicznym a następnie jonowym ścienianiu próbki, obecność obszarów o wysokiej koncentracji indu powoduje silną lokalną relaksację struktury. Wynika to ze znacznej różnicy w stałych sieciowych składników heterostruktury, zob. tab.(5.3). Zjawisko to ma szczególne znaczenie w przypadku cienkich folii lub wydzieleni znajdujących się tuż przy powierzchni próbki. Sprężysta relaksacja struktury skutkuje zakrzywieniem kolumn atomowych wokół wydzieleni indu obserwowanych na obrazie *HRTEM*. Aby zbadać

	a	c	c ₁₁	c ₁₂	c ₁₃	c ₃₃	c ₄₅
GaN	5.185	3.189	374.2	141.4	98.1	388.6	98.3
InN	5.72	3.52	223.0	115.0	92.0	224.0	48.0

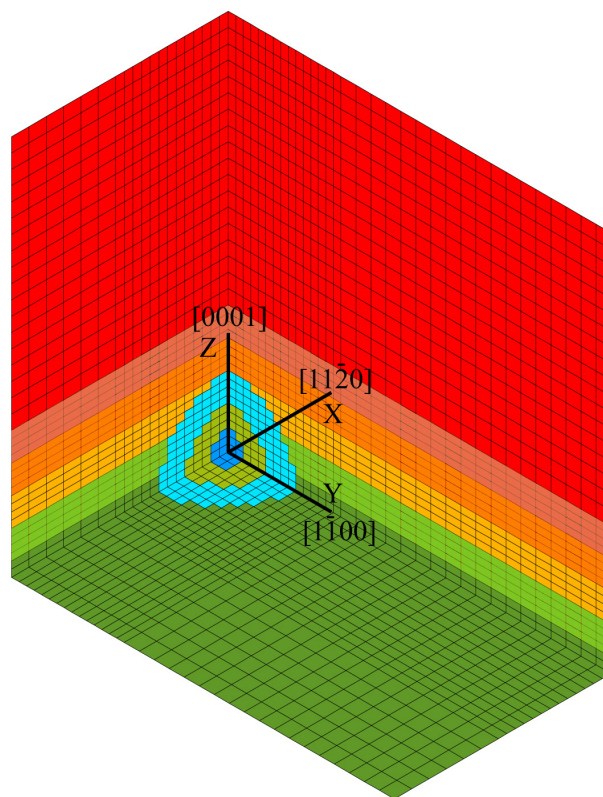
Tablica 5.3: Parametry materiałowe heksagonalnych kryształów GaN i InN, stałe sieciowe (Å) i stałe sztywności (GPa), wg Reeber i Wang (2001).

wpływ efektów relaksacji w cienkich foliach (próbki mikroskopowe) wykorzystany został aparat nieliniowej anizotropowej sprężystości połączony z metodą elementów skończonych i symulacją obrazów *HRTEM*. Porównując obrazy struktury otrzymane na drodze symulacji numerycznej procesu sprężystej relaksacji materiału wokół wydzieleni indu z rzeczywistym obrazem mikroskopowym struktury możemy wyznaczyć poprawkę korygującą skład chemiczny wyznaczony za pomocą metody pomiaru na podstawie odkształceń sieci. Analizę dwuwymiarowego procesu relaksacji w studniach kwantowych In_xGa_{1-x}N/GaN można znaleźć w pracy Ruterana i in. (2002) w której założony skład chemiczny poszczególnych obszarów heterostruktury, tj. bariery GaN, studni kwantowej In_xGa_{1-x}N, wydzielenia In_yGa_{1-y}N (y>x) jest stały. Tak przyjęty model obliczeniowy prowadzi w efekcie do wzorów empirycznych na koncentrację indu jako funkcji zmierzonych odkształceń sieci wyznaczonych na bazie obrazów HRTEM:

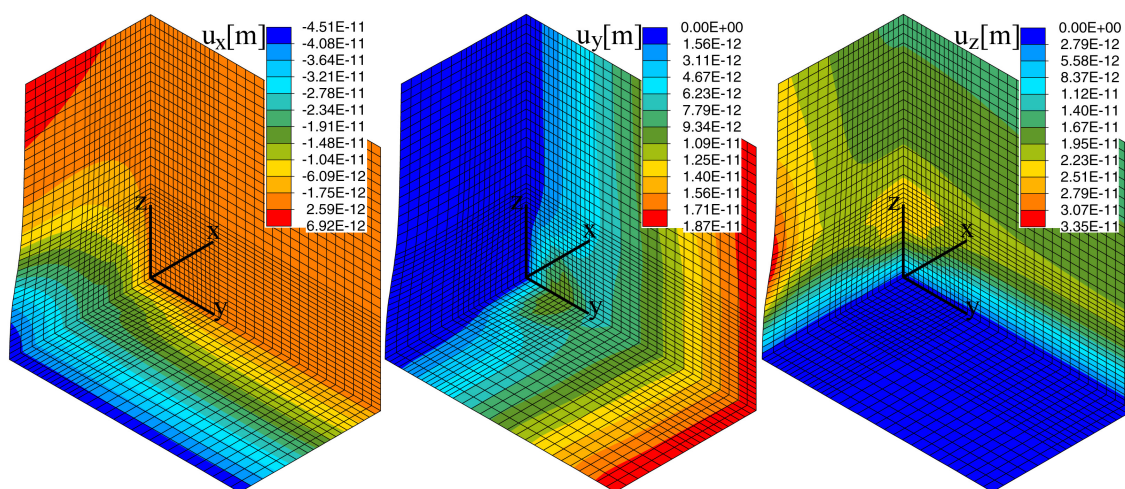
$$x[\%] = 650 \varepsilon_{zz} \text{ dla próbek MOCVD,} \quad (5.29)$$

$$x[\%] = 720 \varepsilon_{zz} \text{ dla próbek MBE,} \quad (5.30)$$

gdzie x oznacza koncentrację indu a ε_{zz} - odkształcenie sieci na kierunku [0001]. Wybór odkształceń sieci na kierunku [0001] do wyznaczenia składu chemicznego nie jest przypadkowy, gdyż na podstawie wielu pomiarów porównawczych okazało się, że odkształcenia sieci na tym kierunku najdokładniej oddają charakter zmian składu chemicznego struktury. W przypadku struktury widocznej na rys.(5.22) można stwierdzić że typowa koncentracja indu w wydzieleniu wynosi ok. 20%, podczas gdy maksymalna koncentracja w wydzieleniach wynosi ok. 40%, zob. rys.(5.23) i por. (5.28). Analizując wstępne wyniki symulacji procesu relaksacji heterostruktury i porównując je do wyników eksperymentalnych, można stwierdzić, że wspomniany model jest nieodpowiedni ze względu na zaniżoną koncentrację indu w wydzieleniach. Pominięcie efektu pełnego zakrzywienia się kolumn atomowych wokół wydzieleni jak i zmienność składu chemicznego skutkuje niedoszacowaniem koncentracji indu wyznaczonego na podstawie (5.29) i (5.29). Aby zbadać wpływ przyjętych uproszczeń na wyniki obliczeń przeprowadzona została symulacja trójwymiarowego (3D) modelu wydzielenia indu w studni kwantowej uwzględniającego efekty nieliniowej

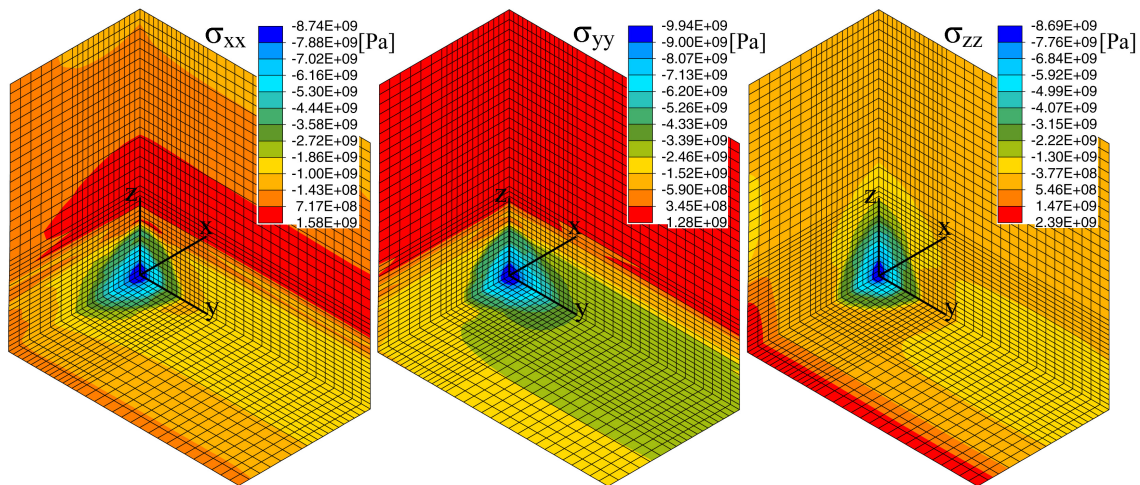


Rysunek 5.25: Założony model wydzielania - poszczególne kolory oznaczają różną koncentrację indu, zob. rys.5.24.



Rysunek 5.26: Przeszczenia sieci (powiększone x10) w zrelaksowanej próbce z kulistym wydzielaniem In w studni kwantowej $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ wg modelu z Rys.5.25.

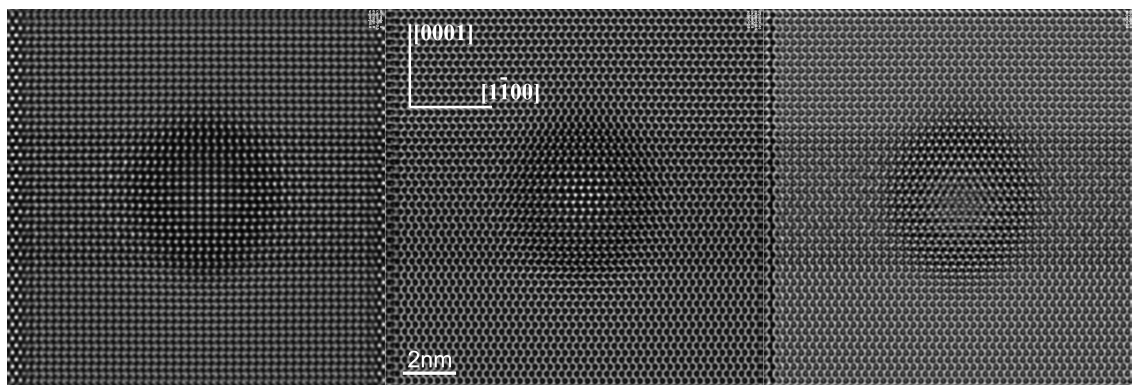
sprężystej relaksacji jak i wpływ zmiennego składu chemicznego struktury. Na podstawie analizy wyników uzyskanych za pomocą modelu 2D ustalona została wyjściowa geometria i skład chemiczny studni kwantowej $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ z pojedynczym, sferycznym wydzieleniem indu, która przedstawiona jest na rys.(5.24). Wymiary próbki przyjętej do obliczeń wynoszą $14 \times 14 \times 8$ nm, podczas gdy grubość studni kwantowej wynosi 9 stałych sieciowych "c" kryształu GaN, por. tab.(5.3). Do obliczeń obszar próbki podzielony został na 8-mio węzłowe elementy skończone. Wymiar pojedynczego elementu skończonego jest całkowitą krotnością stałej sieciowej struktury referencyjnej - kryształu GaN. Zapewnia to zgodność położenia węzłów siatki *MES* z rzeczywistymi położeniami atomów tworzącymi strukturę krystaliczną. W obszarze studni kwantowej zastosowano gęstszy podział na elementy mający na celu możliwie dokładne odwzorowanie kulistego kształtu wydzielenia jak i założonego zmiennego składu chemicznego wydzielenia i studni kwantowej. W tym celu obszar próbki podzielono na 9 podobszarów odpowiadających różnej koncentracji indu. Podziału próbki na elementy skończone wraz z założonym składem chemicznym przedstawia rys.(5.25). Dzięki symetrii tak przyjętego modelu możliwe było przeprowa-



Rysunek 5.27: Naprężenia residualne w zrelaksowanej próbce z kulistym wydzieleniem w studni kwantowej. Skład chemiczny i wymiary wg rys.5.25.

dzenie obliczeń jedynie na $\frac{1}{8}$ -mej części próbki, wprowadzając na płaszczyznach symetrii odpowiednie warunki brzegowe. Dodatkowo, w celu symulacji periodyczności struktury na zewnętrznych powierzchniach próbki, prostopadłych do kierunku $[1\bar{1}00]$ wprowadzone zostały warunki brzegowe typu MPC. Pozostałe powierzchnie zewnętrzne próbki (prostopadłe do kierunku wiązki elektronowej - $[11\bar{2}0]$ oraz kierunku swobodnego wzrostu warstwy - $[0001]$) pozostały powierzchniami swobodnymi. Dane materiałowe dla poszczególnych obszarów, wyznaczone zostały przy użyciu prawa Vegarda, zob. (5.27) na podstawie danych z tab.(5.3). W efekcie symulacji numerycznej otrzymujemy rozkład naprężeń residualnych i przemieszczeń węzłowych w zrelaksowanej strukturze, zob. rys.(5.26). Przemieszczenia węzłów siatki *MES* w dalszym etapie obliczeń przypisane są do odpowiadającej im superkomórki kryształu. Dla atomów leżących pomiędzy węzłami siatki *MES* wyznaczone

jest uśrednione położenie na podstawie przemieszczeń sąsiednich węzłów, korzystając z hipotezy Cauchy'ego-Borna, zob. Born i Huang (1956), Ericksen (1984), Tadmor i in. (1996). Koncentracja indu w strukturze zamieniana jest na prawdopodobieństwo wystąpienia atomu In lub Ga w strukturze superkomórki i stosowana jest zamiast klasycznego współczynnika obsadzenia. Symulowany obraz HRTEM otrzymujemy korzystając z pomocy pakietu obliczeniowego EMS, zob. Stadelmann (1987), wykorzystującego metodę *fast Blocha*. Parametry obrazowania przyjęte do symulacji odpowiadały parametrom mi-

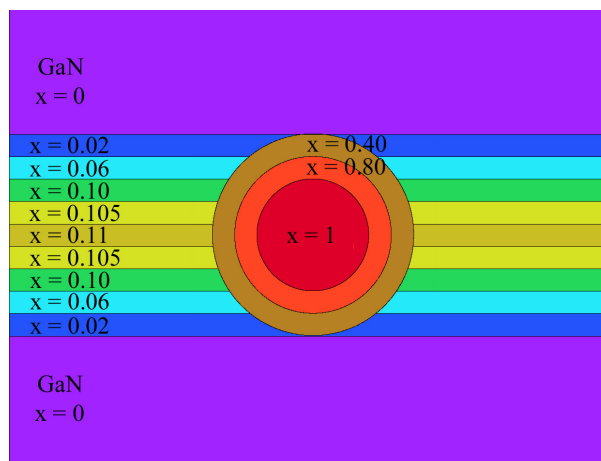


Rysunek 5.28: Symulowane obrazy HRTEM kulistych wydzielań In w studniach kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ dla parametru rozogniskowania $\delta = 0, 40, 80$ nm.

kroskopu "Topcon 0002B" pracującym przy napięciu 200 kV, tj:

- współczynnik abberacji sferycznej $C_s = 0.5$ nm,
- zbieżność wiązki $\alpha = 0.8$ mrad,
- rozkład rozogniskowania $D_s = 8$ nm,
- apertura obiektywu $A = 12$ nm⁻¹.

Użyteczne obrazy do pomiarów odkształceń sieci za pomocą procedur *peak finding* otrzymane zostały dla parametrów rozogniskowania (*defocus*) w zakresach $\delta = 5-15$ nm dla kontrastu normalnego oraz $\delta = 55-70$ nm dla kontrastu odwróconego. Przykładowe symulowane obrazy HRTEM modelowanej struktury przedstawione są na Rys.5.28. Porównując obraz struktury uzyskany na drodze symulacji numerycznej z eksperymentalnym obrazem HRTEM dochodzimy do wniosku, że założona wstępnie koncentracja indu w badanej strukturze jest niedostateczna aby wywołać widoczne na obrazach eksperymentalnych odkształcenia sieci. Odkształcenia sieci dla symulowanej struktury są znacząco niższe w porównaniu z tymi z obrazów eksperymentalnych. Zwiększenie udziału indu w składzie chemicznym wydzielenia do poziomu 80%, a w niektórych przypadkach nawet do 100%, zob. rys.(5.23), przy jednoczesnym zwiększeniu średnicy wydzielenia, por. rys.(5.29), jest konieczne dla osiągnięcia zgodności pomiędzy wynikami numerycznymi a eksperymentem.

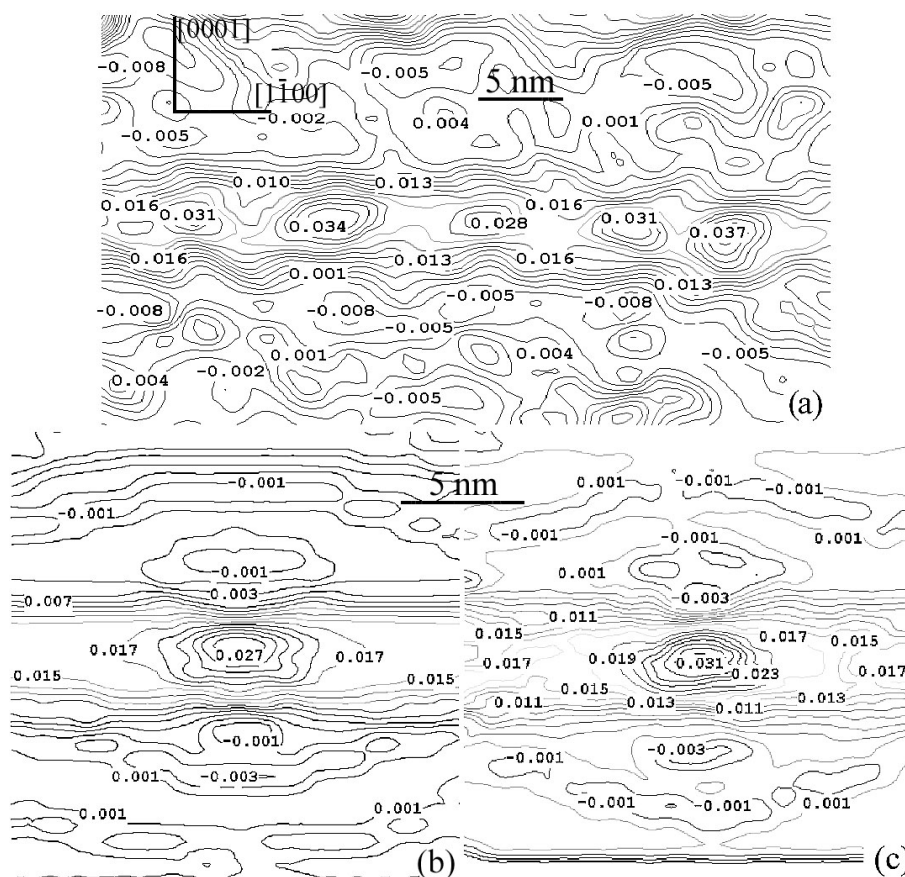


Rysunek 5.29: Geometria i koncentracja In w wydzieleniu dająca na symulowanych obrazach HRTEM odkształcenia sieci porównywalne z eksperymentem.

Model wydzielenia indu z koncentracją indu na poziomie 80% daje w wyniku odkształcenia sieci porównywalne z typowymi wynikami odkształceń sieci wyliczonymi na podstawie eksperymentalnego obrazu HRTEM. Na podstawie porównania wartości i rozkładu odkształceń sieci na symulowanych obrazach heterostruktury z jej rzeczywistym obrazem możemy stwierdzić, że typowe wydzielenie indu ma koncentrację ok. 80% i średnicę ok. 3-4 nm, por. rys.(5.30). Warto zwrócić uwagę na różnicę pomiędzy odkształceniem sieci wyliczonym bezpośrednio z przemieszczeń węzłowych zrelaksowanej siatki MES oraz z symulowanego obrazu HRTEM, zob. rys.(5.30). Symulowany obraz mikroskopowy wyliczony został na podstawie przemieszczeń sieci MES, a różnica pomiędzy nimi powstała podczas samego procesu symulacji obrazu HRTEM. Założenie parametrów obrazowania odpowiadających rzeczywistemu mikroskopowi, a odzwierciedlających błędy jego wykonania są powodem powstania przekłamań obrazu struktury.

5.5 Dyskusja otrzymanych wyników

Przedstawiony w poprzednich rozdziałach algorytm pozwala na obliczanie naprężeń w heterostrukturach krystalicznych. Przy wyznaczaniu konfiguracji równowagowej struktury brana jest pod uwagę nieliniowość geometryczna oraz fizyczna kryształu. Ze względu na specyfikę właściwości mechanicznych kryształu niezwykle ważne jest ujęcie anizotropii sprężystej charakterystycznej dla kryształów, poprzez przyjęcie odpowiedniej postaci macierzy reprezentacji tensora sztywności \mathbf{c} . Różnice w stałych sieciowych dla poszczególnych warstw materiału w prezentowanym modelu zadawane są bezpośrednio, z pominięciem szeroko stosowanych w literaturze współczynników rozszerzalności temperaturowej kryształów, por. Kret i in. (1999), Tillmann i in. (2000). Otwiera to możliwości dalszego rozwoju algorytmu o analizę i uwzględnienie wpływu na heterostrukturę zmian temperatury występujących w procesie jej hodowli. Otrzymane wyniki stanowią kontynuacyjne przybliżenie



Rysunek 5.30: Odkształcenia sieci: a) struktury rzeczywistej, b) symulowany na podstawie zrelaksowanej siatki MES, c) na podstawie symulacji obrazu HRTEM.

ściśłego rozwiązania dla samonaprzężonych heterostruktur epitaksjalnych. Krytycznym parametrem przedstawionych obliczeń jest założony rozkład przestrzenny składników struktury, oparty na przesłankach technologicznych. W pierwszym z przedstawionych przykładów numerycznych wyznaczony został na podstawie położenia dyslokacji niedopasowania i odpowiada w przybliżeniu interfejsowi heterostruktury. Ze względu na tak przyjęte uproszczenie nie może on być uznany za pomiar ostateczny. Aby uzyskać możliwie bliski rzeczywistemu rozkład materiału w próbce należałoby przeprowadzić długotrwałą procedurę optymalizacji rozkładu składników struktury ze względu na naprężenia residualne. Idąc krok dalej, w oparciu o hipotezę Cauchy - Borna przedstawione wyniki kontynuálne można wykorzystać jako wstępną, przybliżoną konfigurację struktury z defektami dla dalszych obliczeń metodami dyskretnymi, które pozwoliłyby uzyskać znacznie dokładniejsze wyniki w obrębie rdzeni dyslokacji. Możemy to uzyskać przyjmując, że atomy kryształu "związane" są sztywno z węzłami elementu skończonego (są w nim "zamrożone") i tak samo jak element kontynuálny deformują się. Konieczny jest więc odpowiednio przyjęty podział na elementy skończone pozwalający na podstawie przemieszczeń węzłowych

siatki elementów skończonych wyznaczyć dyskretne położenia atomów w zdeformowanej obecnością dyslokacji strukturze, zob. rys. (5.9) i (5.17) a następnie wykorzystując je jako dane wejściowe do modelowania struktury statyką/dynamiką molekularną czy też symulowania obrazów HRTEM. Uzyskujemy w ten sposób możliwość weryfikacji eksperymentalnej otrzymanych wyników numerycznych. W przypadku trójwymiarowej analizy defektów sieci na interfejsie heterostruktury, za pomocą przedstawionego algorytmu możliwe było uwzględnienie wpływu składowych śrubowych dyslokacji na konfigurację równowagową struktury i poziom naprężeń residualnych, por. Dłużewski i in. (2002b), Dłużewski i in. (2004). Podobnie jak w cytowanej pracy, ze względu na wysokie gradienty przemieszczeń w okolicy defektów otrzymane wyniki dla naprężeń charakteryzują się bardzo wysokim ich poziomem, rzędu kilku GPa. Dzięki wykorzystaniu przedstawionego modelu do analizy odkształceń supersieci możliwa jest ocena składu chemicznego tychże struktur. Dzięki uzupełnieniu algorytmu o model oddziaływań piezoelektrycznych możliwe są również obliczenia zmian struktury pasmowej heterostruktur wykorzystywanych w optoelektronice, zob. Jurczak i in. (2005).

Przy badaniu wpływu efektów relaksacji cienkiej folii (próbki) mikroskopowej na konfigurację równowagową sieci zastosowano opisany model anizotropowej, nieliniowej relaksacji sprężystej kryształu. Przemieszczenia węzłów siatki elementów skończonych przypisane zostały atomom idealnej struktury krystalicznej GaN a koncentracja indu przeliczona została na prawdopodobieństwo wystąpienia atomu indu lub galu. Dzięki obliczeniom przeprowadzonym metodą elementów skończonych dla trójwymiarowego, kulistego wydzielenia indu w studni kwantowej GaN otrzymaliśmy rozkład "hipotetycznych" przemieszczeń atomów założonej struktury krystalicznej. Tak uzyskana konfiguracja struktury pozwala odtworzyć obraz HRTEM heterostruktury. Na podstawie porównania odkształceń sieci eksperymentalnego i symulowanego obrazu mikroskopowego możemy zweryfikować ocenę składu chemicznego oraz poprawić dokładność w porównaniu z metodami opartymi np. o kombinację HRTEM i interferometrii optycznej. Porównując otrzymane wyniki obliczeń trójwymiarowych struktur z podobnymi symulacjami 2D tychże samych struktur, zob. Ruterana i in. (2002), możemy zauważyć podobieństwa jakościowe dotyczące odkształceń sieci krystalicznej. W obu przypadkach mamy do czynienia ze ścisaniem struktury w obrębie studni kwantowej charakteryzującej się wysoką koncentracją indu i lokalnym rozciąganiem obszarów na granicy studnia - bariera. Jakkolwiek należy tu podkreślić znaczne różnice w otrzymanych wartościach odkształceń sieci. Wartości odkształceń sieci są znacznie niższe w przypadku symulacji w pełni trójwymiarowych obiektów przestrzennych jakimi są wydzielenia indu (w przypadku symulacji 2D wydzielenie odpowiada geometrią walcowi a nie kuli czy elipsoidzie). Jest to spowodowane faktem ujęcia pełnej geometrii obszaru wzbogaconego indem oraz kompletnym opisem procesu relaksacji takiego obiektu. Na podstawie analizy wyników symulacji 2D oparto przypuszczenie liniowej zależności pomiędzy koncentracją indu a lokalnym poziomem odkształcenia sieci, zob. równ. 5.28. Na podstawie przedstawionej zależności koncentracja indu dla odkształcenia sieci $\varepsilon_{zz} = 0.03$ wynosi 20% podczas gdy podobne wartości odkształceń sieci wyznaczane są dla trójwymiarowego modelu kropki z 80% koncentracją indu, por. rys. 5.30c. Na tej podstawie oczywistym jest, że dwuwymiarowy model wydzielenia indu w studni kwantowej nie opisuje w pełni analizowanego zjawiska czego efektem jest otrzymanie poszukiwanego składu

chemicznego obciążonego znacznym błędem. W celu poprawy dokładności prezentowanej metody analizy składu chemicznego należy dokładnie ustalić grubość folii, gdyż parametr ten ma decydujący wpływ na dokładność uzyskiwanych wyników. Przedstawiona metoda pozwala uzyskać informację na temat składu chemicznego bardzo cienkich próbek, porównywalną z wymiarem wydzieleni i częściowo rozwiązuje problemy podczas interpretacji obrazów HRTEM. Poważnym problemem wpływającym na dokładność obliczeń jest występujący w procesie przygotowywania danych wejściowych brak dokładnych narzędzi analizy składu chemicznego heterostruktury na podstawie wyników eksperymentalnych. Dodatkowym ograniczeniem jest brak pełnej, trójwymiarowej informacji o strukturze. Dostępne dziś wyniki eksperymentalne (obrazy HRTEM) ograniczają się jedynie do dwóch wymiarów a rozwiązanie tego problemu przy obecnym poziomie zaawansowania technik badawczych jest praktycznie niemożliwe. W przypadku struktur z defektami prezentowana metoda stanowić może doskonale narzędzie uzupełniające metody dyskretne obliczeń struktur krystalicznych dostarczając "wstępnej" informacji o konfiguracji równowagowej atomów przy jednoczesnym zachowaniu akceptowalnej dokładności poza rdzeniami defektów.

Prezentowany algorytm obliczeniowy zastosowany do obliczeń naprężeń residualnych w zdeformowanych strukturach krystalicznych zapewnia uzyskanie zbieżności rozwiązania ($\delta = 10^{-16}$, zob. (4.12)) już po ok. 6-8 iteracjach metodą NR, przy czym po przekroczeniu tolerancji rzędu 10^{-6} zmiany konfiguracji jak i naprężeń residualnych są już niezauważalne. Liczba iteracji i czas obliczeń zależą ściśle od przyjętego schematu rozwiązania - metodą NR, zmodyfikowaną metodą NR lub też kombinacją obu tych metod. W przypadku stosowania zmodyfikowanej metody NR w celu osiągnięcia pożądanej zbieżności, konieczne jest przeprowadzenie większej, niż wymieniona wyżej, liczby iteracji. Warto tu nadmienić, iż z doświadczenia autora wynika, że zmodyfikowana metoda NR nie we wszystkich wypadkach jest użyteczna. Ponadto jej stosowanie wymaga rozwagi, gdyż w przypadku znaczących zmian konfiguracji ciała metoda ta nie prowadzi do rozwiązania problemu. Zastosowanie podczas obliczeń przybliżonej macierzy stycznej nie wpłynęło w istotny sposób na przebieg procesu iteracji. Liczba iteracji koniecznych do uzyskania zbieżności w obu przypadkach jest podobna. Podczas wielu obliczeń testowych okazywało się wręcz, że pochodna wyznaczona w sposób ścisły powoduje pogorszenie się procesu zbieżności - dotyczy to szybkozmiennego członu $\frac{\partial \nabla \mathbf{N}}{\partial \mathbf{a}}$ w (4.13), który był głównym źródłem zaburzeń. Wspomniane tu znaczne zmiany konfiguracji ciała (zob. dyslokacje w kryształach miedzi - deformacja części elementów wynosi 33%) stanowią poważny problem podczas obliczeń. W wielu przypadkach konieczny jest podział procesu obliczeń na dwa etapy - obliczenia konfiguracji wstępnej (deformacja rzędu 50-70% deformacji docelowej), a następnie start z tak obliczonej konfiguracji do konfiguracji docelowej.

Rozdział 6

Podsumowanie

W ramach niniejszej pracy opracowany został nowy algorytm numeryczny oparty na aparacie nieliniowej anizotropowej hipersprężystości i metodzie elementów skończonych pozwalający wyznaczać konfigurację równowagową i naprężenia residualne w heterostrukturach krystalicznych, a po uwzględnieniu oddziaływań termodynamicznych również w heterostrukturach z defektami. Model anizotropowej hipersprężystości bazuje na uogólnionej mierze odkształcenia pozwalając w ten sposób uwzględnić w obliczeniach nieliniowość geometryczną materiału. Dobór parameteru miary odkształcenia pozwala uzyskać wymagany w danym przypadku stopień nieliniowości. Dzięki temu, możliwe jest dopasowanie modelu do fizyki zjawiska co z punktu widzenia obliczeń struktur krystalicznych jest niezwykle istotne, gdyż stopień ich nieliniowości może być istotnie różny. Nieliniowość fizyczna uwzględniana jest poprzez użycie stałych sztywności rzędów wyższych niż drugi. Anizotropia właściwości sprężystych kryształu ujęta jest poprzez przyjęcie odpowiedniej dla danego kryształu postaci reprezentacji tensorów sztywności. Algorytm metody elementów skończonych oparty jest na całkowaniu równania równowagi w konfiguracji aktualnej. Opracowany algorytm wykorzystany został praktycznie na potrzeby projektów badawczych:

- MRTN-CT-2004-005583 Interfacial Phenomena at Atomic Resolution and multiscale properties of novel III-V Semiconductors (PARSEM),
- KBN 7 T07A 015 17 *Wykorzystanie logarytmicznej miary odkształcenia w hipersprężystej anizotropii materiałów. Termodynamika, równania konstytutywne i komputerowa symulacja metodą elementów skończonych,*
- KBN PBZ-KBN-096/T08/2003 *Technologia wytwarzania wyrobów z metali i stopów o strukturze nanometrycznej,*
- KBN T11F 00 825 *Model numeryczny azotkowych struktur kwantowych do badania sprzężonych własności elastycznych i optycznych,*
- KBN 8 T07A 010 26 *Wpływ warunków wzrostu epitaksjalnego na samonapężenia, pękanie i formowanie się kropek kwantowych w warstwach azotkowych.*

Dzięki oryginalności zastosowanej metody oraz możliwości aplikacji przy analizie wielu problemów możliwe stało się nawiązanie współpracy w wieloma renomowanymi laboratoriami badawczymi m.in:

- CRISMAT/SIFCOM Caen, Francja;
- Centre d'Etudes de Chimie Métallurgique CNRS, Vitry-sur-Seine, Francja;
- Universidad de Kadiz, Hiszpania;
- Nordic Hysitron Laboratory Helsinki, Finlandia;
- Aristotle University of Thessaloniki, Grecja.

Wyniki symulacji numerycznych struktur krystalicznych opublikowane zostały w:

- *Materials Science Forum*, (2002) **404-405**:141–146;
- *Computational Material Science*, (2004) **29**:379–395;
- *Physica status solidi (b)*, (2004) 1-4;
- *Jornal of Alloys and Compounds*, (2004) **38 2**:10–16;
- *Physica status solidi (c)*, (2005) **2(3)**:972–975;

Oryginalne cechy prezentowanego algorytmu:

- możliwość doboru stopnia nieliniowości modelu związanego z możliwością wyboru miary odkształcenia i używanych stałych sztywności,
- łatwość modelowania nieliniowości fizycznej poprzez przyjęcie stałych sztywności wyższych rzędów,
- bezpośrednie uwzględnienie składu chemicznego struktury poprzez przyjęcie różnych stałych sieciowych kryształów,
- możliwość obliczania naprężeń residualnych wywołanych defektami struktury,
- możliwość wyznaczenia konfiguracji równowagowej oraz naprężeń residualne w idealnych i zdeformowanych strukturach krystalicznych,
- możliwość wzbogacenia modelu o dodatkowe zadania sprzężone z polem odkształceń sprężystych dzięki modułowej budowie macierzy stycznej.

W ramach niniejszej pracy, w ramach metody elementów skończonych, opracowane zostały numeryczne i teoretyczne modele dyslokacji krawędziowej i dyslokacji śrubowej (dyslokacje cząstkowe Schockleya). Wyznaczono trójwymiarowy rozkład naprężeń residualnych w heterostrukturze epitaksjalnej CdTe/ZnTe/GaAs powstałych na skutek istnienia układu dyslokacji niedopasowania na interfejsie. Dokonano analizy porównawczej heterostruktury InGaN/GaN celem weryfikacji jej składu chemicznego. Szereg przedstawionych w niniejszej pracy równań, m. in. (A.26), (B.9)-(B.13), (B.17), (C.8) wg aktualnej wiedzy autora publikowane są po raz pierwszy.

Spis rysunków

2.1	Energia odkształcenia zmagazynowana w procesie deformacji ciała.	18
2.2	Układ współrzędnych.	23
2.3	Zależność energii potencjalnej wiązania ψ w zależności od wzajemnej odległości r cząstek w kryształach. D_w - energia wiązania, r_w - odległość równowagowa wiązania, ψ_{od} , ψ_p - składowe potencjału: odpychająca i przyciągająca.	27
3.1	Odkształcenie $\hat{\varepsilon}$ jako funkcja rozciągnięcia próbki u dla różnych parametrów m miary odkształcenia podczas testu jednoosiowego rozciągania.	43
3.2	Schemat wyodrębnionych konfiguracji ciała.	44
5.1	Kontur Burgersa w kryształach zawierających dyslokację: a) dyslokacja krawędziowa, b) dyslokacja śrubowa, wg Hull (1965).	64
5.2	Obraz HRTEM heterostruktury GaAs/ZnTe/CdTe z zaznaczonym obszarem obliczeń MES.	67
5.3	Wartości składowych tensora dystorsji źródłowych $\hat{\beta}$	68
5.4	Przyjęta do obliczeń siatka elementów skończonych wraz z rozkładem materiału i orientacją krystalograficzną.	69
5.5	Wartości składowych tensora naprężenia Cauchy'ego σ	71
5.6	Skalarna gęstość dyslokacji $\hat{\alpha}$	72
5.7	Typowa dyslokacja krawędziowa w kryształach o strukturze regularnej ścianie centrowanej, wektor Burgersa $b = \frac{1}{2}[110]$, wg Seeger (1957).	73
5.8	Orientacja siatki elementów skończonych w strukturze miedzi (<i>FCC</i>) z zaznaczonymi pozycjami atomów w obszarze $\sqrt{2} \times \sqrt{3} \times \sqrt{6} a$. Czarny kolor oznacza atom w położeniu narożnym komórki elementarnej, czerwony - środek ściany.	74
5.9	Zastosowany do obliczeń element skończony wraz z wymiarami i orientacją zapewniającą warunki sklejenia atomów w poprawną strukturę <i>FCC</i> wraz z naniesionymi położeniami atomów.	75
5.10	Założona do obliczeń siatka elementów skończonych a) początkowa konfiguracja lagranżowska \mathbf{X} , b) zdeformowana konfiguracja aktualna \mathbf{x} . Czerwonym kolorem oznaczono elementy 27-mio węzłowe, zielonym 18-to węzłowe.	76
5.11	Założony rozkład dystorsji źródłowych na konfiguracji aktualnej \mathbf{x}	77
5.12	Izolinie naprężeń wokół prostoliniowej dyslokacji krawędziowej dla klasycznej teorii sprężystości i ośrodka izotropowego, za Hirth i Lothe (1982).	77

5.13	Rozkłady naprężeń wokół dyslokacji krawędziowej dla stałych sztywności 2-go rzędu zob. tab.(5.1).	78
5.14	Rozkłady naprężeń wokół dyslokacji krawędziowej wyznaczone z uwzględnieniem stałych sprężystości 3-go rzędu, zob. tab.(5.2).	78
5.15	Mechanizm dysocjacji dyslokacji w kryształach <i>FCC</i> , wg Cottrell (1953).	79
5.16	Dysocjacja dyslokacji krawędziowej na dwie cząstkowe dyslokacje Shockleya oddzielone błędem ułożenia, wg Seeger (1957).	80
5.17	Położenia atomów w komórce translacji $\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt{3} \times \frac{\sqrt{6}}{2}$ stałej sieciowej, z naniesionymi elementami o wymiarach $\frac{\sqrt{2}}{4} \times \sqrt{3} \times \frac{\sqrt{6}}{12}$ stałej sieciowej.	81
5.18	Krystalograficzna siatka elementów skończonych układu dyslokacji Schockleya w konfiguracji a) lagranżowskiej \mathbf{X} , b) aktualnej \mathbf{x}	82
5.19	Założony rozkład dystorsji źródłowych naniesiony na konfigurację lagranżowską \mathbf{X} a) składowa krawędziowa - $\hat{\beta}_{xx}$, b) składowa śrubowa - $\hat{\beta}_{xz}$	83
5.20	Rozkład naprężeń residualnych wokół dyslokacji Schockleya.	83
5.21	Składowe tensora gęstości dyslokacji, składowa krawędziowa $\hat{\alpha}_{xz}$ i śrubowa $\hat{\alpha}_{zz}$. Widoczny na rysunku obszar jest wycinkiem próbki ograniczonym do okolic dyslokacji.	84
5.22	Obraz HRTEM studni kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (zaznaczone strzałkami) w próbce MOCVD GaN. Dzięki uprzejmości dr S. Kreta, IFPAN.	85
5.23	Odkształcenia sieci ε_{zz} [0001], wyznaczone dla obszaru na rys.(5.22). Wyraźnie widoczne kolorowe studnie kwantowe z lokalnymi koncentracjami In. W tle widoczny czarno-biały obraz HRTEM. Dzięki uprzejmości dr S. Kreta, IFPAN.	86
5.24	Przyjęty do obliczeń model geometrii wydzielenia wraz z koncentracją indu - x w studni kwantowej.	87
5.25	Założony model wydzielenia - poszczególne kolory oznaczają różną koncentrację indu, zob. rys.5.24.	89
5.26	Przemieszczenia sieci (powiększone x10) w zrelaksowanej próbce z kulistym wydzieleniem In w studni kwantowej $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ wg modelu z Rys.5.25.	89
5.27	Naprężenia residualne w zrelaksowanej próbce z kulistym wydzieleniem w studni kwantowej. Skład chemiczny i wymiary wg rys.5.25.	90
5.28	Symulowane obrazy HRTEM kulistych wydzieleni In w studniach kwantowych $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ dla parametru rozogniskowania $\delta = 0, 40, 80$ nm.	91
5.29	Geometria i koncentracja In w wydzieleniu dająca na symulowanych obrazach HRTEM odkształcenia sieci porównywalne z eksperymentem.	92
5.30	Odkształcenia sieci: a) struktury rzeczywistej, b) symulowany na podstawie zrelaksowanej siatki MES, c) na podstawie symulacji obrazu HRTEM.	93
B.1	Zmiana konfiguracji oraz zmiana położenia węzła pośredniego \widehat{x}_3 i wartości \mathbf{F}_{pl}^{-1} w tym węźle.	125
C.1	Wpływ wyboru parametru miary odkształcenia "m" na zmianę wartości współczynnika ściśliwości objętościowej $B(\widehat{\varepsilon})$. Stałe sztywności wg tab.(A.1).	129

Literatura

- Abeyarante, R., Bhattacharya, K. i Knowles, J. (2001). Strain-energy functions with multiple local minima: modeling phase transformation using finite thermo-elasticity, w Fu, Y. i Ogden, R.W. (Eds.), *Nonlinear Elasticity: Theory and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Alexander, H. i Teichler, H. (2000). *Handbook of Semiconductor Technology*. Wiley - VCH, Berlin.
- Anand, L. (1979). On Hencky's approximate strain-energy function for moderate deformations. *ASME*, **46**:78–82.
- Anand, L. (1986). Moderate deformations in extension-torsion of incompressible isotropic elastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **34**:293–304.
- Angello, J. i Mills, M. (1995). *Philosophical Magazine A*, **72**:635.
- Antman, S. (1995). *Nonlinear Problems of Elasticity*. Springer-Verlag, New York.
- Barton, N., Dawson, P. i Miller, M. (1999). Yield strength asymmetry predictions from polycrystal plasticity. *Journal of Engineering Materials and Technology*, **121**:230–239.
- Barts, D. B. i Carlsson, A. E. (1995). *Physical Review E*, **52**:3195.
- Bayle, P., Deutsch, T., Gilles, B., Lancon, F., Marty, A. i Thibault, J. (1993). *Ultramicroscopy*, **56**:94.
- Belytschko, T., Liu, W.K. i Moran, B. (2000). *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Wiley and Sons Ltd.
- Berveiller, M. i Zaoui, A. (1978). An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **26**:325–344.
- Betten, J. (1991). Recent advances in applications of tensor functions in solid mechanics. *Advances in Mechanics*, **14**:79–109.
- Bierwolf, R., Hohenstein, M., Phillipp, F., Brandt, O., Crook, G. i Ploog, K. (1993). *Ultramicroscopy*, **49**:273.

- Blatz, P. i Ko, W. (1962). Application of finite elasticity to the deformation of rubbery materials. *Transactions of The Society of Rheology*, **6**:223–251.
- Boehler, J. (1987). Applications of Tensor Functions in Solid Mechanics. *CISM Courses and Lectures*, Vol. 292, Springer.
- Boehler, J., Kirillov, A. i Onat, E. (1994). On the polynomial invariants of elasticity tensor. *Journal of Elasticity*, **34**:97–110.
- Bone, J. i Woods, R. (1997). *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. Cambridge University Press.
- Born, M. (1940). *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **36**:160–172.
- Born, M. i Furth, R. (1940). *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **36**:454.
- Born, M. i Huang, K. (1956). *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Clarendon Press, Oxford.
- Brewster, D. (1816). *The Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 156–178.
- Brillouin, L. (1925). Les lois de l'élasticité sous forme tensorielle valable pour des coordonnées quelconques. *Annalen der Physics*, **10**(3):251–298.
- Brillouin, L. (1928). Les lois de l'élasticité en coordonnées quelconques. *Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Toronto 1924*, **2**(3):73–97.
- Brugger, K. (1964). Thermodynamic definition of higher order elastic coefficients. *Physical Review*, **133**(6A):1611–1612.
- Bruhns, O., Xiao, H. i Meyers, A. (2000). Hencky's elasticity model with the logarithmic strain measure; a study on Poyting effect and stress response in torsion of tubes and rods. *Archives of Mechanics*, **52**(4-5):489–509.
- Cauchy, A. (1829). *Exercices de Mathématique*, **4**.
- Cauchy, A. (1830). *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences*, **9**:119.
- Chadwick, P. (1973). *Continuum Mechanics*. Dover Publications, New York.
- Chadwick, P. (1976). *Continuum Mechanics*. George Allen & Unwin, London.
- Chenot, J., Wood, R. i Zienkiewicz, O. E. (1992). *Numerical Methods in Industrial Forming Processes*. A.A.Balkema.
- Christensen, R. (1994). Properties of carbon fibres. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **42**:681–695.

- Ciarlet, P. (1988). *Mathematical Elasticity*, Volume I: Three-Dimensional Elasticity. North-Holland, Amsterdam.
- Cosserat, E. i Cosserat, F. (1896). Sur la théorie d'élasticité. *Annalen der Physik*, **10**:1–116.
- Cosserat, E. i Cosserat, F. (1909). Théorie des corps déformables. w *Traité de Physique*, O.D. Khvol(Ed.) , Herman & Cie, Paris.
- Cotter, B. i Rivlin, R. (1955). Tensors associated with time-dependent stress. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, **13**:177.
- Cotteril, R. i Doyama, M. (1966). *Physical Review*, (**145**):465.
- Cottrell, A. (1953). *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*. Oxford University Press.
- Courant, R. (1943). Variational methods for the solutions of problems of equilibrium and vibration. *Bulletin of the American Math Society*, **49**:1–61.
- Cowin, S. i Mehrabadi, M. (1995). Anisotropic symmetries of linear elasticity. *Applied Mechanics Reviews*, **48**:247–285.
- Cowin, S., Yang, G. i Mehrabadi, M. (1999). Bounds on the effective anisotropic elastic constants. *Journal of Elasticity*, **57**:1–24.
- Cristfield, M. A. (1997). *Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*, Vols 1 i 2, Fourth edition. Wiley, New York.
- Crump, J. i Mitchell, J. (1970). *Journal of Applied Physics*, (**41**):717.
- Cuitino, A. i Ortiz, M. (1992). Computational modeling of single crystals. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **1**:225–263.
- Dawson, P. (2000). Computational crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, **37**:115–130.
- Doyama, M. i Cotteril, R. (1965). *Physical Review*, (**137**):A994.
- Doyle, T. i Ericksen, J. (1956). *Advances in Applied Mechanics*, **4**:53–115.
- Drabble, J. i Brammer, A. (1966). Third-order elastic constant of gallium arsenite. *Solid State Communications*, **4**(9):467–469.
- Drechsler, M. i Nicholas, J. (1967). *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, (**28**):2597.
- Dłużewski, P. (2000). Anisotropic hyperelasticity based upon general strain measure. *Journal of Elasticity*, **60**:119–129.
- Dłużewski, P., Jurczak, G. i Antúnez, H. (2001). Anisotropic hyperelastic finite element based upon generalized strain. *Materiały konferencyjne 2nd European Conference on Computational Mechanics*, Kraków 26-29 Czerwiec.

- Dhuzewski, P., Jurczak, G., Maciejewski, G., Kret, S., P., R. i Nouet, G. (2002a). From HRTEM micrographs of misfit dislocations to FE modelling of stress distribution. *Materiały konferencyjne 34th Solid Mechanics Conference*, Zakopane 2-7 Wrzesień.
- Dhuzewski, P., Jurczak, G., Maciejewski, G., Kret, S., Ruterana, P. i Nouet, G. (2002b). Finite element simulation of residual stresses in epitaxial layers. *Materials Science Forum*, **404-405**:141–146.
- Dhuzewski, P., Jurczak, G., Maciejewski, G., Kret, S., Ruterana, P. i Nouet, G. (2002c). Finite element simulation of residual stresses in epitaxial layers. *Materiały konferencyjne 6th European Conference Residual Stresses*, Coimbra.
- Dhuzewski, P., Maciejewski, G., Jurczak, G., Kret, S. i Laval, J. (2004). Nonlinear FE analysis of residual stresses induced by dislocations in heterostructure. *Computational Material Science*, **29**:379–395.
- Duncan, T. i Kuhlmann-Wilsdorf, D. (1966). *Bulletin of the American Physical Society*, **11**:46.
- El-Azab, A. (2000). *Physical Review B*, **61**:11956.
- Elata, D. i Rubin, M. (1994). Isotropy of strain energy functions which depend only on a finite number of directional strain measures. *Journal of Applied Mechanics*, **61**:284–289.
- Elliot, J. (1913). *Algebra of Quantics*. Oxford University Press, London, New York.
- Engelman, M., Sani, R., Gresho, P. i Bercovier, M. (1982). Consistent vs. reduced integration penalty methods for incompressible media using several old and new elements. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **2**:25.
- Lepkowski, S. i Majewski, J. (2004). Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN and InN. *Acta Physica Polonica A*, **105**(6):559–566.
- Ericksen, J. (1984). The Cauchy-Born hypotheses for crystals, w *Gurtin, M.E. (Ed.) Phase Transformation and Material Instabilities in Solids*. Academic Press, New York.
- Ericksen, J. i Rivlin, R. (1954). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **3**:281.
- Eringen, A. (1971). *Continuum Physics 1*. Academic Press, New York.
- Eringen, C. (1962). *Nonlinear Theory of Continuous Media*. McGraw-Hill, New York.
- Eringen, C. (1967). *Mechanics of Continua*. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Eshelby, J. D. (1957). *Proceedings of the Royal Society of London A*, **241**:376.
- Finger, J. (1894). Das potential der innern kräfte und die beziehungen zwischen berück-sichtigung von gliedern, die bezüglich der deformationselemente von dritter, beziehungs-weise zweiter ordnung sind. *Sitzber. Akad. Wiss. Wien*, **103**:163–200, 231–442.

- Fosdick, R. i Serrin, J. (1979). On the impossibility of linear Cauchy and Piola-Kirchhoff constitutive theories for stress in solids. *Journal of Elasticity*, **9**(1):83–89.
- Frank, F. (1949). *Physics*, **15**:131.
- Freund, L. (1999). The mechanics of electronics materials. *International Journal of Solids and Structures*, **37**:185–196.
- Fu, Y. i Ogden, R. E. (2001). *Nonlinear Elasticity; Theory and Applications*. Cambridge University Press.
- Fukuoka, H. i Toda, H. (1977). Preliminary experiment on acoustoelasticity for stress analysis. *Archives of Mechanics*, **29**:673–686.
- Gehlen, P., Rosenfield, A. i Hahn, G. (1968). *Journal of Applied Physics*, (**39**):5246.
- Gent, A. (1996). *Rubber Chemistry Technology*, **69**:59–61.
- Gerthsen, D., Hahn, E., Neugebauer, B., Rosenauer, A., Schön, O., Heuken, M. i Rizzi, A. (2000). *Physica status solidi A*, **177**:145.
- Ghoniem, N., Busso, E., Kioussis, N. i Huang, H. (2003). Multiscale modeling of nanomechanics and micromechanics: an overview. *Philosophical Magazine*, **83**(31–34):3475–3528.
- Gibbson, J., Hull, R., Bean, J. i Treacy, M. (1985). *Applied Physical Letters*, **46**:649.
- Girifalco, L. i Weizer, V. (1959). *Physical Review*, **114**:687.
- Gopal, V., Vasiliev, A. i Kvam, E. (2001). Strain relaxation and misfit dislocation introduction in lattice-mismatched InAs/GaP heteroepitaxy. *Philosophical Magazine A*, **81**(10):2481–2501.
- Grace, J. i Young, A. (1903). *The Algebra of Invariants*. Cambridge University Press, London, New York.
- Green, A. i Adkins, J. (1960). *Large Elastic Deformations*. University Press, Oxford.
- Green, A. i Adkins, J. (1970). *Large Elastic Deformations; 2nd edition*. Oxford University Press, Oxford.
- Green, A. i Adkins, R. (1957). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **1**:1.
- Green, A. i Zerna, W. (1954). *Theoretical Elasticity*. University Press, Oxford.
- Green, A. i Zerna, W. (1968). *Theoretical Elasticity, 2nd edition*. University Press, Oxford.
- Green, A. i Zerna, W. (1992). *Theoretical Elasticity*. Dover Publications, New York.
- Gregor, V. i Kratochvil, J. (1990). *Mechanics Research Communications*, **29**:197.

- Guluoglu, A. N., Srolovitz, D. J., LeSar, R. i Lomdahl, R. S. (1989). *Scripta Metallurgica et Materiala*, **23**:1347.
- Gurtin, M. (1974). A short proof of the representation theorem for isotropic, linear stress-strain relations. *Journal of Elasticity*, **4**(3):243–245.
- Hackl, K. (1999). On the representation of anisotropic elastic materials by symmetric irreducible tensors. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, **11**(6):353–369.
- Hähner, P., Bay, K. i Zaiser, M. (1998). *Physical Review Letters*, **81**:2470.
- Haussühl, S. (1967). Die abweichungen von den Cauchy-Relationen. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **6**:181–192.
- Head, A. (1964). *Physica status solidi*, **5**:51.
- Hehl, F. i Itin, Y. (2002). The Cauchy relations in linear elasticity theory. *Journal of Elasticity*, **66**:185–192.
- Hiki, Y. i Granato, A. (1966). Anharmonicity in noble metals, higher order elastic constants. *Physical Review*, **144**(2):411–419.
- Hill, R. (1952). The elastic behaviour of crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society of London A*, **65**:349–354.
- Hill, R. (1968). On constitutive inequalities for simple materials - I. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **16**(4):229–242.
- Hill, R. (1970). *Proceedings of the Royal Society of London, A* **314**:457–472.
- Hill, R. (1975). On the elasticity and stability of perfect crystals at finite strain. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **77**:225–240.
- Hill, R. (1978). Aspects of invariance in solid mechanics. *Advances in Applied Mechanics*, **18**:1–75.
- Hirth, J. i Lothe, J. (1982). *Theory of Dislocations*. Wiley, New York.
- Hooke, R. (1676). A description of helioscopes and some other instruments.
- Hooke, R. (1678). De potentia restitutiva or of spring explaining the power of springing bodies.
- Horgan, C. i Baxter, S. (1996). Effects of curvilinear anisotropy on radially symmetric stresses in anisotropic linear elastic solids. *Journal of Elasticity*, **42**:31–48.
- Horgan, C. i Saccomandi, G. (2002). *Journal of Elasticity*, **68**:167–176.
- Horodon, M. i Averbach, B. (1961). *Acta Metallurgica*, **9**:247.

- Hrennikoff, A. (1941). Solutions of problems in elasticity by the framework method. *Journal of Applied Mechanics*, **8**(A169).
- Hu, S. (1997). Film-edge-induced stress in substrates. *Journal of Applied Physics*, **50**(1):4661–4666.
- Huebner, K., Thornton, E. i Byrom, T. (1995). *The Finite Element Method for Engineers*. Wiley - Interscience, New York.
- Huetink, J. i Baaijens, F. E. (1998). *Simulation of Materials Processing: Theory, Methods and Applications. NUMIFORM98*. A.A.Balkema.
- Hull, D. (1965). *Introduction to Dislocations*. Pergamon Press, Oxford.
- Humphrey, J. (1995). Mechanics of the arterial wall; review and directions. *Critical Reviews in Biomechanical Engineering*, **23**:1–162.
- Huntington, H. (1958). *Solid State Physics*, **7**:213.
- Hutchinson, J. (1976). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proceedings of the Royal Society of London A*, **A238**:101–127.
- Hýtch, M. (1997). *Microscopy Microanalysis Microstructures*, **8**:41–57.
- Hýtch, M., Putaux, J. i Pénisson, J. (2003). Measurement of the displacement field of dislocations to 0.03Å by electron microscopy. *Letters to Nature*, (**423**):270–273.
- Hýtch, M., Snoeck, E. i Kilas, R. (1998). Quantitative measurement of displacement and strain fields from HREM micrographs. *Ultramicroscopy*, **74**:131–146.
- Jain, S. C., Harker, A. H., Atkinson, A. i Pinardi, K. (1995). Edge-induced stress and strain in stripe films and substrates: A two-dimensional finite element calculation. *Journal of Applied Physics*, **78**(3):1630–1637.
- James, F. (1980). *Computer Physics Communications*, **60**:329.
- Jaumann, G. (1911). Geschlossenes system physikalischer und chemischer differenzialgesetze. *Sitzber. Akad. Wiss. Wien IIa*, **120**:385–530.
- Jemioło, S. (2002). *Stadium Hipresprężystych Własności Materiałów Izotropowych*. Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa.
- Johnson, C. (1987). *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Johnson, H. i Freund, L. (2001). The influence of strain on confined electronic states in semiconductor quantum structures. *International Journal of Solids and Structures*, **38**:1045–1062.
- Johnson, R. (1964). *Physical Review*, (**134**):A1329.

- Jurczak, G., Łepkowski, S., Dłużewski, P. i Suski, T. (2005). Modeling of elastic, piezoelectric and optical properties of vertically correlated GaN/AlN quantum dots. *Physica status solidi (c)*, **2**(3):972–975.
- Jurczak, G., Kret, S., Ruterana, P., Maciejewski, G., Dłużewski, P., Sanchez, A. i di Forte Poisson, M.A. (2003). Indium rich clusters in MOCVD InGaN/GaN: high resolution electron microscopy study and finite element modeling. *Proceedings of 13th International Conference on Microscopy of Semiconducting Materials, 31 March - 3 April*.
- Jurczak, G., Maciejewski, G., Kret, S., Dłużewski, P. i Ruterana, P. (2004). Modeling of indium rich clusters in MOCVD $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ multilayers. *Journal of Alloys and Compounds*, **38** 2:10–16.
- Kato, R. i Hama, J. (1994). *Journal of Physics: Condensed Matter*, **6**:7617.
- Kisielowski, C., Liliental-Weber, Z. i Nakamura, S. (1997). *Japanese Journal of Applied Physics*, **36**:6932.
- Kleiber, M. (1985). *Metoda elementów skończonych w nieliniowej mechanice kontinuum*. PWN, Warszawa.
- Kratochvil, J. i Saxlova, N. (1992). *Scripta Metallurgica et Materialia*, **26**:113.
- Kret, S., Cywiński, G., Wojtowicz, T., Kossut, J., Delamarre, J., Laval, J., Dubon, A. i Schiffmacher, G. (1999). *X Conference on Electron Microscopy of Solids*.
- Kret, S., Delamarre, C., Laval, J. i Dubon, A. (1998). *Philosophical Magazine Letters*, **77**:249.
- Kret, S., Dłużewski, P., Dłużewski, P. i Sobczak, E. (2000). Measurement of dislocation core distribution by digital processing of high-resolution transmission electron microscopy micrographs: a new technique for studying defects. *Journal of Physics C*, **12**:10313–10318.
- Kret, S., Maciejewski, G., Dłużewski, P., Ruterana, P., Grandjean, N. i Damilano, B. (2003). Contribution to quantitative measurement of the In composition in GaN/InGaN multilayers. *Materials Chemistry i Physics*, **81**:273–276.
- Kröner, E. (1958). *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Springer, Berlin.
- Lamé, G. i Clapeyron, R. (1833). *Mémoires présentés par divers savans*, **4**.
- Leamy, H. (1967). *Acta Metallurgica*, (**15**):1839.
- Lee, B. H. (1970). *Journal of Applied Physics*, (**41**):7.

- Leibfried, G. (1955). Gittertheorie der mechanischen und thermischen Eigenschaften der Kristalle, w *S. Flügge (Ed.), Handbuch der Physik, Vol. VII/1, Kristallphysik I*. Springer, Berlin.
- Lepinoux, J. i Kubin, L. P. (1987). *Scripta Metallurgica et Materiala*, **21**:883.
- Lepinoux, J., Maziere, D., Pontikis, V. i Saada, G. (2000). Multiscale phenomena in plasticity: from experiments to phenomenology, modelling and materials engineering. *NATO Science Series Applied Science*, (**367**).
- Lincoln, R., Koliwad, K. i Ghate, P. (1967). *Physical Review*, (**157**):463.
- Loubet, J., Georges, J. i Meille, G. (1986). Microindentation techniques in materials science and engineering. *ASTM Special Technical Publication*, **889**:72.
- Lubarda, V. A., Blume, B. J. A. i Needleman, A. (1993). *Acta Metallurgica et Materialia*, **41**:625.
- Lurie, A. (1990). *Nonlinear theory of elasticity*. North Holland, Amsterdam.
- Maciejewski, G. (2002). Zastosowanie metody elementów skończonych do wyznaczania rozkładów naprężeń residualnych w heterostrukturach. *Rozprawa doktorska*.
- Maciejewski, G. i Dłużewski, P. (2004). *Computational Materials Science*, (**30**):44–49.
- Maciejewski, G., Jurczak, G., Kret, S., P., D. i Ruterana, P. (2003). Indium rich clusters in MOCVD InGaN/GaN: high resolution electron microscopy study and finite element modeling. *MRS Proceedings* **798**, Material Research Society Fall Meeting, Boston, December 1-5,.
- Macmillan, N. i Kelly, A. (1972). *Proceedings of the Royal Society of London*, **330**:291–308.
- Marsden, J. i Hughes, T. (1988). *Mathematical Foundations of Elasticity*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New York.
- Marsden, J. i Hughes, T. (1994). *Mathematical Foundations of Elasticity*. Dover Publications, New York.
- Mceluskey, L., Romano, L., Kruskar, B., Baur, D. i Johsan, W. (1998). *Applied Physics Letters*, **72**:1730.
- Mehrabadi, M. i Cowin, S. (1990). Eigentensors of linear anisotropic elastic materials. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, **43**:15–41.
- Mehrabadi, M., Cowin, S. i Horgan, C. (1993). Strain energy density bounds for linear anisotropic elastic materials. *Journal of Elasticity*, **30**:191–196.
- Milstein, F. (1971). *Physical Review B*, **4**(3):1130–1141.
- Möbus, G. i Wagner, T. (1999). *Journal of Microscopy*, **194**:124.

- Mooney, M. (1940). A theory of large elastic deformation. *Journal of Applied Physics*, **11**:582–592.
- Mura, T. (1968). *The Continuum Theory of Dislocations, Advances in Materials Research 3*. Interscience, New York.
- Murnaghan, F. (1937). *American Journal of Mathematics*, (**59**):235–260.
- Murnaghan, F. (1951). *Finite deformation of an elastic solids*. Wiley, New York.
- Nabarro, F. (1967). *The Theory of Crystal Dislocations*. Oxford University Press.
- Nabarro, F. (1979-2003). *Dislocations in solids*. Vol. 1-11.
- Nakamura, S. i Fazol, G. (1997). *The Blue Laser Diode*. Springer, Berlin.
- Narukawa, Y., Kawakami, Y., Funato, M., Fujita, S. i Nakamura, S. (1997). *Applied Physics Letters*, **70**:981.
- Navier, L. (1826). *Résumé des leçons données à l'École des Ponts et Chaussées sur l'application de la mécanique à l'établissement des constructions et des machines*. Paris.
- Noll, W. (1958). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **2**:197.
- Noll, W. (1974). *The Foundations of Mechanics and Thermodynamics*. Springer-Verlag, Berlin.
- Ogden, R. (1972a). Large deformation isotropic elasticity: on the correlation of theory i experiment for incompressible rubberlike solids. *Proceedings of the Royal Society of London A*, **326**:565–584.
- Ogden, R. (1972b). Large deformation isotropic elasticity: on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. *Proceedings of the Royal Society of London A*, **328**:567–583.
- Ogden, R. (1984). *Non-linear Elastic Deformations*. Ellis Horwood Limited, Chichester.
- Ogden, R. (1997). *Non-linear Elastic Deformations*. Dover Publications, New York.
- Oldroyd, J. (1950). On the formulation of rheological equations of state. *Proceeding of the Royal Society of London A*, **200**:523–541.
- Oleś, A. (1998). *Metody Doświadczalne Fizyki Ciała Stałego*. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa.
- OPTIMAS (1999). *User Guide and Technical Reference*. Media Cybernetics.
- O'Reilly, E. (1989). Valence band engineering in strained-layer structures. *Semiconductors Science i Technology*, **4**:121–137.

- Ortiz, M. (1996). Computational micromechanics. *Computational Mechanics*, **18**:321–338.
- Ortiz, M. i Philips, R. (1999). Nanomechanics of defects in solids, w *Wu, T.Y. i van der Giessen, E. (Eds.) Advances in Applied Mechanics*, Volume 36. Academic Press, New York.
- Pericak-Spector, K. i Spector, S. (1995). On the representation theorem for linear, isotropic tensor functions. *Journal of Elasticity*, **39**:181–185.
- Pipkin, A. i Rivlin, R. (1959). The formulation of constitutive equations in continuum physics. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **4**:129–144.
- Poisson, S. (1829). *Mémoires Acad. Sci. Inst. France*, **8**.
- Polanyi, M. (1921). *Zeitschrift für Physik*, **7**:323.
- Prantil, V., Dawson, P. i Chastel, Y. (1995). Comparison of equilibrium-based plasticity models and a Taylor-like hybrid formulation for deformation of constrained crystal systems. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **3**:215–234.
- Rakowski, G. i Kacprzyk, Z. (1993). *Metoda Elementów Skończonych w Mechanice Konstrukcji*. Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa.
- Rao, S., Hernandez, C., Simmons, J., Parthasarathy, T. i Woodward, C. (1998). *Philosophical Magazine A*, (**77**):231.
- Reeber, R. i Wang, K. (2001). *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research*, **6**:art.3.
- Reiner, M. (1945). *American Journal of Mathematics*, **67**:350.
- Reuss, A. (1929). Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM*, **9**:49–58.
- Rice, J. (1975). Continuum mechanics i thermodynamics of plasticity in relation to micro-scale deformation mechanisms w *Argon, A.S. (Ed.) Constitutive Equations in Plasticity*, Volume 18. MIT press.
- Rice, J. (1999). *Foundations of Solid Mechanics*, w (Ed.) *Meyers, M.A. Armstrong, R.W. i Kirchner H. Mechanics and Materials: Fundamentals and Linkages*. Wiley.
- Rivlin, R. (1948a). *Philosophical Transactions of The Royal Society of London A*, **241**:379.
- Rivlin, R. (1948b). *Proceedings of the Royal Society of London A*, **193**:260.
- Rivlin, R. (1948c). Large elastic deformations of isotropic materials. II some uniqueness theorems for pure homogeneous deformation. *Philosophical Transactions of The Royal Society of London, A* **240**:491–508.

- Rivlin, R. (1949). Large elastic deformations of isotropic materials, part VI. Further results in the theory of torsion, shear i flexure. *Philosophical Transactions of The Royal Society of London*, **A242**:173–195.
- Rivlin, R. (1955). *Journal of the Rational Mechanics and Analysis*, **4**:681.
- Robertson, M., Currie, J., Corbett, J. i Webb, J. (1995). *Ultramicroscopy*, **58**:175.
- Roy, A. i Acharaya, A. (2005). Finite element approximation of field dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **53**:143–170.
- Ruterana, P., Albrecht, M. i Neugebauer, J. (2003). *Nitride Semiconductors*. WILEY-VCH, Weinheim.
- Ruterana, P., Kret, S., Vivet, A., Maciejewski, G. i Dłużewski, P. (2002). *Journal of Applied Physics*, **91**:8979.
- Ruterana, P., Singh, P., Kret, S., Jurczak, G., Maciejewski, G., Dłużewski, P., Cho, H., Choi, R., Lee, H. i Suh, E. (2004). Quantitative evaluation of the atomic structure of defects and composition fluctuations at the nanometer scale inside InGaN/GaN heterostructures. *Physica status solidi (b)*, 1-4.
- Rychlewski, J. (1969). Tensory i funkcje tensorowe. *Biuletyn Nr 631*.
- Rychlewski, J. (1983). Ceiiinosssttuv(w jęz. rosyjskim). Matematyczna struktura ciał sprężystych. *Preprint nr 217*.
- Rychlewski, J. (1995). Unconventional approach to linear elasticity. *Archiwum Mechaniki Stosowanej*, **47**(2):149–171.
- Sadegh, A. i Cowin, S. (1991). The proportional anisotropic elastic invariants. *Journal of Applied Mechanics*, **51**:50–57.
- Saxlova, N., Kratochvil, J. i Zatloukal, J. (1997). *Materials Science and Engineering*, **A234**:205.
- Scattergood, R. i Bacon, D. (1974). *Physica status solidi (a)*, **25**:395.
- Scheidler, M. (1991). *Mechanics of Materials*, **11**(3):199–210.
- Schouten, J. (1989). *Tensor Analysis for Physicists, 2nd edn*. Dover, Mineola, New York.
- Schwarz, K. W. i Chidambarrao, D. (1999). Dislocation dynamics near film edges and corners in silicon. *Journal of Applied Physics*, **85**(10):7198–7208.
- Seeger, A. (1957). *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*. Wiley, New York.
- Seeger, A. i Schoeck, G. (1953). *Acta Metalurgica*, **1**:519.
- Segmueller, A. i Murakami, M. (1988). *Materials Science and Engineering*, **27**:143.

- SIA (2002). *The National Technology Road Map for Semiconductors*. Semiconductor Industry Association, <http://public.itrs.net>.
- Seth, B. (1964). Second-order effects in elasticity, plasticity and fluid dynamics. *Proceedings of International Symposium, Haifa 1962*.
- Shen, S. i Dawson, P. E. (1995). *Simulation of Materials Processing: Theory, Methods and Applications. NUMIFORM95*. A.A.Balkema.
- Simo, J. i Taylor, R. (1984). Consistent tangent operators for rate independent elastoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **48**:101–118.
- Singh, R., Dappalapudi, D., Maussakas, T. i Romano, L. (1997). *Applied Physics Letters*, **70**:1089.
- Smith, G. (1962). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **10**:108.
- Smith, G. (1994). *Constitutive Equations for Anisotropic and Isotropic Materials, Mechanics i Physics of Discrete Systems, Vol. 3*. North - Holland, Amsterdam.
- Smith, G. i Rivlin, R. (1958). The strain-energy function for anisotropic elastic materials. *Transactions of the American Mathematical Society*, **88**:175–193.
- Smith, G., Smith, M. i Rivlin, R. (1963). Integrity bases for a symmetric tensor and a vector – the crystal classes. *Archive of the Rational Mechanics i Analysis*, **12**:93–133.
- Snoeck, E., Warot, B., Ardhuin, H., Rocher, A., Casanove, M., Kilaas, R. i Hÿtch, M. (1998). *Thin Solid Films*, **319**:157.
- Spaepen, F. (2000). *Acta Materialia*, **48**:31.
- Spencer, A. (1972). *Deformation of Fibre-reinforced Materials*. Oxford University Press, Oxford.
- Spencer, A. (1984). *Continuum Theory of the Mechanics of Fibre-reinforced Composites*. Number 282. Springer Verlag, Wien.
- Spencer, A. i Rivlin, R. (1962). Isotropic integrity bases for vectors and second-order tensors, part I. *Archive of the Rational Mechanics i Analysis*, **9**:45–63.
- Spencer, A. i Rivlin, R. (1965). Isotropic integrity bases for vectors i second-order tensors, part II. *Archive of the Rational Mechanics and Analysis*, **18**:51–82.
- Stadelmann, P. (1987). *Ultramicroscopy*, **21**:131.
- Suresh, S., Nieh, T. i Choi, B. (1999). Nano-indentation of copper thin films on silicon substrates. *Scripta Materialia*, **41**:951–957.
- Sutcliffe, S. (1992). Spectral decomposition of the elasticity tensor. *Transactions of the ASME*, **59**(4):762–773.

- Tadmor, E., Ortiz, M. i Philips, R. (1996). Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine A*, **73**:1529–1563.
- Teodosiou, C. E. (1997). *Large Plastic Deformation of Crystalline Aggregates*. Springer Verlag, Wien, New York.
- Teodosiu, C. (1970). in A. Simmonds (Ed.), *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, volume 317.
- Teodosiu, C. (1982). *Elastic Models of Crystal Defects*. Springer-Verlag, Editura Academiei, Berlin, Bucuresti.
- Teutonico, L. (1962). *Physical Review*, **127**:413.
- Teutonico, L. (1963). *Physical Review*, **11**:391.
- Thomas, J. (1968). Third-order elastic constants of aluminium. *Physical Review*, **175**(3):955–968.
- Thomson, R., Levine, L. E., Shim, Y. i Savage, M. F. (2002). *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, **3**:245.
- Thurston, R. (1964). *Physical Acoustic*, **1**:33.
- Tillmann, K., Lentzen, M. i Rosenfeld, R. (2000). *Ultramicroscopy*, **83**:128.
- Ting, T. (1999). The remarkable nature of radially symmetric deformation of spherically uniform linear anisotropic elastic solids. *Journal of Elasticity*, **53**:47–64.
- Ting, T. (2000). Recent developments in anisotropic elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, **37**:401–409.
- Ting, T. i Lee, V. (1997). The three-dimensional elastostatic Green's function for general anisotropic linear elastic solids. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, **50**:407–426.
- Todhunter, I. (1960). A History of the Theory of Elasticity and the Strength of Materials, from Galilei to Lord Kelvin, w *Edited i completed by K. Pearson, (1st ed. 1886)* Dover, New York.
- Treacy, M. i Gibbson, J. (1986). *The Journal of Vacuum Science and Technology B*, **4**:1458.
- Truesdell, C. (1952). The mechanical foundations of elasticity and fluid dynamics. *Journal of the Rational Mechanics and Analysis*, **1,3**:125–300,593–616.
- Truesdell, C. (1955). Hypo-elasticity. *Journal of Rational Mechanics and Analysis*, **4**:83–132.

- Truesdell, C. i Noll, W. (1965). The nonlinear field theories of mechanics, w *Flügge, S. (Ed.) Handbuch der Physik*, volume III/3. Springer-Verlag, Berlin.
- Truesdell, C. i Toupin, R. (1960). The Classical Field Theories, w *Flügge, S. (Ed.) Handbuch der Physik*. Springer-Verlag, Berlin.
- Tu, K. N., Mayer, J. i Feldman, L. C. (1992). *Electronic Thin Film Science for Electrical Engineers and Material Scientists*.
- Tyson, W. (1966). *Philosophical Magazine*, **14**:925.
- Valandis, K. i Landel, R. (1967). The strain-energy function of a hyperelastic material in terms of the extension ratios. *Journal of Applied Physics*, **38**(7):2997–3002.
- Van Mieghem, P., Jain, S. C. i van Overstraeten, R. (1994). Stress relaxation in laterally small strained semiconductor epilayers. *Journal of Applied Physics*, **75**(1):666–668.
- Voigt, W. (1887-1889). *Wiedemanns Annalen der Physik und Chemie*.
- Voigt, W. (1910). *Lehrbuch der Kristallphysik*. Teubner, Leipzig.
- Volterra, V. (Paris 1907). *Annales Scientifiques de l'Ecole Normale Supérieure*, **24**:401.
- Voyadis, G., Bank, L. i Jacobs, L. (1994). Elsevier Science B.V.
- Walgraef, D. i Aifantis, C. (1985). *International Journal of Engineering Science*, **23**:1351.
- Walker, N., Saunders, G. i Hawkey, J. (1985). Soft TA models and anharmonicity in cadmium tellurite. *Physical Review B*, **52**(5):1005–1018.
- Wang, C. (1969). On representation for isotropic functions. part I and II. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **33**:249–287.
- Wang, C. (1970). A new representation theorem for isotropic functions. part I and II. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **36**:166–223.
- Wang, C. (1971). Corrigendum. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **43**:392–395.
- Wang, C. i Truesdell, C. (1973). *Introduction to Rational Elasticity*. Noordhoff, Leyden.
- Wang, H. Y. i LeSar, R. (1995). *Philosophical Magazine A*, **71**:149.
- Watanabe, K., Nakanishi, N., Yamazaki, T., Yang, J., Huang, S., Inoke, K., Hsu, J., Tu, R. i Shiojiri, M. (2003). Atomic-scale strain field and In atom distribution in multiple quantum wells InGaN/GaN. *Applied Physics Letters*, **82**:715–717.
- Weitzenböck, R. (1923). *Invariantentheorie*. Noordhoff, Groningen.
- Westergaard, H. (1952). *Theory of Elasticity and Plasticity*. Harvard University Press, Cambridge.

- Weyl, H. (1939). *The Classical Groups*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- Wright, A. (1997). Pressure dependence of elastic constants in zinc-blende III-N and their influence on the light emission in nitride heterostructure. *Journal of Applied Physics*, **82**(6):2833–2839.
- Wu, T., Lee, C. i Wang, R. (1993). *Materials Research Society Symposium Proceedings*, **308**:133.
- Yang, M., Sturm, J. i Prevorst, J. (1991). Calculation of band alignments and quantum confinement effects in zero- and one-dimensional pseudomorphic structures. *Physical Review B*, **56**:1973–1980.
- Yu, E., McCaldin, J. i McGrill, T. (1992). Band offsets in semiconductor heterostructures. *Solid State Physics*, **46**:1–146.
- Zaiser, M., Avlonitis, M. i Aifantis, E. C. (1998). *Acta Materialia*, **46**:4143.
- Zang, Y. W. i Bower, A. F. (1999). Numerical simulations of island formation in a coherent strained epitaxial thin film system. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **47**:2273–2297.
- Zheng, Q. (1994). Theory of representations for tensor functions: A unified invariant approach to constitutive equations. *Applied Mechanics Reviews*, **47**:545–587.
- Zhu, T., Li, J., Van Vliet, K., Ogata, S., Yip, S. i Suresh, S. (2004). Predictive modeling of nanoindentation-induced homogeneous dislocation nucleation in copper. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **52**:691–724.
- Zienkiewicz, O. C. i Taylor, R. L. (1994). *The Finite Element Method, fourth edition*. McGraw-Hill, New York.
- Zwicky, F. (1923). *Zeitschrift für Physik*, **24**:131.

Spis publikacji autora

2001

1. Paweł Dłużewski, Grzegorz Jurczak i Horacio Antúnez „Anisotropic Hyperelastic Finite Element Based upon Generalized Strain” materiały konferencyjne 2nd European Conference on Computational Mechanics Kraków, 26-29 Czerwiec 2001

2002

2. Paweł Dłużewski, Grzegorz Jurczak, Grzegorz Maciejewski, Sławomir Kret, Pierre Ruterana i Gerard Nouet ”Finite element simulation of residual stresses in epitaxial layers” *Materials Science Forum*, **404-405**: 141-146, 2002
3. Paweł Dłużewski, Grzegorz Jurczak, Grzegorz Maciejewski, Sławomir Kret, Pierre Ruterana i Gerard Nouet ”Finite element simulation of residual stresses in epitaxial layers” (2002) materiały konferencyjne 6th European Conference Residual Stresses Coimbra, Czerwiec 2002
4. Paweł Dłużewski, Grzegorz Jurczak, Grzegorz Maciejewski, Sławomir Kret, Pierre Ruterana i Gerard Nouet „From HRTEM Micrographs of Misfit Dislocations to FE Modelling of Stress Distribution” materiały konferencyjne 34th Solid Mechanics Conference Zakopane, 2-7 Wrzesień 2002
5. Paweł Dłużewski, Eligiusz Postek i Grzegorz Jurczak „Self-organization of Quantum Dots in Semiconductor Layers under Stress Field” materiały konferencyjne 34th Solid Mechanics Conference Zakopane, 2-7 Wrzesień 2002

2003

6. Paweł Dłużewski, Grzegorz Jurczak i Horacio Antúnez „Logarithmic Strain Measure in Finite Element Modelling of Anisotropic Hyperelastic Materials” *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, **10**: 69-79, 2003
7. Grzegorz Jurczak, Sławomir Kret, Pierre Ruterana, Grzegorz Maciejewski, Paweł Dłużewski, Anna Maria Sanchez, Marie-Antoinette di Forte Poisson „Indium rich clusters in MOCVD InGaN/GaN: high resolution electron microscopy study and finite element modeling” Proc. 13th Int. Conf. Microscopy of Semiconducting Materials, University of Cambridge, 31 March - 3 April 2003

8. Grzegorz Maciejewski, Grzegorz Jurczak, Sławomir Kret, Paweł Dłużewski i Pierre Ruterana „Evidence of strong indium segregation in MOCVD InGaN/GaN quantum layers” *MRS Proceedings Volume 798*, Material Research Society Fall Meeting, Boston, December 1-5, 2003

2004

9. Grzegorz Jurczak, Grzegorz Maciejewski, Sławomir Kret, Paweł Dłużewski i Pierre Ruterana „Modelling of indium rich clusters in MOCVD InGaN/GaN multilayers” *Journal of Alloys and Compounds*, **382**: 10-16, 2004.
10. Paweł Dłużewski, Grzegorz Maciejewski, Grzegorz Jurczak, Sławomir Kret i Jean-Yves Laval „Nonlinear FE analysis of residual stresses induced by dislocations in heterostructures” *Computational Material Science*, **29**: 379-395, 2004
11. P. Ruterana, P. Singh, S. Kret, G. Jurczak, G. Maciejewski, P. Dłużewski, H.K. Cho, R.J. Choi, H.J. Lee i E.K. Suh „Quantitative evaluation of the atomic structure of defects and composition fluctuations at the nanometer scale inside InGaN/GaN heterostructures” *Physica status solidi (b)*, 1-4, 2004
12. S.P. Łepkowski, G. Jurczak, P. Dłużewski i T. Suski „Modeling of elastic, piezoelectric and optical properties of vertically correlated GaN/AlN quantum dots” praca złożona do druku w Proceedings of Materials Research Society Fall Meeting Boston 2004

2005

13. G. Jurczak, S.P. Łepkowski, P. Dłużewski i T. Suski „Modeling of elastic, piezoelectric and optical properties of vertically correlated GaN/AlN quantum dots” *Physica status solidi (c)*, **2**, 3 : 972-975, 2005

Dodatek A

Przeliczanie stałych sztywności przy zmianie miary odkształcenia

Wykorzystując stałe sztywności stopnia wyższego niż 2-gi, właściwą energię odkształcenia materiału hipersprężystego, zgodnie z równaniem (3.23), możemy opisać wzorem:

$$\psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}) = \frac{1}{\hat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2} \hat{c}^{ijkl} \hat{\epsilon}_{ij} \hat{\epsilon}_{kl} + \frac{1}{6} \hat{C}^{ijklmn} \hat{\epsilon}_{ij} \hat{\epsilon}_{kl} \hat{\epsilon}_{mn} \right\}. \quad (\text{A.1})$$

Przy zmianie parametru odkształcenia "m" funkcja energii odkształcenia przyjmie postać:

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}')). \quad (\text{A.2})$$

W celu otrzymania zależności opisujących stałe sztywności dla różnych miar odkształcenia dokonajmy operacji dwukrotnego i trzykrotnego różniczkowania, odpowiednio dla stałych sztywności drugiego i trzeciego rzędu:

$$\hat{c}' = \hat{\rho} \frac{\partial^2 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}' \partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'} \quad \text{oraz} \quad \hat{C}' = \hat{\rho} \frac{\partial^3 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}' \partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}' \partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'}. \quad (\text{A.3})$$

Kolejne pochodne funkcji energii sprężystej względem odkształcenia są równe:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{\partial \hat{\epsilon}'_{pq}} &= \frac{1}{\hat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2} \hat{c}^{ijkl} \left[L_{ij}{}^{pq} \hat{\epsilon}_{kl} + \hat{\epsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pq} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{6} \hat{C}^{ijklmn} \left[L_{ij}{}^{pq} \hat{\epsilon}_{kl} \hat{\epsilon}_{mn} + \hat{\epsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pq} \hat{\epsilon}_{mn} + \hat{\epsilon}_{ij} \hat{\epsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pq} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{\partial \hat{\epsilon}'_{pq} \partial \hat{\epsilon}'_{rs}} &= \frac{1}{\hat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2} \hat{c}^{ijkl} \left[L_{ij}{}^{pqrs} \hat{\epsilon}_{kl} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rs} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pq} + \hat{\epsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pqrs} \right] \right. \\ &\quad + \frac{1}{6} \hat{C}^{ijklmn} \left[L_{ij}{}^{pqrs} \hat{\epsilon}_{kl} \hat{\epsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rs} \hat{\epsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{pq} \hat{\epsilon}_{kl} L_{mn}{}^{rs} \right. \\ &\quad \left. + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pq} \hat{\epsilon}_{mn} + \hat{\epsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pqrs} \hat{\epsilon}_{mn} + \hat{\epsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pq} L_{mn}{}^{rs} \right. \\ &\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{rs} \hat{\epsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pq} + \hat{\epsilon}_{ij} L_{kl}{}^{rs} L_{mn}{}^{pq} + \hat{\epsilon}_{ij} \hat{\epsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pqrs} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^3 \psi(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}'))}{\partial \widehat{\varepsilon}'_{pq} \partial \widehat{\varepsilon}'_{rs} \partial \widehat{\varepsilon}'_{tu}} &= \frac{1}{\widehat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2} \widehat{c}^{ijkl} \left[L_{ij}{}^{pqrstu} \widehat{\varepsilon}_{kl} + L_{ij}{}^{pqrs} L_{kl}{}^{tu} + L_{ij}{}^{pqtu} L_{kl}{}^{rs} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rstu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{rstu} L_{kl}{}^{pq} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pqtu} + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{pqrs} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pqrstu} \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{6} \widehat{C}^{ijklmn} \left[L_{ij}{}^{pqrstu} \widehat{\varepsilon}_{kl} \widehat{\varepsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{pqrs} L_{kl}{}^{tu} \widehat{\varepsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{pqrs} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{tu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{pqtu} L_{kl}{}^{rs} \widehat{\varepsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rstu} \widehat{\varepsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rs} L_{mn}{}^{tu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{pqtu} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{rs} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{tu} L_{mn}{}^{rs} + L_{ij}{}^{pq} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{rstu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{rstu} L_{kl}{}^{pq} \widehat{\varepsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pqtu} \widehat{\varepsilon}_{mn} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pq} L_{mn}{}^{tu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{pqrs} \widehat{\varepsilon}_{mn} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pqrstu} \widehat{\varepsilon}_{mn} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pqrs} L_{mn}{}^{tu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{pq} L_{mn}{}^{rs} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pqtu} L_{mn}{}^{rs} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{pq} L_{mn}{}^{rstu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{rstu} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pq} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{tu} L_{mn}{}^{pq} + L_{ij}{}^{rs} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pqtu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{rs} L_{mn}{}^{pq} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{rstu} L_{mn}{}^{pq} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{rs} L_{mn}{}^{pqtu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{tu} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pqrs} + \widehat{\varepsilon}_{ij} L_{kl}{}^{tu} L_{mn}{}^{pqrs} + \widehat{\varepsilon}_{ij} \widehat{\varepsilon}_{kl} L_{mn}{}^{pqrstu} \right] \right\}, \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

gdzie:

$$L_{ij}{}^{pq} = \frac{\partial \widehat{\varepsilon}_{ij}(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}')}{\partial \widehat{\varepsilon}'_{pq}}, \quad L_{ij}{}^{pqrs} = \frac{\partial^2 \widehat{\varepsilon}_{ij}(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}')}{\partial \widehat{\varepsilon}'_{pq} \partial \widehat{\varepsilon}'_{rs}} \quad \text{oraz} \quad L_{ij}{}^{pqrstu} = \frac{\partial^3 \widehat{\varepsilon}_{ij}(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}')}{\partial \widehat{\varepsilon}'_{pq} \partial \widehat{\varepsilon}'_{rs} \partial \widehat{\varepsilon}'_{tu}}, \quad (\text{A.7})$$

są pochodnymi izotropowej funkcji argumentu tensorowego względem symetrycznego tensora drugiego rzędu, zob. Ogden (1984). Ponieważ funkcję energii sprężystej $\psi(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}})$ rozwinięto w szereg potęgowy w okolicy stanu naturalnego (gdzie $\widehat{\varepsilon}_{ij} \rightarrow 0$), dlatego można uprościć postać wyrażeń (A.5) i (A.6) (wrażenie (A.4) przyjmuje wartość równą 0 - brak naprężeń):

$$\frac{\partial^2 \psi(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}'))}{\partial \widehat{\varepsilon}'_{pq} \partial \widehat{\varepsilon}'_{rs}} = \frac{1}{\widehat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2} \widehat{c}^{ijkl} \left[L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rs} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pq} \right] \right\}, \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^3 \psi(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}'))}{\partial \widehat{\varepsilon}'_{pq} \partial \widehat{\varepsilon}'_{rs} \partial \widehat{\varepsilon}'_{tu}} &= \frac{1}{\widehat{\rho}} \left\{ \frac{1}{2} \widehat{c}^{ijkl} \left[L_{ij}{}^{pqrs} L_{kl}{}^{tu} + L_{ij}{}^{pqtu} L_{kl}{}^{rs} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rstu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{rstu} L_{kl}{}^{pq} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pqtu} + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{pqrs} \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{6} \widehat{C}^{ijklmn} \left[L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rs} L_{mn}{}^{tu} + L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{tu} L_{mn}{}^{rs} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{pq} L_{mn}{}^{tu} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{pq} L_{mn}{}^{rs} + L_{ij}{}^{rs} L_{kl}{}^{tu} L_{mn}{}^{pq} + L_{ij}{}^{tu} L_{kl}{}^{rs} L_{mn}{}^{pq} \right] \right\}. \quad (\text{A.9})
\end{aligned}$$

Po uwzględnieniu symetrii $\widehat{c}^{ijkl} = \widehat{c}^{klij}$ możemy stałe sztywności drugiego rzędu \mathbf{c} , w zależności od wybranej miary odkształcenia, przeliczyć wg wzoru:

$$\widehat{c}{}^{pqrs} = \widehat{c}^{ijkl} L_{ij}{}^{pq} L_{kl}{}^{rs}. \quad (\text{A.10})$$

Korzystając ze wzorów podanych przez Ogdena, zob. Ogden (1984), niezerowe składowe tensora $L_{ij}{}^{pq}$ w bazie wektorów własnych $\hat{\varepsilon}_i$ mają wartości:

$$L_{iiii} = f'(\hat{\varepsilon}_i) \quad \text{dla } i = 1, 2, 3;$$

$$L_{ijij} = \begin{cases} \frac{1}{2}f'(\hat{\varepsilon}_i) & \text{dla } i \neq j, \hat{\varepsilon}_i = \hat{\varepsilon}_j; \\ \frac{1}{2}\{f(\hat{\varepsilon}_j) - f(\hat{\varepsilon}_i)\}/(\hat{\varepsilon}_j - \hat{\varepsilon}_i) & \text{dla } i \neq j, \hat{\varepsilon}_i \neq \hat{\varepsilon}_j. \end{cases}$$

Dla ($\hat{\varepsilon}_{ij} \rightarrow 0$) pochodna funkcji tensorowej (f') równa jest 1, stąd w dowolnej, ortonormalnej bazie reprezentacja tensora L_{ijpq} przyjmie postać:

$$L_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \quad (\text{A.11})$$

Podstawiając do wzoru (A.8) odpowiednie wielkości otrzymamy:

$$\hat{c}'{}^{ijkl} = \hat{c}{}^{mnop}L_{mn}{}^{ij}L_{op}{}^{kl}, \quad (\text{A.12})$$

stąd dla kryształów o symetrii kubicznej stałe sztywności rzędu drugiego, przy zmianie miary odkształcenia, przeliczymy wg wzorów:

$$\begin{aligned} \hat{c}'{}^{11} &= \hat{c}'{}^{1111} = \hat{c}{}^{ijkl}L_{ij}{}^{11}L_{kl}{}^{11}, \\ \hat{c}'{}^{12} &= \hat{c}'{}^{1122} = \hat{c}{}^{ijkl}L_{ij}{}^{11}L_{kl}{}^{22}, \\ \hat{c}'{}^{44} &= \hat{c}'{}^{2323} = \hat{c}{}^{ijkl}L_{ij}{}^{23}L_{kl}{}^{23}. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Niezerowe składowe tensora $L_{ij}{}^{pq}$ występujące w powyższych wzorach mają wartości:

$$L_{11}{}^{11} = L_{22}{}^{22} = 1 \quad \text{oraz} \quad L_{23}{}^{23} = L_{32}{}^{23} = \frac{1}{2}. \quad (\text{A.14})$$

Wynika stąd, że stałe sztywności drugiego rzędu kryształu kubicznego nie zależą od wyboru miary odkształcenia. Podobnie postępując możemy przeliczyć stałe sztywności dla kryształów o symetrii heksagonalnej, które oprócz stałych $\hat{c}{}^{11}$, $\hat{c}{}^{12}$ i $\hat{c}{}^{44}$ charakteryzują się posiadaniem dodatkowych niezależnych stałych $\hat{c}{}^{13}$ i $\hat{c}{}^{33}$:

$$\begin{aligned} \hat{c}'{}^{13} &= \hat{c}'{}^{1133} = \hat{c}{}^{ijkl}L_{ij}{}^{11}L_{kl}{}^{33}, \\ \hat{c}'{}^{33} &= \hat{c}'{}^{3333} = \hat{c}{}^{ijkl}L_{ij}{}^{33}L_{kl}{}^{33}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Niezerowe składowe tensora $L_{ij}{}^{pq}$ występujące w powyższych wzorach mają wartości równe:

$$L_{11}{}^{11} = L_{33}{}^{33} = 1, \quad (\text{A.16})$$

co oznacza, że stałe sztywności drugiego rzędu dla kryształów o powyższych symetriach *nie zależą od wyboru miary odkształcenia!*

$$\hat{c}'{}^{ij} = \hat{c}{}^{ij}. \quad (\text{A.17})$$

Przeliczenie stałych sztywności trzeciego rzędu do nowej miary odkształcenia odbywa się wg wzoru:

$$\begin{aligned} \widehat{C}'^{pqrstu} = & \frac{1}{2} \widehat{C}^{ijkl} \left[L_{ij}^{pqrs} L_{kl}^{tu} + L_{ij}^{pqtu} L_{kl}^{rs} + L_{ij}^{pq} L_{kl}^{rstu} \right. \\ & \left. + L_{ij}^{rstu} L_{kl}^{pq} + L_{ij}^{rs} L_{kl}^{pqtu} + L_{ij}^{tu} L_{kl}^{pqrs} \right] \\ & + \frac{1}{6} \widehat{C}^{ijklmn} \left[L_{ij}^{pq} L_{kl}^{rs} L_{mn}^{tu} + L_{ij}^{pq} L_{kl}^{tu} L_{mn}^{rs} + L_{ij}^{rs} L_{kl}^{pq} L_{mn}^{tu} \right. \\ & \left. + L_{ij}^{tu} L_{kl}^{pq} L_{mn}^{rs} + L_{ij}^{rs} L_{kl}^{tu} L_{mn}^{pq} + L_{ij}^{tu} L_{kl}^{rs} L_{mn}^{pq} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Podobnie jak składowe pierwszej pochodnej funkcji izotropowej L_{ijkl} , składowe drugiej pochodnej L_{ijklmn} możemy wyrazić w ortonormalnej bazie wektorów własnych, które przyjmują postać:

$$\begin{aligned} L_{ijklmn} = & \frac{1}{8} \left[\delta_{ik} \delta_{jm} \delta_{ln} + \delta_{ik} \delta_{jn} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn} + \delta_{il} \delta_{jn} \delta_{km} \right. \\ & \left. + \delta_{im} \delta_{jk} \delta_{ln} + \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{kn} + \delta_{in} \delta_{jk} \delta_{lm} + \delta_{in} \delta_{jl} \delta_{km} \right] f''(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}), \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

gdzie $f''(\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}})$ dla $\widehat{\varepsilon}_{ij} \rightarrow 0$ równe jest (m-m'). Kryształy o symetrii kubicznej posiadają sześć niezależnych stałych sztywności trzeciego rzędu opisujących anizotropowe właściwości materiału:

$$\widehat{C}^{111}, \widehat{C}^{112}, \widehat{C}^{123}, \widehat{C}^{144}, \widehat{C}^{155}, \widehat{C}^{456}.$$

Podstawiając odpowiednie wielkości do wzoru (A.9) i uwzględniając symetrię tensora \widehat{C}^{ijklmn} otrzymamy:

$$\begin{aligned} \widehat{C}'^{111} = \widehat{C}'^{111111} = & \widehat{C}^{ijklmn} L_{ij}^{11} L_{kl}^{11} L_{mn}^{11} + 3 \widehat{C}^{ijkl} L_{ij}^{1111} L_{kl}^{11}, \\ \widehat{C}'^{112} = \widehat{C}'^{111122} = & \widehat{C}^{ijklmn} L_{ij}^{11} L_{kl}^{11} L_{mn}^{22} + \widehat{C}^{ijkl} L_{ij}^{1111} L_{kl}^{22}, \\ \widehat{C}'^{123} = \widehat{C}'^{112233} = & \widehat{C}^{ijklmn} L_{ij}^{11} L_{kl}^{22} L_{mn}^{33} \\ & + \widehat{C}^{ijkl} (L_{ij}^{1122} L_{kl}^{33} + L_{ij}^{1133} L_{kl}^{22} + L_{ij}^{2233} L_{kl}^{11}), \\ \widehat{C}'^{144} = \widehat{C}'^{112323} = & \widehat{C}^{ijklmn} L_{ij}^{11} L_{kl}^{23} L_{mn}^{23} \\ & + \widehat{C}^{ijkl} (L_{ij}^{2323} L_{kl}^{11} + 2 L_{ij}^{1123} L_{kl}^{23}), \\ \widehat{C}'^{155} = \widehat{C}'^{111313} = & \widehat{C}^{ijklmn} L_{ij}^{11} L_{kl}^{13} L_{mn}^{13} \\ & + \widehat{C}^{ijkl} (L_{ij}^{1313} L_{kl}^{11} + 2 L_{ij}^{1113} L_{kl}^{13}), \\ \widehat{C}'^{456} = \widehat{C}'^{231312} = & \widehat{C}^{ijklmn} L_{ij}^{23} L_{kl}^{13} L_{mn}^{12} \\ & + \widehat{C}^{ijkl} (L_{ij}^{2313} L_{kl}^{12} + L_{ij}^{2312} L_{kl}^{13} + L_{ij}^{1312} L_{kl}^{23}). \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Niezerowe składowe pierwszej pochodnej funkcji izotropowej L_{ijkl} są równe:

$$\begin{aligned} L_{11}^{11} = L_{22}^{22} = L_{33}^{33} = & 1 \\ \text{oraz } L_{12}^{12} = L_{21}^{12} = L_{13}^{13} = L_{31}^{13} = & L_{23}^{23} = L_{32}^{23} = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Niezerowe składowe drugiej pochodnej L_{ijklmn} występujące w (A.21) są równe:

$$\begin{aligned} L_{11}^{1111} = 1, \quad L_{22}^{2323} = L_{33}^{2323} = L_{11}^{1313} = L_{33}^{1313} = L_{13}^{1113} = L_{31}^{1113} = \frac{1}{4}, \\ L_{12}^{2313} = L_{21}^{2313} = L_{13}^{2312} = L_{31}^{2312} = L_{23}^{1312} = L_{32}^{1312} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Po podstawieniu do wzorów (A.21) otrzymamy zależności opisujące zmianę stałych sztywności trzeciego rzędu w zależności od wyboru miary odkształcenia, por. Dłużewski (2000):

$$\begin{aligned} \hat{C}'^{111} &= \hat{C}'^{111111} = \hat{C}^{111111} + 3(m - m')\hat{c}^{1111}, \\ \hat{C}'^{112} &= \hat{C}'^{111122} = \hat{C}^{111122} + (m - m')\hat{c}^{1122}, \\ \hat{C}'^{123} &= \hat{C}'^{112233} = \hat{C}^{112233}, \\ \hat{C}'^{144} &= \hat{C}'^{112323} = \hat{C}^{112323} + \frac{1}{2}(m - m')\hat{c}^{1122}, \\ \hat{C}'^{155} &= \hat{C}'^{111313} = \hat{C}^{111313} + \frac{1}{4}(m - m')(\hat{c}^{1111} + \hat{c}^{1122} + 4\hat{c}^{2323}), \\ \hat{C}'^{456} &= \hat{C}'^{231312} = \hat{C}^{231312} + \frac{3}{4}(m - m')\hat{c}^{2323}. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Kryształy o symetrii heksagonalnej (wurcytu) w porównaniu z kryształami kubicznymi oprócz różnicy dla stałej sztywności C^{456} , która w tym wypadku jest funkcją innych stałych i ma postać:

$$\hat{C}^{456} = \frac{1}{2}(\hat{C}^{155} - \hat{C}^{144}), \quad (\text{A.25})$$

dotatkowo posiadają pięć dalszych, niezależnych stałych sztywności trzeciego rzędu opisujących nieliniowe zachowanie sprężyste kryształu (w sumie 10):

$$\hat{C}^{113}, \quad \hat{C}^{133}, \quad \hat{C}^{222}, \quad \hat{C}^{333}, \quad \hat{C}^{344}.$$

Po podstawieniu odpowiednich wartości pochodnych funkcji izotropowej L_{ijkl} i L_{ijklmn} do wzorów (A.9) otrzymamy, że powyższe stałe po zmianie miary odkształcenia przyjmują wartość:

$$\begin{aligned} \hat{C}'^{113} &= \hat{C}'^{111133} = \hat{C}^{111133} + (m - m')\hat{c}^{1133}, \\ \hat{C}'^{133} &= \hat{C}'^{113333} = \hat{C}^{113333} + (m - m')\hat{c}^{1133}, \\ \hat{C}'^{222} &= \hat{C}'^{222222} = \hat{C}^{222222} + 3(m - m')\hat{c}^{1111}, \\ \hat{C}'^{333} &= \hat{C}'^{333333} = \hat{C}^{333333} + 3(m - m')\hat{c}^{3333}, \\ \hat{C}'^{344} &= \hat{C}'^{332323} = \hat{C}^{332323} + \frac{1}{4}(m - m')(\hat{c}^{1133} + \hat{c}^{3333} + 2\hat{c}^{2323}). \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Tablice (A.1) i (A.2) zawierają stałe sztywności drugiego i trzeciego rzędu dla kilku wybranych materiałów o symetrii kubicznej i heksagonalnej.

	m	c_{11}	c_{12}	c_{44}	C_{111}	C_{112}	C_{123}	C_{144}	C_{155}	C_{456}
GaAs	2	119	54	60	-675	-402	-4	-70	-320	-69
	1	-	-	-	-318	-348	-4	-43	-217	-24
	0	-	-	-	39	-294	-4	-16	-113	21
CdTe	2	54	37	16	-213	-210	-42	14	-65	5
	1	-	-	-	-51	-173	-42	33	-26	17
	0	-	-	-	111	-136	-42	51	13	29
Al	2	106	60	28	-1076	-315	36	-23	-340	-30
	1	-	-	-	-758	-255	36	7	-271	-9
	0	-	-	-	-440	-195	36	37	-201	12
Cu	2	166	120	76	-1271	-814	-50	-3	-780	-95
	1	-	-	-	-773	-694	-50	57	-633	-38
	0	-	-	-	-275	-574	-50	117	-485	19

Tablica A.1: Stałe sztywności drugiego \mathbf{c} i trzeciego rzędu \mathbf{C} wybranych kryształów o symetrii kubicznej przeliczone z miary Greena ($m = 2$) do miary Biota ($m = 1$) i Hencky'ego ($m = 0$). Dane wg Drabble i Brammer (1966), Walker i in. (1985), Thomas (1968) i Hiki i Granato (1966).

	m	c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}
GaN	2	374	141	98	389	98
InN	2	223	115	92	224	48

Tablica A.2: Stałe sztywności drugiego \mathbf{c} rzędu azotku galu i azotku indu krystalizujących w układzie heksagonalnym. Dane wg Wright (1997) oraz Reeber i Wang (2001).

Dodatek B

Wyznaczanie dystorsji źródłowych

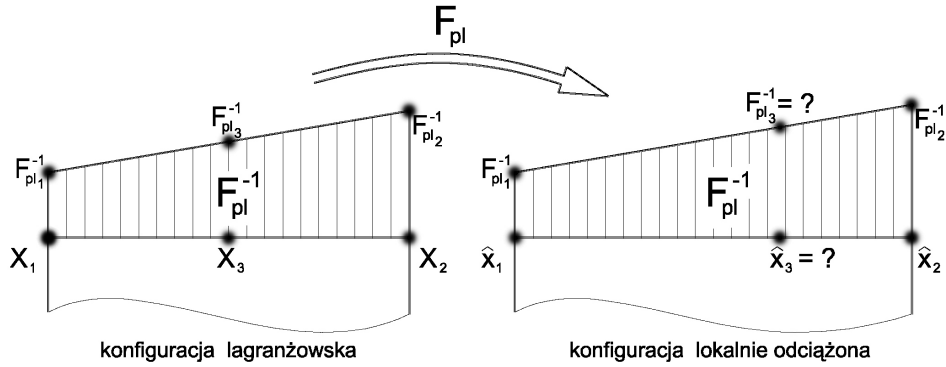
B.1 Regularna siatka w konfiguracji lagranżowskiej

Dystorsje źródłowe, otrzymywane za pomocą metody fazy geometrycznej, zob. Hýtch i in. (1998) wyznaczane są podczas procesu cyfrowej obróbki obrazu TEM w oparciu o konfigurację struktury widoczną na obrazie mikroskopowym, zob. Dłużewski i in. (2002a). Tak wyznaczone dystorsje $\boldsymbol{\beta}^{HRTM}$ przeliczane są następnie do lokalnie odciążonej konfiguracji struktury $\hat{\mathbf{x}}$ przy użyciu wzoru, zob. rys.(3.2):

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}^{HRTM})^{-1} - \mathbf{1}. \quad (\text{B.1})$$

Wartość dystorsji $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ podczas obliczeń metodą elementów skończonych pozostaje stała a zmienia się konfiguracja ciała, konieczne jest zatem takie przyjęcie ich wartości w konfiguracji lagranżowskiej \mathbf{X} , aby rozkład w konfiguracji $\hat{\mathbf{x}}$ był liniowy (w ogólnym przypadku o rząd niższy niż stopień funkcji opisującej pole przemieszczeń) wzdłuż krawędzi elementu skończonego. Oznacza to, że w trakcie procesu przygotowywania danych wejściowych do obliczeń, przy zadawaniu dystorsji w węzłach elementu skończonego należy uwzględnić zmiany konfiguracji próbki. Trudność polega na tym, że odciążona konfiguracja $\hat{\mathbf{x}}$ zależy właśnie od wartości dystorsji $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. Problemem jest poprawne określenie dystorsji w węzłach leżących na krawędzi i środku elementu umożliwiające uzyskanie założonego rozkładu dystorsji w elemencie. Niezachowanie odpowiedniego rozkładu dystorsji sieci w elemencie skutkuje powstaniem niepożądanych koncentracji naprężeń. Zaletą proponowanego podejścia jest uzyskanie niezmienniczości dystorsji względem deformacji, tzn. na każdym kroku obliczeń MES, mimo zmian konfiguracji aktualnej \mathbf{x} , wielkość $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ związana z konfiguracją odciążoną $\hat{\mathbf{x}}$ pozostaje stała. Aby zapewnić liniowy rozkład dystorsji $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ na krawędziach elementu konieczne jest wyznaczenie położenia węzłów pośrednich w konfiguracji lokalnie odciążonej $\hat{\mathbf{x}}$ - węzeł $\hat{\mathbf{x}}_3$ na rys.(B.1). Wiemy, że zmiana odległości pomiędzy punktami w konfiguracji lagranżowskiej \mathbf{X} przy przejściu do konfiguracji lokalnie odciążonej $\hat{\mathbf{x}}$ (lub odwrotnie), po uwzględnieniu dystorsji źródłowych jest opisana wzorem:

$$\mathbf{X}_{12} = \int_{\hat{\mathbf{x}}_1}^{\hat{\mathbf{x}}_2} \mathbf{F}_{pl}^{-1} d\hat{\mathbf{x}}. \quad (\text{B.2})$$



Rysunek B.1: Zmiana konfiguracji oraz zmiana położenia węzła pośredniego \hat{x}_3 i wartości \mathbf{F}_{pl}^{-1} w tym węźle.

Jednocześnie wiemy, że \mathbf{F}_{pl}^{-1} jest liniową funkcją $\hat{\boldsymbol{\beta}}$:

$$\mathbf{F}_{pl}^{-1} = \mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}, \quad (\text{B.3})$$

stąd wynika, że rozkład \mathbf{F}_{pl}^{-1} wzdłuż elementu również jest liniowy, więc:

$$\mathbf{X} = \int (\mathbf{a}\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b})d\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{2}\mathbf{a}\hat{\mathbf{x}}^2 + \mathbf{b}\hat{\mathbf{x}}, \quad (\text{B.4})$$

gdzie \mathbf{a} i \mathbf{b} są współczynnikami równania liniowego opisującego zmiany \mathbf{F}_{pl}^{-1} wzdłuż krawędzi elementu, które należy wyznaczyć rozwiązując następujący układ równań:

$$\mathbf{F}_{pl_1}^{-1} = \mathbf{a}\hat{\mathbf{x}}_1 + \mathbf{b} = \mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1 \quad \text{dla } \hat{\mathbf{x}}_1; \quad (\text{B.5})$$

$$\mathbf{F}_{pl_2}^{-1} = \mathbf{a}\hat{\mathbf{x}}_2 + \mathbf{b} = \mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2 \quad \text{dla } \hat{\mathbf{x}}_2. \quad (\text{B.6})$$

Lokalnie, w każdym elemencie możemy założyć: $\mathbf{X}_1 = \hat{\mathbf{x}}_1 = 0$, stąd współczynniki \mathbf{a} i \mathbf{b} są więc równe:

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}_{pl_2}^{-1} - \mathbf{F}_{pl_1}^{-1}}{\hat{\mathbf{x}}_2} = \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}_2 - \hat{\boldsymbol{\beta}}_1}{\hat{\mathbf{x}}_2}; \quad (\text{B.7})$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{F}_{pl_1}^{-1} = \mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1. \quad (\text{B.8})$$

Podstawiając do (B.4) \mathbf{a} i \mathbf{b} w postaci (B.7) i (B.8) dla X_2 otrzymamy:

$$\mathbf{X}_2 = \frac{1}{2} \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}_2 - \hat{\boldsymbol{\beta}}_1}{\hat{\mathbf{x}}_2} \hat{\mathbf{x}}_2^2 + (\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)\hat{\mathbf{x}}_2, \quad (\text{B.9})$$

stąd wyliczamy zależność odwrotną:

$$\hat{\mathbf{x}}_2 = \frac{2\mathbf{X}_2}{\hat{\boldsymbol{\beta}}_1 + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2 + 2}. \quad (\text{B.10})$$

Podstawiając znalezione $\hat{\mathbf{x}}_2$ do wzoru (B.7) otrzymamy, że:

$$\mathbf{a} = \frac{(\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2)^2 - (\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)^2}{2\mathbf{X}_2}. \quad (\text{B.11})$$

Aby wyznaczyć poszukiwane położenie $\hat{\mathbf{x}}_3$ należy więc znaleźć, odpowiedni pierwiastek następującego równania kwadratowego:

$$\mathbf{X}_3 = \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2)^2 - (\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)^2}{2\mathbf{X}_2} \hat{\mathbf{x}}_3^2 + (\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)\hat{\mathbf{x}}_3. \quad (\text{B.12})$$

Występujące w powyższym równaniu \mathbf{X}_3 jest znane, bowiem wynika z dokonanego na wstępie założenia, że siatka elementów skończonych w konfiguracji lagranżowskiej jest regularna, więc $\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2/2$. Znając teraz długości $\hat{\mathbf{x}}_2$ i $\hat{\mathbf{x}}_3$ możemy wyznaczyć poszukiwaną wartość $\hat{\beta}_3$ w węźle pośrednim:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_3 = \hat{\boldsymbol{\beta}}_1 + (\hat{\boldsymbol{\beta}}_2 - \hat{\boldsymbol{\beta}}_1) \frac{\hat{\mathbf{x}}_3}{\hat{\mathbf{x}}_2}. \quad (\text{B.13})$$

B.2 Regularna siatka w konfiguracji lokalnie odciążonej

Załóżmy, że mamy tak przygotowaną siatkę elementów skończonych, że w lokalnie odciążonej konfiguracji $\hat{\mathbf{x}}$ siatka ta jest regularna, tzn:

$$\hat{\mathbf{x}}_3 = \frac{\hat{\mathbf{x}}_2}{2}, \quad (\text{B.14})$$

co kapitalnie upraszcza wyznaczenie wartości dystorsji w węźle pośrednim \hat{x}_3 :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_3 = \frac{(\hat{\boldsymbol{\beta}}_1 + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2)}{2}. \quad (\text{B.15})$$

Dodatkowym atutem takiego założenia jest fakt, że otrzymana w ten sposób konfiguracja $\hat{\mathbf{x}}$ jest regularna pod względem geometrycznym a rozkład dystorsji źródłowych $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ jest liniowy. Korzystając z warunku geometrycznego (B.14) oraz z zależności (B.10) $\hat{\mathbf{x}}_2$ możemy znaleźć poszukiwane teraz położenie węzła \mathbf{X}_3 podstawiając odpowiednie wielkości do równania (B.9):

$$\mathbf{X}_3 = \frac{1}{2} \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}_2 - \hat{\boldsymbol{\beta}}_1}{\hat{\mathbf{x}}_2} \left(\frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}}_2\right)^2 + (\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)\left(\frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}}_2\right). \quad (\text{B.16})$$

W efekcie otrzymujemy zależność opisującą położenie węzła pośredniego w konfiguracji lagranżowskiej \mathbf{X}_3 :

$$\mathbf{X}_3 = \frac{1}{4} \mathbf{X}_2 \frac{(\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2) + 3(\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)}{(\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_2) + (\mathbf{1} + \hat{\boldsymbol{\beta}}_1)}, \quad (\text{B.17})$$

koniecznego dla uzyskania regularnej siatki elementów skończonych w lokalnie odciążonej konfiguracji $\hat{\mathbf{x}}$.

Jeszcze inne podejście polega na wyznaczeniu wartości dystorsji biorąc pod uwagę jedynie

konfigurację lagranżowską, co przy regularnej siatce (równe odległości pomiędzy węzłami - typowy przypadek) daje w efekcie prosty sposób na wyznaczenie dystorsji $\hat{\beta}$. Wadą tego rozwiązania jest brak liniowości dystorsji $\hat{\beta}$ wzdłuż krawędzi elementu w lokalnej dla całego elementu konfiguracji odciążonej. Jest to proste podejście lecz z punktu widzenia naprężeń generuje ono sztuczne naprężenia residualne, np. w rdzeniach dyslokacji i wynika z faktu względnie dużych różnic w położeniach węzłów krawędziowych w konfiguracji lagranżowskiej \mathbf{X} i lokalnie odciążonej $\hat{\mathbf{x}}$, zob. rys.(B.1).

Dodatek C

Wybór parametru miary odkształcenia

Dokonanie poprawnego wyboru jednej z wielu uogólnionych miar odkształcenia nie jest trywialne. Wybór taki powinien odpowiedzieć na pytanie, która z miar odkształcenia jest najwłaściwsza w danym przypadku obciążenia i warunków brzegowych do modelowania zachowania się ciała. Jednym z wielu kryteriów wyboru może być minimalizacja współczynnika ściśliwości objętościowej B , zob. rów.(2.29). Poprawnie wybrana miara odkształcenia powinna zapewniać stałą jego wartość w całym zakresie deformacji objętościowych. Sprawdźmy zatem jak wybór parametru miary odkształcenia "m" wpływa na zmianę współczynnika ściśliwości i wybierzmy taką miarę odkształcenia dla której B nie zależy od zmian objętościowych. Dla kryształów o symetrii kubicznej współczynnik ściśliwości objętościowej ma postać:

$$B = \frac{c_{11} + 2 c_{12}}{3}. \quad (\text{C.1})$$

Na podstawie (3.34) i (3.41) możemy zapisać:

$$c'_{11}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = c^0_{11} + C_{11i} \hat{\varepsilon}_i, \quad (\text{C.2})$$

$$c'_{12}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = c^0_{12} + C_{12i} \hat{\varepsilon}_i, \quad (\text{C.3})$$

Ponieważ rozważamy deformację objętościową stąd wynika, że:

$$\hat{\varepsilon}_1 = \hat{\varepsilon}_2 = \hat{\varepsilon}_3 = \hat{\varepsilon}, \quad (\text{C.4})$$

a z symetrii tensorów sztywności trzeciego rzędu kryształów kubicznych wynika, że:

$$C_{112} = C_{113}, \quad C_{121} = C_{122}, \quad \text{oraz} \quad C_{114} = C_{115} = C_{116} = C_{124} = C_{125} = C_{126} = 0. \quad (\text{C.5})$$

Po dokonaniu odpowiednich przekształceń równanie (C.1) możemy wyrazić w postaci:

$$B = B^0 + B(\hat{\varepsilon}) = \frac{c^0_{11} + 2 c^0_{12}}{3} + \frac{C_{111} + 6 C_{112} + 2 C_{123}}{3} \hat{\varepsilon}. \quad (\text{C.6})$$

Na podstawie (3.43) wiemy, że stałe sztywności trzeciego rzędu C_{111} , C_{112} oraz C_{123} zależą od wyboru miary odkształcenia. Po podstawieniu odpowiednich formuł otrzymamy warunek doboru parametru miary odkształcenia pod kątem stałości współczynnika ściśliwości

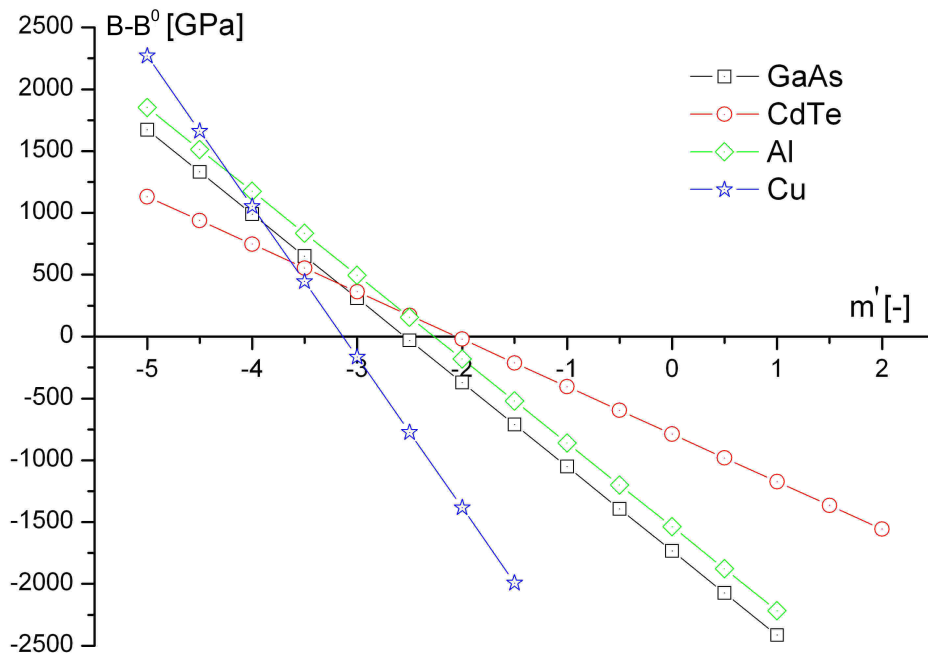
objętościowej B:

$$B(\hat{\varepsilon}) = 0 \Leftrightarrow C_{111} + 3(m - m')c_{11} + 6\left(C_{112} + (m - m')c_{12}\right) + 2C_{123} = 0. \quad (C.7)$$

Po przekształceniu powyższego wzoru otrzymamy, że parametr miary odkształcenia zapewniający stałość współczynnika sztywności objętościowej ma wartość:

$$m' = \frac{C_{111} + 3mc_{11} + 6C_{112} + 6mc_{12} + 2C_{123}}{3c_{11} + 6c_{12}}. \quad (C.8)$$

W tabeli (C.1) podane są parametry miary odkształcenia "m" zapewniające stałość współ-



Rysunek C.1: Wpływ wyboru parametru miary odkształcenia "m" na zmianę wartości współczynnika ścisłości objętościowej $B(\hat{\varepsilon})$. Stałe sztywności wg tab.(A.1).

	m
GaAs	-2.5
CdTe	-2.0
Al	-2.25
Cu	-3.1

Tablica C.1: Parametr miary odkształcenia "m" zapewniający stałość współczynnika sztywności objętościowej B.

czynnika sztywności objętościowej "B" podczas deformacji. W prezentowanych przypadkach są to wielkości ujemne z przedziału (-3.1;-2). Z drugiej strony, taka wartość parametru odkształcenia powoduje, że zakładamy silną nieliniowość materiału objawiającą się silną asymetrią podczas ściskania i rozciągania - zgodną z przewidywaniami modeli dyskretnych (np. potencjał Stillinger - Weber) i rozkładem sił oddziaływań atomowych, por. rys.(2.3) i (3.1).

Dłużewski i in. (2002b)Dłużewski i in. (2002c)Dłużewski i in. (2002c)Jurczak i in. (2004)Jurczak i in. (2003)Maciejewski i in. (2003)Ruterana i in. (2004)Ruterana i in. (2004)