



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ ΜΕ ΘΕΜΑ
«ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΝΑΛΥΣΗΣ
ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΑΤΕΛΕΙΩΝ»**



ΕΠΙΜΕΛΕΙΑ: ΜΠΑΞΕΒΑΝΑΚΗΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

Δρ. ΑΡΑΒΑΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

Δρ. ΓΙΑΝΝΑΚΟΠΟΥΛΟΣ ΑΝΤΩΝΙΟΣ (ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ)

Δρ. ΠΕΡΔΙΚΑΡΗΣ ΦΙΛΙΠΠΟΣ

ΒΟΛΟΣ

ΙΟΥΛΙΟΣ 2006



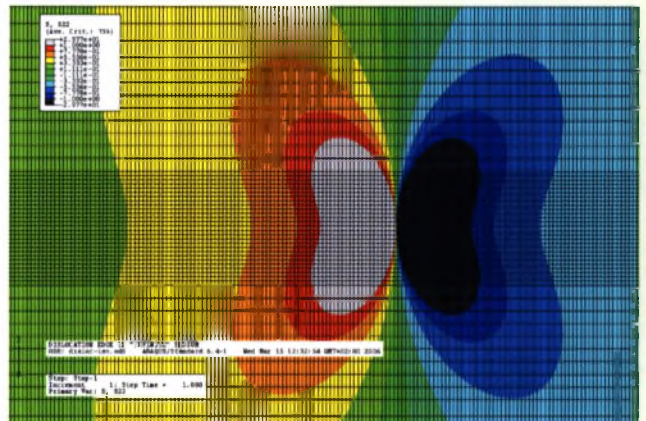
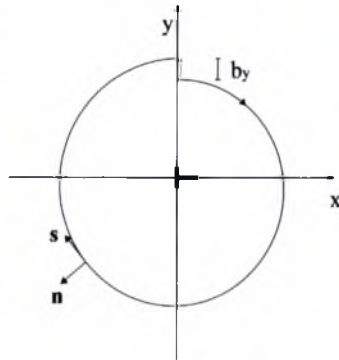
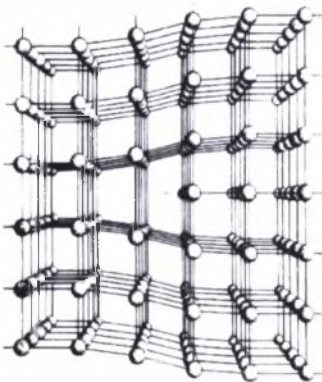
**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 4847/1
Ημερ. Εισ.: 09-10-2007
Δωρεά: Συγγραφέα
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ -- ΠΜ
2006
ΜΠΑ



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ ΜΕ ΘΕΜΑ
«ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΝΑΛΥΣΗΣ
ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΑΤΕΛΕΙΩΝ»



ΕΠΙΜΕΛΕΙΑ: ΜΠΑΞΕΒΑΝΑΚΗΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

Δρ. ΑΡΑΒΑΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

Δρ. ΓΙΑΝΝΑΚΟΠΟΥΛΟΣ ΑΝΤΩΝΙΟΣ (ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ)

Δρ. ΠΕΡΔΙΚΑΡΗΣ ΦΙΛΙΠΠΟΣ

ΒΟΛΟΣ

ΙΟΥΛΙΟΣ 2006

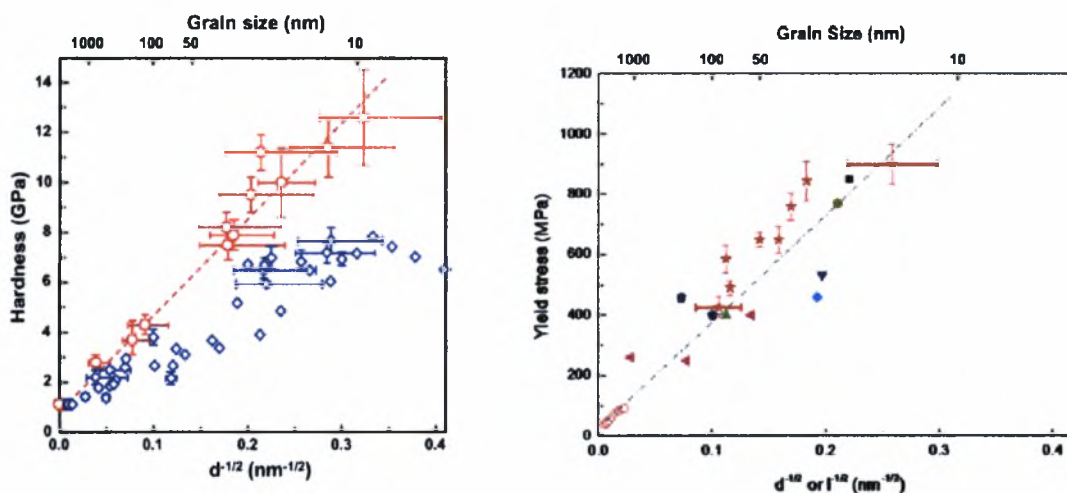
Περιεχόμενα

1.	Εισαγωγή.....	2
2.	Ανάπτυξη του «θερμικού αναλόγου».....	4
2.1.	Το «θερμικό ανάλογο» για δισδιάστατες ατέλειες σε ισότροπα υλικά.....	5
2.2.	Το «θερμικό ανάλογο» για δισδιάστατες ατέλειες σε ανισότροπα υλικά.....	9
2.3.	Κατανομή τάσεων γύρω από μία ατέλεια σε ισότροπα υλικά.....	12
2.4.	Κατανομή τάσεων γύρω από μία ατέλεια σε ανισότροπα υλικά.....	13
2.5.	Η «κινούσα» δύναμη των ατελειών, δύναμη Peach-Koehler	15
3.1.	Εισαγωγή στα Πεπερασμένα Στοιχεία	18
3.2.	Προσδιορισμός τάσεων για ατέλειες σε ισότροπα υλικά.....	18
3.3.	Προσδιορισμός τάσεων για ατέλειες σε ανισότροπα υλικά.....	22
3.4.	Επιρροή της ελεύθερης επιφάνειας και υπολογισμός δύναμης Peach-Koehler	25
3.5.	Η δύναμη «αντίστασης» του υλικού, δύναμη Peierls (Nabarro)	31
4.	Συμπεράσματα και προτάσεις για το μέλλον.....	34
5.	Βιβλιογραφία	35
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α.....	36
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β.....	89
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ.....	118
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ.....	144

1. Εισαγωγή

Η παρούσα εργασία έχει ως στόχο την ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων των εντατικών πεδίων των κρυσταλλικών ατελειών με απώτερο σκοπό την πρόβλεψη της συμπεριφοράς τους. Η μεθοδολογία είναι γενική και περιλαμβάνει τόσο ισότροπα όσο και ανισότροπα υλικά.

Με τους συνώνυμους όρους κρυσταλλικές ατέλειες, ανωμαλίες, εξαρθρώσεις, δυστοπίες εννοούμε τις γραμμικές ατέλειες (dislocations) στην κρυσταλλική δομή των υλικών με δεδομένη δομή, αλληλεπίδραση με το περιβάλλον τους και κίνηση. Οι ατέλειες των κρυστάλλων είναι διαταραχές της τέλειας γεωμετρικής διάταξης των ατόμων του κρυστάλλου. Η σημασία τους για την επιστήμη είναι πολύ σημαντική καθώς η αντοχή σε διαρροή των μετάλλων (και άλλων υλικών) έχει ως βασική αιτία τις ατέλειες. Όπως φαίνεται από την εικόνα 1, το μέγεθος της ατέλειας επηρεάζει την τελική αντοχή των μετάλλων, τη σκληρότητά τους και άλλες μηχανικές ιδιότητες. Επιπλέον, οι κρυσταλλικές ατέλειες επηρεάζουν τις ηλεκτρικές ιδιότητες των υλικών.

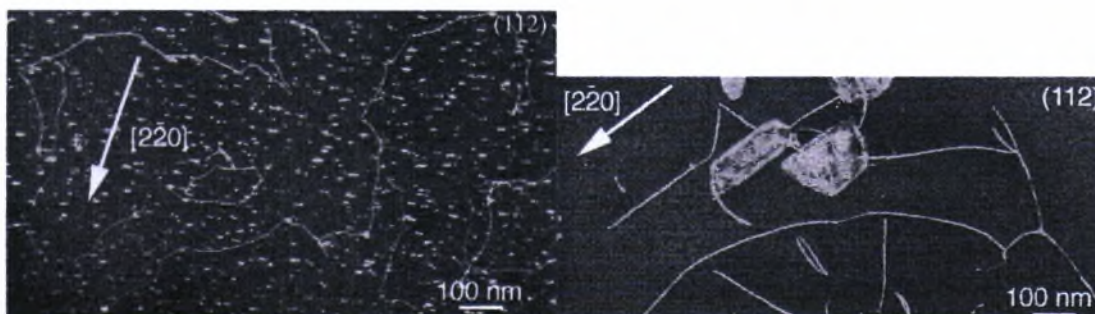


Εικόνα 1: Επιρροή του μεγέθους των ατελειών στην τάση διαρροής και τη σκληρότητά των μετάλλων (Asaro and Suresh, Acta Materialia 53, 2005).

Ο όρος κρυσταλλική ατέλεια εισήχθη το 1907 από τον Volterra ως γραμμική ιδιομορφία στις τάσεις ή παραμορφώσεις ενός στερεού. Οι ατέλειες περιγράφονται από πεδία τάσεων τα οποία δεν υπακούουν στο συμβιβαστό των μετατοπίσεων και δημιουργούν αυτεντατικά πεδία δυνάμεων. Αυτή η διαταραχή της κρυσταλλικής συμμετρίας είναι που επηρεάζει τις μηχανικές ιδιότητες των υλικών. Οι πραγματικοί κρύσταλλοι περιέχουν έναν πεπερασμένο αριθμό ατελειών των οποίων η πυκνότητα και η κατανομή εξαρτάται από τις θερμομηχανικές διαδικασίες που έχει υποστεί στο παρελθόν. Δηλαδή, όλες οι διαδικασίες σκλήρυνσης και αύξησης της αντοχής (βάψιμο, θερμή εξέλαση) έχουν ως κοινό παρονομαστή την απομάκρυνση -κατά το δυνατόν ελαχιστοποίηση- των ατελειών.

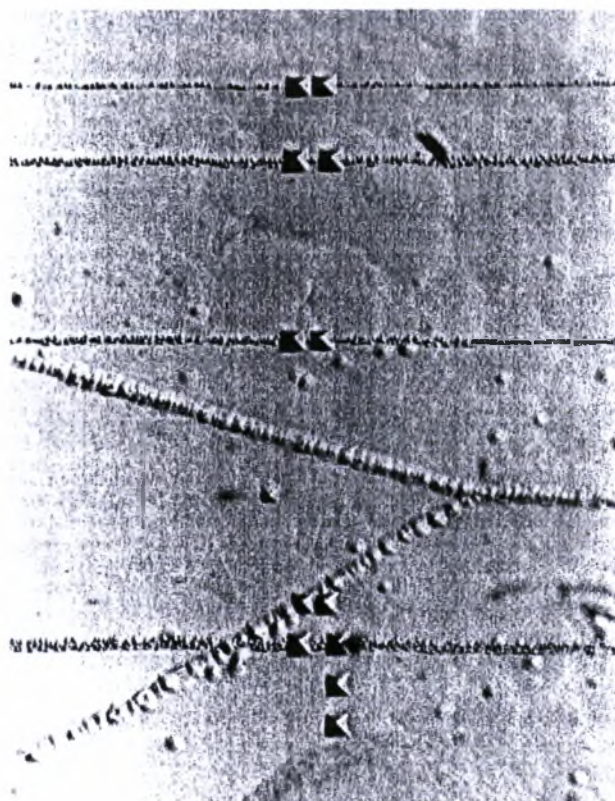
Για να προβλέψουμε τη συμπεριφορά μίας ατέλειας είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε το πεδίο των τάσεων που την περιγράφει. Στη διεθνή βιβλιογραφία υπάρχουν λύσεις για σχετικά απλά προβλήματα ενώ οι πιο σύνθετες γεωμετρίες και η ανισοτροπία εισάγουν στο πρόβλημα σημαντικές δυσκολίες. Σε αυτές τις περιπτώσεις, τα πεδία των τάσεων δεν είναι γνωστά ειδικά όταν οι ατέλειες αλληλεπιδρούν ή όταν βρίσκονται κοντά σε ελεύθερα σύνορα. Όταν η ατέλεια δεν βρίσκεται κοντά σε σύνορο ή σε άλλη ατέλεια συνήθως δεν αντιδρά. Αν όμως διαταραχθεί, π.χ. έρθει σε

αλληλεπίδραση με ελαστικά διαφορετικό σώμα ή αν αυξηθεί η θερμοκρασία, η ατέλεια δύναται να κινηθεί επιδιώκοντας να βρεθεί σε μία πιο σταθερή (ενεργειακά) κατάσταση. Η «κινούσα δύναμη» της ατέλειας ονομάζεται δύναμη Peach-Koehler. Η κίνηση της ατέλειας μπορεί να οδηγήσει σε σταδιακή αστοχία αν υπάρξει συσπείρωση των ατελειών και δημιουργία επιφάνειας ολίσθησης (εικόνες 2, 3 [Bartnett, 1999]).



Εικόνα 2: Αλλαγή της μικροδομής του μετάλλου έπειτα από θέρμανση στους 800 °C.

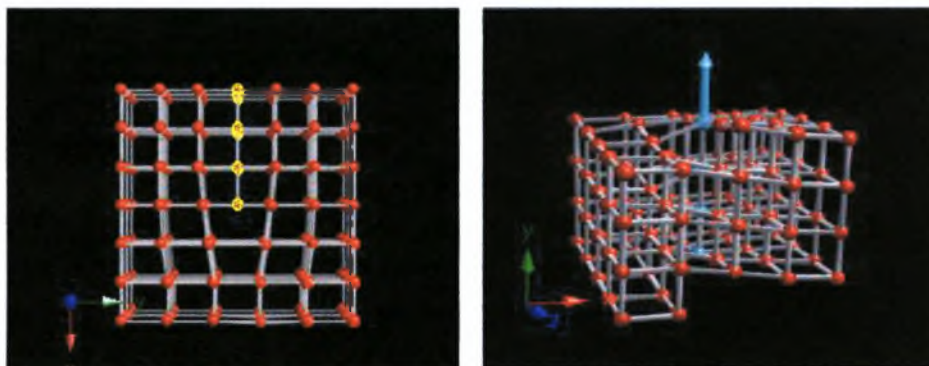
Όπως γίνεται αντιληπτό, οι αναλυτικές λύσεις δε μπορούν να δώσουν απάντηση σε όλα τα προβλήματα άμεσα. Οι αναλυτικοί υπολογισμοί απαιτούν χρόνο ενώ η τεχνολογική πρόοδος χρειάζεται γρήγορες απαντήσεις σε πρακτικά προβλήματα. Οι ατομικοί (atomistic) υπολογισμοί δε χρησιμοποιούνται σε καθημερινές εφαρμογές των μηχανικών παρά τις προσπάθειες εισαγωγής μεθοδολογιών σε κώδικες πεπερασμένων στοιχείων (Tadmor et al., 1996). Στην παρούσα εργασία, επιχειρείται η ανάπτυξη μίας μεθοδολογίας που θα περιγράφει εύκολα τις κρυσταλλικές ατέλειες και θα δίνει άμεσα αποτελέσματα. Η εφαρμογή της δεν περιορίζεται στα μέταλλα καθώς ατέλειες υπάρχουν και σε οξειδία μετάλλων ή κεραμικά υλικά σε υψηλές θερμοκρασίες.



Εικόνα 3: Επιφάνειες ολίσθησης λόγω της κίνησης των ατελειών σε κρύσταλλο LiF.

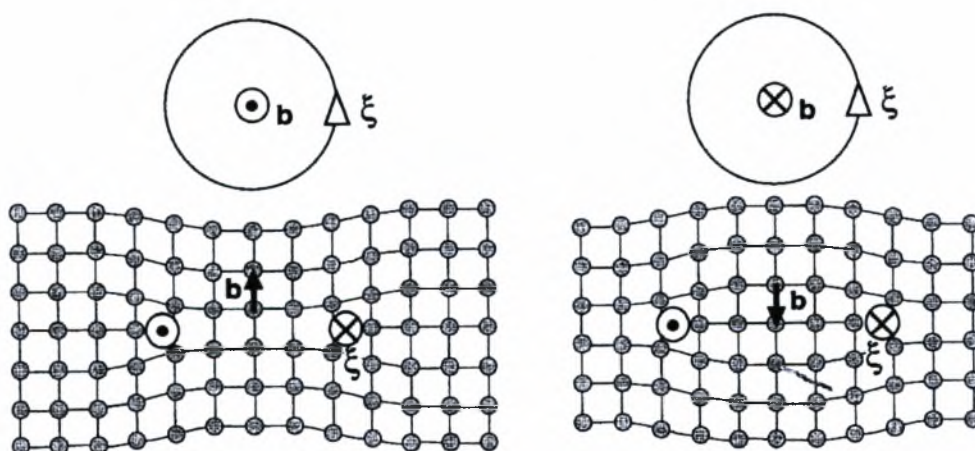
2. Ανάπτυξη του «θερμικού αναλόγου»

Η κρυσταλλική ατέλεια είναι μία γραμμική ασυνέχεια του κρυσταλλικού πλέγματος η οποία έχει ως χαρακτηριστικό να «μεταφέρει» μία διακεκριμένη ποσότητα μετατόπισης της οποίας το μέγεθος και η διεύθυνση αναπαρίσταται από το διάνυσμα Burgers (\mathbf{b}). Η γραμμή της ατέλειας παριστάνεται με ένα εφαπτομενικό διάνυσμα ξ . Αν το διάνυσμα ξ είναι κάθετο με το διάνυσμα \mathbf{b} , η ατέλεια βρίσκεται στο επίπεδο x-y (edge dislocation) ενώ αν τα διανύσματα είναι παράλληλα υπάρχει και συνιστώσα κατά z (screw dislocation).



Εικόνα 4: Ατέλεια τύπου edge και τύπου screw.

Οι ορισμοί των διανυσμάτων \mathbf{b} και ξ φαίνονται στα παρακάτω σχήματα: στο πρώτο σχήμα έχουμε απώλεια ενός ατόμου στο κρυσταλλικό πλέγμα ενώ στο δεύτερο έχουμε ένα πρόσθετο άτομο.



Εικόνα 5: Ορισμοί διανυσμάτων \mathbf{b} και ξ .

Στην παρούσα εργασία εξετάζονται μόνο ατέλειες στο επίπεδο (edge dislocations).

2.1. Το «θερμικό ανάλογο» για διδιάστατες ατέλειες σε ισότροπα υλικά

Για να μπορέσουμε να εισάγουμε τις ατέλειες σε μία μεθοδολογία πεπερασμένων στοιχείων, θα χρησιμοποιήσουμε ένα ανάλογο από τη θερμοελαστικότητα. Ο Biot (1935) παρουσίασε ένα θερμικό ανάλογο για να περιγράψει τα πεδία γύρω από τις ατέλειες. Η μέθοδός του εφαρμόστηκε σαν πειραματική τεχνική για τη μελέτη των ατελειών με οπτικά μέσα. Η παρουσίαση του διανύσματος Burgers σε όρους τάσεων έγινε από τους Mindlin και Salvadori (1950) και χρησιμοποιήθηκε πρόσφατα από τους Dundurs και Markenscoff (1993). Χρησιμοποιούμε τις παραπάνω ιδέες μαζί με μία θερμοκρασιακή κατανομή για να παρακάμψουμε την ασυμβατότητα στις μετακινήσεις που είναι απαραίτητη για τη μαθηματική περιγραφή μίας ατέλειας τύπου Volterra. Η ασυμβατότητα δε μπορεί να εισαχθεί διαφορετικά στα συνηθισμένα πεπερασμένα στοιχεία.

Ας θεωρήσουμε ένα ελαστικό σώμα που υπόκειται σε επίπεδη παραμόρφωση. Υπό την απουσία μαζικών δυνάμεων (F_x, F_y), τα στοιχεία του τανυστή των τάσεων σ_{ij} πρέπει να υπακούν στις εξισώσεις ισορροπίας που για καρτεσιανές συντεταγμένες (x, y, z) είναι:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} = 0 \quad \text{και} \quad \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

Οι παραμορφώσεις πρέπει να τηρούν την τοπική συνθήκη συμβιβαστού:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2} = 0 \quad (2)$$

Θεωρούμε μία συνάρτηση Airy $\Phi(x, y)$ ώστε η (1) να ικανοποιείται:

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}, \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \quad (3)$$

Η τοπική συνθήκη συμβιβαστού των παραμορφώσεων είναι απαραίτητη για δεδομένες παραμορφώσεις ώστε οι παραγόμενες μετακινήσεις u_x, u_y να είναι συνεχείς. Δεν είναι όμως αρκετή όταν ο κρύσταλλος είναι πολλαπλώς συνδεδεμένος. Σύμφωνα με τον Michell (1899), πρέπει να εισαχθούν καθολικές συνθήκες συμβιβαστού σε μορφή ολοκληρωμάτων. Για μία κλειστή καμπύλη γύρω από μία ατέλεια τύπου Volterra (εικ. 6), ισχύει:

$$\oint d\omega_z = 0 \quad \text{όπου} \quad \omega_z = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \quad \text{το στροφικό μέρος του υλικού (material spin)} \quad (4)$$

$$\oint du_x = b_x \quad \text{και} \quad \oint du_y = b_y \quad (5)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις αποτελούν τις 3 συνθήκες του Michell.

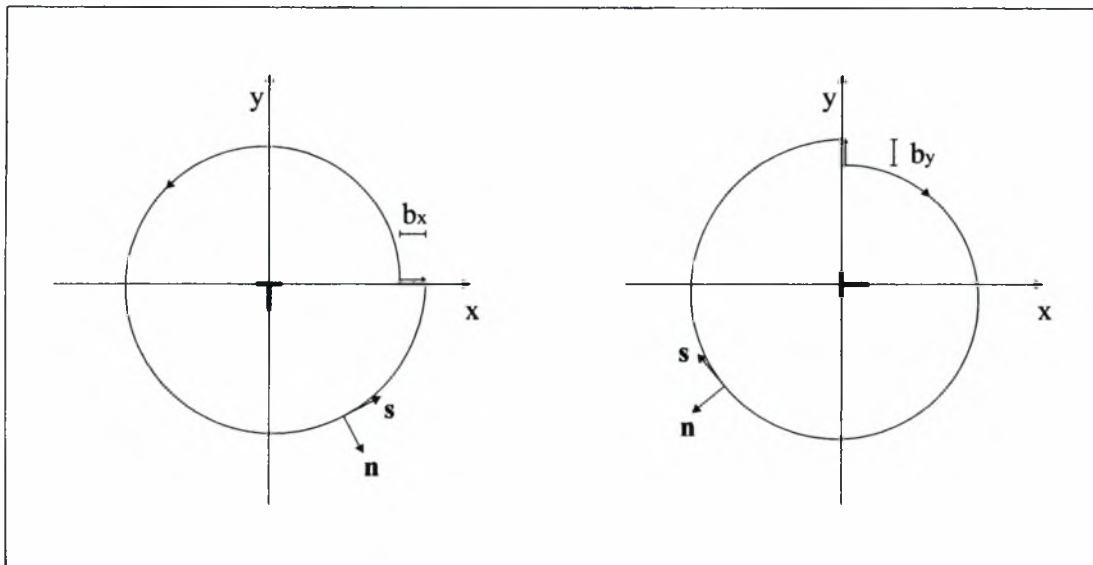
Η εξίσωση (4) είναι απαραίτητη ώστε να μην υπάρχουν αποκλίσεις (edge disclinations), δηλαδή να μην έχουμε ατέλειες τύπου Somigliana. Οι ποσότητες b_x και b_y είναι οι συνιστώσες του διανύσματος Burgers.

Οι σχέσεις παραμορφώσεων-μετακινήσεων είναι:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \quad (6)$$

Χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (6), η εξίσωση (4) γίνεται:

$$0 = \oint \left[\left(\frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial y} \right) dx + \left(\frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial y} \right) dy \right] \quad (7)$$



Εικόνα 6: Οι συνιστώσες του διανύσματος Burgers μίας ατέλειας τύπου Volterra και οι κλειστές καμπύλες που τις περιβάλλουν.

Λαμβάνοντας υπόψιν τις εξισώσεις (5), (6), (7) και (2), έχουμε:

$$b_x = -\oint x \left(\frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial x} dx - \frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial y} dy \right) - \oint y \left[\frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial x} dx - \left(\frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial y} - 2 \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial y} \right) dy \right] \quad (8)$$

$$b_y = -\oint x \left[\left(2 \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial y} \right) dx + \frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial x} dy \right] - \oint y \left(\frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial x} dx + \frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial y} dy \right) \quad (9)$$

Ο νόμος του Hooke για ισότροπη επίπεδη παραμόρφωση είναι:

$$\begin{aligned} 2\mu \varepsilon_{xx} &= \sigma_{xx} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \\ 2\mu \varepsilon_{yy} &= \sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \\ 2\mu \varepsilon_{xy} &= \sigma_{xy} \end{aligned} \quad (10)$$

Οι συνιστώσες των τάσεων είναι συνεχείς. Χρησιμοποιώντας το νόμο του Hooke (10) και τις εξισώσεις ισορροπίας (1) στις σχέσεις (7), (8) και (9), αποκτούμε:

$$\oint \frac{\partial}{\partial n} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) ds = 0 \quad (11)$$

$$b_x = -\oint \left(x \frac{\partial}{\partial s} - y \frac{\partial}{\partial n} \right) \frac{(1-\nu)}{2\mu} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) ds + \frac{1}{2\mu} \oint (\sigma_{xy} n_x + \sigma_{yy} n_y) ds \quad (12)$$

$$b_y = -\oint \left(x \frac{\partial}{\partial n} + y \frac{\partial}{\partial s} \right) \frac{(1-\nu)}{2\mu} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) ds - \frac{1}{2\mu} \oint (\sigma_{xx} n_x + \sigma_{yy} n_y) ds \quad (13)$$

Ας θεωρήσουμε τα εφαπτομενικά και κάθετα διανύσματα των κλειστών καμπυλών της εικ. 5:

$$\underline{n} = \left\{ \frac{dy}{ds}, -\frac{dx}{ds} \right\}^T, \quad \underline{s} = \left\{ \frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds} \right\}^T \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} ds = \frac{\partial}{\partial x} dy - \frac{\partial}{\partial y} dx, \quad \frac{\partial}{\partial s} ds = \frac{\partial}{\partial x} dx + \frac{\partial}{\partial y} dy \quad (15)$$

Τώρα ας θεωρήσουμε ένα ελαστικό σώμα στο οποίο επιτρέπεται μία θερμοκρασιακή κατανομή $\theta(x,y)$. Σε αυτή την περίπτωση, οι καταστατικές εξισώσεις γίνονται:

$$\begin{aligned} 2\mu\varepsilon_{xx} &= \sigma_{xx} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + \frac{(1+\nu)}{2\mu}\alpha\theta \\ 2\mu\varepsilon_{yy} &= \sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + \frac{(1+\nu)}{2\mu}\alpha\theta \end{aligned} \quad (16)$$

$$2\mu\varepsilon_{xy} = \sigma_{xy}$$

όπου α είναι ο συντελεστής θερμικής διαστολής.

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (16) στη συνθήκη συμβιβαστού (2), αποκτούμε:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -\frac{(1+\nu)}{(1-\nu)}\frac{\alpha}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\theta \quad (17)$$

Θεωρούμε μία αρμονική θερμοκρασιακή κατανομή

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\theta = 0 \quad (18)$$

Για τη γεωμετρικά όμοια περίπτωση ενός σώματος το οποίο περιέχει μόνο την ατέλεια, η σχέση (11) εξακολουθεί να ισχύει. Οι σχέσεις (12) και (13) μετατρέπονται στις (19) και (20):

$$b_x = -(1+\nu)\alpha\oint\left(y\frac{\partial\theta}{\partial n} - x\frac{\partial\theta}{\partial s}\right)ds \quad (19)$$

$$b_y = (1+\nu)\alpha\oint\left(y\frac{\partial\theta}{\partial s} + x\frac{\partial\theta}{\partial n}\right)ds \quad (20)$$

Η θερμοκρασιακή κατανομή πρέπει να τηρεί τη σχέση (18) για να αποφύγουμε τυχόν αποκλίσεις (disclinations).

Σαν ένα παράδειγμα θερμοκρασιακής κατανομής, επιλέγουμε τη $\theta(x, y)$ ως:

$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T & -0,5h \leq y \leq 0,5h & \quad x \leq 0 \\ \theta &= \Delta T \frac{y+1,5h}{h} & -1,5h \leq y \leq -0,5h & \quad x \leq 0 \end{aligned} \quad (21)$$

$$\theta = \Delta T \frac{1,5h-y}{h} \quad 0,5h \leq y \leq 1,5h \quad x \leq 0$$

$\theta=0$ οπουδήποτε αλλού

Η θερμοκρασιακή κατανομή που περιγράφεται από την (21) ικανοποιεί τη σχέση (18) μερικώς καθώς η 2^η παράγωγος δεν ορίζεται στο 0,5h και στο -0,5h (ασθενής λύση).

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (19) προκύπτει:

$$b_y = -2(1+\nu)\alpha\Delta Th \quad (22)$$

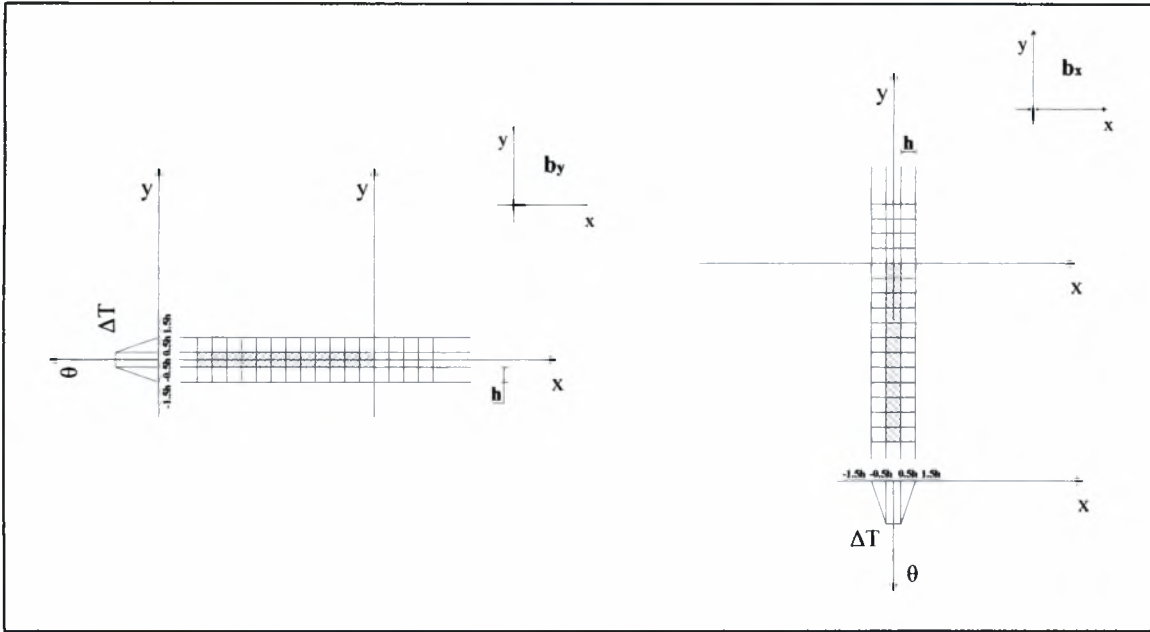
Με αντίστοιχο τρόπο αποκτούμε τη σχέση του b_x :

$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T & -0,5h \leq x \leq 0,5h & \quad y \leq 0 \\ \theta &= \Delta T \frac{x+1,5h}{h} & -1,5h \leq x \leq -0,5h & \quad y \leq 0 \end{aligned} \quad (23)$$

$$\theta = \Delta T \frac{1,5h-x}{h} \quad 0,5h \leq x \leq 1,5h \quad y \leq 0$$

$\theta=0$ οπουδήποτε αλλού

$$\text{οπότε } b_x = 2(1+\nu)\alpha\Delta Th \quad (24)$$



Εικόνα 7: Η εισαγωγή του θερμικού αναλόγου στα Πεπερασμένα Στοιχεία. Σε αυτή τη θερμοκρασιακή κατανομή, η θερμοκρασία δίνεται στα πεπερασμένα στοιχεία.

Τα αποτελέσματα των σχέσεων (22) και (24) που προέκυψαν από τη θερμοκρασιακή κατανομή της εικόνας 7 είναι αυτά που πρέπει να εισαχθούν σε κώδικα πεπερασμένων στοιχείων. Δηλαδή, διαλέγοντας μία κατάλληλη θερμοκρασιακή κατανομή όπως στις σχ. (21) και (23) μπορούμε να εισάγουμε μία ατέλεια και στη συνέχεια να λύσουμε το θερμοελαστικό πρόβλημα.

Εναλλακτικά, έχουμε τη δυνατότητα να εισάγουμε τη θερμοκρασία στους κόμβους των πεπερασμένων στοιχείων όπως φαίνεται στην εικόνα 8. Σε αυτή την περίπτωση θεωρούμε την εξής θερμοκρασιακή κατανομή:

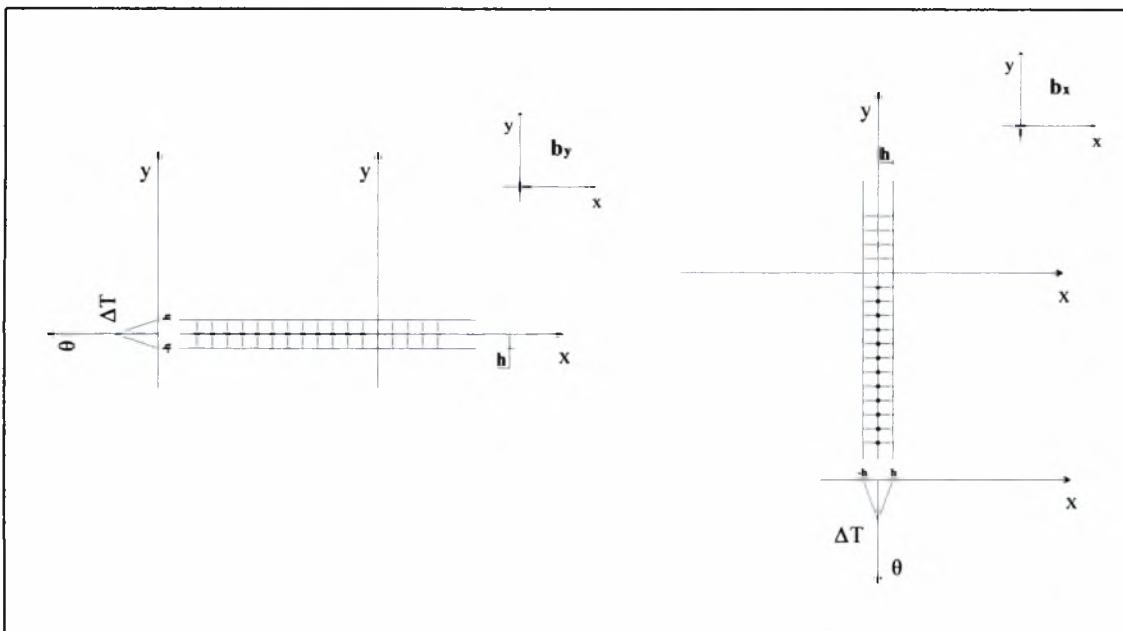
$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T & y=0 & & x \leq 0 \\ \theta &= \Delta T \frac{y+h}{h} & -h \leq y \leq 0 & & x \leq 0 \end{aligned} \tag{25}$$

$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T \frac{h-y}{h} & 0 \leq y \leq h & & x \leq 0 \\ \theta &= 0 & \text{οπουδήποτε αλλού} & & \\ \text{και προκύπτει } b_y &= -(1+\nu)\alpha\Delta Th \end{aligned} \tag{26}$$

Κατ' αντιστοιχία, για την άλλη διεύθυνση έχουμε:

$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T & x=0 & & y \leq 0 \\ \theta &= \Delta T \frac{x+h}{h} & -h \leq x \leq 0 & & y \leq 0 \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T \frac{h-x}{h} & 0 \leq x \leq h & & y \leq 0 \\ \theta &= 0 & \text{οπουδήποτε αλλού} & & \\ \text{και προκύπτει } b_x &= (1+\nu)\alpha\Delta Th \end{aligned} \tag{28}$$



Εικόνα 8: Η εισαγωγή του θερμικού αναλόγου στα Πεπερασμένα Στοιχεία. Σε αυτή τη θερμοκρασιακή κατανομή, η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους.

2.2. Το «θερμικό ανάλογο» για δισδιάστατες ατέλειες σε ανισότροπα υλικά

Στην προηγούμενη ενότητα περιγράφηκε η ανάπτυξη του θερμικού αναλόγου για την εισαγωγή διδιάστατων κρυσταλλικών ατελειών σε κώδικα πεπερασμένων στοιχείων μόνο για ισότροπα υλικά. Στη φύση, τα ισότροπα υλικά σπανίζουν ενώ και η πλειοψηφία των σύνθετων υλικών παρουσιάζουν ανισοτροπική συμπεριφορά. Η παραδοχή της ισοτροπίας για ένα υλικό είναι απλοποιητική και μας επιτρέπει να έρθουμε κοντά στην επίλυση του προβλήματος δίχως ακριβή αποτελέσματα, ιδιαίτερα σε θεωρητικό επίπεδο. Στόχος της εργασίας ήταν να επεκταθεί η μεθοδολογία και σε ανισότροπα υλικά ώστε να αποκτήσει γενικότητα, να είναι πρακτική για τη λύση των προβλημάτων και να δίνει γρήγορα και ακριβή αποτελέσματα.

Μία κατηγορία ανισότροπων υλικών είναι αυτά με κυβική κρυσταλλική συμμετρία (cubic crystal symmetry). Ας θεωρήσουμε ένα ανισότροπο θερμοελαστικό μέσο με κυβική κρυσταλλική συμμετρία. Οι ελαστικές σταθερές που απαιτούνται είναι τρεις: c_{11} , c_{12} και c_{44} . Ισοδύναμα μπορούμε να έχουμε σαν ελαστικές σταθερές; E , ν , μ . Οι καταστατικές εξισώσεις μεταξύ παραμορφώσεων και τάσεων στην επίπεδη παραμόρφωση είναι:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1+\nu}{E} \left[\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \right] + \alpha(1+\nu)\theta \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{1+\nu}{E} \left[\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \right] + \alpha(1+\nu)\theta \quad , \quad \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{xy} \end{aligned} \quad (29)$$

Με απουσία θερμοκρασιακής κατανομής $\theta(x,y)$, οι τάσεις σχετίζονται με τις παραμορφώσεις με τον ακόλουθο τρόπο:

$$\{ \sigma_{ij} \} = \{ c_{ijkl} \}_{6 \times 6} \{ \varepsilon_{kl} \} \quad (30)$$

(οι επαναλαμβανόμενοι λατινικοί δείκτες αθροίζονται από 1 έως 3).

Η αντιστροφή του μητρώου $\{c_{ijkl}\}_{6 \times 6}$ μας δίνει το μητρώο $\{s_{ijkl}\}_{6 \times 6}$ το οποίο ρυθμίζει τη σχέση παραμορφώσεων και τάσεων. Λαμβάνοντας υπόψιν ότι $\{c\}_{6 \times 6} \{s\}_{6 \times 6} = \{1\}$, έχουμε:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{12} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{13} & s_{23} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{14} & s_{24} & s_{34} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{15} & s_{25} & s_{35} & s_{45} & s_{55} & s_{56} \\ s_{16} & s_{26} & s_{36} & s_{46} & s_{56} & s_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} \quad (31)$$

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, για υλικά με κυβική κρυσταλλική συμμετρία, είναι απαραίτητες μόνο οι τρεις ελαστικές σταθερές c_{11} , c_{12} , c_{44} . Χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες σταθερές s_{ij} , από την (31) έχουμε:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= s_{11}'\sigma_{11} + s_{12}'\sigma_{22} \\ \varepsilon_{22} &= s_{12}'\sigma_{11} \\ 2\varepsilon_{23} &= s_{44}'\sigma_{23} \end{aligned} \quad (32)$$

Επιπλέον, για τις s_{ij} ισχύει (Hirth and Lothe, 1982):

$$\begin{aligned} s_{11}' &= \frac{c_{11} + c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} \\ s_{12}' &= \frac{-c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} \\ s_{44}' &= \frac{1}{c_{44}} \end{aligned} \quad (33)$$

Από την εξίσωση των σχέσεων (29) και (32) με την προσθήκη και της (33) αποκτούμε:

$$\mu = c_{44}, \quad \nu = \frac{c_{12}}{c_{11} + 2c_{12}}, \quad E = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 3c_{12})}{c_{11} + 2c_{12}} \quad (34)$$

$H = 2c_{44} + c_{12} - c_{11}$ ο συντελεστής ανισοτροπίας

και $A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}$ ο λόγος ανισοτροπίας

Στο Παράρτημα Α έχουν υπολογιστεί τα παραπάνω μεγέθη για αρκετά ανισότροπα υλικά. Απόσπασμα του πίνακα του παραρτήματος ακολουθεί παρακάτω.

Πίνακας 1: Ελαστικές σταθερές για τα υλικά Cr, Cu και W.

Crystal	c_{11} (10^{10} Pa)	c_{12} (10^{10} Pa)	c_{44} (10^{10} Pa)	H (10^{10} Pa)	A	μ (10^{10} Pa)	E (10^{10} Pa)	ν
Cr	35.00	5.78	10.10	-9.02	0.69	10.10	32.85	0.124
Cu	16.84	12.14	7.54	10.38	3.21	7.54	6.09	0.295
W	52.10	20.10	16.00	0.00	1.00	16.00	38.97	0.218

Από τις εξισώσεις του Michell (8) και (9) και τη συνέχεια των $x\sigma_{xx}$, $y\sigma_{xy}$ και $y\sigma_{xx}$, $x\sigma_{xy}$ αποκτούμε:

$$b_x = \alpha(1+\nu) \oint \left(x \frac{\partial \theta}{\partial s} - y \frac{\partial \theta}{\partial n} \right) ds + \frac{(1-\nu^2)}{E} \oint \left(x \frac{\partial (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial s} - y \frac{\partial (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial n} \right) ds$$

$$- \frac{(1+\nu)}{E} \oint (\sigma_{xy} n_x + \sigma_{yy} n_y) ds + \left(\frac{1}{\mu} - \frac{2(1+\nu)}{E} \right) \oint \sigma_{xy} dy \quad (35)$$

$$b_y = \alpha(1+\nu) \oint \left(x \frac{\partial \theta}{\partial n} + y \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) ds + \frac{(1-\nu^2)}{E} \oint \left(x \frac{\partial (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial n} + y \frac{\partial (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial s} \right) ds$$

$$+ \frac{(1+\nu)}{E} \oint (\sigma_{xx} n_x + \sigma_{xy} n_y) ds + \left(\frac{2(1+\nu)}{E} - \frac{1}{\mu} \right) \oint \sigma_{xy} dx \quad (36)$$

Από την τοπική συνθήκη συμβιβαστού (2), προκύπτει ότι:

$$\frac{(1-\nu^2)}{E} \left[\frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 \Phi}{\partial y^4} + 2 \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^2 \partial y^2} \right] + \left(\frac{1}{\mu} - \frac{2(1+\nu)}{E} \right) \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^2 \partial y^2} = -\alpha(1+\nu) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \quad (37)$$

Επιπλέον, όλες οι τάσεις είναι συνεχείς έτσι ώστε:

$$\oint \sigma_{xy} dy = 0, \quad \oint \sigma_{xy} dx = 0, \quad \nabla^2 \Phi = - \frac{\alpha(1+\nu)\theta}{\left(\frac{1-\nu^2}{E} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \frac{2(1+\nu)}{E} \right) \right)} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} \quad (38)$$

Από την συνολική ισορροπία στις κλειστές καμπύλες (εικ. 6), έχουμε:

$$\oint (\sigma_{xy} n_x + \sigma_{yy} n_y) ds = 0, \quad \oint (\sigma_{xx} n_x + \sigma_{xy} n_y) ds = 0 \quad (39)$$

Ας θεωρήσουμε μία αρμονική θερμοκρασιακή κατανομή όπως στα προηγούμενα:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \theta = 0 \quad (18)$$

Η τοπική συνθήκη συμβιβαστού (2) εξακολουθεί να ισχύει όπως και η σχέση (7). Οι σχέσεις (35) και (36) παίρνουν τη μορφή των (19) και (20):

$$b_x = -(1+\nu)a \oint \left(y \frac{\partial \theta}{\partial n} - x \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) ds \quad (19)$$

$$b_y = (1+\nu)a \oint \left(y \frac{\partial \theta}{\partial s} + x \frac{\partial \theta}{\partial n} \right) ds \quad (20)$$

Στη συνέχεια, επιλέγουμε μία κατάλληλη θερμοκρασιακή κατανομή όπως περιγράφηκε παραπάνω και φτάνουμε στις σχέσεις (22) και (24) αν η θερμοκρασία δίνεται στα πεπερασμένα στοιχεία ή στις σχέσεις (26) και (28) αν η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους. Παρατηρούμε, δηλαδή, ότι τόσο στα ισότροπα όσο και στα ανισότροπα υλικά με κυβική κρυσταλλική συμμετρία οι ατέλειες μπορεί να περιγραφούν με τον ίδιο τρόπο. Επομένως, η μεθοδολογία γίνεται γενική ανεξαρτήτως του υλικού.

2.3. Κατανομή τάσεων γύρω από μία ατέλεια σε ισότροπα υλικά

Η μεθοδολογία που αναπτύσσεται στα πλαίσια της παρούσας εργασίας έχει ως στόχο τον προσδιορισμό της αντοχής των υλικών σε νάνο- και μικρο-κλίμακες. Οι κρυσταλλικές ατέλειες δημιουργούν αυτεντατικά πεδία στα υλικά τα οποία στη γενική περίπτωση είναι αυτοίσορροπούμενα. Ένα μακροσκοπικό ανάλογο των τασικών πεδίων των ατελειών είναι οι προεντεταμένοι φορείς από οπλισμένο σκυρόδεμα. Εκεί τα αντιφορτία που ασκούνται στο χάλυβα προέντασης εξισορροπούνται με αποτέλεσμα να μη γίνονται αντιληπτά στο εξωτερικό της κατασκευής.

Το τασικό πεδίο γύρω από μία ατέλεια στο άπειρο (δηλαδή δε βρίσκεται κοντά σε κάποιο σύνορο) μπορεί να περιγραφεί από την παρακάτω συνάρτηση του Airy:

$$\Phi = -\frac{\mu b y}{4\pi(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2) \quad (40)$$

Γνωρίζοντας τη σχέση μεταξύ των τάσεων σ_{ij} και της συνάρτησης του Airy, σχ. (3), μπορούμε να υπολογίσουμε αναλυτικά τις τάσεις σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{yy} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{xy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \end{aligned} \quad (41)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$$

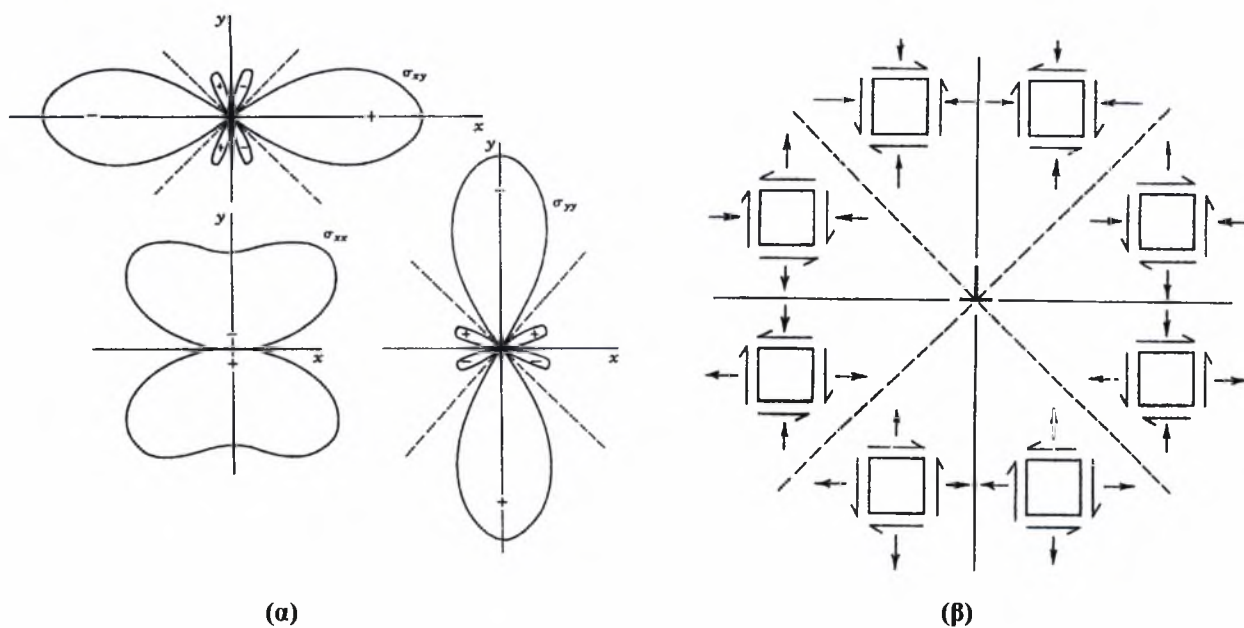
Αντίστοιχα, σε πολικές συντεταγμένες οι τάσεις παίρνουν τη μορφή:

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} &= -\frac{\mu b \sin \theta}{2\pi(1-\nu)r} \\ \sigma_{r\theta} &= \frac{\mu b \cos \theta}{2\pi(1-\nu)r} \end{aligned} \quad (42)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}) = -\frac{\mu b \nu \sin \theta}{\pi(1-\nu)r}$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{\theta z} = 0$$

Σχηματικά, τα τασικά πεδία που παράγονται από τις σχέσεις αυτές φαίνονται στις παρακάτω εικόνες (Hirth and Lothe, 1982).



Εικόνα 9: α) Οι καμπύλες των τάσεων γύρω από μία κρυσταλλική ατέλεια, β) Σχηματική αναπαράσταση του τασικού πεδίου γύρω από μία κρυσταλλική ατέλεια.

Αξίζει να προσεχθεί ότι στο πάνω μέρος της ατέλειας στην εικ. 9β αναπτύσσεται θλίψη και στο κάτω μέρος εφελευσμός. Με τον τρόπο αυτό, οι τάσεις εξισορροπούνται οπότε η ατέλεια μένει ακίνητη. Επιπλέον, οι αναλυτικές εκφράσεις των τάσεων μας δίνουν την ένταση μακριά από το κέντρο της ατέλειας καθώς για $x=y=0$ οι τάσεις απειρίζονται. Επομένως, για το κέντρο (core) της ατέλειας δεν έχουμε ακριβή τιμή των τάσεων, απλά γνωρίζουμε ότι τείνουν στο άπειρο με ρυθμό $1/r$.

2.4. Κατανομή τάσεων γύρω από μία ατέλεια σε ανισότροπα υλικά

Οι αυτεντατικές καταστάσεις που περιγράφηκαν παραπάνω υπάρχουν και στις ατέλειες των ανισότροπων υλικών. Η ανισοτροπία εισάγει μεγαλύτερες δυσκολίες στην επίλυση ενός προβλήματος. Απλοποιητικά, μπορούμε να υπολογίσουμε κάποιους μέσους όρους των ελαστικών σταθερών του ανισότροπου υλικού (π.χ. μέσος όρος Voigt ή Reuss) και στη συνέχεια να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα έχοντας ένα νέο υλικό, «ισότροπο». Αναλυτικές λύσεις για ανισότροπα υλικά σπανίζουν. Ωστόσο, για μία ατέλεια σε άπειρο χώρο οι εξισώσεις των τάσεων έχουν υπολογιστεί (Eshelby et al, 1955):

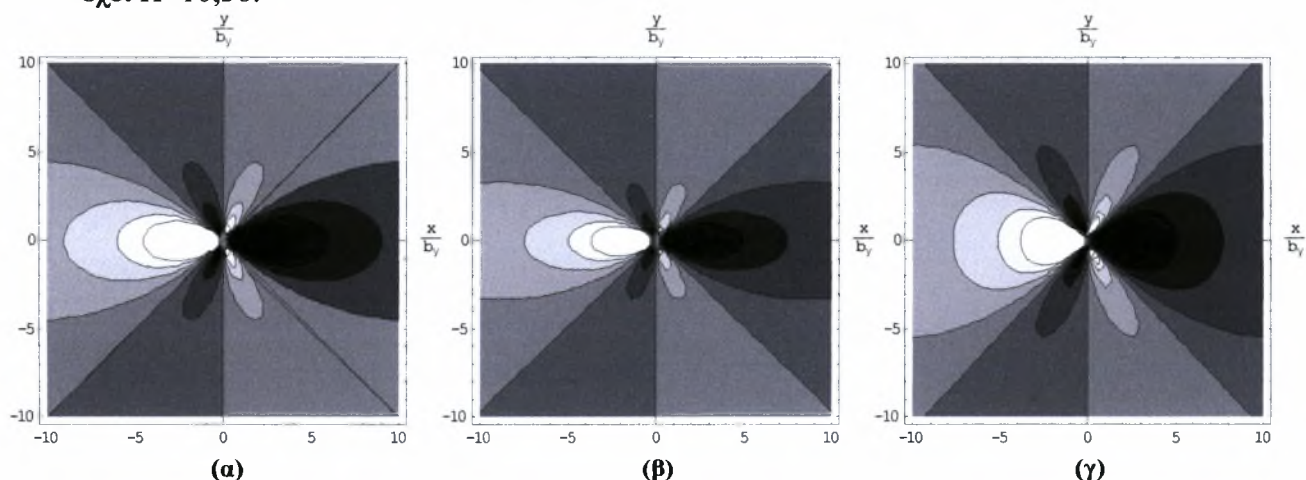
$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} &= \frac{Mb_x}{2\pi\rho^4 c_{22}'} \left\{ \left[(\bar{c}_{11}' - c_{12}') (\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}') - \bar{c}_{11}' c_{66}' \right] x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'^2 c_{66}'}{c_{22}'} y^3 \right\} + \frac{Mb_y c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(\frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} xy^2 - x^3 \right) \\
 \sigma_{yy} &= \frac{Mb_x c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^3 \right) - \frac{Mb_y}{2\pi\rho^4 \bar{c}_{11}'} \left\{ \left[(\bar{c}_{11}' - c_{12}') (\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}') - \bar{c}_{11}' c_{66}' \right] xy^2 + c_{22}' c_{66}' x^3 \right\} \\
 \sigma_{xy} &= \frac{Mb_x c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^3 + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} xy^2 \right) + \frac{Mb_y c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^3 \right)
 \end{aligned} \tag{43}$$

$$\text{όπου } M = (\bar{c}_{11} + c_{12}) \left[\frac{\bar{c}_{11} - c_{12}}{c_{22}c_{66}(\bar{c}_{11} + c_{12} + 2c_{66})} \right]^{1/2}$$

$$\rho^4 = \left(x^2 + \frac{\bar{c}_{11}}{c_{22}} y^2 \right)^2 + \frac{(\bar{c}_{11} + c_{12})(\bar{c}_{11} - c_{12} - 2c_{66})}{c_{22}c_{66}} x^2 y^2 \quad (44)$$

$$\bar{c}_{11} = (c_{11}c_{22})^{1/2}, \quad c_{11} = c_{11}, \quad c_{12} = c_{12}, \quad c_{66} = c_{55} = c_{44}, \quad c_{22} = c_{11} + \frac{1}{2}H$$

Όπως εύκολα γίνεται αντιληπτό, η υπολογιστική δυσκολία είναι μεγάλη ακόμη και για αυτή την απλή περίπτωση. Οι καμπύλες των τάσεων δεν έχουν παρασταθεί γραφικά στη βιβλιογραφία. Μέσω των παραπάνω σχέσεων, υπολογίζουμε και παριστάνουμε γραφικά τις τάσεις γύρω από μία ατέλεια για όποιο ανισότροπο υλικό επιθυμούμε αρκεί να γνωρίζουμε τις ελαστικές του σταθερές και τη γωνία της ατέλειας. Στην εικόνα 10, παρουσιάζονται μερικά παραδείγματα τασικών καμπυλών. Ενδεικτικά, παρουσιάζονται μόνο οι τάσεις σ_{xx} για $b_y=1$ (δηλαδή για μία ατέλεια κατά τον άξονα y) για τα υλικά W, Cr και Cu. Οι τασικές καμπύλες των τριών υλικών διαφέρουν και ως προς το σχήμα τους και ως προς την ένταση. Παρατηρούμε ότι στον κρύσταλλο Cu, οι λοβοί των τάσεων είναι πιο πεπλατυσμένοι ενώ στον κρύσταλλο Cr πιο επιμήκεις. Η ποικιλία των σχημάτων οφείλεται στις ελαστικές σταθερές του κάθε υλικού και στο συντελεστή ανισοτροπίας H αυτών. Από τα παρακάτω υλικά το W έχει $H=0$ (10^{10} Pa) και συμπεριφέρεται σαν ισότροπο ενώ το Cr έχει $H=-9,02$ και το Cu έχει $H=10,38$.



Εικόνα 10: Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_y . Το διάνυσμα Burgers είναι $b=(0, b_y)$. Το υλικό και το εύρος των ισοτασικών είναι ανά περίπτωση: α) W και $(-1,0, 1,0)$ Pa/m, β) Cr και $(-0,8, 0,8)$ Pa/m και γ) Cu και $(-0,37, 0,37)$ Pa/m.

Στο Παράρτημα Α υπάρχουν για κάθε υλικό οι τάσεις σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} και σ_H τόσο για $b_y=1$ όσο και για $b_x=1$. Φυσικά, μέσω των σχέσεων (43) και (44) μπορεί κανείς να υπολογίσει με επαλληλία τα πεδία των τάσεων για τυχαία γωνία της ατέλειας (π.χ. για γωνία 45° θέτουμε $b_x=b_y=1$). Η ένταση των τάσεων διαφοροποιείται ανάλογα με τη διεύθυνση της ατέλειας καθώς τα υλικά είναι ανισότροπα. Οι τάσεις έχουν κανονικοποιηθεί με το λόγο $4\pi(1-\nu^2)/E$ και ο χώρος με το $|b|$. Η σκίαση των διαγραμμάτων γίνεται από το μαύρο προς το άσπρο όσο αυξάνουν οι τιμές (άσπρο: θετικές τιμές). Η μέγιστη και ελάχιστη ισοπαχής δίνονται σε κάθε περίπτωση.

Η σχηματική παράσταση των τάσεων λειτουργεί σαν οδηγός ώστε να μπορεί κάποιος να ελέγξει αριθμητικά και ποιοτικά τα αποτελέσματα που παίρνει από τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων.

Το υδροστατικό μέρος των τάσεων δίνεται από τη σχέση $\sigma_H = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} = \frac{(1+\nu)(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{3}$. Τα υδροστατικά πεδία είναι πολύ σημαντικά.

Στην τεχνολογία της μικροηλεκτρονικής (chips) ενδιαφέρουν οι ζώνες με έντονη εφελκυστική υδροστατική πίεση διότι οι περιοχές αυτές είναι επιδεκτικές στη συλλογή μικροκενών ή άλλων διασκορπισμένων ατόμων αλλά και ατελειών. Οι περιοχές αυτές αποκαλούνται ατμόσφαιρες του Cottrell. Παρατηρούμε πως στα ισότροπα υλικά (W) οι ισοπαχείς των υδροστατικών τάσεων είναι τέλειοι κύκλοι ενώ γενικά παρουσιάζουν διάφορα σχήματα.

2.5. Η «κινούσα» δύναμη των ατελειών, δύναμη Peach-Koehler

Όπως είδαμε στα παραπάνω οι ατέλειες δημιουργούν αυτεντατικά πεδία τάσεων τα οποία είναι απολύτως συμμετρικά και αυτοϊσορροπούμενα. Αυτό σημαίνει πως οι ατέλειες μένουν αδιατάρακτες. Κάτω από ορισμένες συνθήκες οι ατέλειες είναι δυνατόν να κινηθούν, να συσσωρευθούν και να οδηγήσουν σε αστοχία. Για να συμβεί κάτι τέτοιο πρέπει να διαταραχθεί η συμμετρία των τάσεών τους με κάποιο τρόπο. Αυτό μπορεί να γίνει για παράδειγμα αν μία ατέλεια έρθει κοντά σε μία άλλη, αν υπάρχει κάποιο ξένο άτομο στο υλικό το οποίο μπορεί να έλκει ή να απωθεί την ατέλεια ή αν η ατέλεια βρίσκεται κοντά σε κάποια ελεύθερη επιφάνεια (σύνορο). Σε αυτή την περίπτωση τα πεδία των τάσεων δεν είναι συμμετρικά και έχουν σαν αποτέλεσμα την εμφάνιση μίας κατευθυντήριας δύναμης (configurational force) για την ατέλεια, γνωστή ως δύναμη Peach-Koehler (Peach and Koehler, 1950). Η εξίσωση της δύναμης Peach-Koehler μπορεί να γραφεί εν συντομία ως εξής:

$$F_k = -\varepsilon_{ijk} \xi_i \sigma_{jl} b_l \quad (45)$$

Αναλυτικά η δύναμη Peach-Koehler μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\frac{\mathbf{F}}{L} = G \times \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} i & j & k \\ G_x & G_y & G_z \\ \xi_x & \xi_y & \xi_z \end{pmatrix} = (G_y \xi_z - G_z \xi_y) \mathbf{i} + (G_z \xi_x - G_x \xi_z) \mathbf{j} + (G_x \xi_y - G_y \xi_x) \mathbf{k}$$

$$G_x = \sigma_{xx} b_x + \sigma_{xy} b_y + \sigma_{xz} b_z \quad (46)$$

$$G_y = \sigma_{yx} b_x + \sigma_{yy} b_y + \sigma_{yz} b_z$$

$$G_z = \sigma_{zx} b_x + \sigma_{zy} b_y + \sigma_{zz} b_z$$

όπου ξ είναι η διεύθυνση της ατέλειας.

Στο δισδιάστατο χώρο, για $\xi_x = \xi_y = 0$ και $\xi_z = 1$, οι παραπάνω σχέσεις παίρνουν τη μορφή:

$$\frac{\mathbf{F}}{L} = G \times \boldsymbol{\xi} = (G_y \xi_z) \mathbf{i} + (-G_x \xi_z) \mathbf{j}$$

$$G_x = \sigma_{xx} b_x + \sigma_{xy} b_y \quad (47)$$

$$G_y = \sigma_{yx} b_x + \sigma_{yy} b_y$$

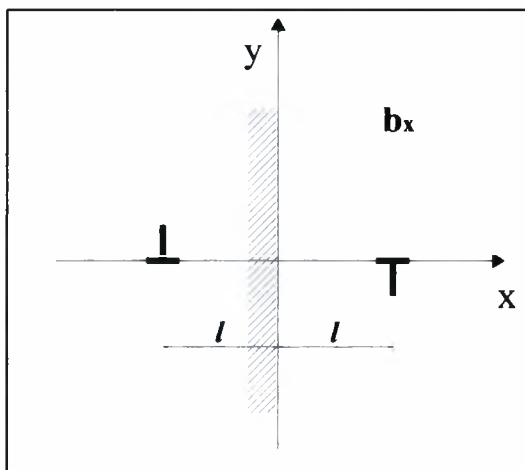
Σε όρους ενέργειας, η δύναμη Peach-Koehler μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$F = -\frac{\Delta W}{\Delta s} = -\frac{W' - W}{\Delta s} \quad (48)$$

όπου ΔW η δαπανώμενη ενέργεια για μετακίνηση της ατέλειας κατά Δs (ρυθμός έκλυσης ενέργειας).

Παράδειγμα υπολογισμού

Ας θεωρήσουμε μία κρυσταλλική ατέλεια b_x η οποία βρίσκεται κοντά σε μία ελεύθερη επιφάνεια (εικόνα 11).



Εικόνα 11: Κρυσταλλική ατέλεια κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια (αριστερά) και η «εικόνα» της.

Επιπλέον, θεωρούμε και την «εικόνα» (image) της ατέλειας σε απόσταση l από το σύνορο (δεξιά ατέλεια). Οι τάσεις της ατέλειας περιγράφονται από τη σχέση (41) ενώ για την εικόνα της ισχύουν οι ίδιες σχέσεις με αλλαγμένα τα πρόσημα αφού έχει αντίθετο προσανατολισμό. Για να φτάσουμε στις συνολικές εκφράσεις των τάσεων για την ατέλεια κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια αρκεί η επαλληλία των τάσεων της ατέλειας, της «εικόνας» της και των τάσεων που προκύπτουν από τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{2\mu b l x y}{\pi(1-\nu)r^6} \left[3(l-x)^2 - y^2 \right] \\ \sigma_{yy} &= \frac{\mu b l}{\pi(1-\nu)r^6} \left[4(l-x)^3 y + 6(l-x)^2 x y + 4(l-x) y^3 - 2x y^3 \right] \\ \sigma_{xy} &= \frac{-\mu b l}{\pi(1-\nu)r^6} \left[(l-x)^4 y + 2x(l-x)^3 - 6x y^2 (l-x) - y^4 \right] \\ \sigma_{zz} &= \frac{4\mu b l \nu}{\pi(1-\nu)r^6} \left[(l-x)^3 y + (l-x) y^3 \right]\end{aligned}\quad (49)$$

Η δύναμη Peach-Koehler δίνεται μόνο από τις τάσεις της «εικόνας» της ατέλειας. Το διάνυσμα Burgers στην περίπτωση αυτή είναι \mathbf{b} (1, 0, 0) και η διεύθυνση της ατέλειας ξ (0, 0, 1). Από τις σχέσεις (47), έχουμε:

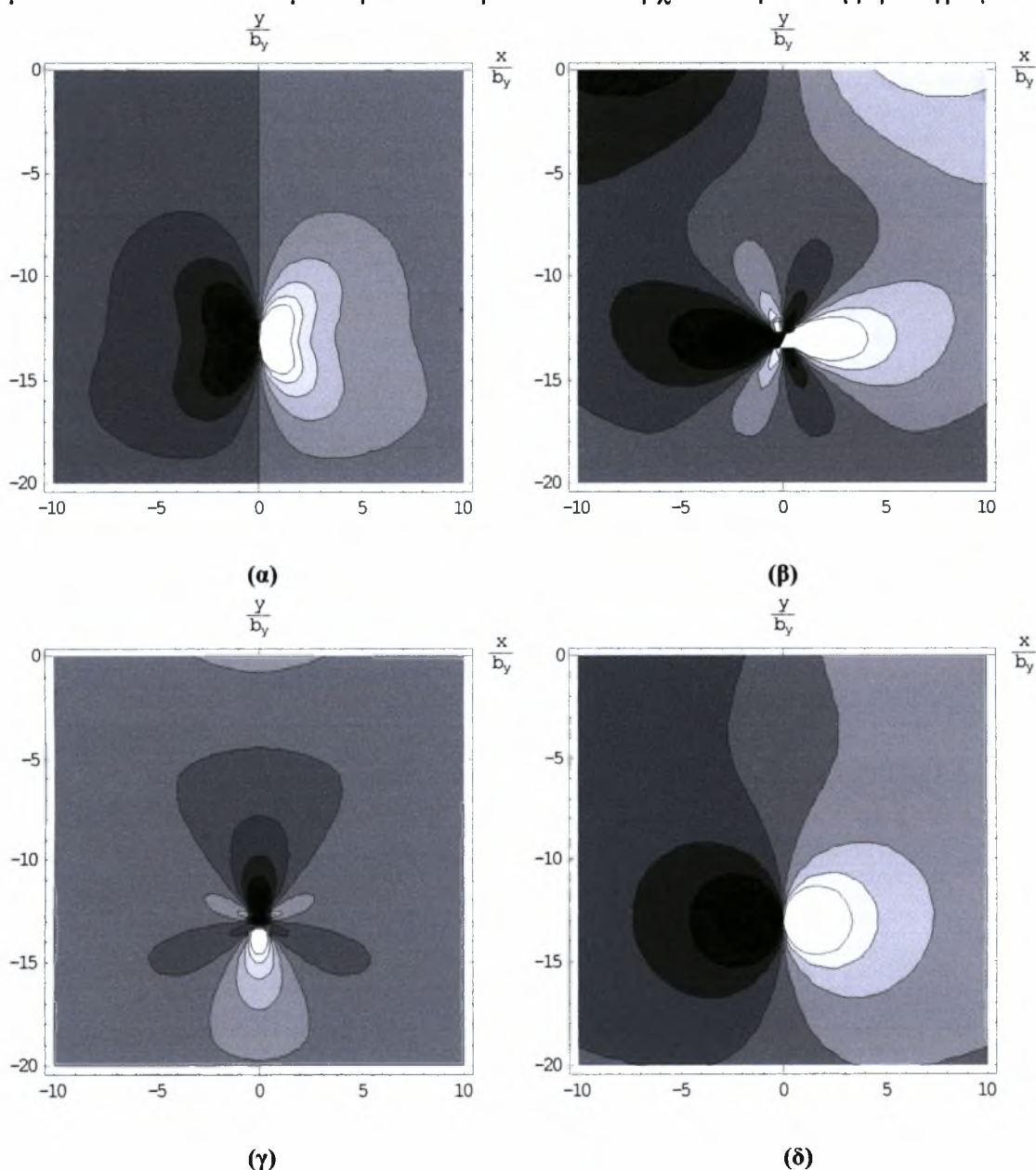
$$\begin{aligned}G_x = \sigma_{xx} b_x &= -\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ G_y = \sigma_{yx} b_x &= \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}\end{aligned}\quad (50)$$

Κρατώντας τον ένα «λοβό» των τάσεων και θέτοντας $x=-l$ και $y=0$ παίρνουμε την παρακάτω τιμή τη δύναμη ανά μονάδα πλάτους:

$$\frac{1}{2} \frac{\mathbf{F}}{L} = \frac{1}{2} \left[(G_y \xi_z) \mathbf{i} + (-G_x \xi_z) \mathbf{j} \right] = \left[-\frac{b_x^2 (x^3 + 3x^2 y - xy^2 + y^3) \mu}{4\pi (x^2 + y^2)^2 (\nu - 1)}, 0 \right] = \left[\frac{\mu b_x^2}{4\pi (1 - \nu) l}, 0 \right]$$

δηλαδή $\frac{F_x}{L} = \frac{\mu b_x^2}{4\pi (1 - \nu) l}$ και $F_y = 0$ (51)

Οι συνολικές εκφράσεις των τάσεων έχουν μία αρκετά σύνθετη μορφή. Ωστόσο, επιχειρήθηκε η σχηματική τους αναπαράσταση ώστε να συγκριθεί το αποτέλεσμα με αυτό που θα δώσουν τα πεπερασμένα στοιχεία. Τα πεδία των τάσεων φαίνονται στις παρακάτω εικόνες για μία ατέλεια b_y η οποία βρίσκεται σε απόσταση $l=13b_y$ από την ελεύθερη επιφάνεια. Αξίζει να σημειωθεί ότι οι παραπάνω σχέσεις είναι για ισότροπα μόνον υλικά. Αποτελέσματα για ανισότροπα δεν υπάρχουν στη διεθνή βιβλιογραφία.



Εικόνα 12: Τα πεδία των τάσεων για μία ατέλεια b_y πλησίον μίας ελεύθερης επιφάνειας. α) σ_{xx}/b_y , β) σ_{yy}/b_y , γ) σ_{xy}/b_y και δ) σ_H/b_y .

3.1. Εισαγωγή στα Πεπερασμένα Στοιχεία

Η ανάπτυξη του θερμικού αναλόγου που περιγράφηκε στις ενότητες 2.1 και 2.2 είχε ως στόχο την εισαγωγή των ατελειών σε κώδικα πεπερασμένων στοιχείων και τον μετέπειτα υπολογισμό των τάσεων, παραμορφώσεων και των δυνάμεων που πιθανόν να δρουν στις ατέλειες αυτές. Η εισαγωγή των ατελειών γίνεται δίνοντας στο πρόγραμμα μία κατάλληλη θερμοκρασιακή κατανομή. Η θερμοκρασία μπορεί να δοθεί είτε στα πεπερασμένα στοιχεία από τις σχέσεις (22) και (24) είτε στους κόμβους από τις σχέσεις (26) και (28). Υποθέτοντας γραμμική θερμοελαστική απόκριση και δίνοντας τη θερμοκρασία στα πεπερασμένα στοιχεία, έχουμε:

$$\Delta T = -\frac{b_y}{2(1+\nu)\alpha_y h}, \quad a_y = a, \quad a_x = 0, \quad a_z = 0 \quad (52)$$

ή/και

$$\Delta T = \frac{b_x}{2(1+\nu)\alpha_x h}, \quad a_x = a, \quad a_y = 0, \quad a_z = 0 \quad (53)$$

Αν η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους, οι σχέσεις αποκτούν την παρακάτω μορφή:

$$\Delta T = -\frac{b_y}{(1+\nu)\alpha_y h}, \quad a_y = a, \quad a_x = 0, \quad a_z = 0 \quad (54)$$

ή/και

$$\Delta T = \frac{b_x}{(1+\nu)\alpha_x h}, \quad a_x = a, \quad a_y = 0, \quad a_z = 0 \quad (55)$$

Με αυτό τον τρόπο μία ατέλεια στο επίπεδο με συγκεκριμένου μεγέθους διάνυσμα Burgers (b_x, b_y) έχει εισαχθεί στα πεπερασμένα στοιχεία μέσω μίας θερμοκρασιακής κατανομής. Πρέπει να σημειωθεί ότι οι συντελεστές θερμικής διαστολής α_x, α_y ($\alpha_z = 0$ σε όλες τις περιπτώσεις) δεν είναι οι πραγματικοί αλλά παίρνουν κατάλληλες τιμές ώστε να διευκολύνουν τους υπολογισμούς. Στην πραγματικότητα δεν υπάρχει κάποιο θερμοκρασιακό πεδίο στο πρόβλημα αλλά το χρησιμοποιούμε για να γίνει δυνατή η εισαγωγή των ατελειών. Το μέγεθος των ατελειών το γνωρίζουμε από την κρυσταλλική δομή του υλικού ενώ ο λόγος του Poisson ν προσδιορίζεται από τη σχέση (34) και δίνεται στο παράρτημα Α.

3.2. Προσδιορισμός τάσεων για ατέλειες σε ισότροπα υλικά

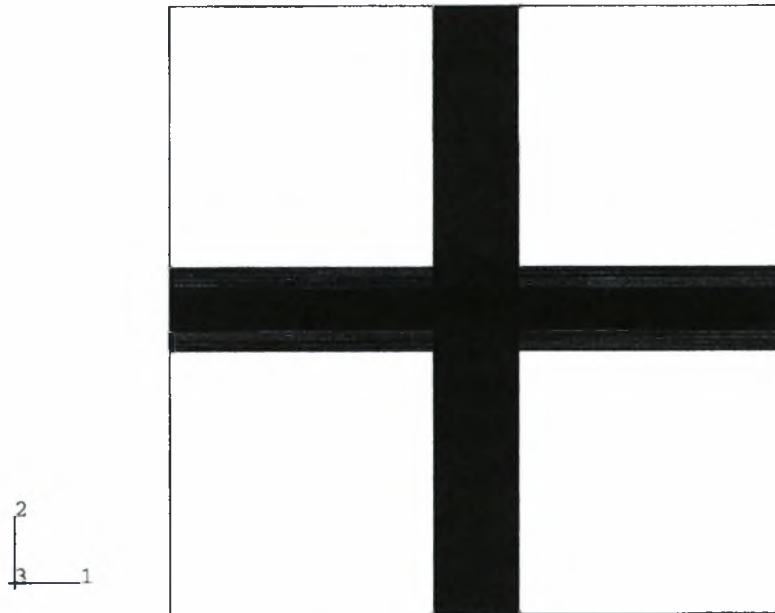
Μετά την ολοκλήρωση του θεωρητικού μοντέλου ακολουθεί ο έλεγχος του με την εισαγωγή του προβλήματος σε κώδικα πεπερασμένων στοιχείων. Αρχικά πρέπει να διασφαλιστεί ότι η μεθοδολογία δίνει σωστά αποτελέσματα και στη συνέχεια να γίνει χρήση τις σε διάφορες εφαρμογές. Το πιο απλό παράδειγμα που μπορεί να ελέγξει κανείς είναι μία μοναχική ατέλεια σε άπειρο, ισότροπο υλικό.

Ο κώδικας πεπερασμένων στοιχείων που χρησιμοποιούμε είναι το λογισμικό ABAQUS. Ο κάρναβος που χρησιμοποιούμε είναι περίπου 10.000 ισοπαραμετρικών τετρακομβικών επιφανειακών πεπερασμένων στοιχείων όπως φαίνεται στις εικόνες 13α και 13β. Το εξωτερικό σύνορο είναι 150 φορές το διάνυσμα Burgers σε όλες τις διευθύνσεις για να γίνει δυνατή η προσομοίωση των συνθηκών στο άπειρο,

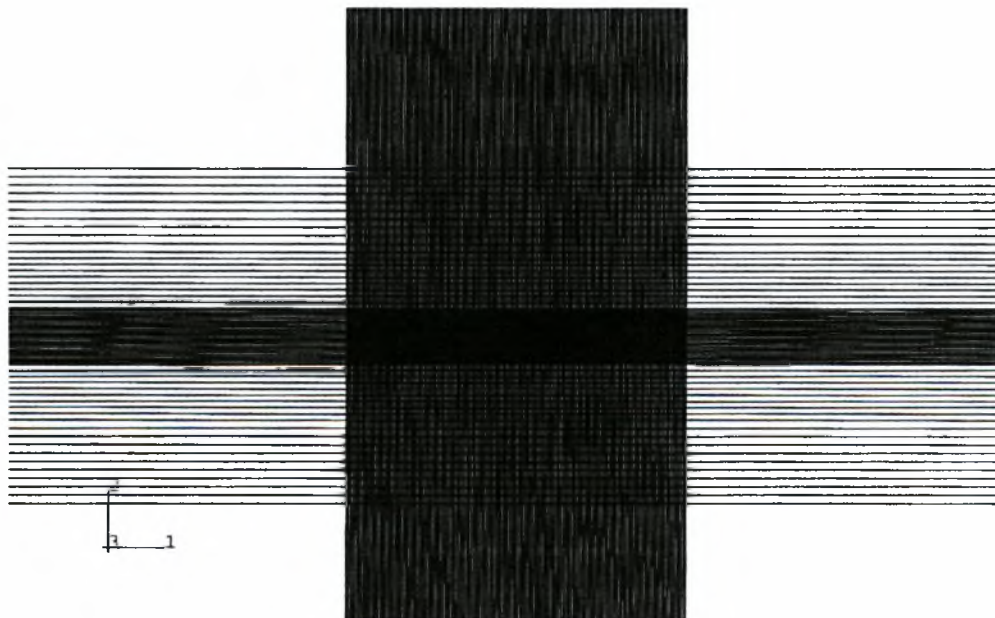
$$\sigma_{ij} \rightarrow O\left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \text{ όσο } \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty. \text{ Επιπλέον, να σημειωθεί ότι δε δόθηκε}$$

ιδιαιτέρη βαρύτητα στη βελτιστοποίηση του καννάβου καθώς δεν είναι αυτός ο

στόχος της εργασίας. Η βελτιστοποίηση μπορεί να γίνει σε άλλη χρονική στιγμή ανάλογα με την εκάστοτε εφαρμογή και την επιθυμητή ακρίβεια. Στο απομακρυσμένο σύνορο (farfield), οι τάσεις είναι μηδέν και οι μόνες άλλες συνοριακές συνθήκες που θέτονται εξασφαλίζουν απλά την ισοστατική στήριξη του μοντέλου.



(α)

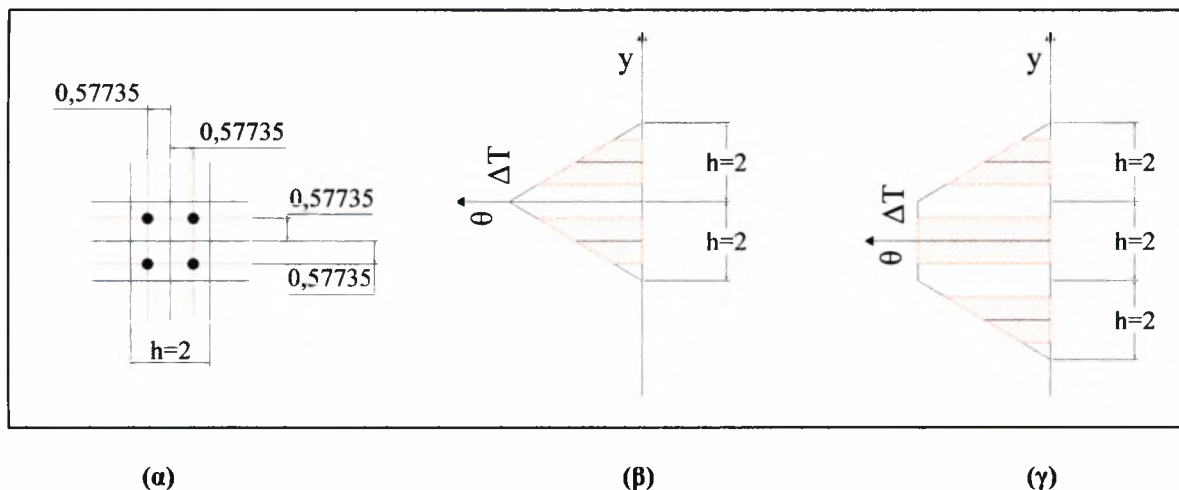


(β)

Εικόνα 13: α) Γενική άποψη του καννάβου που χρησιμοποιήθηκε, β) Μία πιο κοντινή εικόνα του καννάβου.

Στη συνέχεια επιλέγουμε τον προσανατολισμό και το μέγεθος του διανύσματος Burgers. Επιλέγουμε το διάνυσμα $\mathbf{b}=(0, b_y)$. Όσον αφορά το μέγεθος, αυτό μπορεί να συσχετιστεί με το πλάτος του πεπερασμένου στοιχείου h . Η συσχέτιση αυτή απλοποιεί τον υπολογισμό του ΔT . Για παράδειγμα, μπορούμε να επιλέξουμε $b_y=h$, $b_y=2h$ ή και $b_y=4h$ κ.ό.κ. Όσο μεγαλύτερο γίνεται το b_y , τόσο βελτιώνεται η ανάλυση των παραγόμενων τάσεων. Το καλύτερο αποτέλεσμα δίνεται για $b_y=4h$, ανάλυση η οποία οδηγεί σε αλληλοεπικάλυψη (interpenetration) των γειτονικών πεπερασμένων στοιχείων στην παραμορφωμένη κατάσταση. Αυτό είναι αναμενόμενο λόγω της τασικής ιδιομορφίας ($1/r$) στο κέντρο της ατέλειας.

Ένα ακόμη σημείο που πρέπει να προσεχθεί είναι ότι η αριθμητική ολοκλήρωση στα πεπερασμένα στοιχεία γίνεται στα λεγόμενα σημεία Gauss. Για να είναι ακριβής ο υπολογισμός των σχέσεων (19) και (20) πρέπει να προσεχθούν τα σημεία ολοκλήρωσης ανάλογα με τον τύπο του στοιχείου. Για τετρακομβικά επιφανειακά στοιχεία, τα σημεία ολοκλήρωσης βρίσκονται σε απόσταση 0,57735 εκατέρωθεν του μέσου του στοιχείου πλάτους $h=2$. Επομένως, για να μη «θερμαίνεται» μικρότερο τμήμα από το επιθυμητό και παίρνουμε λανθασμένα αποτελέσματα, πρέπει να πολλαπλασιάσουμε τις θερμοκρασίες ΔT των σχέσεων (52), (53), (54) και (55) με το λόγο $1/0,57735$. Με αυτό τον τρόπο, τα σημεία ολοκλήρωσης δέχονται τη σωστή θερμοκρασία. Στην εικόνα 14 φαίνεται σχηματικά το πλάτος ολοκλήρωσης (κόκκινη διαγράμμιση) για τις περιπτώσεις που η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους ή κατευθείαν στα στοιχεία.



Εικόνα 14: α) Σημεία ολοκλήρωσης (Gauss points) για τετρακομβικό επιφανειακό Π.Σ. β) Πλάτος ολοκλήρωσης όταν η θερμοκρασία δίνεται σε κόμβους ή γ) στα στοιχεία.

Μετά τις παραπάνω επισημάνσεις, υπολογίζουμε τη θερμοκρασιακή κατανομή για το ισότροπο υλικό W με τη συνθήκη ότι η θερμοκρασία θα δοθεί στους κόμβους. Για $b_y=4h$, από τη σχέση (54), έχουμε:

$$\alpha_y \Delta T = -\frac{b_y}{(1+\nu)h} \left(\frac{1}{0,57735} \right) = -\frac{4h}{(1+0,218)h} \left(\frac{1}{0,57735} \right) = -5,688177 \quad (56)$$

(το πρόσημο επηρεάζει τη φορά της ατέλειας).

Όπως φαίνεται στα παρακάτω αποσπάσματα του κώδικα (input), εκτός από τη θερμοκρασία δίνεται το μέτρο ελαστικότητας από τη σχέση (34) και ο συντελεστής θερμικής διαστολής $\alpha_y=1$.

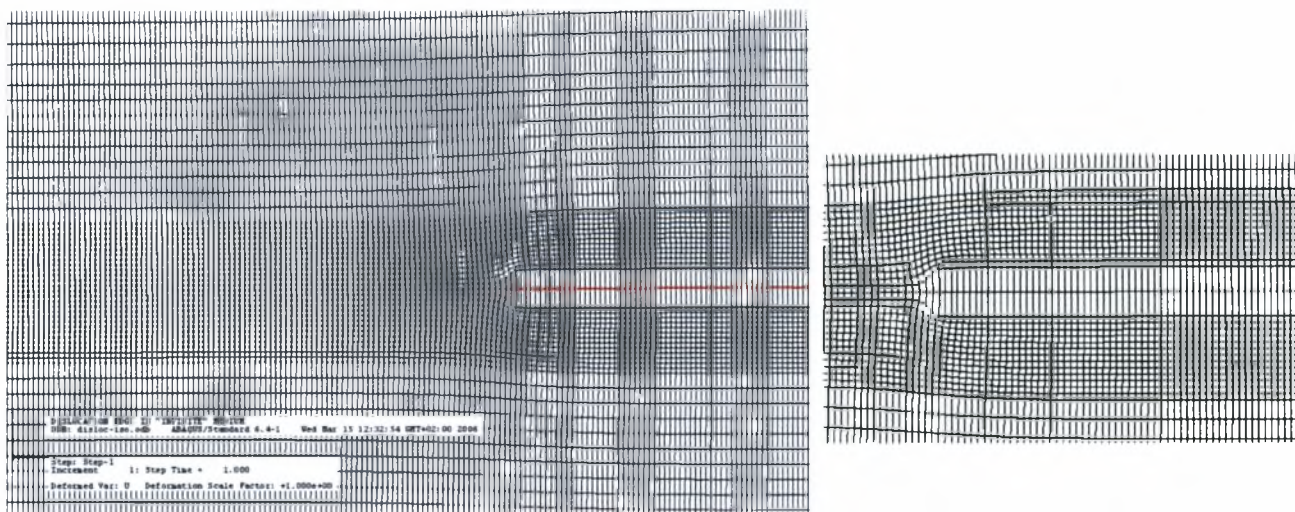
```

**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC
38.97, 0.218 (E, ν)
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0 (αγ)
**

.....
STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 5.688177 (ΔT)
**

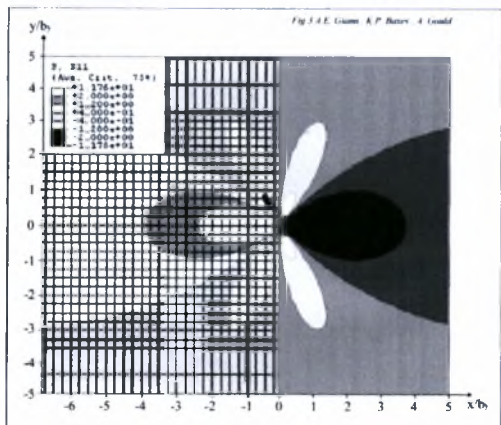
```

Συνολικά οι κώδικες παρατίθενται στο παράρτημα Β. Η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους με ονομασία NCO όπως φαίνεται στην εικόνα 15.

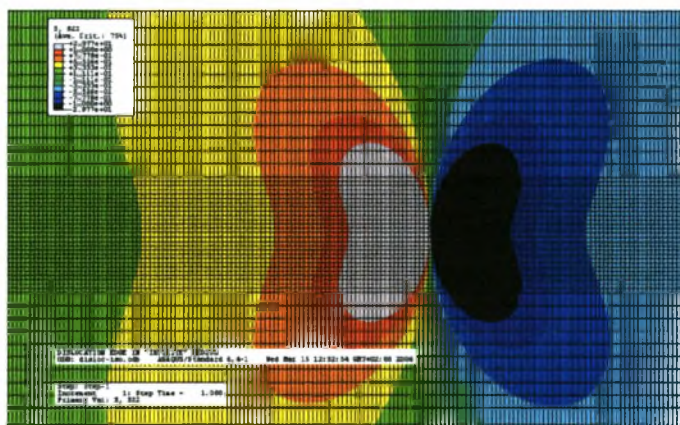


Εικόνα 15: Η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους (NCO). Δεξιά η λεπτομέρεια του παραμορφωμένου καννάβου μετά τη δημιουργία της ατέλειας.

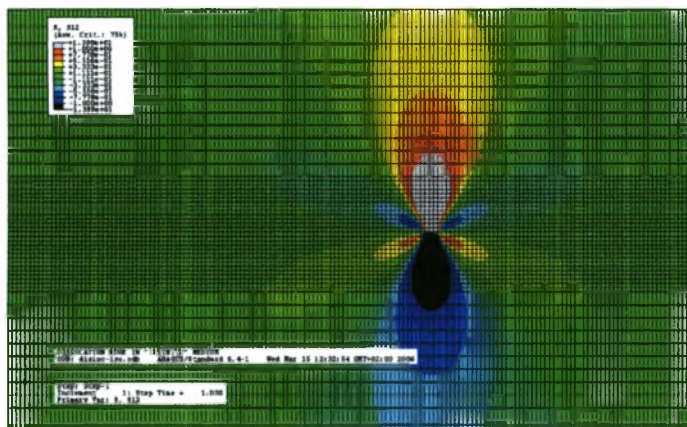
Μετά την επίλυση, το αποτέλεσμα είναι ο σχηματισμός των τάσεων όπως ακριβώς αυτές προβλέπονται από τη θεωρία (εικ. 10). Στην εικόνα 15α δίνεται στα αριστερά το αποτέλεσμα της θεωρίας ενώ στο δεξί τμήμα το αποτέλεσμα των πεπερασμένων στοιχείων. Παρατηρούμε ότι ταιριάζουν απόλυτα. Στις εικόνες 15β, 15γ και 15δ δίνονται τα τασικά πεδία όπως προέκυψαν από τα πεπερασμένα στοιχεία. Οι υδροστατικές τάσεις είναι τέλειοι κύκλοι αφού πρόκειται για ισότροπο υλικό. Στο παράρτημα Γ δίνονται οι τάσεις Mises και οι παραμορφώσεις u_1 και u_2 .



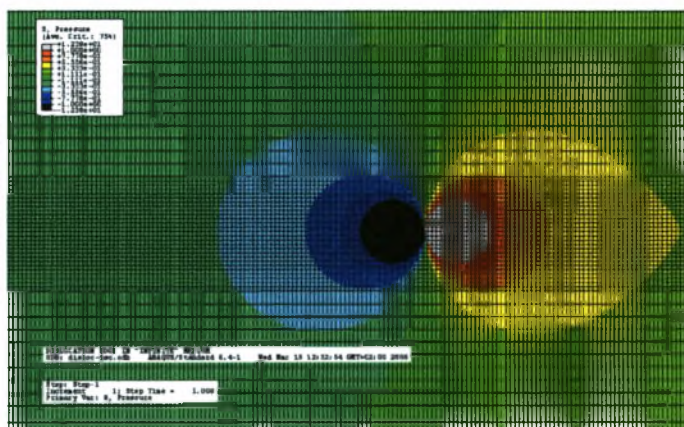
(α)



(β)



(γ)



(δ)

Εικόνα 16: α) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_y . Το διάνυσμα Burgers είναι $\mathbf{b}=(0, b_y)$ και το εύρος των ισοτασικών $(-2,0, 2,0)$ Pa/m, β) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{yy}/b_y με εύρος $(-1,0, 1,0)$ Pa/m, γ) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xy}/b_y και δ) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_H/b_y με εύρος όπως στη (β).

3.3. Προσδιορισμός τάσεων για ατέλειες σε ανισότροπα υλικά

Στα πλαίσια του ελέγχου της μεθοδολογίας και των τάσεων της εικόνας 10, πρέπει να επιλύσουμε ξανά το πρόβλημα εισάγοντας την ανισοτροπία. Επιλύουμε πρώτα για το υλικό Cu και στη συνέχεια για το Cr. Ο κάρναβος και η αναλογία $b_y=4h$ παραμένει ίδια, οπότε όμοια με τη σχέση (56), έχουμε:

$$\alpha_y \Delta T = -\frac{b_y}{(1+\nu)h} \left(\frac{1}{0,57735} \right) = -\frac{4h}{(1+0,295)h} \left(\frac{1}{0,57735} \right) = -5,349966 \quad (57)$$

Για να εισάγουμε την ανισοτροπία στο πρόβλημα, δίνουμε τα παρακάτω μεγέθη στον κώδικα: $c_{11}, c_{12}, c_{22}, c_{12}, c_{23}, c_{22}, c_{55}, c_{55}$ και στην επόμενη σειρά το c_{44} . Τα μεγέθη υπολογίζονται από τη σχέση (44) και τον πίνακα του παραρτήματος Α. Στο απόσπασμα από τον κώδικα φαίνεται η εισαγωγή των ελαστικών σταθερών για το Cu και $\mathbf{b}=(0, b_y)$.

** by

```

** in 10^10 Pa (Copper Cu)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
16.84, 12.14, 22.03, 12.14, 6.95, 22.03, 7.54, 7.54
2.35

```

Λόγω της ανισοτροπίας πρέπει να γίνει επίλυση και για $\mathbf{b}=(b_x, 0)$ αφού το αποτέλεσμα δε θα είναι το ίδιο για κάθε διεύθυνση της ατέλειας. Αυτό μπορεί να γίνει είτε δίνοντας τη θερμοκρασία σε μία κατακόρυφη ομάδα κόμβων (εικόνα 8) είτε κρατώντας την οριζόντια ομάδα κόμβων (την ίδια θερμοκρασιακή κατανομή) και αλλάζοντας τις ελαστικές σταθερές με κατάλληλο τρόπο. Δηλαδή, όπου c'_{11} θα δίνουμε πλέον c'_{22} . Άρα με βάση τα προηγούμενα, για $\mathbf{b}=(b_x, 0)$, οι ελαστικές σταθερές πρέπει να δοθούν με την εξής σειρά: c'_{22} , $c'_{21} = c'_{12}$, c'_{11} , c'_{21} , $c'_{13} = c'_{12}$, c'_{11} , c'_{55} , c'_{55} και στην επόμενη σειρά το c'_{44} όπως φαίνεται από το παρακάτω απόσπασμα.

```

** bx
** in 10^10 Pa (Copper Cu)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
22.03, 12.14, 16.84, 12.14, 12.14, 16.84, 7.54, 7.54
2.35

```

Δεν επιλέγουμε να δώσουμε θερμοκρασία σε μία κατακόρυφη ομάδα κόμβων καθώς δεν υπάρχει επαρκής αριθμός στοιχείων μικρού μεγέθους σε αυτή τη διεύθυνση ώστε να έχουμε ικανοποιητική ανάλυση. Πρέπει να σημειωθεί ότι με την αλλαγή των ελαστικών σταθερών κατά αυτό τον τρόπο οφείλουμε να μετατρέψουμε κατάλληλα και τα αποτελέσματα. Δηλαδή όπου s_{11} είναι η τάση $s_{22} \equiv \sigma_{yy}$ και όπου s_{22} είναι η $s_{11} \equiv \sigma_{xx}$. Επιπλέον, πρέπει να γίνει στροφή των τάσεων κατά 90° λόγω της αλλαγής του διανύσματος Burgers.

Με αντίστοιχο τρόπο δουλεύουμε και για το Cr. Για $b_y=4h$, έχουμε:

$$\alpha_y \Delta T = -\frac{b_y}{(1+\nu)h} \left(\frac{1}{0,57735} \right) = -\frac{4h}{(1+0,124)h} \left(\frac{1}{0,57735} \right) = -6,163885 \quad (58)$$

Οι ελαστικές σταθερές για $\mathbf{b}=(0, b_y)$ είναι:

```

** by
** in 10^10 Pa (Chromium Cr)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
35.00, 5.78, 30.49, 5.78, 10.29, 30.49, 10.1, 10.1
14.61

```

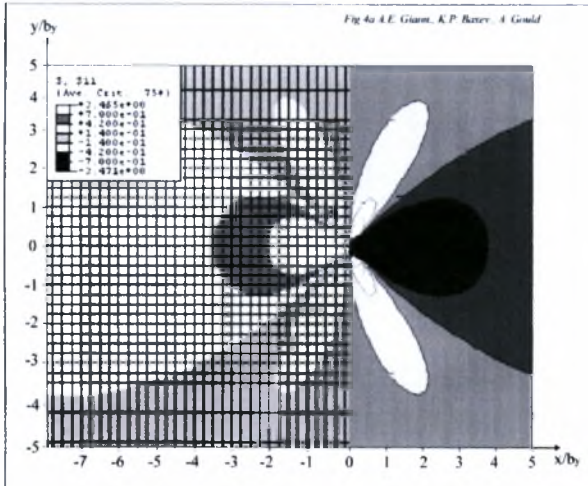
ενώ για $\mathbf{b}=(b_x, 0)$:

```

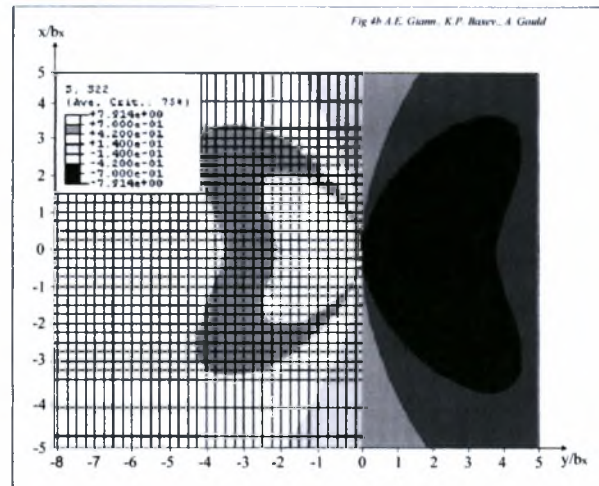
** bx
** in 10^10 Pa (Chromium Cr)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
30.49, 5.78, 35.00, 5.78, 10.29, 35.00, 10.1, 10.1
14.61

```

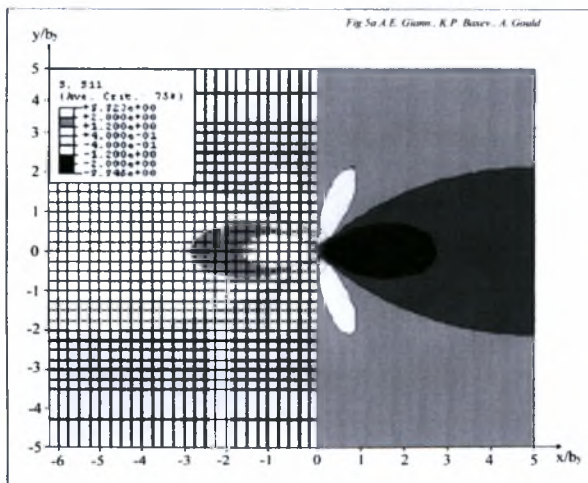

Τελικά, τα αποτελέσματα είναι ταυτόσημα με αυτά της θεωρίας. Συνοπτικά, παραθέτουμε συγκριτικά σχήματα (όπως η εικ. 16α) με το αποτέλεσμα της θεωρίας στα αριστερά και αυτό των πεπερασμένων στοιχείων στα δεξιά μόνο για τις τάσεις σ_{xx} και για τα δύο υλικά και για τις δύο διευθύνσεις. Οι εικόνες 17α και 17β είναι για το Cu και οι 17γ και 17δ για το Cr. Τα υπόλοιπα τασικά πεδία καθώς και οι παραμορφώσεις δίνονται στο παράρτημα Γ.



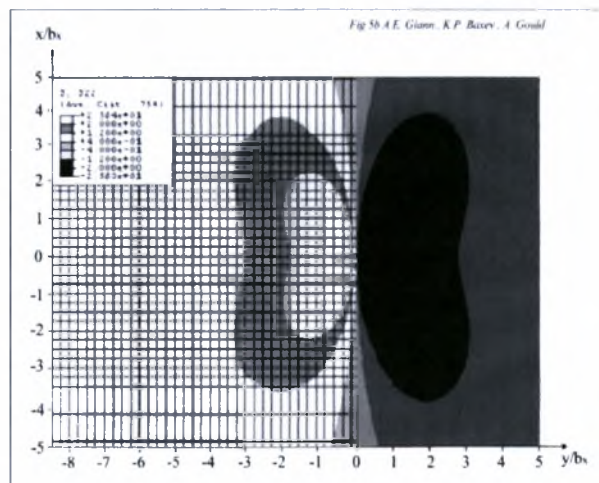
(α)



(β)



(γ)



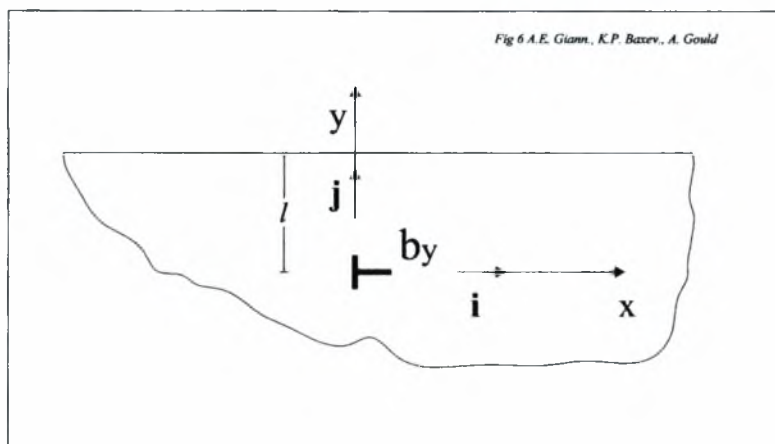
(δ)

Εικόνα 17: α) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_y με διάνυσμα Burgers $b=(0, b_y)$ και εύρος ισοτασικών $(-0,7, 0,7)$ Pa/m, β) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_x με διάνυσμα Burgers $b=(b_x, 0)$ και εύρος ισοτασικών $(-0,7, 0,7)$ Pa/m, γ) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_y με διάνυσμα Burgers $b=(0, b_y)$ και εύρος ισοτασικών $(-2,0, 2,0)$ Pa/m και δ) Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_x με διάνυσμα Burgers $b=(b_x, 0)$ και εύρος ισοτασικών $(-2,0, 2,0)$ Pa/m.

3.4. Επιρροή της ελεύθερης επιφάνειας και υπολογισμός δύναμης Peach-Koehler

Στην ενότητα 2.5 υπολογίσαμε αναλυτικά τη δύναμη Peach-Koehler που έλκει μία ατέλεια όταν αυτή είναι κοντά σε μία ελεύθερη επιφάνεια. Η λύση εκείνη ισχύει μόνο για ισότροπα υλικά. Πηγαίνοντας στα πεπερασμένα στοιχεία, επιθυμούμε να επαληθεύσουμε αριθμητικά το θεωρητικό αποτέλεσμα της δύναμης και των τασικών πεδίων και να επεκταθούμε και στα ανισότροπα υλικά λύνοντας τόσο για $\mathbf{b}=(0, b_y)$ όσο και για $\mathbf{b}=(b_x, 0)$.

Στην περίπτωση του ισότροπου υλικού, θεωρούμε μία ατέλεια κοντά σε μία ελεύθερη επιφάνεια, όπως στην εικόνα 18.



Εικόνα 18: Μία ατέλεια $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε απόσταση l από την ελεύθερη επιφάνεια.

Σε πρώτη φάση, λοιπόν, πρέπει να επέμβουμε στον κώδικα δημιουργώντας την ελεύθερη επιφάνεια. Αυτό γίνεται προσθέτοντας ένα ακόμη βήμα (step) στην επίλυση με το οποίο αφαιρούμε μία ομάδα στοιχείων (GONE):

```
*STEP
*STATIC
*MODEL CHANGE, REMOVE
GONE
```

Ανατρέχουμε στη σχέση (47) για να δούμε από τι εξαρτάται η F_x και από τι η F_y .

$$\frac{\mathbf{F}}{L} = G \times \boldsymbol{\xi} = (G_y \xi_z) \mathbf{i} + (-G_x \xi_z) \mathbf{j}$$

$$G_x = \sigma_{xx} b_x + \sigma_{xy} b_y$$

$$G_y = \sigma_{yx} b_x + \sigma_{yy} b_y$$
(47)

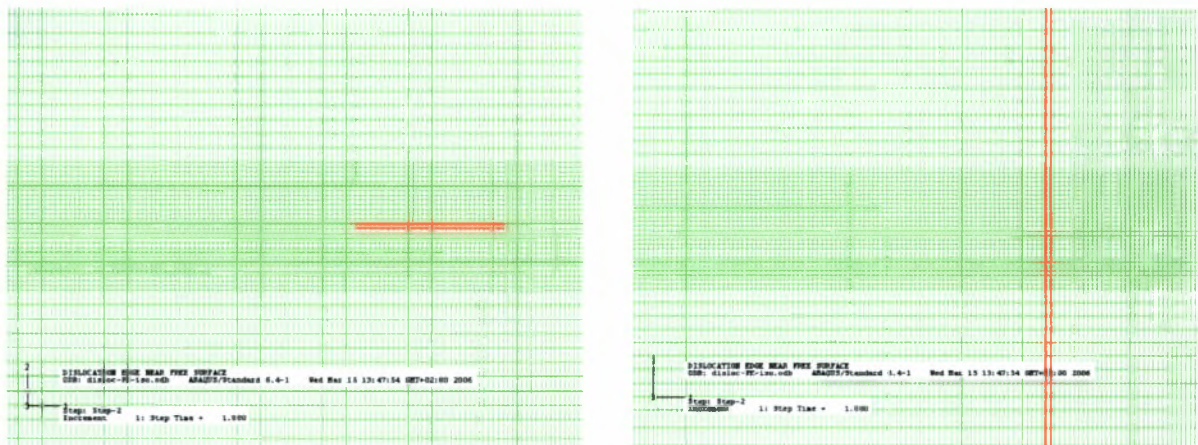
Επίσης από τη σχέση (51) γνωρίζουμε ότι $\frac{F_y}{L} = \frac{\mu b_y^2}{4\pi(1-\nu)l}$ και $F_x=0$.

Το αποτέλεσμα των πεπερασμένων στοιχείων είναι τάσεις οπότε για $\xi_z=-1$ και από τις σχέσεις (47) και (51), έχουμε στο κέντρο της ατέλειας:

$$F_y = \frac{\mu b_y^2}{4\pi(1-\nu)l} \Rightarrow \sigma_{xy} b_y = \frac{\mu b_y^2}{4\pi(1-\nu)l} \Rightarrow \sigma_{xy} = \frac{\mu b_y}{4\pi(1-\nu)l}$$
(59)

και $F_x = (\sigma_{yx} b_x + \sigma_{yy} b_y)(-1)$ οπότε πρέπει $\sigma_{yy}=0$.

Για να υπολογίσουμε τις δύο δυνάμεις πρέπει να έχουμε τις κατανομές των τάσεων γύρω από την ατέλεια. Δημιουργούμε δύο ομάδες στοιχείων μία οριζόντια για την καταγραφή των τάσεων σ_{yy} και μία κατακόρυφη για τις τάσεις σ_{xy} όπως φαίνονται στην εικόνα 19.



Εικόνα 19: Οι δύο ομάδες στοιχείων για την καταγραφή των τάσεων, αριστερά για τις τάσεις σ_{yy} και δεξιά για τις τάσεις σ_{xy} .

Η ατέλεια είναι τοποθετημένη σε $l=13h$ από την ελεύθερη επιφάνεια (13 στοιχεία στην κάθετη κατεύθυνση). Σημαντικό ρόλο παίζει τώρα και η συσχέτιση b_y και h . Συγκεκριμένα, από τη σχέση (59) υπολογίζουμε για το W :

$$\text{Για } b_y=h/4 \quad \sigma_{xy} = \frac{\mu b_y}{4\pi(1-\nu)l} = \frac{16(h/4)}{4\pi(1-0,218)13h} = 0,03131122 \quad (\times 10^{10} \text{ Pa})$$

$$\text{Για } b_y=h \quad \sigma_{xy} = \frac{\mu b_y}{4\pi(1-\nu)l} = \frac{16h}{4\pi(1-0,218)13h} = 0,1252449 \quad (\times 10^{10} \text{ Pa})$$

$$\text{Για } b_y=4h \quad \sigma_{xy} = \frac{\mu b_y}{4\pi(1-\nu)l} = \frac{16h}{4\pi(1-0,218)13h} = 0,5009796 \quad (\times 10^{10} \text{ Pa})$$

Όπως καταλαβαίνει κανείς όταν $b_y=4h$ και $l=13h$, η ατέλεια βρίσκεται πολύ κοντά στην ελεύθερη επιφάνεια ($l=3,25 b_y$) ενώ για $b_y=h/4$ η ατέλεια βρίσκεται στο «άπειρο». Για να υπολογίσουμε τη σ_{xy} και κατ' επέκταση τη δύναμη Peach-Koehler, καταγράφουμε τις τάσεις και παίρνουμε το μέσο όρο των γειτονικών στην ατέλεια τιμών. Υπενθυμίζουμε ότι η θερμοκρασία δίνεται στους κόμβους ενώ τα αποτελέσματα των τάσεων αφορούν πεπερασμένα στοιχεία. Επομένως, αφού $l=13h$, θα παίρνουμε το μέσο όρο των τάσεων του 13^{ου} και 14^{ου} πεπερασμένου στοιχείου. Επιλύουμε το πρόβλημα και για τις τρεις περιπτώσεις που υπολογίσαμε παραπάνω δίνοντας κάθε φορά την κατάλληλη θερμοκρασία.

Για $b_y=h/4$

Στοιχείο από ελεύθερη επιφάνεια	σ_{xy}
11 ^ο	0,4554
12 ^ο	0,5982
13 ^ο	0,3589
14 ^ο	-0,2696
15 ^ο	-0,5094

16°	-0,3677
-----	---------

$$\text{Άρα } \sigma_{xy} = \frac{0,3589 - 0,2696}{2} = 0,04465$$

Για $b_y=h$

Στοιχείο από ελεύθερη επιφάνεια	σ_{xy}
11°	1,3310
12°	1,1780
13°	0,5690
14°	-0,2148
15°	-0,8259
16°	-0,9834

$$\text{Άρα } \sigma_{xy} = \frac{0,5690 - 0,2148}{2} = 0,1771$$

Για $b_y=4h$

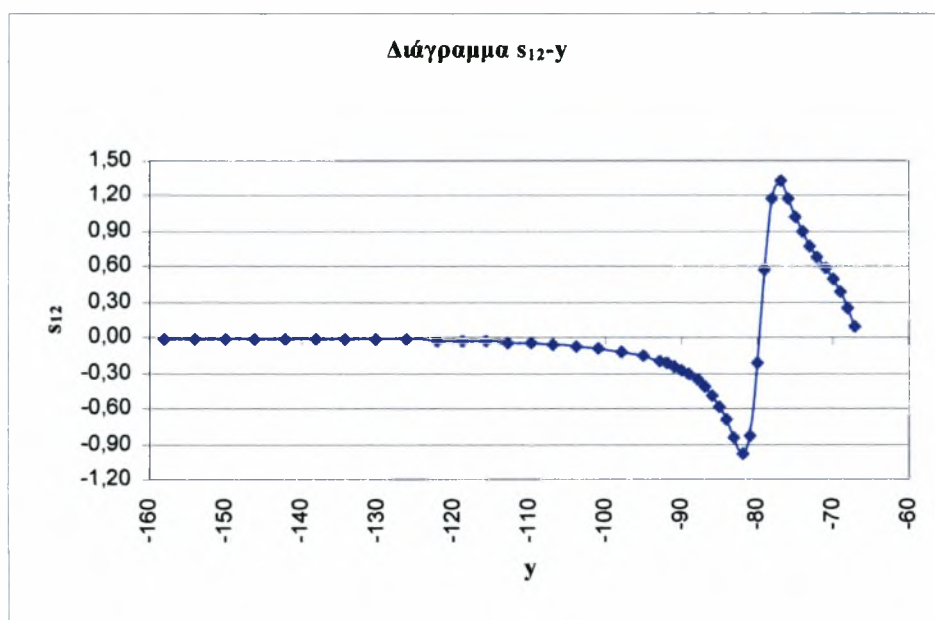
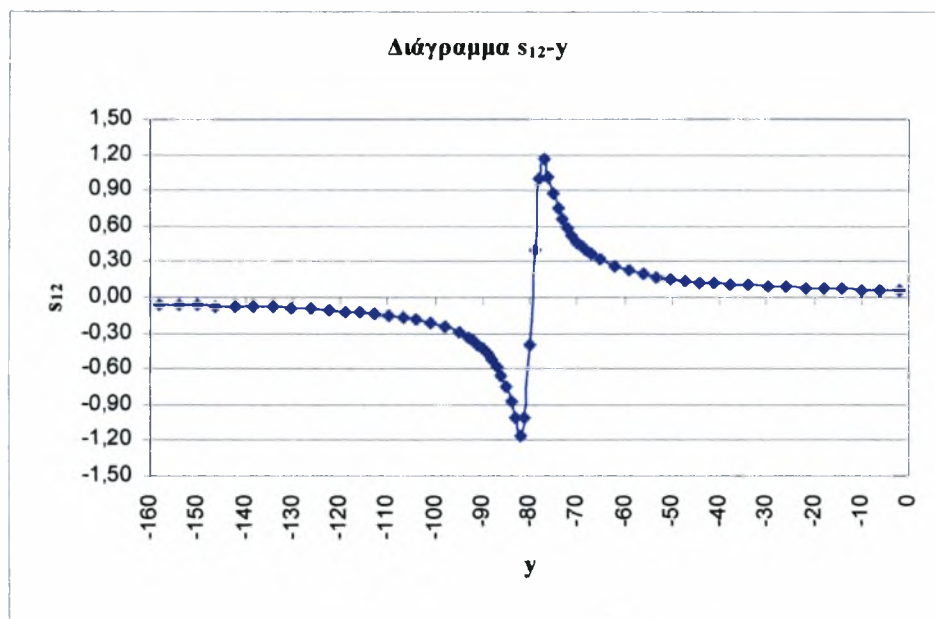
Στοιχείο από ελεύθερη επιφάνεια	σ_{xy}
11°	7,286
12°	2,571
13°	5,743
14°	-4,313
15°	-8,151
16°	-5,883

$$\text{Άρα } \sigma_{xy} = \frac{5,743 - 4,313}{2} = 0,715$$

Συνοπτικά, δίνονται τα θεωρητικά αποτελέσματα και τα αποτελέσματα των πεπερασμένων στοιχείων για καθεμία περίπτωση.

	σ_{xy}^{theory}	σ_{xy}^{FEM}
$b_y=h/4$	0,03131122	0,04465
$b_y=h$	0,1252449	0,1771
$b_y=4h$	0,5009796	0,715

Παρατηρούμε μία απόκλιση στα αποτελέσματα και συγκεκριμένα μία υπερεκτίμηση κατά 40% περίπου από τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Η απόκλιση αυτή οφείλεται πιθανότατα στην ποιότητα του καννάβου και στον τρόπο που γίνεται ο υπολογισμός (μέσος όρος). Όσον αφορά τη δύναμη F_x , προκύπτει 0 καθώς οι τάσεις σ_{yy} είναι ίσες στα γειτονικά στοιχεία της ατέλειας (βλ. σχήματα κατανομής τάσεων στο W, παράρτημα Γ).

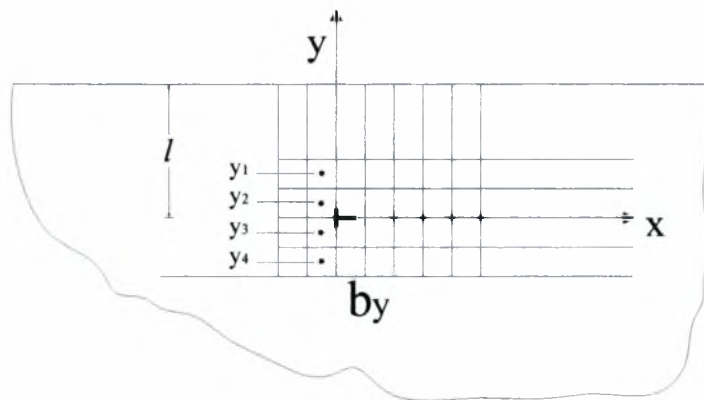


Εικόνα 20: α) Κατανομή τάσεων σ_{xy} πριν τη δημιουργία της ελεύθερης επιφάνειας, β) Κατανομή τάσεων σ_{xy} κοντά για μία ατέλεια κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια.

Όπως φαίνεται στην εικόνα 20, η κατανομή των τάσεων σ_{xy} κοντά στην περιοχή της ατέλειας θυμίζει κυβική παραβολή. Για να προσομοιάσουμε καλύτερα την κατανομή αυτή δημιουργούμε μία τασική συνάρτηση τρίτου βαθμού $\sigma_{xy}(y) = ay^3 + by^2 + cy + d$, όπου y οι συντεταγμένες των πεπερασμένων στοιχείων. Γνωρίζοντας τις τάσεις σε τέσσερα γειτονικά πεπερασμένα στοιχεία, προσδιορίζουμε τις σταθερές του προβλήματος. Η τάση για $y=0$ (σημείο ατέλειας) είναι ίση με τη σταθερά d :

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{disloc} = d = & \frac{s_1 y_2 (y_2 - y_3) y_3 + y_1^2 (s_3 y_2 - s_2 y_3) + y_1 (-s_3 y_2^2 + s_2 y_3^2)}{(y_1 - y_2)(y_1 - y_3)(y_2 - y_3)} + \\ & + \frac{(s_2 - s_4) y_1 y_2 y_3}{(y_1 - y_2)(y_2 - y_3)(y_2 - y_4)} + \frac{(s_3 - s_4) y_1 y_2 y_3}{(y_1 - y_3)(-y_2 + y_3)(y_3 - y_4)} \\ & + \frac{(s_1 - s_4) y_1 y_2 y_3}{(y_1 - y_2)(y_1 - y_3)(-y_1 + y_4)} \end{aligned} \quad (60)$$

όπου s_i οι τάσεις σ_{xy} των γειτονικών πεπερασμένων στοιχείων και y_i οι συντεταγμένες τους όπως φαίνεται στην εικόνα 21.



Εικόνα 21: Κυβική παρεμβολή ώστε να ληφθεί υπόψιν η καμπυλότητα της σ_{xy} κοντά στην ατέλεια.

Η μέθοδος της κυβικής παρεμβολής βελτιώνει κάπως το αποτέλεσμα καθώς η απόκλιση είναι περίπου 34%. Επιπλέον, μικρές βελτιώσεις του καννάβου στο σημείο της ατέλειας βελτιώνουν το αποτέλεσμα. Υπάρχει όμως κίνδυνος να γίνει κάποιο λάθος με τη θερμοκρασιακή κατανομή και τα σημεία ολοκλήρωσης των στοιχείων αυτών. Η λύση της αλλαγής του καννάβου δεν είναι ικανοποιητική προς το παρόν.

Η δύναμη Peach-Koehler όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 2.5 μπορεί να υπολογιστεί και ενεργειακά από τη σχέση (48). Τα πεπερασμένα στοιχεία μπορούν να υπολογίσουν την ολική εσωτερική ενέργεια του συστήματος. Άρα για να υπολογίσουμε τη δύναμη F_y που δρα σε μία ατέλεια τύπου $\mathbf{b}=(0, b_y)$ πρέπει να μετακινήσουμε την ατέλεια (και την αντίστοιχη θερμοκρασιακή κατανομή) κατά ένα πεπερασμένο στοιχείο πλάτους h (για $b_y=h$) κατά τον θετικό άξονα y . Αντίστοιχα, για τη δύναμη F_x αρκεί μία μετακίνηση κατά το θετικό άξονα x όπως φαίνεται στις εικόνες 22α και 22β.

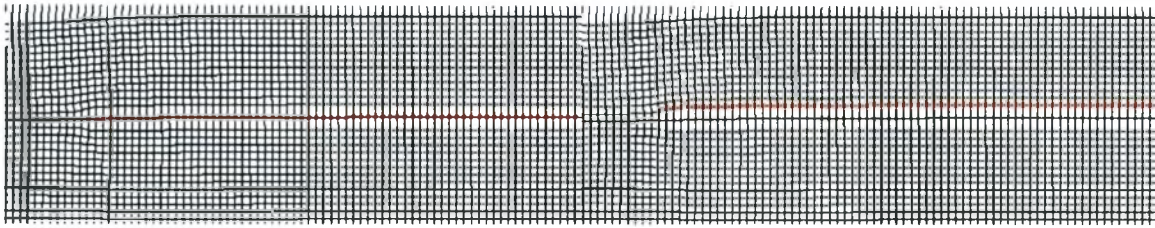
Η σχέση (48) παίρνει τη μορφή:

$$F_x = -\frac{\Delta U}{\Delta x} = -\frac{U_{τελική} - U_{αρχική}}{h}, \quad F_y = -\frac{\Delta U}{\Delta y} = -\frac{U_{τελική} - U_{αρχική}}{h} \quad (61)$$

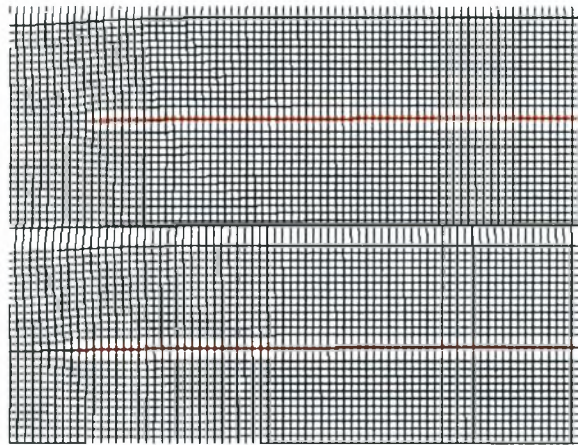
ενώ η εσωτερική ελαστική ενέργεια είναι ίση με:

$$U = \frac{1}{2} \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^m dV \quad (62)$$

($\varepsilon_{ij}^m = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{th}$ μηχανική τροπή=ολική τροπή-θερμική τροπή)



(α)



(β)

Εικόνα 22: α) Μετακίνηση της ατέλειας $b=(0, b_y)$ προς τα επάνω για υπολογισμό της F_y και β) Μετακίνηση της ατέλειας $b=(0, b_y)$ προς τα επάνω για υπολογισμό της F_x .

Τροποποιούμε κατάλληλα τον κώδικα ώστε να μας δίνει την ολική ενέργεια του συστήματος (ELSE) και επιλύουμε το πρόβλημα και για τις τρεις θέσεις της ατέλειας (αρχική, ένα στοιχείο προς τα πάνω, ένα στοιχείο προς τα δεξιά).

```
**** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
**** this input is to find  $F_y=-dW/dy$ , multiply by 1/2
***TEMPERATURE, OP=MOD
**NCOU, 1.422044252
****by=h for optimal results
**
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
ELSE
```

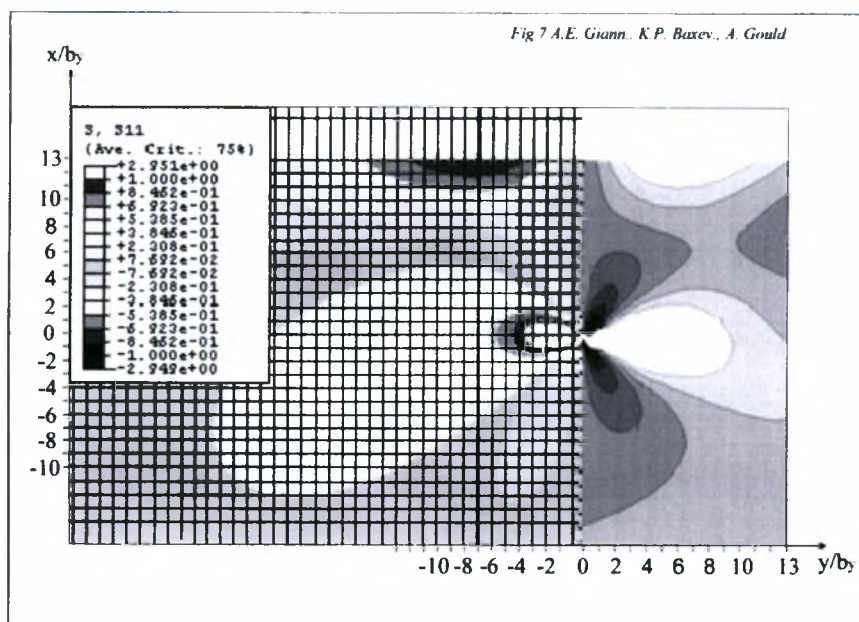
Τελικά, παίρνουμε τα εξής αποτελέσματα:

$$F_y = -\frac{8,653-8,913}{2} = 0,130 b_y \times 10^{10} \text{ (N/m)}$$

$$F_x = -\frac{8,913-8,913}{2} = 0$$

ενώ η προβλεπόμενη από τη θεωρία F_y για $b=h$ είναι $F_y=0,125 b_y \times 10^{10}$ (N/m).

Παρατηρούμε δηλαδή ότι το αποτέλεσμα είναι ουσιαστικά ακριβές (4% απόκλιση). Ακριβή είναι και τα τασικά πεδία, μακριά από το κέντρο της ατέλειας, όπως φαίνεται στην εικόνα 23 και στο παράρτημα Γ.



Εικόνα 23: Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b_y με διάνυσμα Burgers $b=(0, b_y)$ και εύρος ισοτασικών $(-1,0, 1,0)$ Pa/m για το υλικό W.

Το πρόβλημα της ατέλειας κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια παρουσιάζει ενδιαφέρον και στα ανισότροπα υλικά καθώς η δύναμη αναμένεται να είναι διαφορετική ανάλογα με τον προσανατολισμό της ατέλειας. Προσθέτοντας, λοιπόν, στον κώδικα για το υλικό Cu την ελεύθερη επιφάνεια υπολογίζουμε τη δύναμη F_y που έλκει την ατέλεια αρχικά από τις τάσεις σ_{xy} . Η τιμή της δύναμης (από τις τάσεις) είναι $F_y=0,066955 b_y \times 10^{10}$ (N/m). Υπολογίζοντας την ολική ενέργεια του συστήματος, βρίσκουμε το αποτέλεσμα:

$$F_y = -\frac{2,995 - 3,088}{2} = 0,0465 b_y \times 10^{10} \text{ (N/m)}. \text{ Το ορθότερο αποτέλεσμα είναι αυτό}$$

που υπολογίζουμε από την ενεργειακή σχέση ενώ η απόκλιση των δύο αποτελεσμάτων είναι γύρω στο 40%, όπως και στην περίπτωση του ισότροπου υλικού.

Αλλάζοντας τον προσανατολισμό της ατέλειας ή καλύτερα αλλάζοντας τις ελαστικές σταθερές όπως περιγράφηκε στην ενότητα 3.3, υπολογίζουμε τη δύναμη που δρα στην ατέλεια. Το αποτέλεσμα των τάσεων είναι $F_y=0,05925 b_y \times 10^{10}$ (N/m) ενώ από την ενεργειακή σχέση είναι $F_y = -\frac{2,7 - 2,781}{2} = 0,0405 b_y \times 10^{10}$ (N/m).

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα, σε ανισότροπα υλικά η διεύθυνση της ανισοτροπίας παίζει μεγάλο ρόλο στην κατανομή των τάσεων και στη δύναμη που δέχεται η ατέλεια. Αυτό μπορεί να φανεί και στα διαγράμματα των τάσεων για καθεμία περίπτωση (παράρτημα Γ).

3.5. Η δύναμη «αντίστασης» του υλικού, δύναμη Peierls (Nabarro)

Η δύναμη Peach-Koehler όπως περιγράφηκε στα προηγούμενα είναι η δύναμη εκείνη που κινεί την ατέλεια. Πρόκειται για εσωτερική δύναμη (material force) και όχι εξωτερική δράση. Το αν η ατέλεια τελικά θα κινηθεί η όχι εξαρτάται από την

αντίσταση που θα φέρει το υλικό. Συνεπώς, εξαρτάται από ένα μηχανισμό δράσης-αντοχής (αντίστασης) του υλικού το αν θα οδηγηθούμε τελικά σε κινητικότητα της ατέλειας. Η αντίσταση του υλικού ονομάζεται δύναμη Peierls ή Peierls-Nabarro (Peierls 1940, Nabarro 1947) και συνήθως συμβολίζεται ως τ_p . Η δύναμη (ή τάση) αυτή έχει προσδιοριστεί πειραματικά για αρκετά υλικά ενώ υπάρχουν και αρκετές θεωρητικές σχέσεις όπως η παρακάτω (Wang 1996):

$$\tau_p = \frac{G}{1-\nu} \exp \frac{4\pi\zeta}{b} \text{ όπου } \zeta = \frac{d}{2(1-\nu)} \quad (63)$$

(d: πρωτεύων σύστημα ολίσθησης, βλ. πίνακα 2).

Γνωρίζοντας την τάση Peierls, μπορούμε να υπολογίσουμε για το Cu σε ποια απόσταση πρέπει να βρεθεί η ατέλεια ώστε να βγει προς την ελεύθερη επιφάνεια. Στον πίνακα 2 δίνονται τόσο η θεωρητική όσο και η πειραματική τιμή της τάσης Peierls.

Πίνακας 2: Κυρίαρχα συστήματα ολίσθησης και τάσεις Peierls για το Cu.

Material	Structure	Burgers vector and length b	Primary slip system d {plane}/ b <direction>	Theoretical τ_p/μ at 0° K	Experimental τ_p/μ at 0° K
Cu	Simple fcc	$\langle 1\bar{1}0 \rangle, a_0\sqrt{2}/2$ $b=0.255$ nm	$\frac{\sqrt{6}}{3} a_0 \{111\} / \frac{\sqrt{2}}{2} a_0 \langle 1\bar{1}0 \rangle$	3.22×10^{-5}	5.31×10^{-6} 1.04×10^{-5}

Γνωρίζοντας ότι $G=\mu=7,54 \times 10^{10}$ Pa, άρα:

$\tau_p / G = 3,22 \cdot 10^{-5} \Rightarrow \tau_p = 24,28 \cdot 10^{-5}$ N/m² (στην ουσία έχω τ_p/L δηλαδή N/m πλάτους).

Η δύναμη Peach-Koehler που ασκείται στην ατέλεια στην πρώτη περίπτωση είναι

$$F_y = -\frac{2,995 - 3,088}{2} = 0,0465 b_y \times 10^{10} \text{ (N/m)} \text{ ή αλλιώς } F_y = 0,0802 \frac{\mu b_y^2}{l} \text{ (N/m)}. \text{ Για}$$

να βρούμε τη ζητούμενη απόσταση εξισώνουμε τη δύναμη Peach-Koehler με την δύναμη Peierls:

$$\frac{0,0802 \cdot 7,54 \cdot 10^{10} \cdot (0,255 \cdot 10^{-9})^2}{l} = 24,28 \cdot 10^{-5} \Rightarrow l = 1,619 \mu\text{m}.$$

Δηλαδή όταν η απόσταση γίνει μικρότερη από 1,619 μm , η ατέλεια έλκεται προς την ελεύθερη επιφάνεια. Αντίστοιχα, όταν ο κρύσταλλος στρίψει κατά 90° η δύναμη

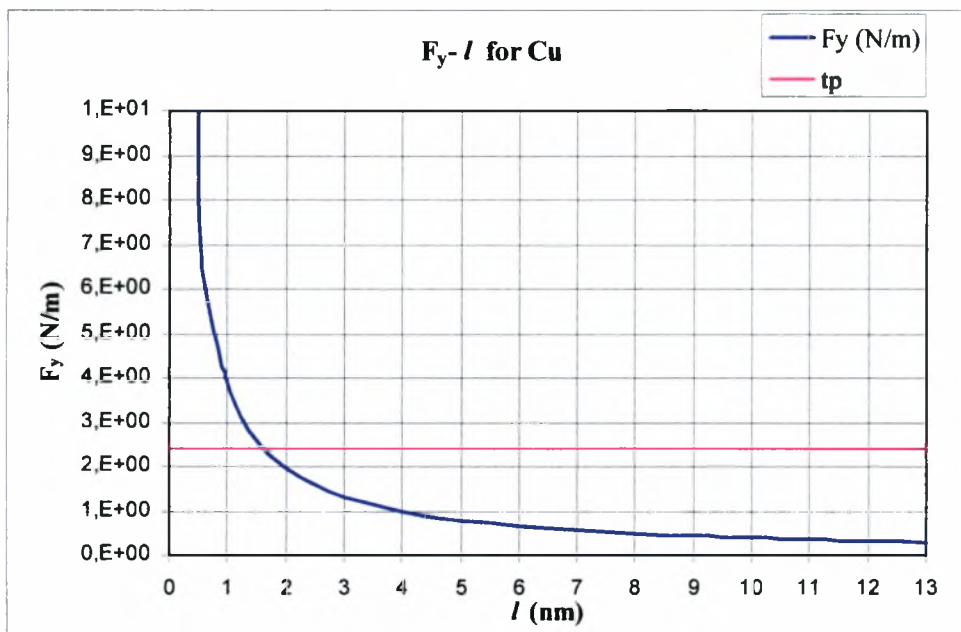
$$F_y = -\frac{2,7 - 2,781}{2} = 0,0405 b_y \times 10^{10} \text{ (N/m)} \text{ γράφεται } F_y = 0,0698 \frac{\mu b_y^2}{l} \text{ (N/m)}.$$

Εξισώνοντας όπως και προηγουμένως βρίσκουμε:

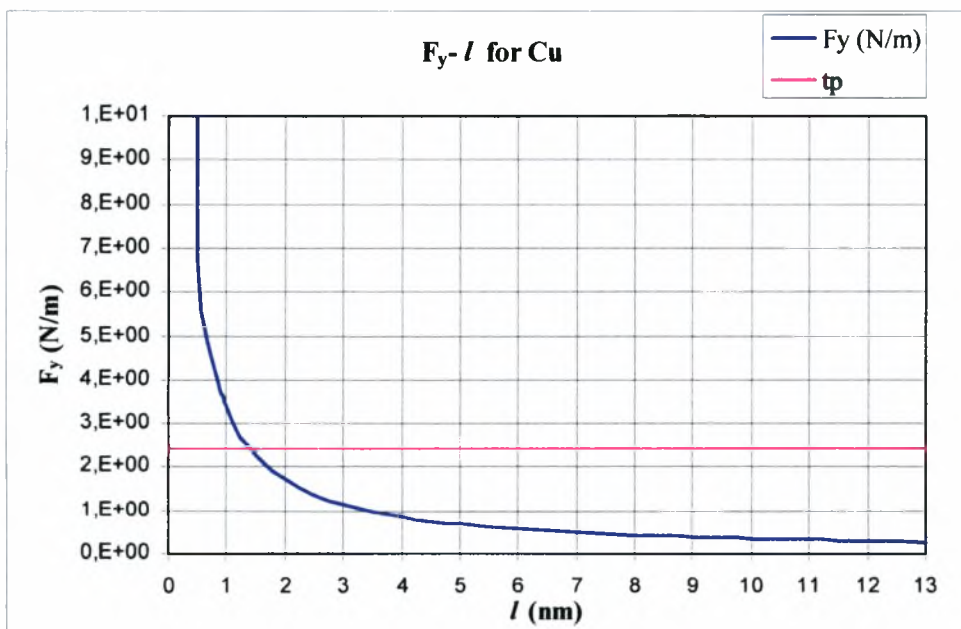
$$\frac{0,0698 \cdot 7,54 \cdot 10^{10} \cdot (0,255 \cdot 10^{-9})^2}{l} = 24,28 \cdot 10^{-5} \Rightarrow l = 1,409 \mu\text{m}.$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (51) για τη δύναμη Peach-Koehler σε ισότροπα υλικά για το Cu που είναι ανισότροπο, προκύπτει $F_y = 0,1129 \frac{\mu b_y^2}{l}$ (N/m) και $l=2,279 \mu\text{m}$.

Επομένως, η χρήση της σχέσης αυτής για ανισότροπα υλικά δίνει συντηρητικά αποτελέσματα. Στις εικόνες 24α και 24β, φαίνονται σχηματικά οι δυνάμεις Peach-Koehler και Peierls για τις δύο παραπάνω περιπτώσεις (γραφική επίλυση).



(α)



(β)

Εικόνα 24: Διαγράμματα δύναμης Peach-Koehler και Peierls. Η ατέλεια έλκεται όταν α) $l \leq 1,619 \mu\text{m}$ και β) $l \leq 1,409 \mu\text{m}$.

4. Συμπεράσματα και προτάσεις για το μέλλον

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας αναπτύχθηκε η μεθοδολογία εισαγωγής κρυσταλλικών ατελειών σε μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Πιστεύουμε ότι αυτή η μέθοδος είναι ένα πολύ καλά ανεπτυγμένο και πολύ ισχυρό υπολογιστικό εργαλείο για επίπεδες ατέλειες σε ισότροπα ή ανισότροπα υλικά. Το γεγονός ότι ακόμη και με ένα «φθινό» κάνναβο τόσο σε αριθμό όσο και σε είδος στοιχείων τα αποτελέσματα είναι ακριβή πιστοποιεί την παραπάνω πεποίθηση. Το εργαλείο αυτό μας έδωσε τη δυνατότητα του ελέγχου κάποιων υπάρχουσών αναλυτικών λύσεων και τη συμπλήρωσή τους με πεδία τάσεων. Φυσικά, το εύρος των παραδειγμάτων δεν έχει τέλος και πλέον έγκειται στην κάθε εφαρμογή να δημιουργήσει ένα συναφές θερμοελαστικό πρόβλημα και να το επιλύσει με πεπερασμένα στοιχεία. Τέλος, οι αναλύσεις των κρυσταλλικών ατελειών είναι χρήσιμες και στην αντισεισμική τεχνολογία διότι τα εντατικά πεδία στα γεωλογικά ρήγματα μπορεί να προσομοιωθούν όπως οι κρυσταλλικές ατέλειες.

Σε μελλοντική βάση μπορούν να εξεταστούν προβλήματα αλληλεπίδρασης ατελειών με άλλα υλικά, με σφαιρίδια, με οπές κ.ό.κ. καθώς και να γίνει βελτίωση του προσομοιώματος κοντά στο κέντρο της ατέλειας (core) είτε με βελτιστοποίηση του καννάβου είτε με χρήση άλλων λύσεων. Επιπλέον, η μέθοδος είναι δυνατόν να επεκταθεί σε αξονοσυμμετρικά προβλήματα. Σε μεταγενέστερο στάδιο από αυτά τα παραδείγματα, μπορεί να αναπτυχθεί η κατάλληλη θεωρία ώστε σε συνεργασία με την παρούσα μεθοδολογία να μελετηθεί η δυναμική των ατελειών και η επέκτασή της σε μεγάλες παραμορφώσεις (υπερελαστικά υλικά).

Ευχαριστίες

Ο συγγραφέας ευχαριστεί θερμά τον Καθηγητή Νικόλαο Αράβα για τη χρήση των υπολογιστών και των προγραμμάτων του Εργαστηρίου Μηχανικής και Αντοχής Υλικών, του οποίου προϊστάται ως Διευθυντής.

5. Βιβλιογραφία

- [1] ABAQUS Version 6.4 Finite Element Code. Hibbitt, Karlsson and Sorensen, Inc., Pawtucket, R. I.
- [2] Barnett DM (1999) Elastic Anisotropy, Mechanics and Materials: Fundamentals and Linkages. Edited by M. A. Heyers, R. W. Armstrong, H. Kirchner. John Wiley & Sons, pp 71-98
- [3] Biot MA (1935) Distributed gravity and temperature loading in two dimensional elasticity replaced by boundary pressures and dislocations. J. Appl. Mech. IV(2):A41-45
- [4] Cottrell AH (1961) *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*. Oxford University Press, London
- [5] Dundurs J, Markenscoff X (1993) Invariance of stresses under a change in elastic compliances. Proc. R. Soc. London A, A443:289-300
- [6] Eshelby JD, Read WT, Shockley W (1953) Anisotropic Elasticity with applications to dislocation theory. Acta Metallurgica 1:251-259
- [7] Gouldstone A, Giannakopoulos AE (2005) A finite element method for plain-strain and axisymmetric problems of microstructures with dislocations, under preparation
- [8] Hall EO (1951) The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results. Proc. Phys. Soc. London, Sect B, 64:747-53
- [9] Hirth JP, Lothe J (1982) *Theory of Dislocations*, 2nd edition. John Wiley & Sons, New York
- [10] Michell JH (1899) On the direct determination of stress in an elastic solid, with application to the theory of plates. Proc. London Math. Soc.31:100-124
- [11] Mindlin RD, Salvadori MG (1950) In Handbook of experimental stress analysis. Edited by M. Hetenyi. John Wiley & Sons, New York, pp 700-827
- [12] Nabarro FRN (1947) Dislocations in a single cubic lattice. Proc. Phys. Soc. 59:256-272
- [13] Nabarro FRN (1997) Theoretical and experimental estimates of the Peierls stress. Phil. Mag. A75:703-711
- [14] Peach M, Koehler JS (1950) The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. Physical Review 80:436-439
- [15] Peierls R (1940) The size of a dislocation. Proc. Phys. Soc.52:34-37
- [16] Petch NJ (1953) The cleavage of polycrystals. J. Iron Steel. Inst. 174:25-8
- [17] Phillips R (2001) *Crystals, Defects and Microstructures: Models Across Scales*. Cambridge University Press.
- [18] Rice JR (1992) Dislocation nucleation from a crack tip: An analysis based on the Peierls concept. J. Mech. Phys. Solids 40:239-271
- [19] Tadmor EB, Ortiz M, Phillips R (1996) Quasicontinuum analysis of defects in solids. Phil. Mag. A73:1529-1563
- [20] Wang JN (1996) Prediction of Peierls stresses for different crystals. Mater. Sci. Eng. A206:259-269

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

Στο παράρτημα αυτό παρατίθενται ο πίνακας των ελαστικών σταθερών για αρκετά ανισότροπα υλικά και οι τασικές καμπύλες σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} και σ_H για $\mathbf{b}=(0, b_y)$ και για $\mathbf{b}=(b_x, 0)$. Τα μεγέθη του πίνακα υπολογίζονται από τις σχέσεις (34):

$$\mu = c_{44}, \quad \nu = \frac{c_{12}}{c_{11} + 2c_{12}}, \quad E = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 3c_{12})}{c_{11} + 2c_{12}} \quad (34)$$

$H = 2c_{44} + c_{12} - c_{11}$ ο συντελεστής ανισοτροπίας

και $A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}$ ο λόγος ανισοτροπίας

Τα τασικά πεδία των ανισότροπων υλικών υπολογίζονται από τις σχέσεις (43) και (44) χρησιμοποιώντας τις σταθερές του πίνακα:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{Mb_x}{2\pi\rho^4 c_{22}'} \left\{ \left[(\bar{c}_{11}' - c_{12}')(\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}') - \bar{c}_{11}' c_{66}' \right] x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'^2 c_{66}'}{c_{22}'} y^3 \right\} + \frac{Mb_y c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(\frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} xy^2 - x^3 \right) \\ \sigma_{yy} &= \frac{Mb_x c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^3 \right) - \frac{Mb_y}{2\pi\rho^4 \bar{c}_{11}'} \left\{ \left[(\bar{c}_{11}' - c_{12}')(\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}') - \bar{c}_{11}' c_{66}' \right] xy^2 + c_{22}' c_{66}' x^3 \right\} \\ \sigma_{xy} &= \frac{Mb_x c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^3 + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} xy^2 \right) + \frac{Mb_y c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^3 \right) \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \text{όπου } M &= (\bar{c}_{11}' + c_{12}') \left[\frac{\bar{c}_{11}' - c_{12}'}{c_{22}' c_{66}' (\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}')} \right]^{1/2} \\ \rho^4 &= \left(x^2 + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^2 \right)^2 + \frac{(\bar{c}_{11}' + c_{12}')(\bar{c}_{11}' - c_{12}' - 2c_{66}')}{c_{22}' c_{66}'} x^2 y^2 \end{aligned} \quad (44)$$

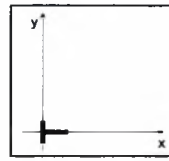
$$\bar{c}_{11}' = (c_{11}' c_{22}')^{1/2}, \quad c_{11}' = c_{11}, \quad c_{12}' = c_{12}, \quad c_{66}' = c_{55} = c_{44}, \quad c_{22}' = c_{11} + \frac{1}{2} H$$

Στο τέλος του παραρτήματος δίνονται παραδείγματα τάσεων για τυχαία γωνία της ατέλειας. Τα τασικά πεδία που καταχωρούνται στο παρόν παράρτημα χρησιμεύουν για την εκτίμηση της ποιότητας των αντίστοιχων λύσεων των Πεπερασμένων Στοιχείων.

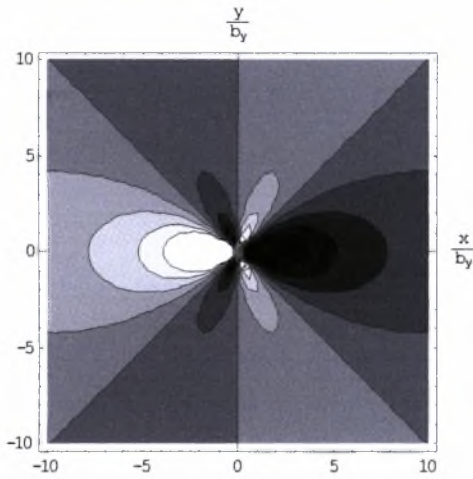
Appendix A (Hirth and Lothe, 1982)

Crystal	Cubic Crystals (thesis)													
	C_{11} (10^{10} Pa)	C_{12} (10^{10} Pa)	C_{44} (10^{10} Pa)	s_{11}'	s_{12}'	s_{44}'	H (10^{10} Pa)	A	μ (10^{10} Pa)	λ (10^{10} Pa)	ν	μ (10^{10} Pa)	E (10^{10} Pa)	ν
Al	10,82	6,13	2,85	1,566	0,566	3,509	1,01	1,22	2,65	5,93	0,347	2,85	5,94	0,266
Ag	12,40	9,34	4,61	2,286	0,982	2,169	6,16	3,01	3,38	8,11	0,354	4,61	3,98	0,301
Au	18,60	15,70	4,20	2,366	1,083	2,381	5,50	2,90	3,10	14,60	0,412	4,20	3,81	0,314
Cr	35,00	5,78	10,10	0,300	0,042	0,990	-9,02	0,69	11,90	7,58	0,130	10,10	32,85	0,124
Cu	16,84	12,14	7,54	1,500	0,628	1,326	10,38	3,21	5,46	10,06	0,324	7,54	6,09	0,295
Fe	24,20	14,65	11,20	0,760	0,287	0,893	12,85	2,35	8,63	12,08	0,291	11,20	12,17	0,274
Ge	12,89	4,83	6,71	0,975	0,266	1,490	5,36	1,67	5,64	3,76	0,200	6,71	9,79	0,214
K	0,457	0,374	0,263	83,088	37,394	38,023	0,443	6,34	0,17	0,29	0,312	0,26	0,11	0,310
Mo	46,00	17,60	11,00	0,276	0,076	0,909	-6,40	0,77	12,28	18,88	0,305	11,00	34,56	0,217
Na	0,603	0,459	0,586	48,488	20,957	17,065	1,028	8,14	0,38	0,25	0,201	0,59	0,19	0,302
Nb	24,60	13,40	2,87	0,660	0,233	3,484	-5,46	0,51	3,96	14,49	0,392	2,87	14,12	0,261
Ni	24,65	14,73	12,47	0,734	0,274	0,802	15,02	2,51	9,47	11,73	0,276	12,47	12,62	0,272
Pb	4,66	3,92	1,44	9,276	4,238	6,944	2,14	3,89	1,01	3,49	0,387	1,44	0,97	0,314
Ta	26,70	16,10	8,25	0,686	0,258	1,212	5,90	1,56	7,07	14,92	0,339	8,25	13,50	0,273
Th	7,53	4,89	4,78	2,718	1,070	2,092	6,92	3,62	3,40	3,51	0,254	4,78	3,39	0,282
Si	16,57	6,39	7,96	0,768	0,214	1,256	5,74	1,56	6,81	5,24	0,218	7,96	12,40	0,218
V	22,80	11,90	4,26	0,683	0,234	2,347	-2,38	0,78	4,74	12,38	0,352	4,26	13,68	0,255
W	52,10	20,10	16,00	0,244	0,068	0,625	0,00	1,00	16,00	20,10	0,278	16,00	38,97	0,218
AgBr	5,63	3,30	0,72	3,134	1,158	13,889	-0,89	0,62	0,90	3,48	0,401	0,72	2,96	0,270
KCl	3,98	0,62	0,625	2,623	0,353	16,000	-2,11	0,37	1,05	1,04	0,250	0,63	3,76	0,119
LiF	11,12	4,20	6,28	1,134	0,311	1,592	5,64	1,82	5,15	3,07	0,187	6,28	8,41	0,215
MgO	28,60	8,70	14,80	0,407	0,095	0,676	9,70	1,49	12,86	6,76	0,173	14,80	23,66	0,189
NaCl	4,87	1,24	1,26	2,290	0,465	7,937	-1,11	0,69	1,48	1,46	0,248	1,26	4,24	0,169
PbS	12,70	2,98	2,48	0,865	0,164	4,032	-4,76	0,51	3,43	3,93	0,267	2,48	11,27	0,160
Diamond	107,60	12,50	57,60	0,095	0,010	0,174	20,10	1,21	53,58	8,48	0,068	57,60	104,06	0,094

Crystal: **Al**
 H= 1.01 $b_x= 0$
 ν= 0.266 $b_y= 1$

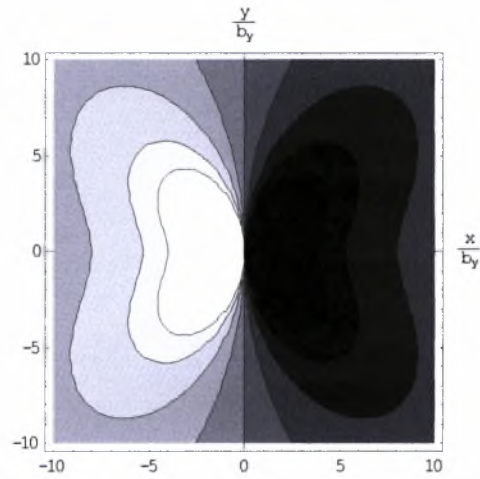


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



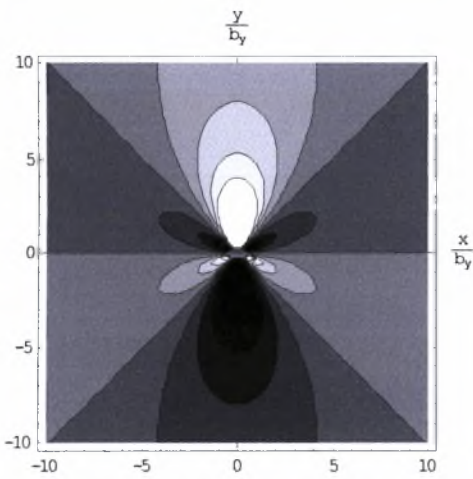
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



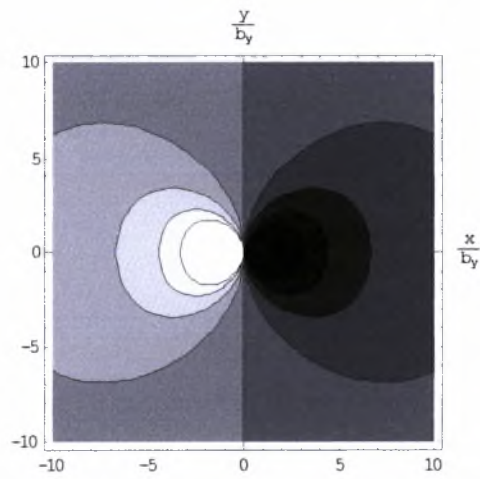
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



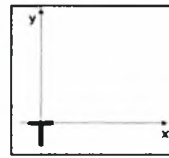
min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

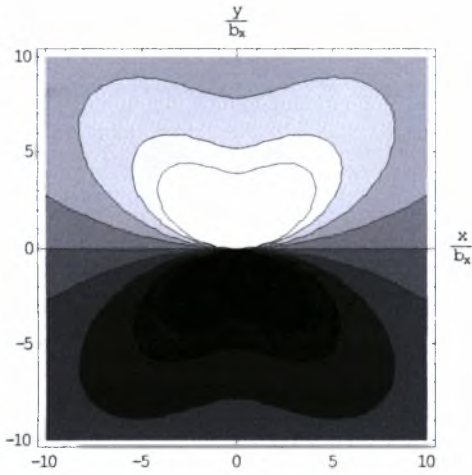


min= -0.4
 max= 0.4

Crystal: **Al**
 H= 1.01 $b_x=1$
 $\nu= 0.266$ $b_y=0$

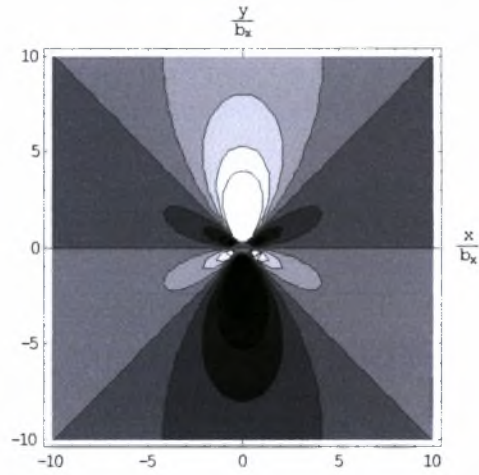


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



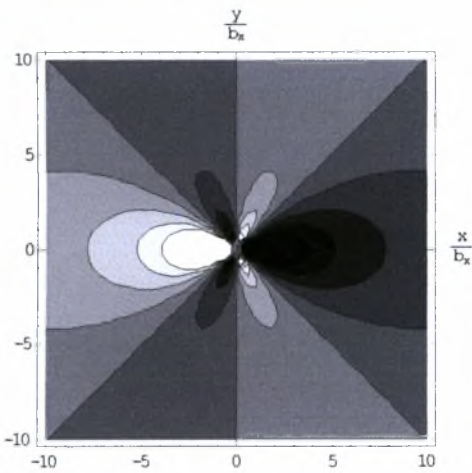
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



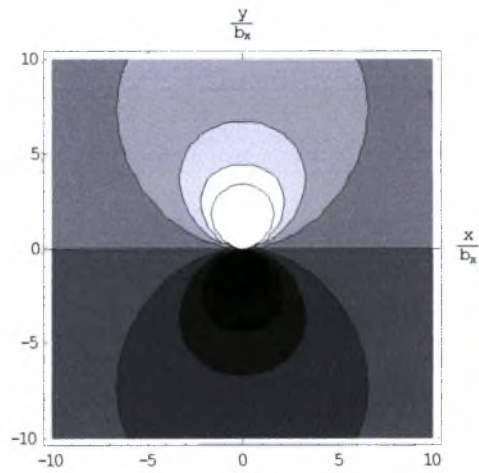
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



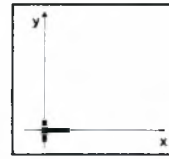
min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



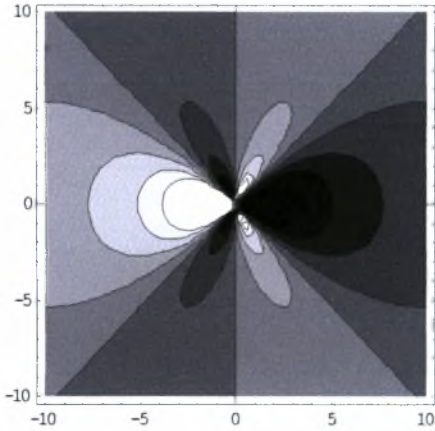
min= -0.4
 max= 0.4

Crystal: **Ag**
 H= 6.16 $b_x=0$
 $\nu= 0.301$ $b_y=1$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

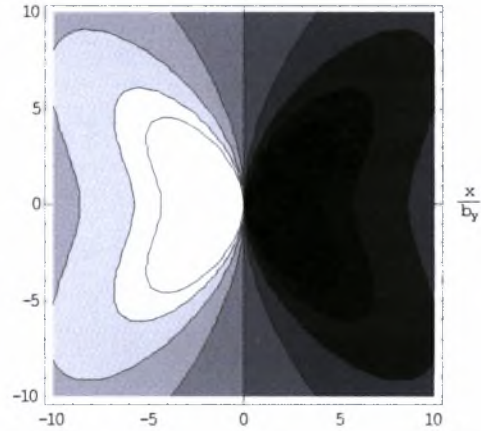
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

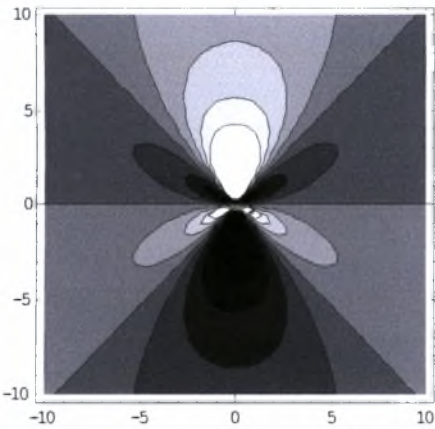
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

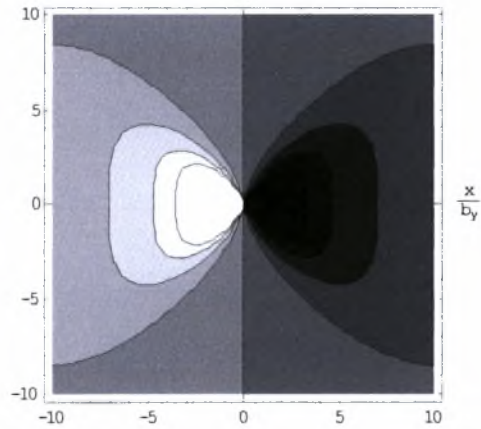
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_y}$

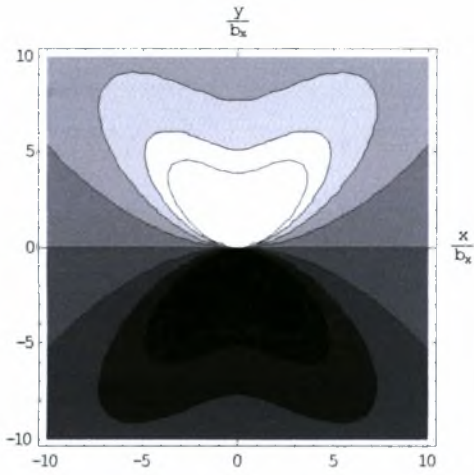


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: **Ag**
 H= 6.16 $b_x= 1$
 $\nu= 0.301$ $b_y= 0$

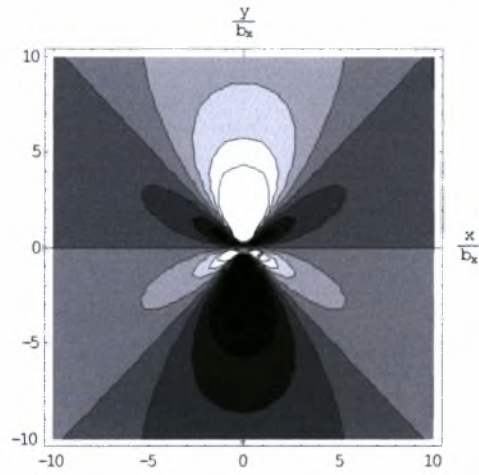


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



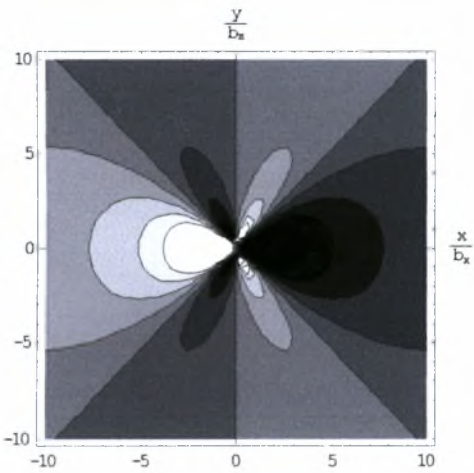
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



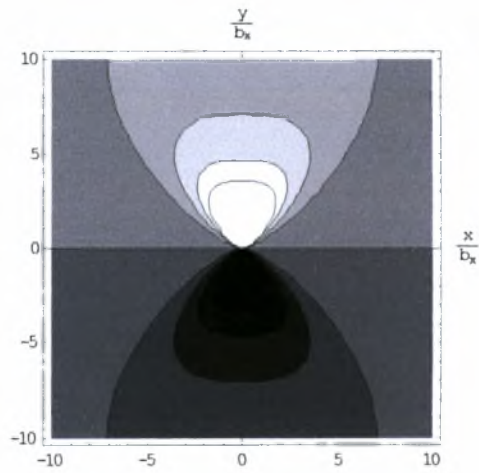
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



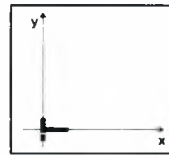
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

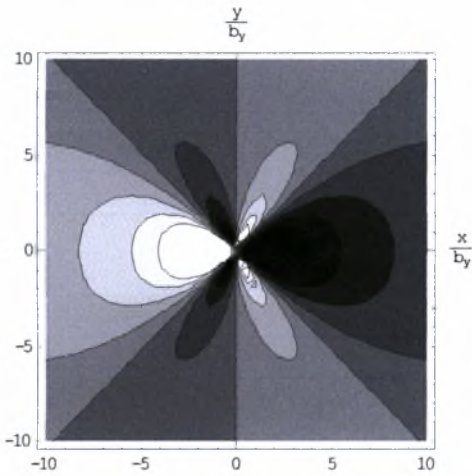


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: Au
 H= 5.50 $b_x=0$
 $\nu=0.314$ $b_y=1$

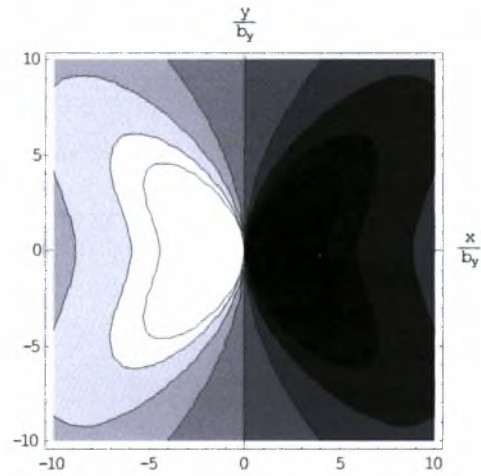


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



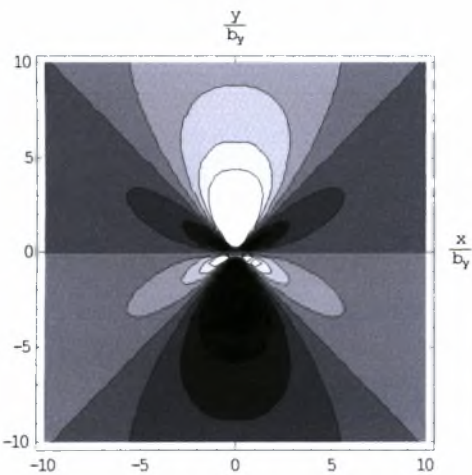
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



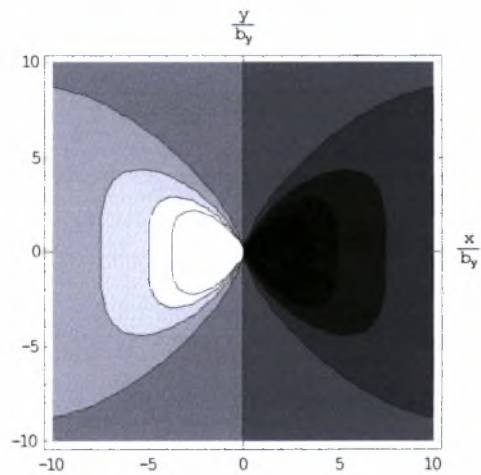
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



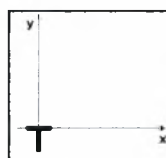
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

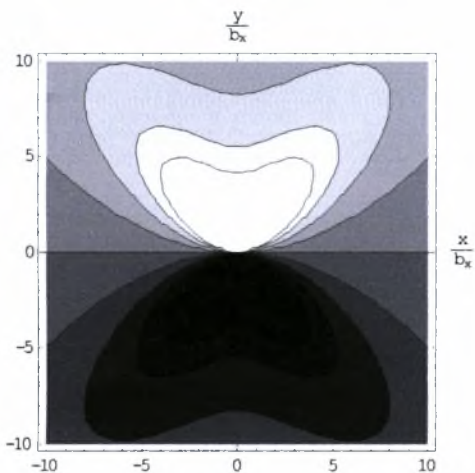


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: **Au**
 H= 5.50 $b_x= 1$
 $\nu= 0.314$ $b_y= 0$

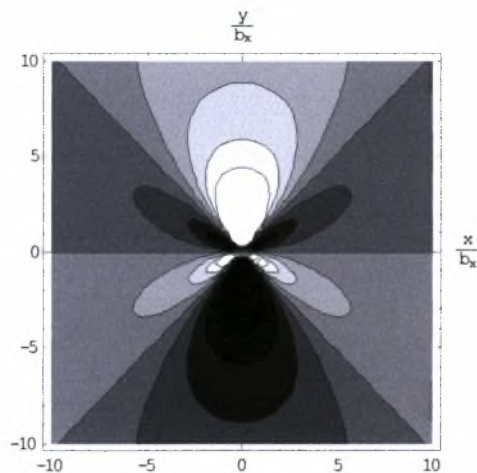


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



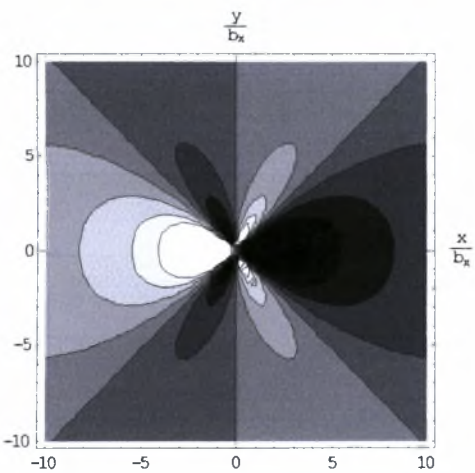
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



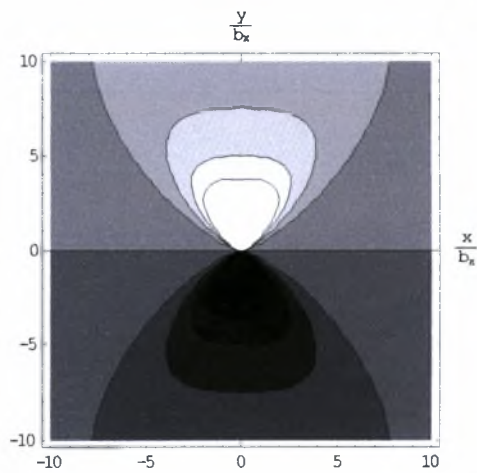
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



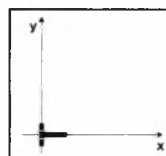
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

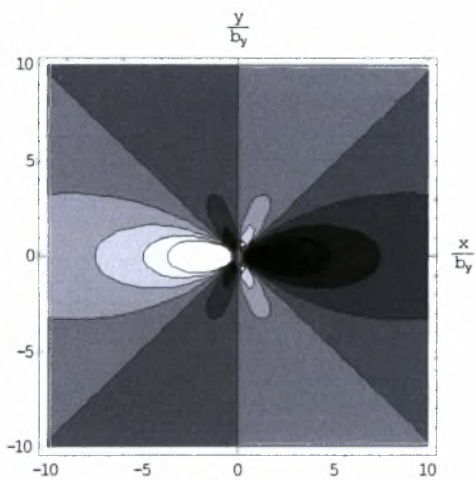


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: Cr
 H= -9.02 $b_x=0$
 $\nu= 0.124$ $b_y=1$

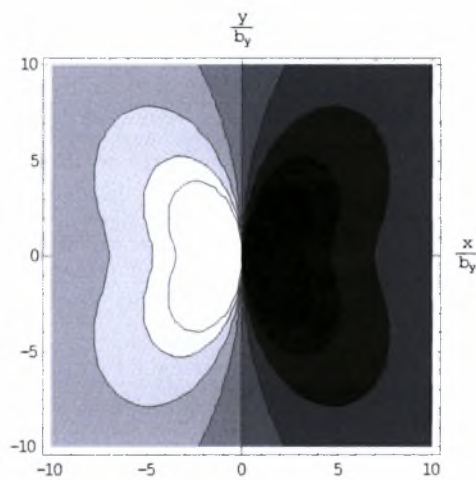


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



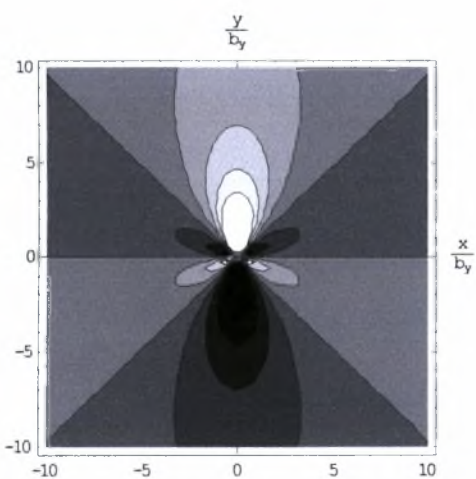
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



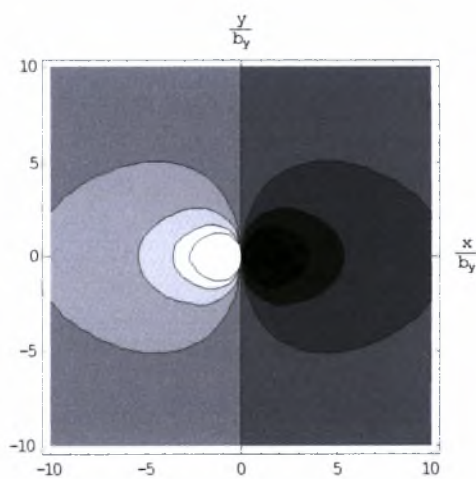
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



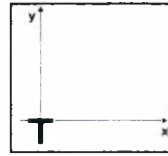
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

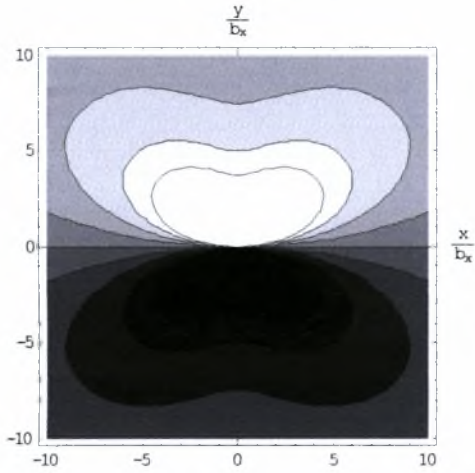


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: Cr
 H= -9.02 $b_x=1$
 $\nu=0.124$ $b_y=0$

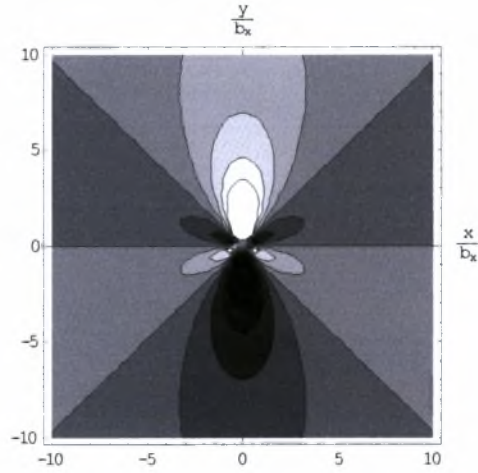


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



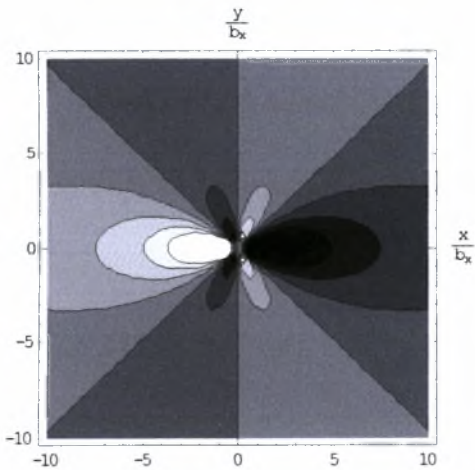
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



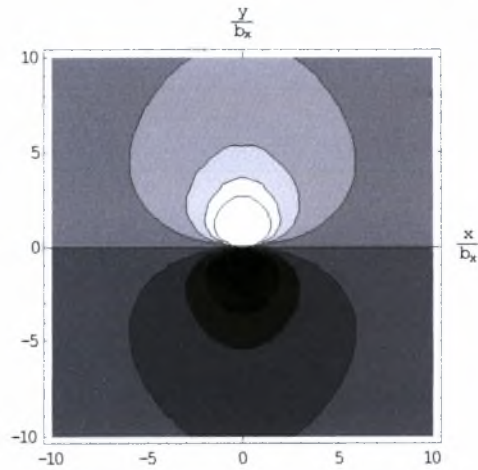
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



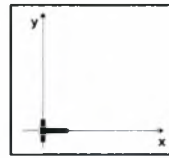
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

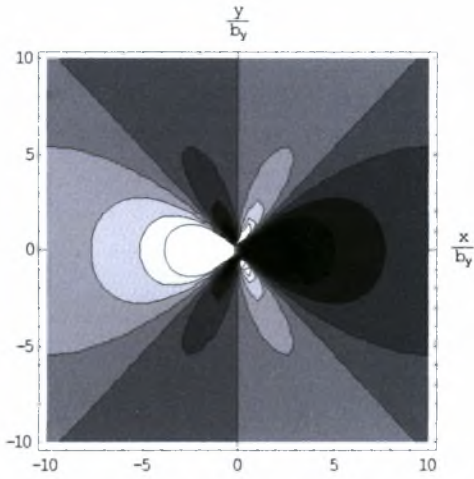


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: **Cu**
 H= 10.38 $b_x=0$
 ν= 0.295 $b_y=1$

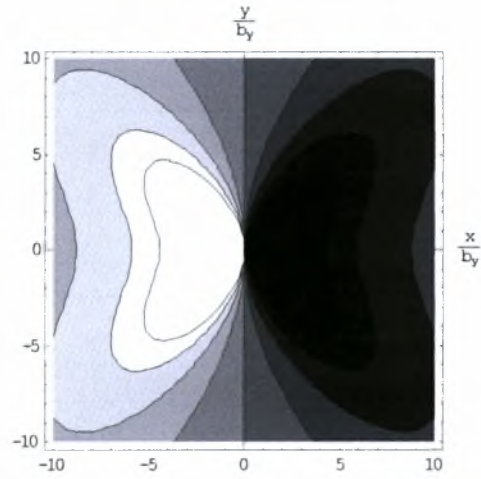


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



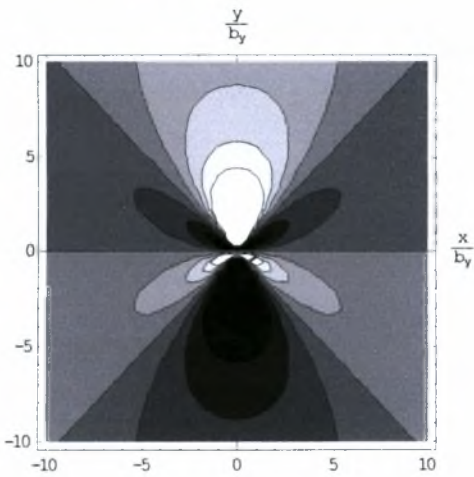
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



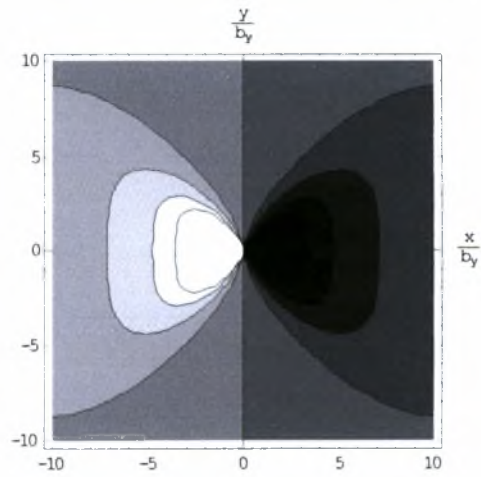
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



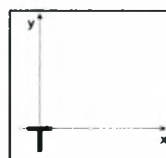
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

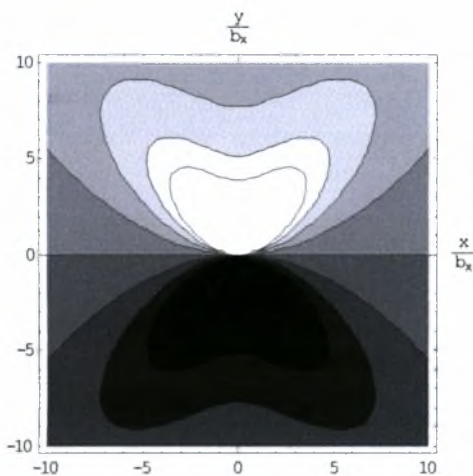


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: **Cu**
 H= 10.38 $b_x=1$
 $\nu= 0.295$ $b_y=0$

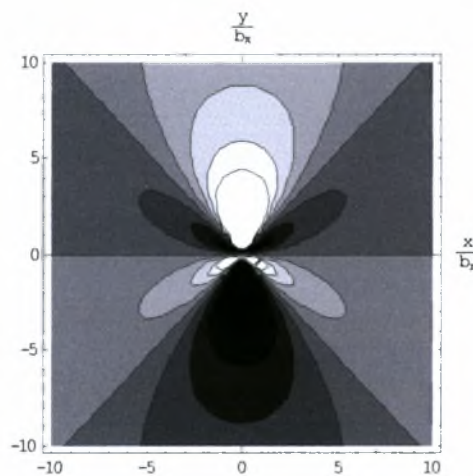


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



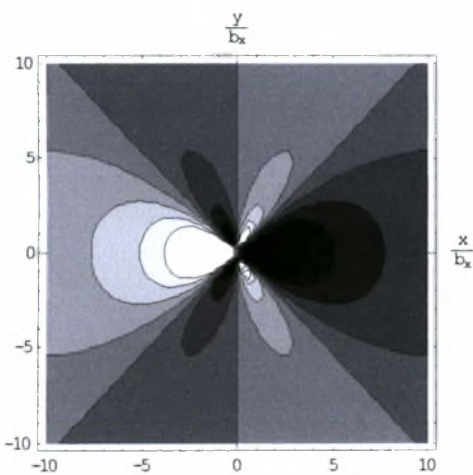
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



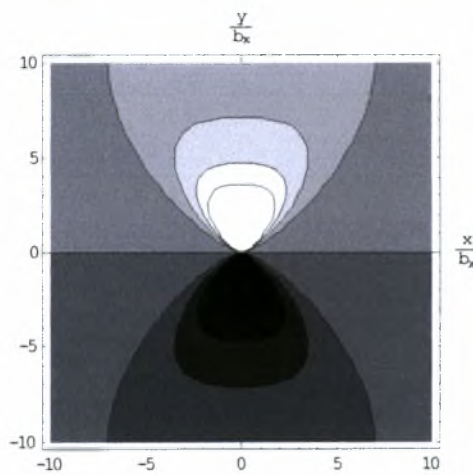
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



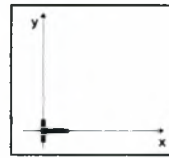
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

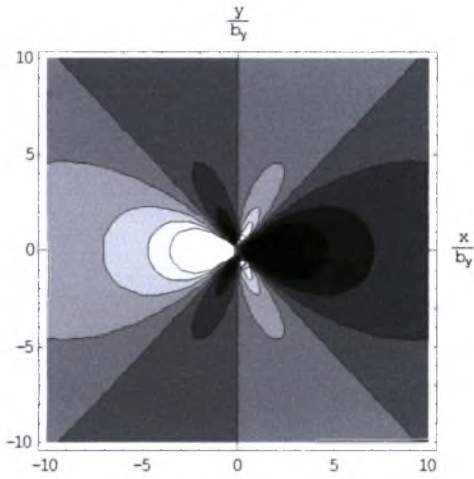


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: **Fe**
 H= 12.85 $b_x=0$
 $\nu= 0.274$ $b_y=1$

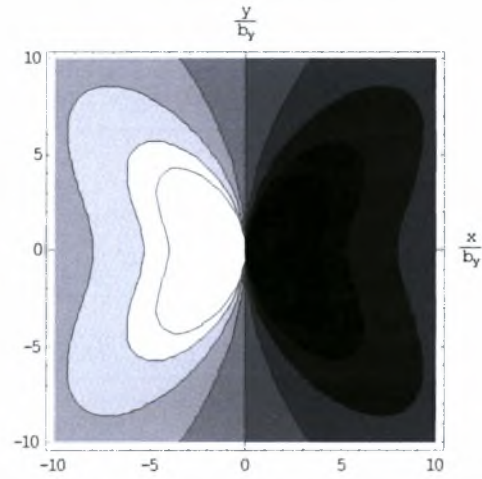


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



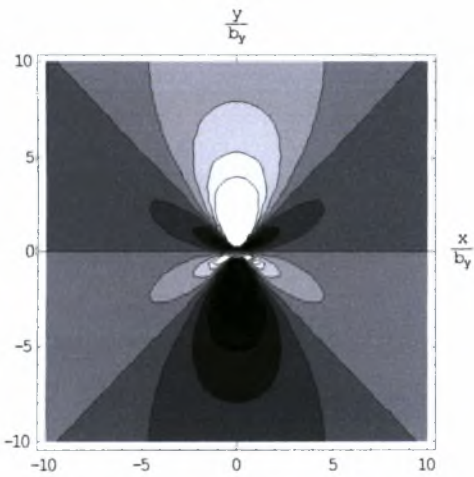
min= -0.6
 max= 0.6

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



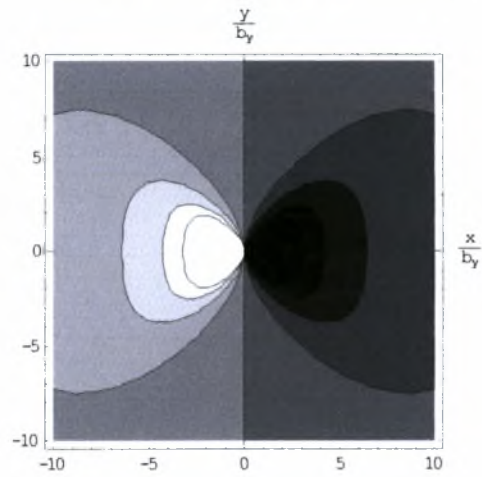
min= -0.6
 max= 0.6

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.6
 max= 0.6

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.6
 max= 0.6

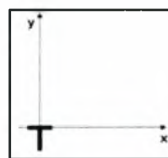
Crystal: **Fe**

H= 12.85

ν= 0.274

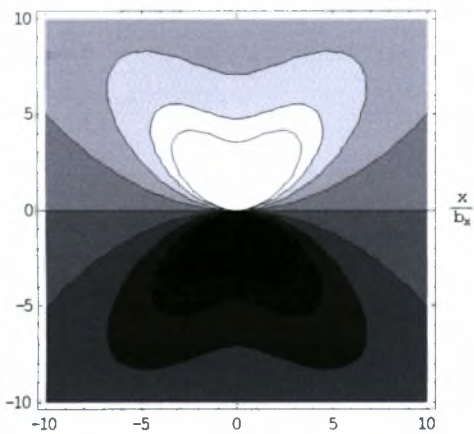
$b_x= 1$

$b_y= 0$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

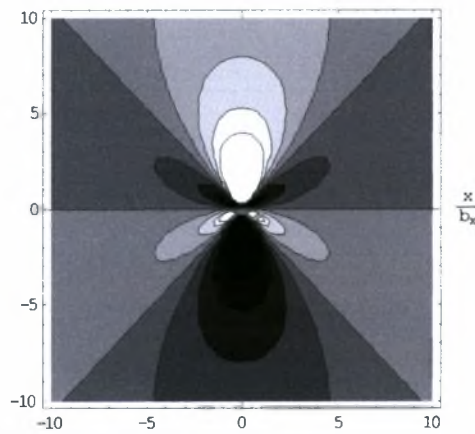
$\frac{y}{b_x}$



min= -0.6
max= 0.6

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

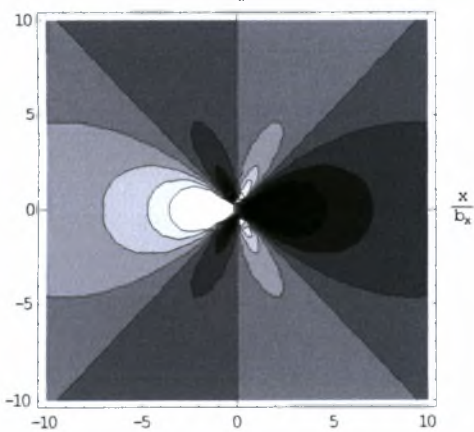
$\frac{y}{b_x}$



min= -0.6
max= 0.6

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

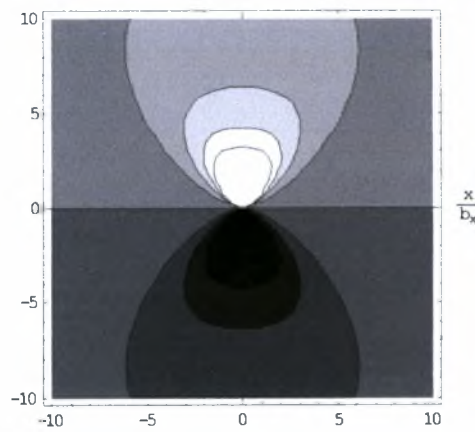
$\frac{y}{b_x}$



min= -0.6
max= 0.6

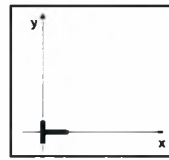
$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_x}$

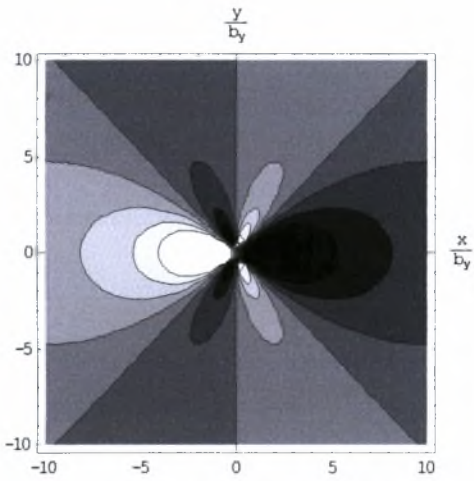


min= -0.6
max= 0.6

Crystal: **Ge**
 H= 5.36 $b_x=0$
 $\nu= 0.214$ $b_y=1$

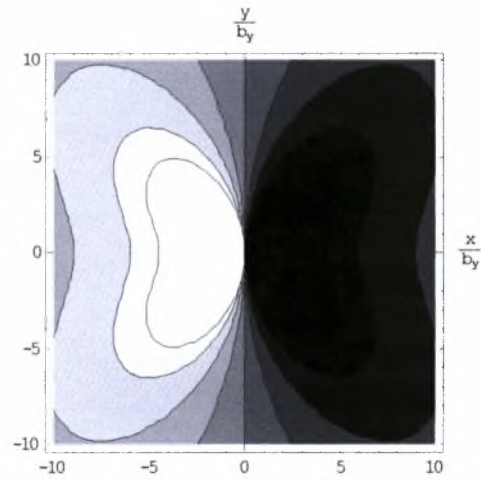


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



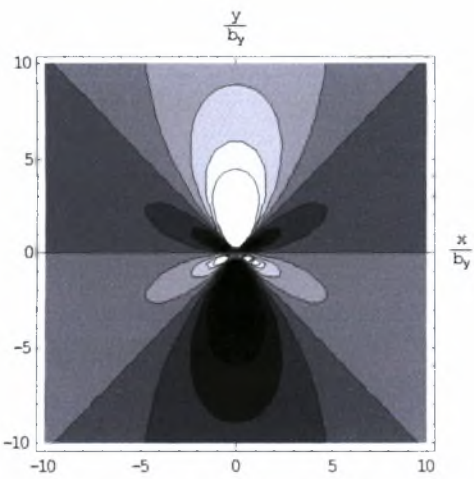
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



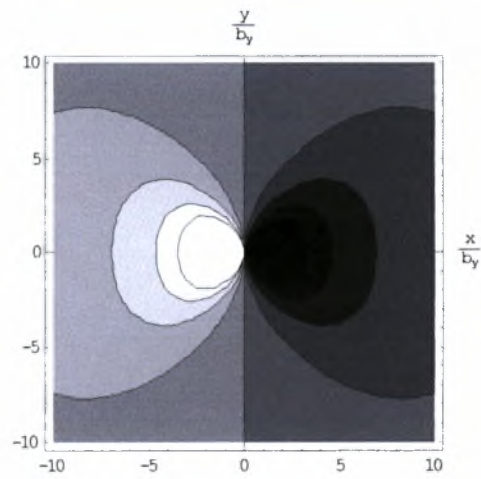
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



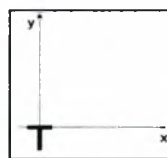
min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

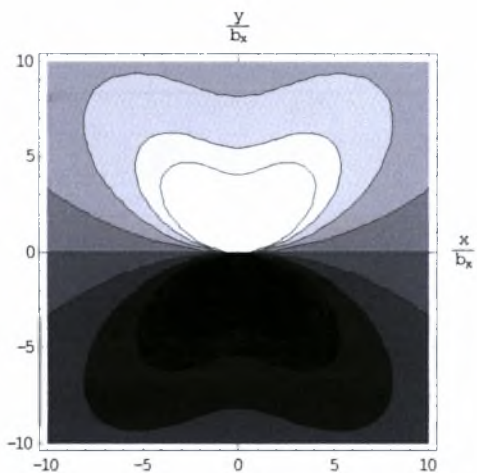


min= -0.4
 max= 0.4

Crystal: **Ge**
 H= 5.36 $b_x= 1$
 ν= 0.214 $b_y= 0$

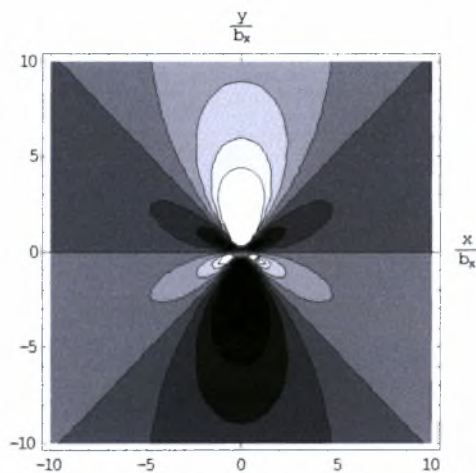


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



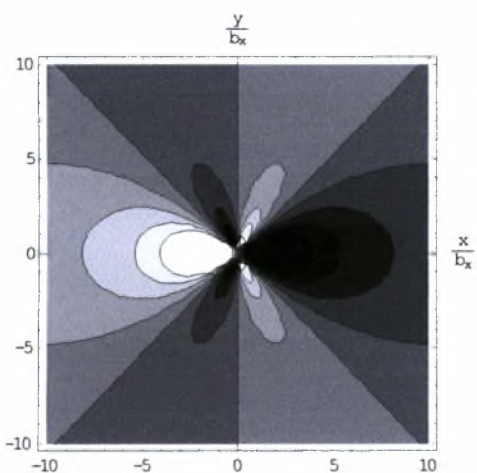
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



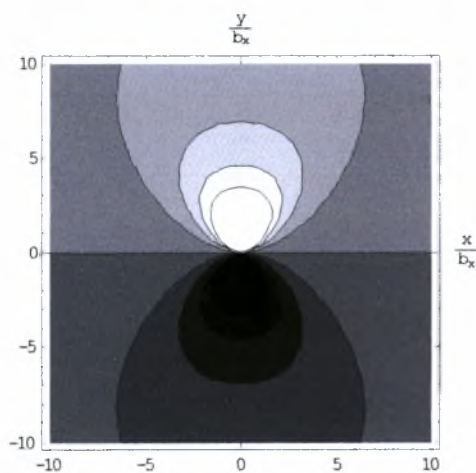
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



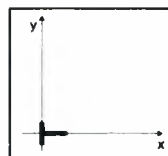
min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

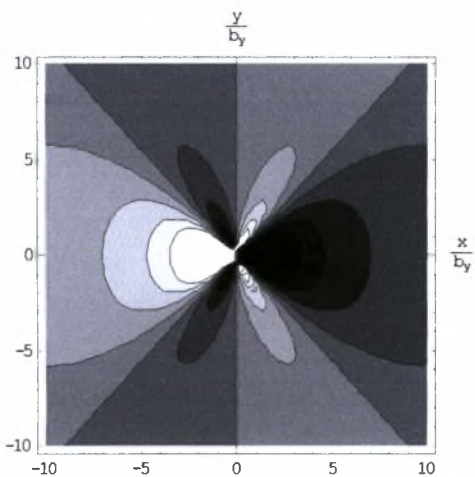


min= -0.4
 max= 0.4

Crystal: **K**
 H= 0.443 $b_x=0$
 ν= 0.310 $b_y=1$

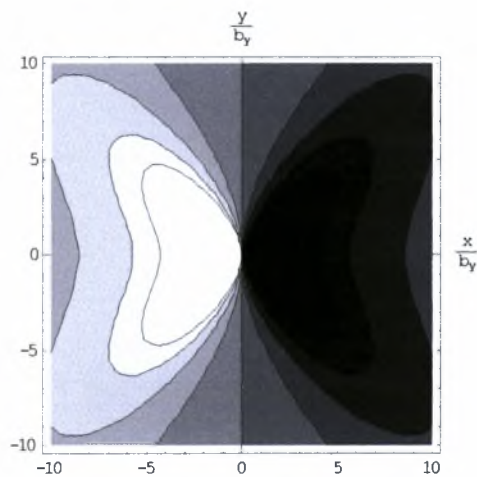


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



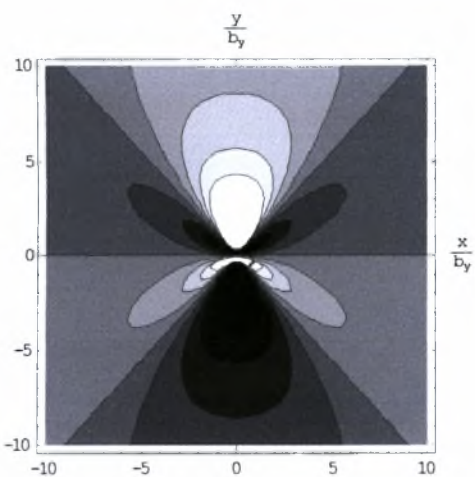
min= -1.2
 max= 1.2

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



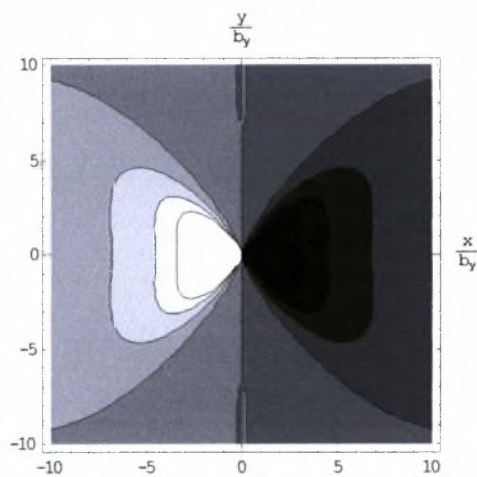
min= -1.2
 max= 1.2

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



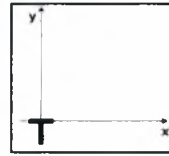
min= -1.2
 max= 1.2

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

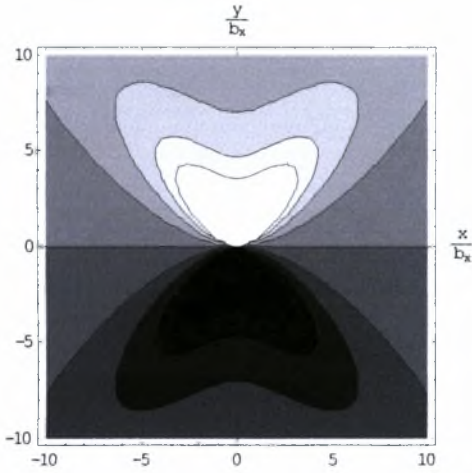


min= -1.2
 max= 1.2

Crystal: **K**
 H= 0.443 $b_x=1$
 ν= 0.310 $b_y=0$

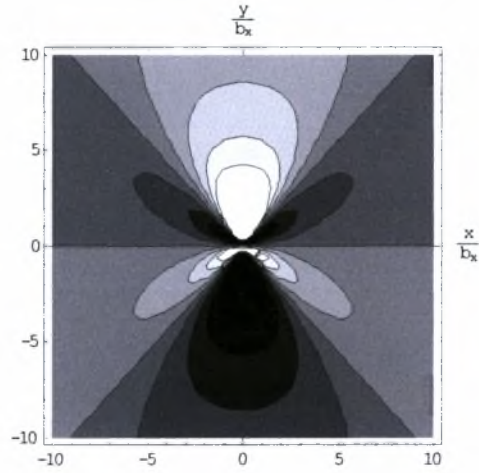


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



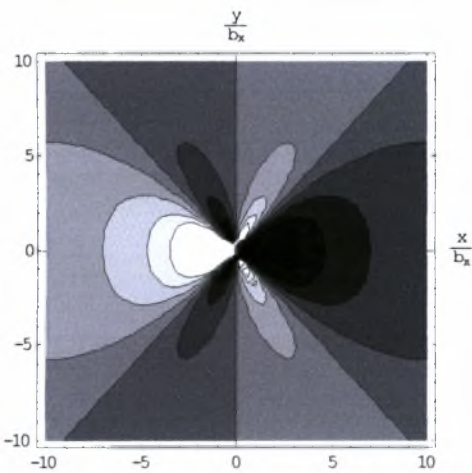
min= -1.2
 max= 1.2

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



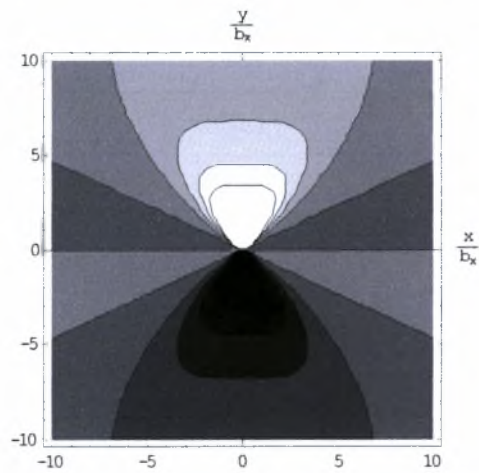
min= -1.2
 max= 1.2

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



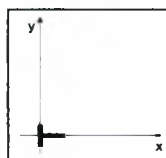
min= -1.2
 max= 1.2

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



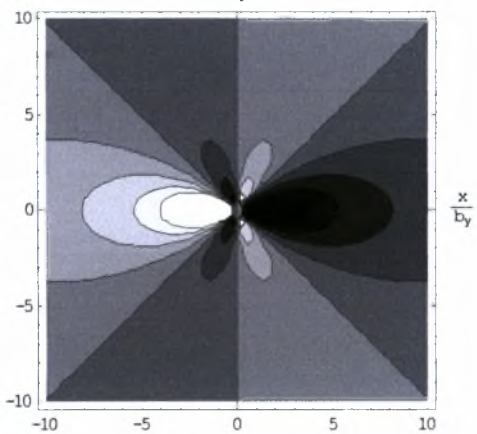
min= -1.2
 max= 1.2

Crystal: **Mo**
 H= -6.40 $b_x=0$
 $\nu= 0.217$ $b_y=1$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

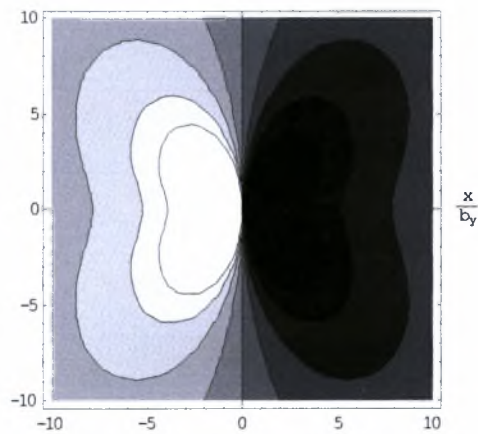
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

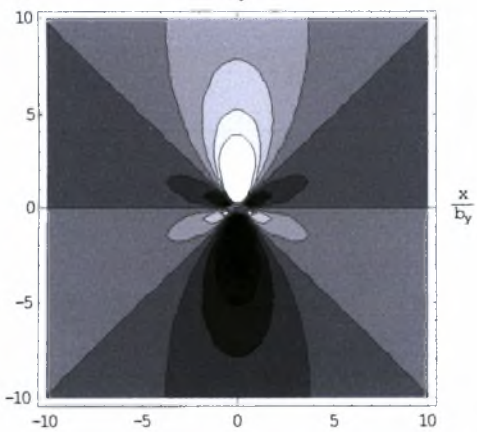
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

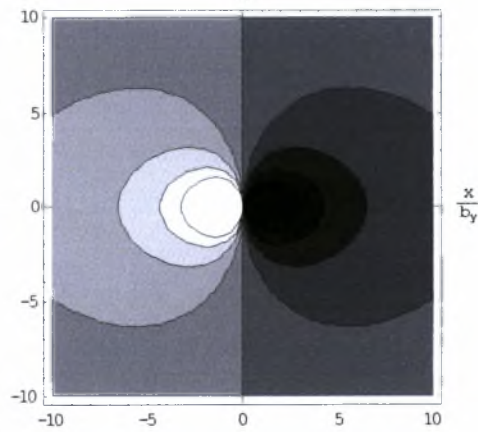
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
 max= 0.3

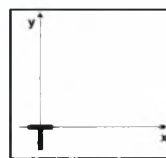
$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_y}$

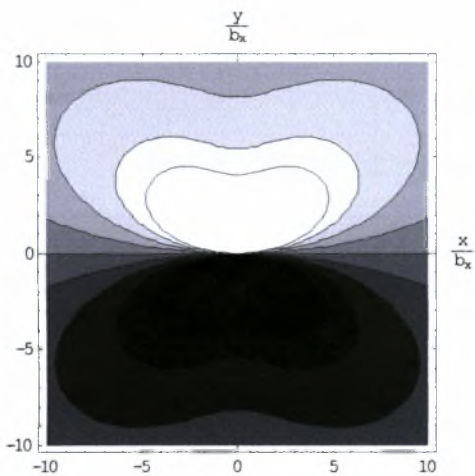


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: **Mo**
 H= -6.40 $b_x=1$
 ν= 0.217 $b_y=0$

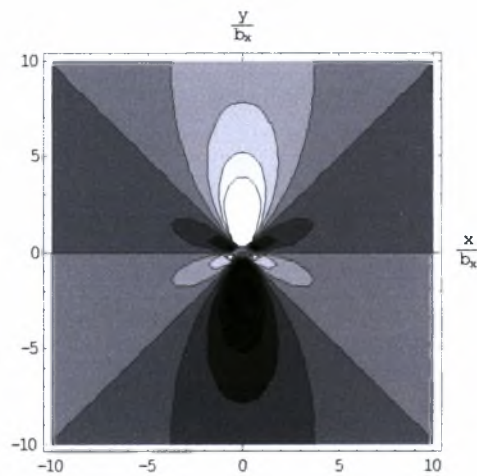


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



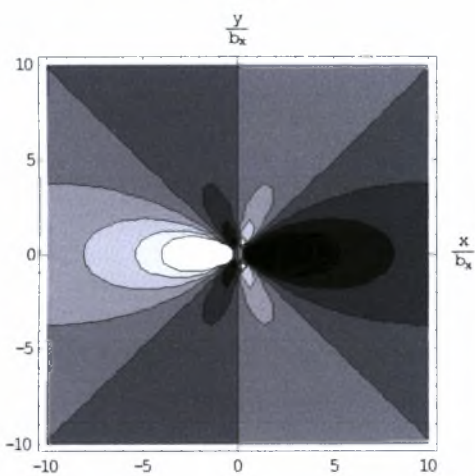
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



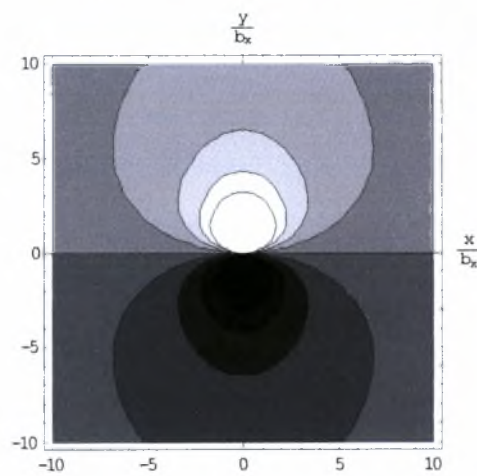
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



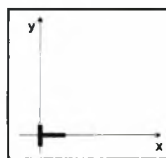
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

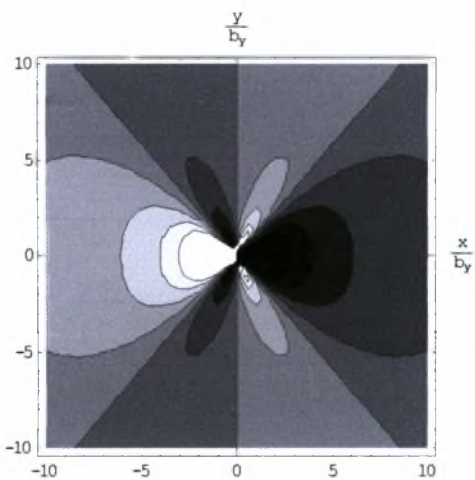


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: Na
 H= 1.028 $b_x= 0$
 ν= 0.302 $b_y= 1$

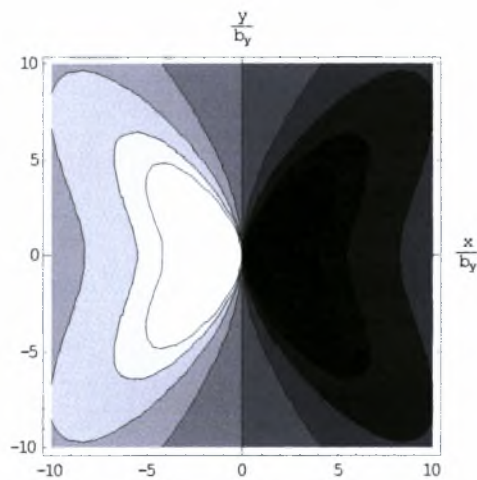


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



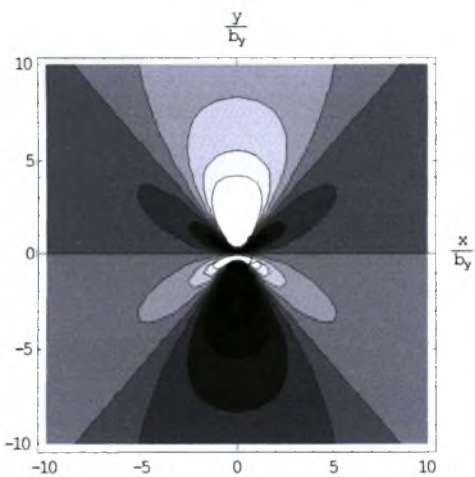
min= -1.4
 max= 1.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



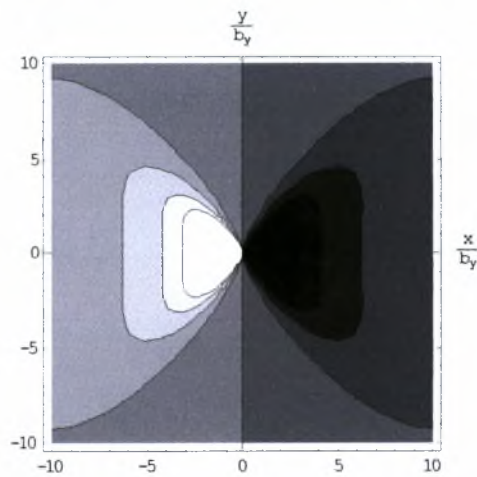
min= -1.4
 max= 1.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



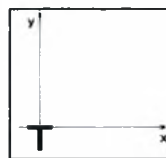
min= -1.4
 max= 1.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

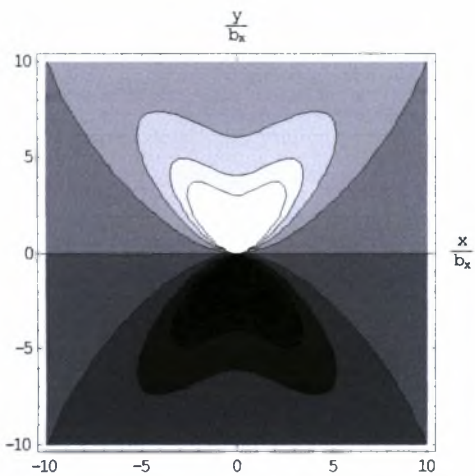


min= -1.4
 max= 1.4

Crystal: Na
 H= 1.028 $b_x=1$
 $\nu= 0.302$ $b_y=0$

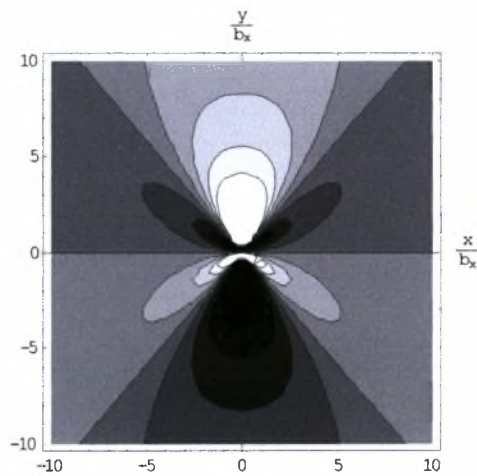


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



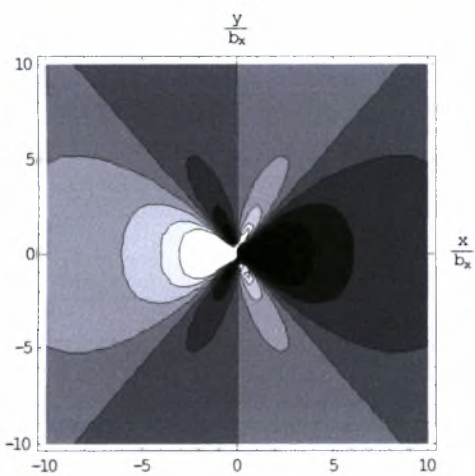
min= -1.4
 max= 1.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



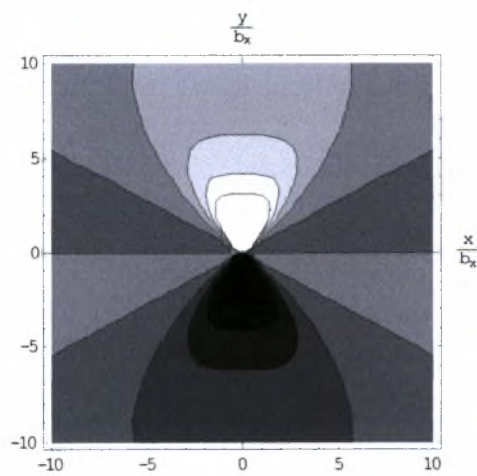
min= -1.4
 max= 1.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



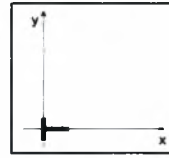
min= -1.4
 max= 1.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

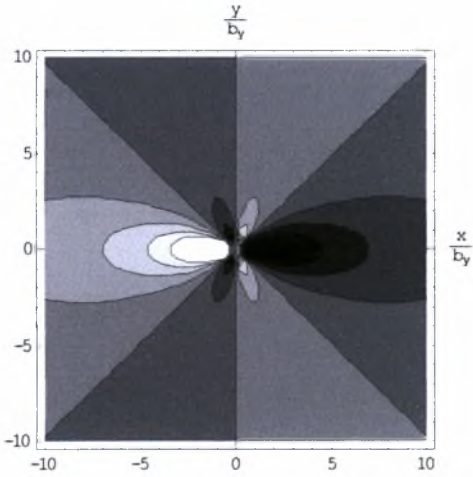


min= -1.4
 max= 1.4

Crystal: **Nb**
 H= -5.46 $b_x=0$
 $\nu=0.261$ $b_y=1$

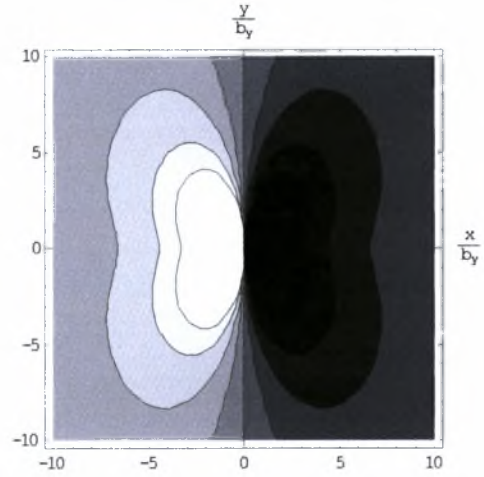


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



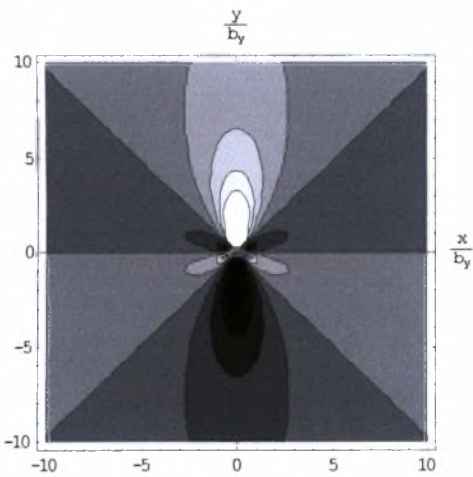
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



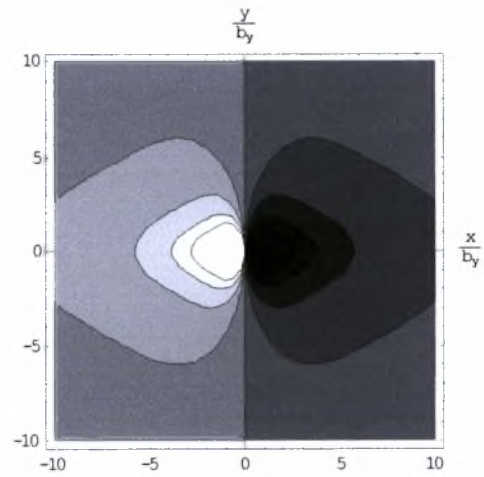
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



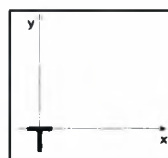
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

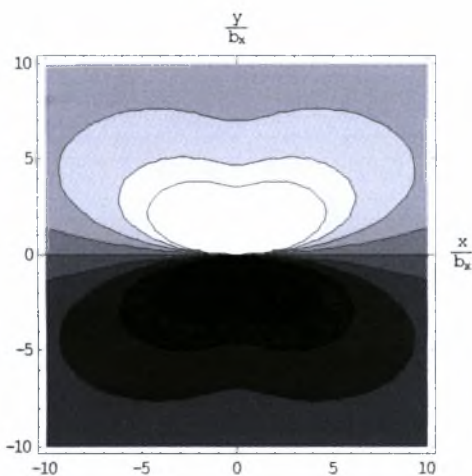


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: **Nb**
 H= -5.46 $b_x=1$
 ν= 0.261 $b_y=0$

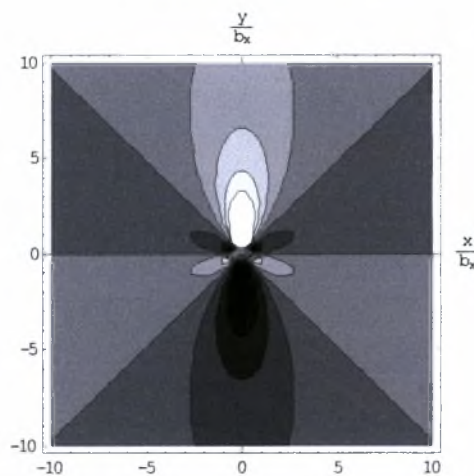


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



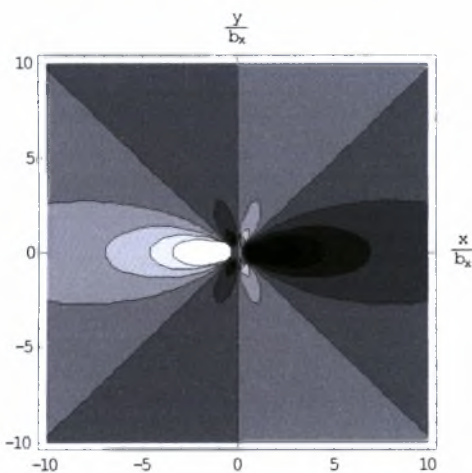
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



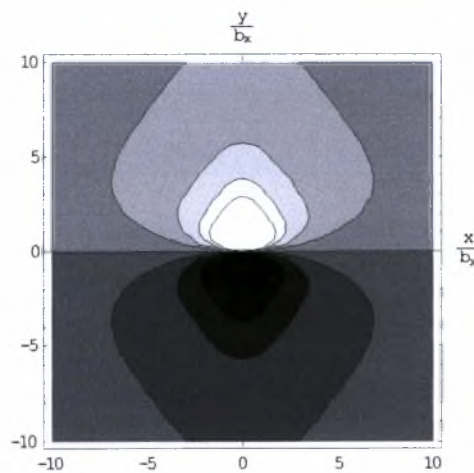
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



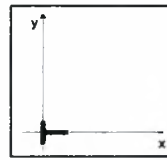
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

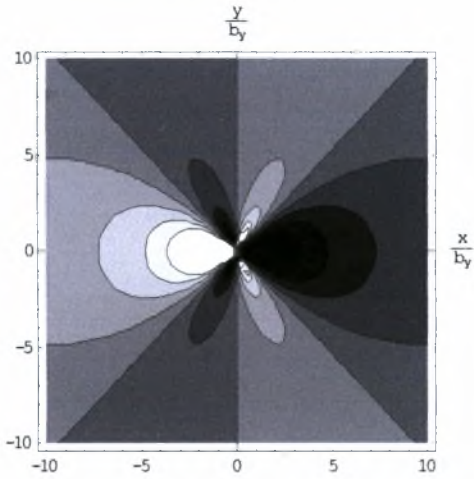


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: Ni
 H= 15.02 $b_x=0$
 $\nu= 0.272$ $b_y=1$

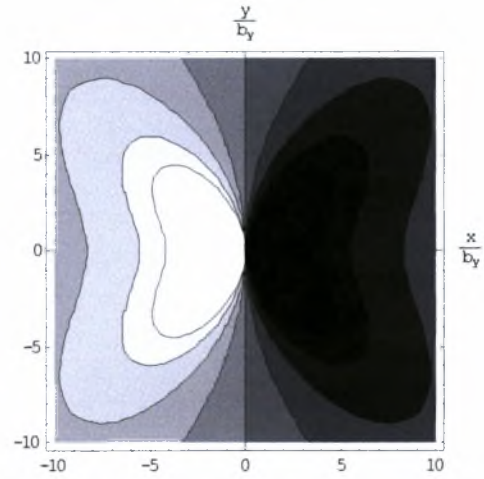


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



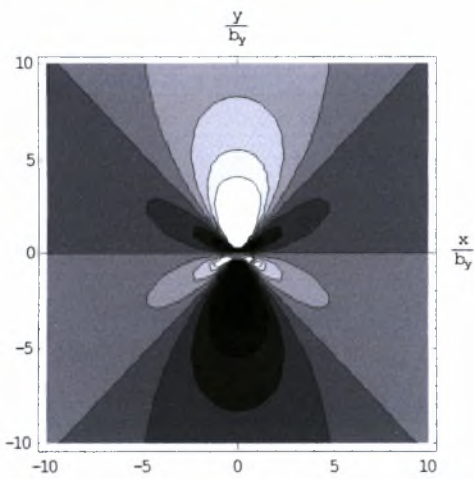
min= -0.6
 max= 0.6

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



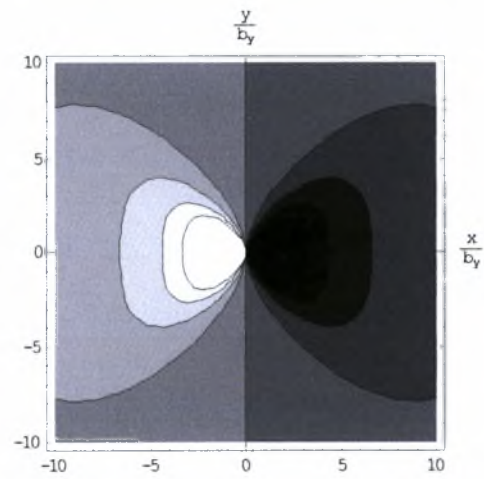
min= -0.6
 max= 0.6

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



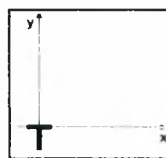
min= -0.6
 max= 0.6

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

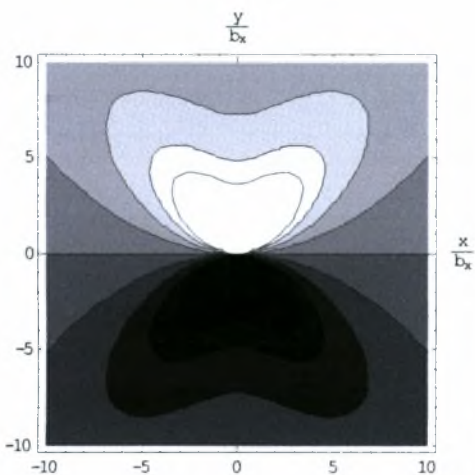


min= -0.6
 max= 0.6

Crystal: Ni
 H= 15.02 $b_x= 1$
 $\nu= 0.272$ $b_y= 0$

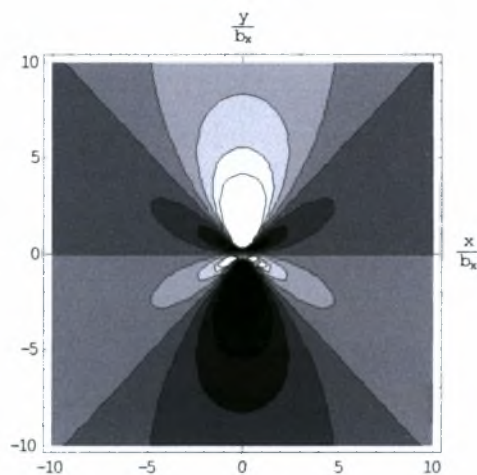


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



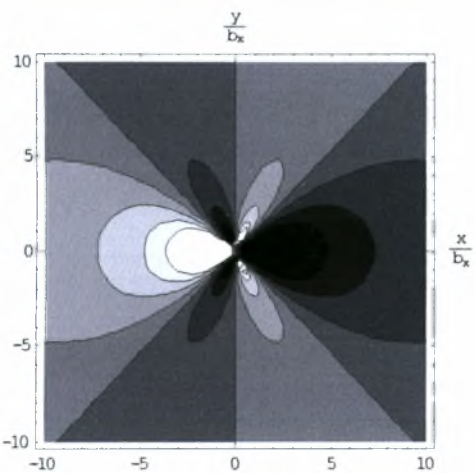
min= -0.6
 max= 0.6

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



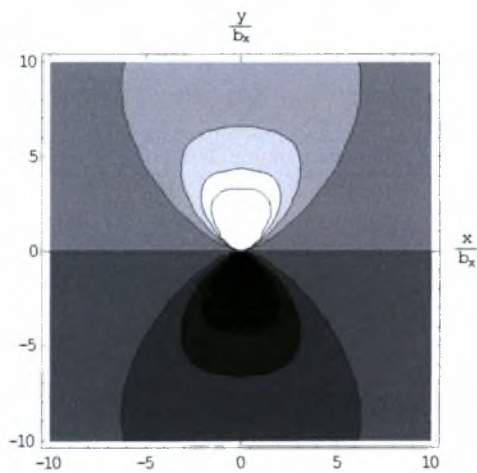
min= -0.6
 max= 0.6

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.6
 max= 0.6

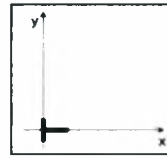
$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



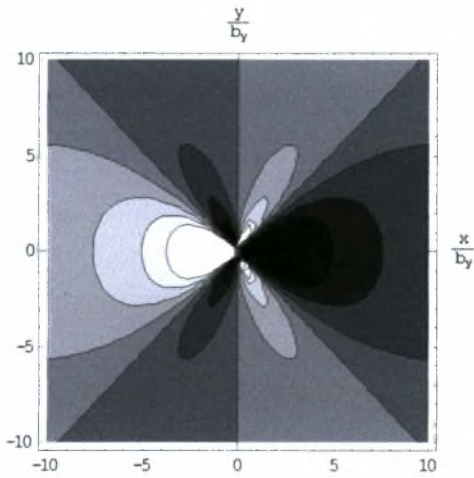
min= -0.6
 max= 0.6

Crystal: **Pb**
 H= 2.14
 ν= 0.314

$b_x=0$
 $b_y=1$

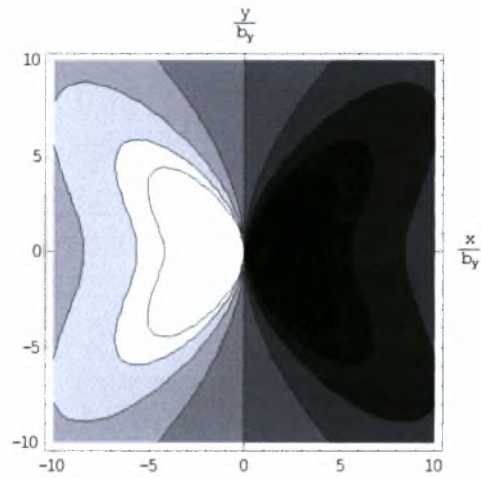


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



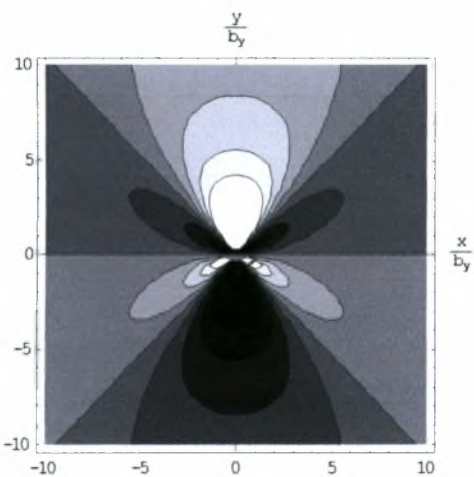
min= -0.9
 max= 0.9

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



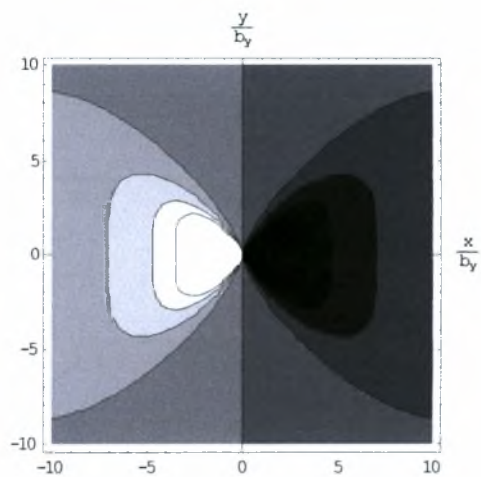
min= -0.9
 max= 0.9

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.9
 max= 0.9

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

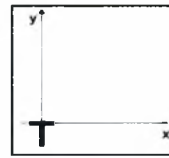


min= -0.9
 max= 0.9

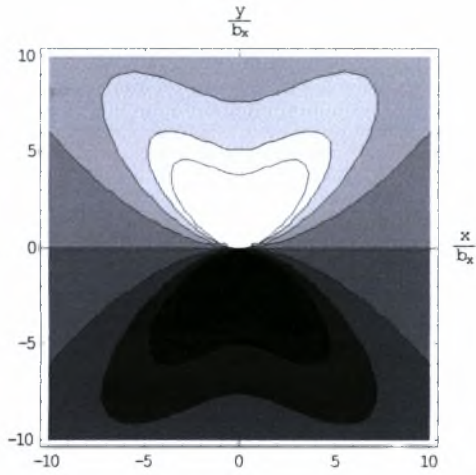
Crystal: **Pb**

H= 2.14
ν= 0.314

$b_x= 1$
 $b_y= 0$

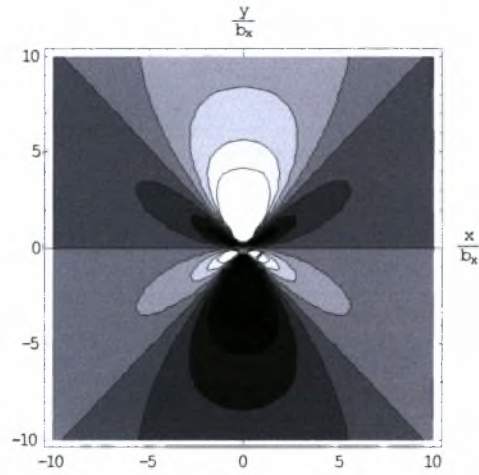


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



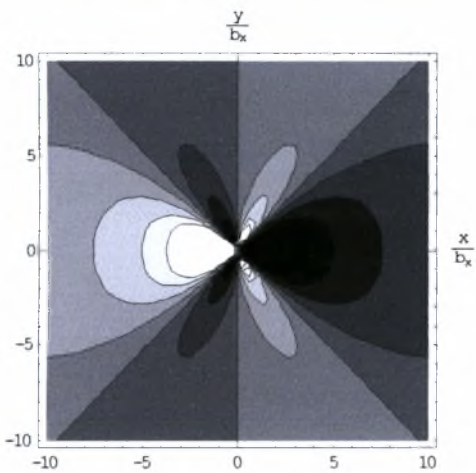
min= -0.9
max= 0.9

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



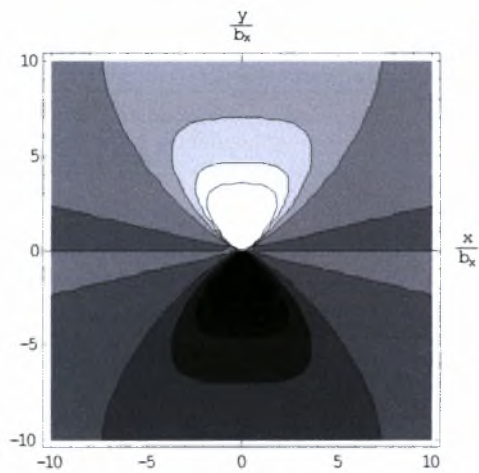
min= -0.9
max= 0.9

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.9
max= 0.9

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.9
max= 0.9

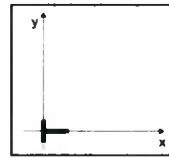
Crystal: **Ta**

H= 5.90

$\nu= 0.273$

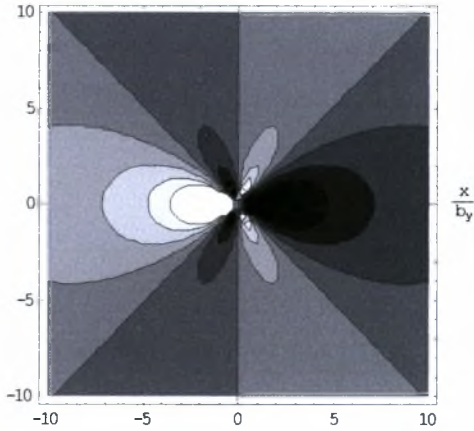
$b_x= 0$

$b_y= 1$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

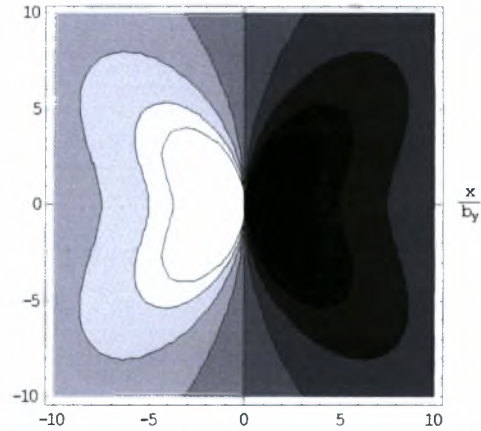
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.5
max= 0.5

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

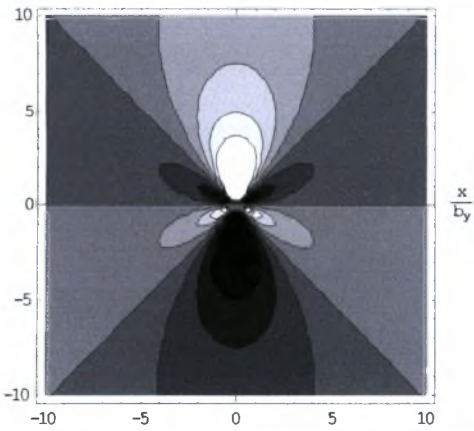
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.5
max= 0.5

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

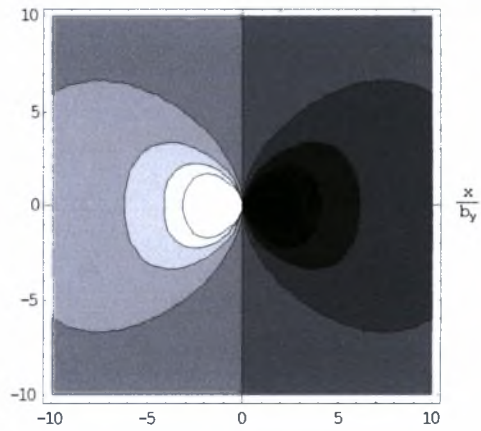
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.5
max= 0.5

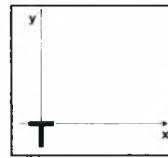
$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_y}$

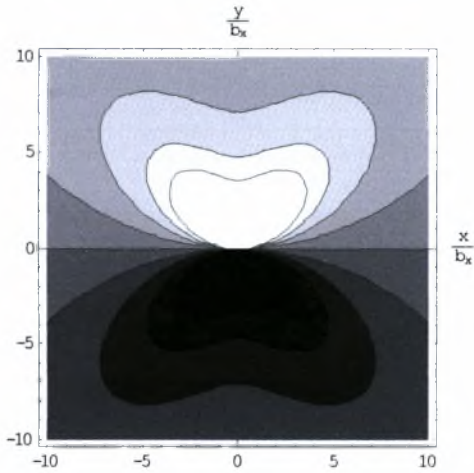


min= -0.5
max= 0.5

Crystal: **Ta**
 H= 5.90 $b_x=1$
 $\nu=0.273$ $b_y=0$

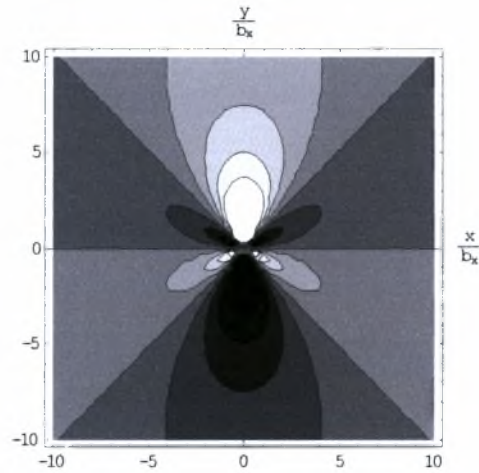


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



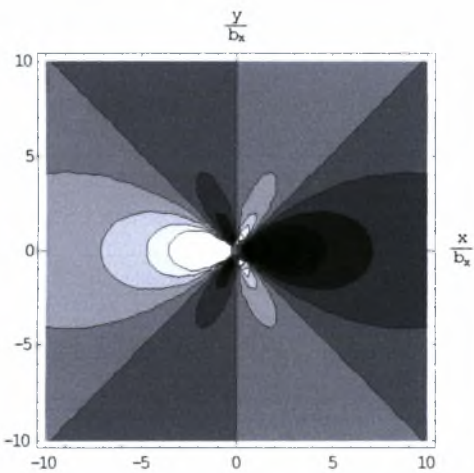
min= -0.5
 max= 0.5

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



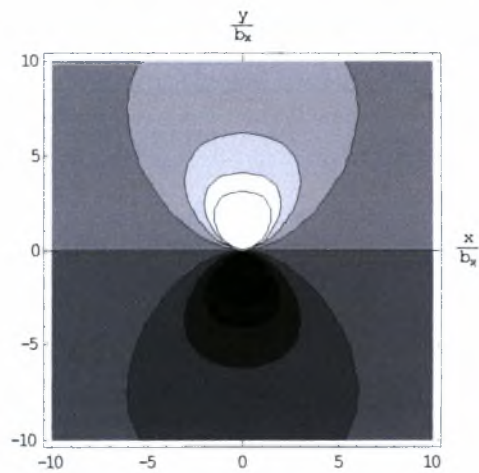
min= -0.5
 max= 0.5

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



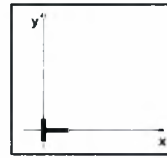
min= -0.5
 max= 0.5

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

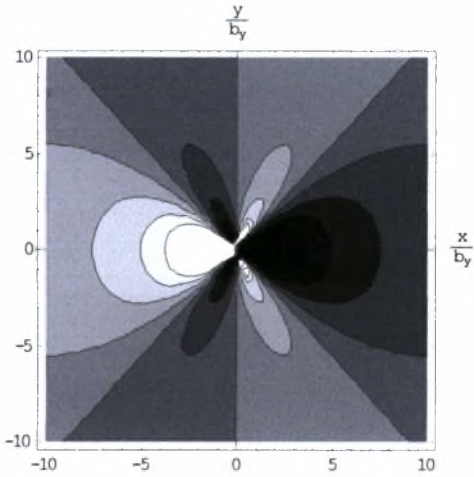


min= -0.5
 max= 0.5

Crystal: **Th**
 H= 6.92 $b_x=0$
 ν= 0.282 $b_y=1$

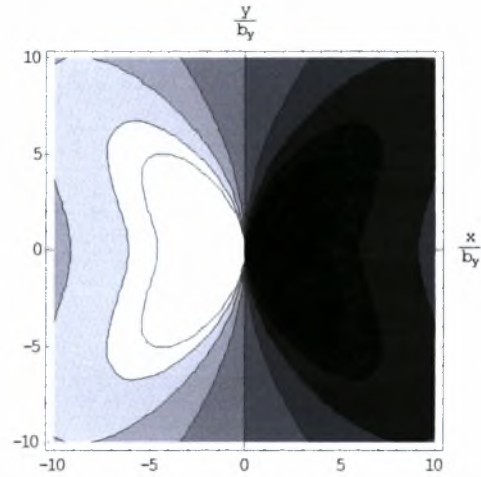


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



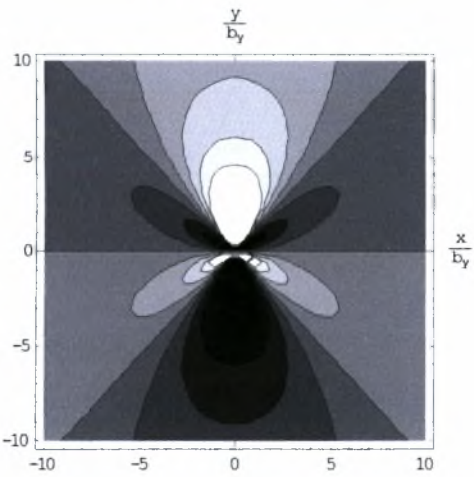
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



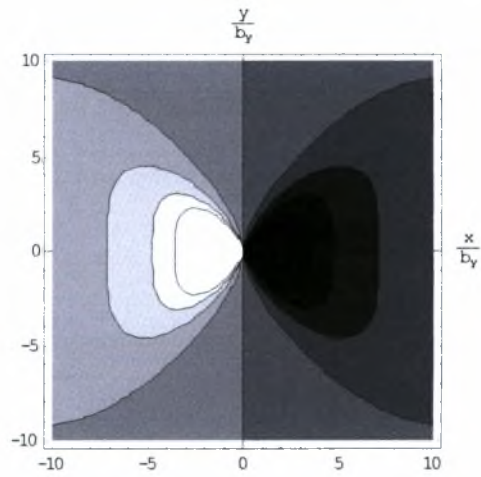
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



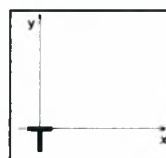
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

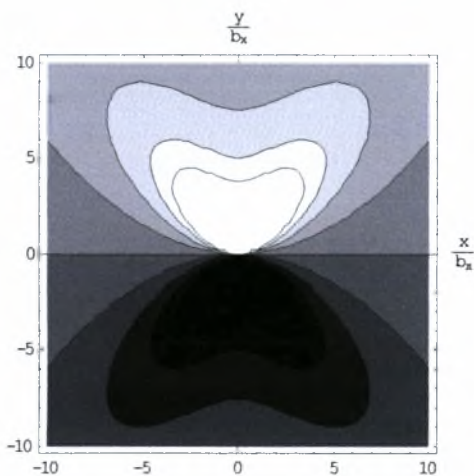


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: **Th**
 H= 6.92 $b_x= 1$
 $\nu= 0.282$ $b_y= 0$

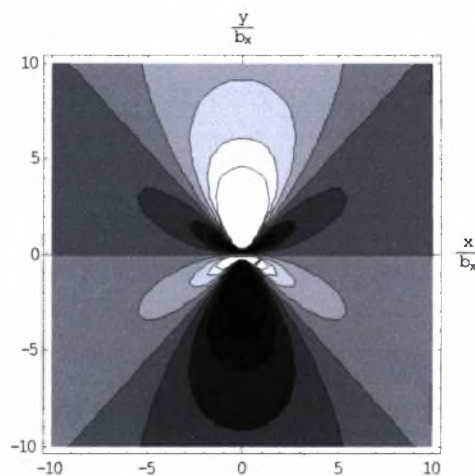


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



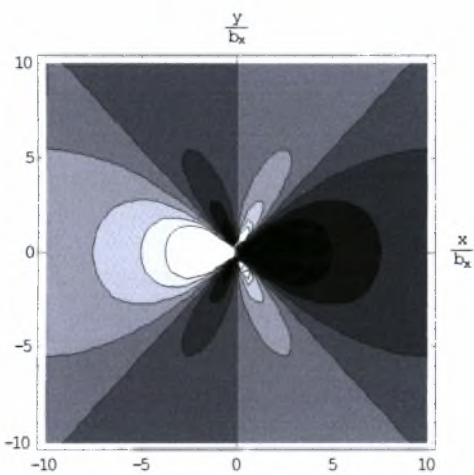
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



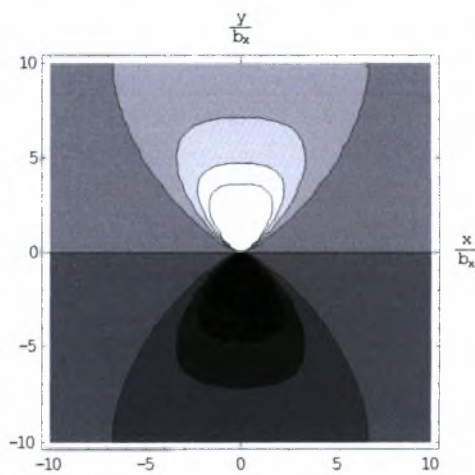
min= -0.7
 max= 0.7

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



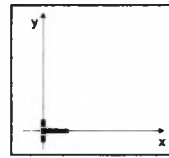
min= -0.7
 max= 0.7

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

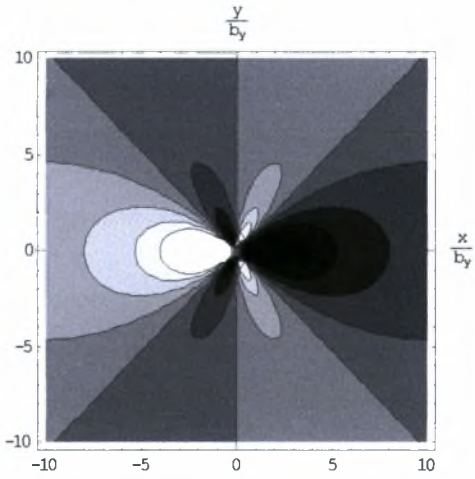


min= -0.7
 max= 0.7

Crystal: **Si**
 H= 5.74 $b_x= 0$
 $\nu= 0.218$ $b_y= 1$

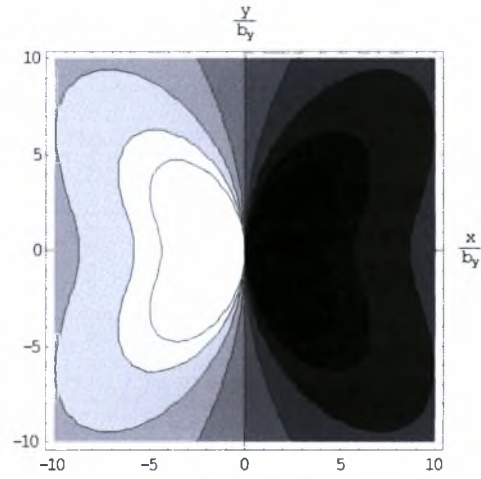


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



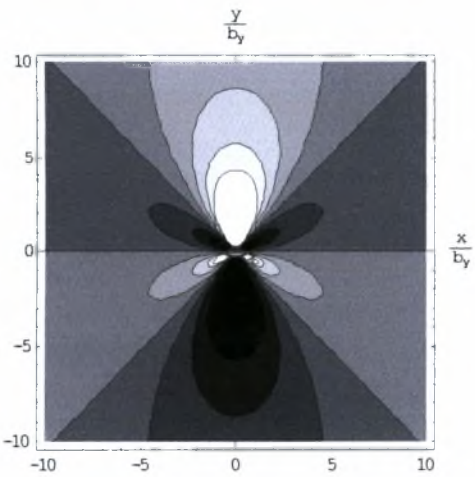
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



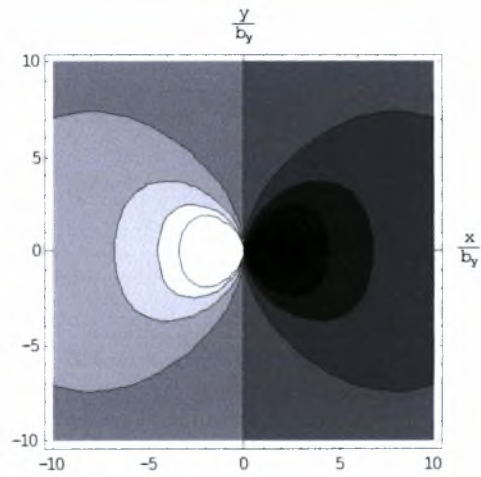
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



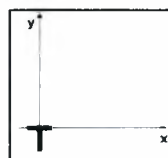
min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

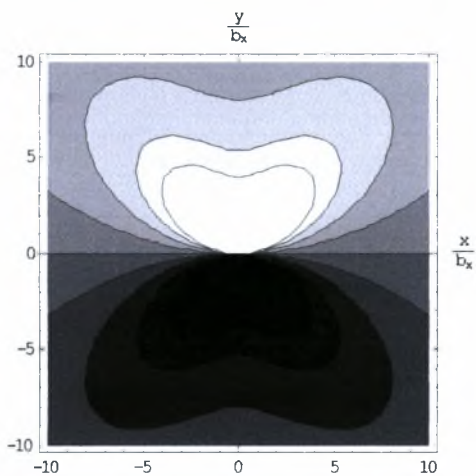


min= -0.4
 max= 0.4

Crystal: Si
 H= 5.74 $b_x=1$
 $\nu= 0.218$ $b_y=0$

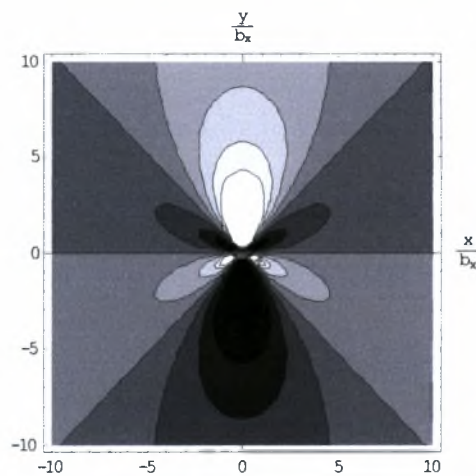


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



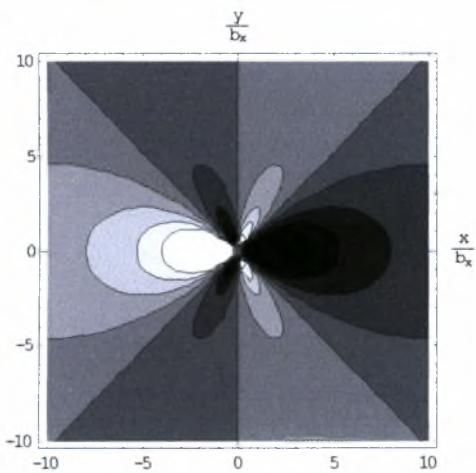
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



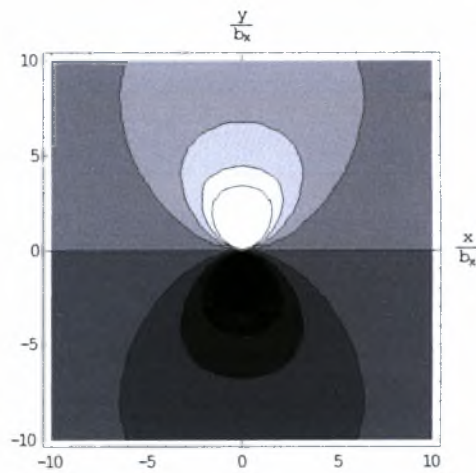
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



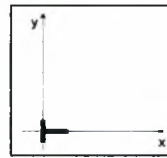
min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

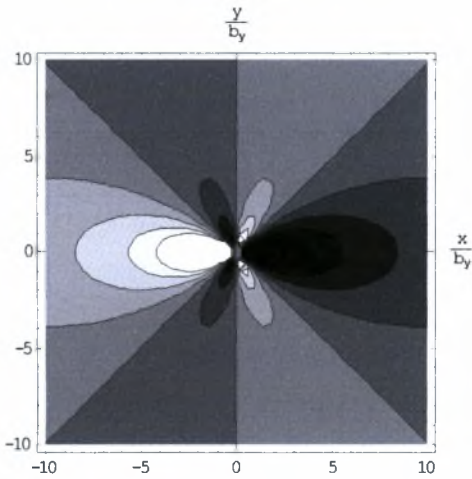


min= -0.4
 max= 0.4

Crystal: V
 H= -2.38 $b_x= 0$
 $\nu= 0.255$ $b_y= 1$

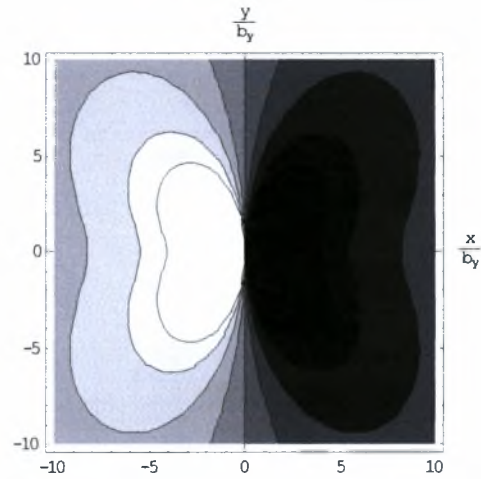


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



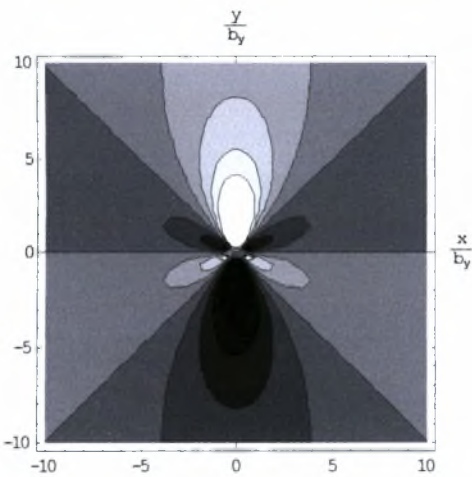
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



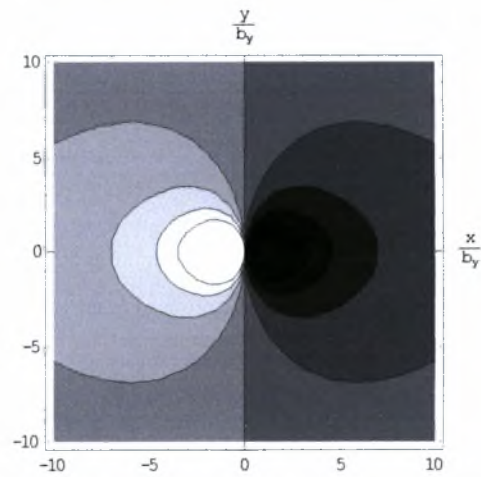
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



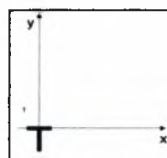
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

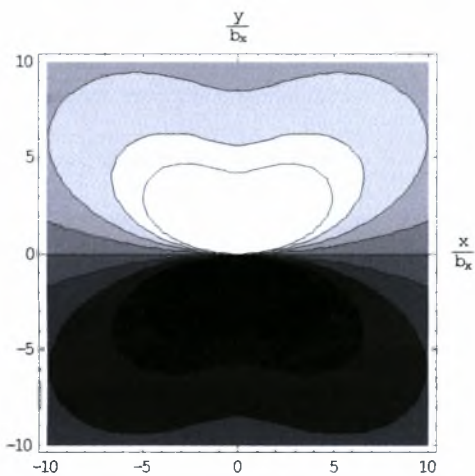


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: V
 H= -2.38 $b_x= 1$
 ν= 0.255 $b_y= 0$

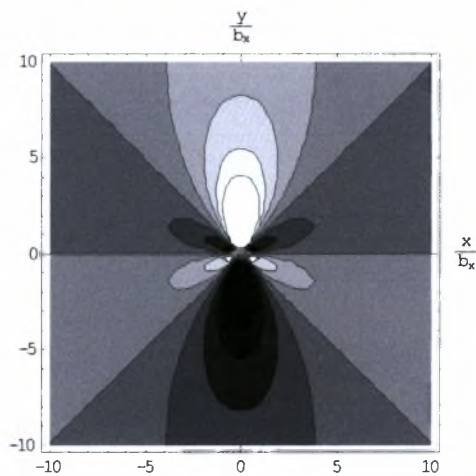


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



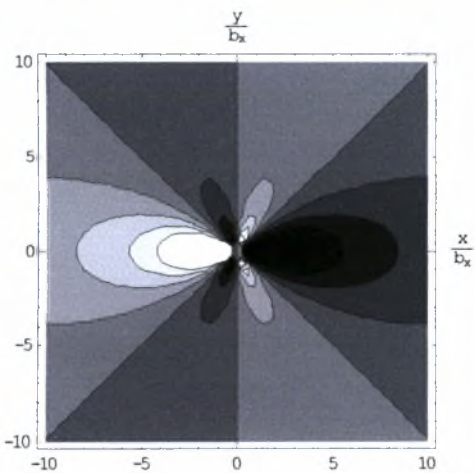
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



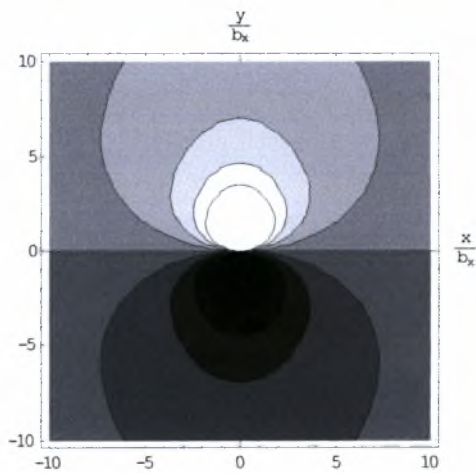
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



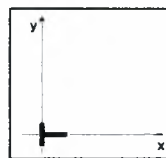
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

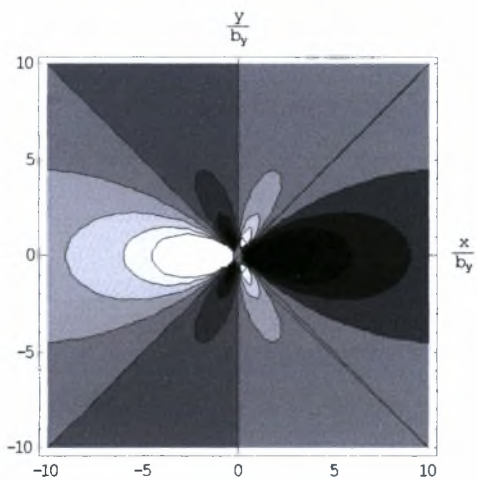


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: **W**
 H= 0.0 $b_x=0$
 ν= 0.218 $b_y=1$

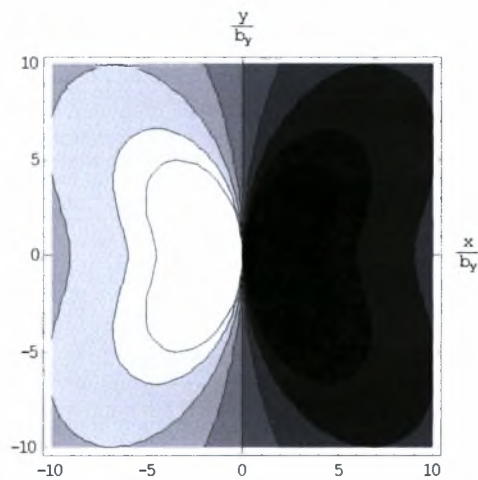


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



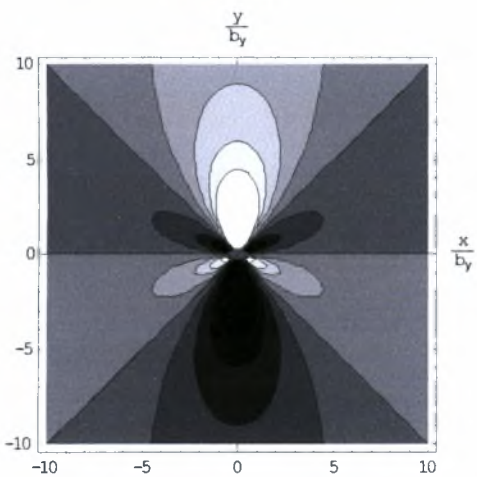
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



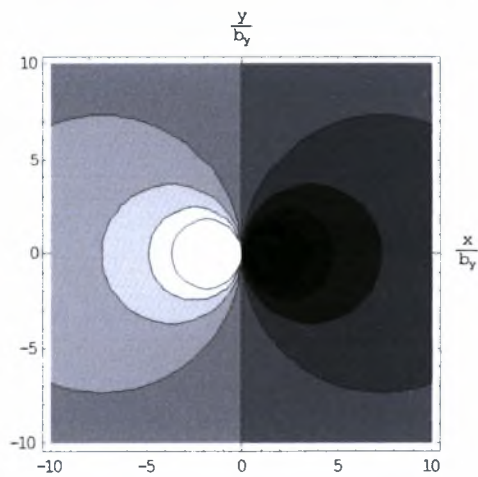
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



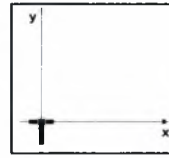
min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

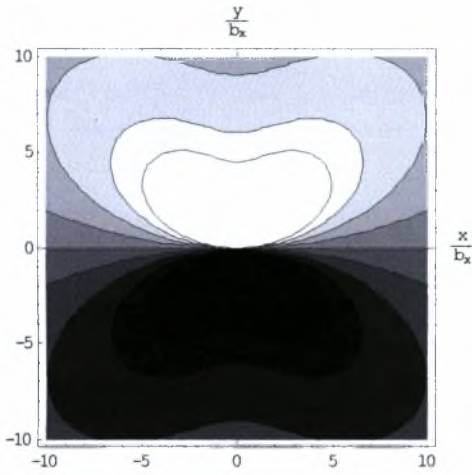


min= -0.3
 max= 0.3

Crystal: **W**
 H= 0.0 $b_x= 1$
 $\nu= 0.218$ $b_y= 0$

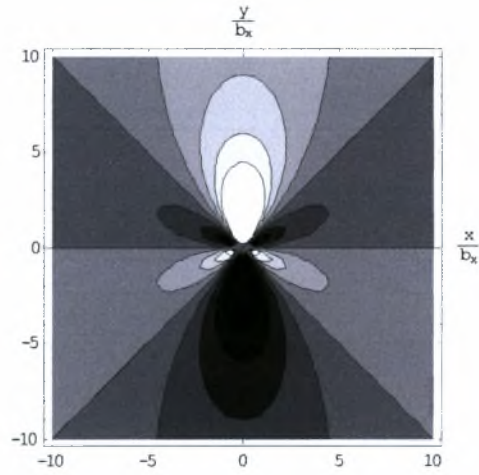


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



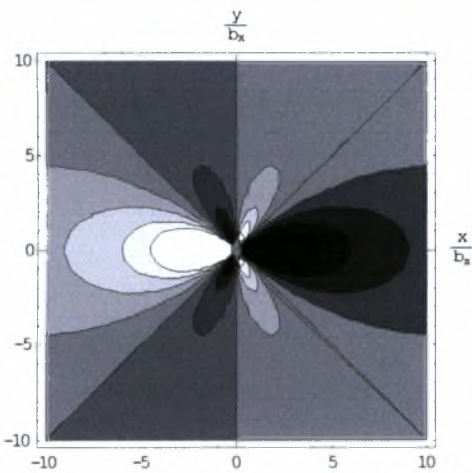
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



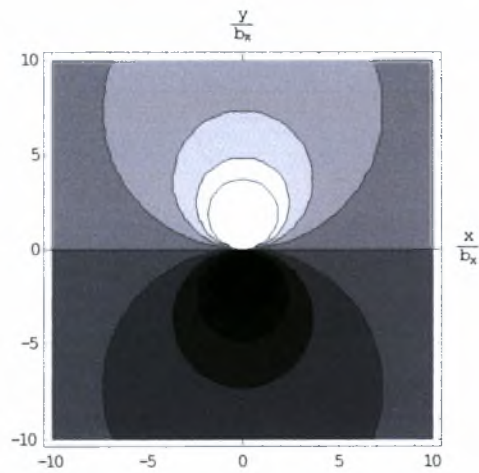
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
 max= 0.3

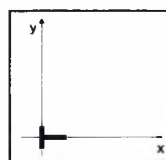
Crystal: **AgBr**

H= -0.89

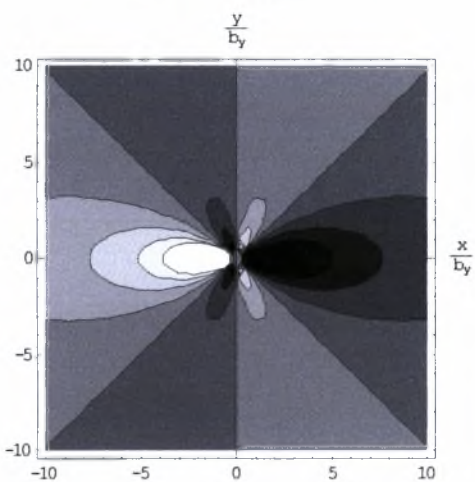
$b_x= 0$

$\nu= 0.270$

$b_y= 1$

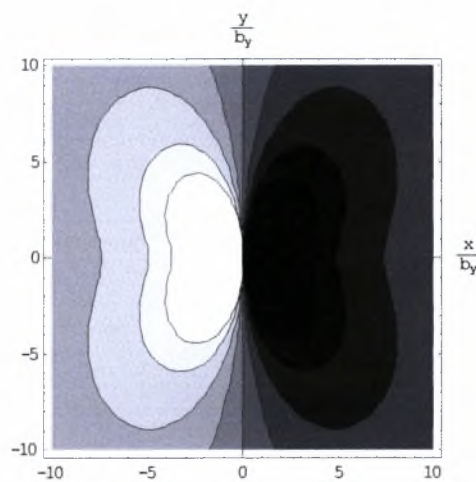


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



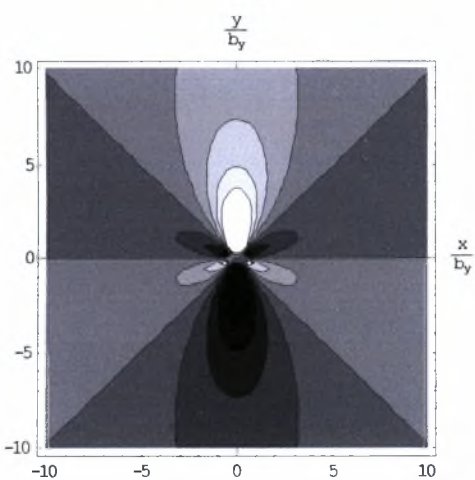
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



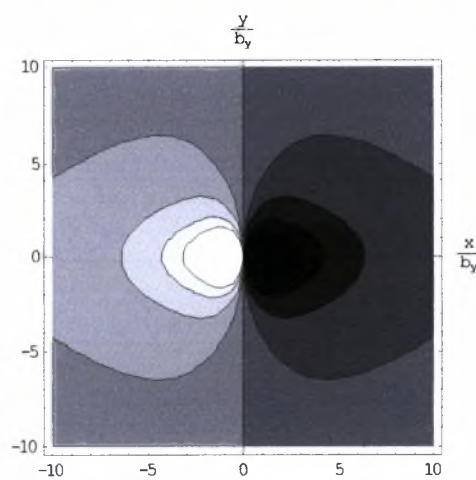
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
max= 0.3

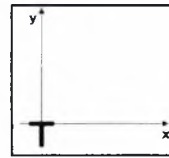
Crystal: **AgBr**

H= -0.89

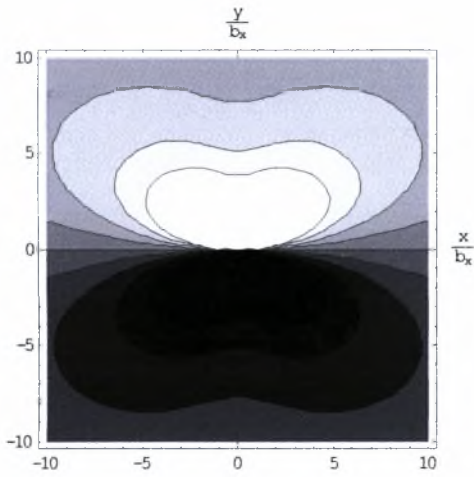
ν= 0.270

$b_x= 1$

$b_y= 0$

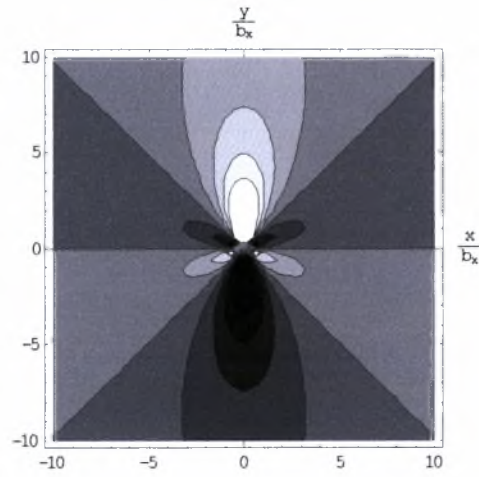


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



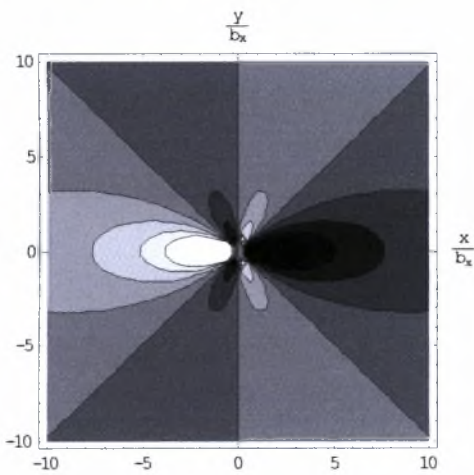
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



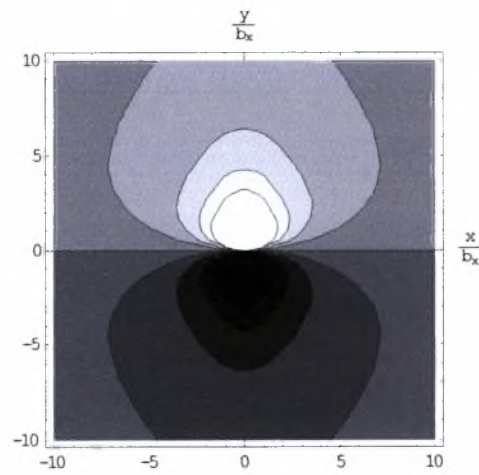
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
max= 0.3

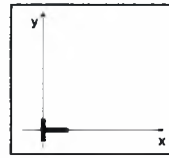
Crystal: **KCl**

H= -2.11

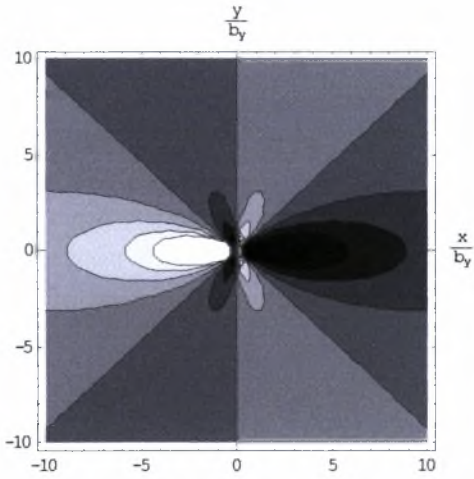
ν= 0.119

$b_x= 0$

$b_y= 1$

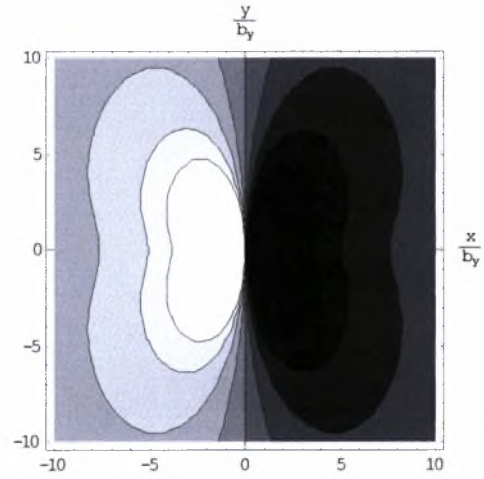


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



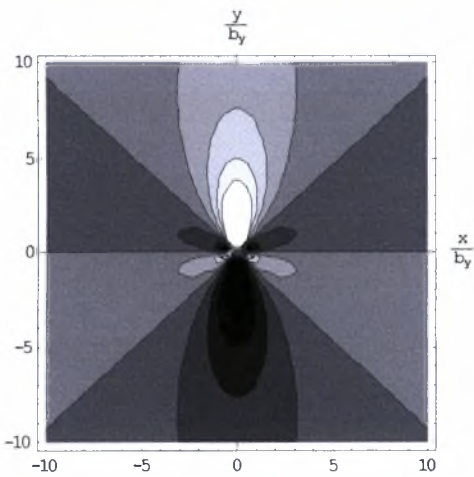
min= -0.2
max= 0.2

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



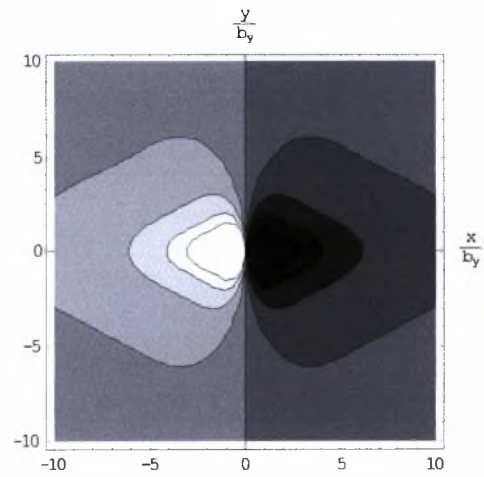
min= -0.2
max= 0.2

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.2
max= 0.2

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.2
max= 0.2

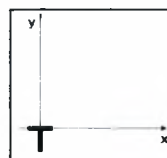
Crystal: **KCl**

H= -2.11

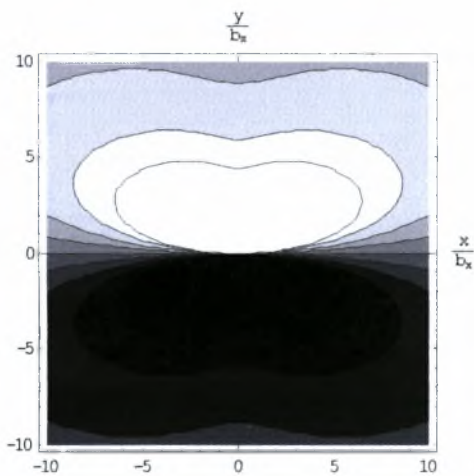
v= 0.119

$b_x= 1$

$b_y= 0$

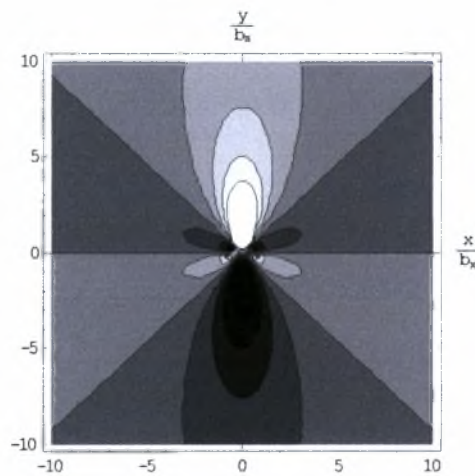


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



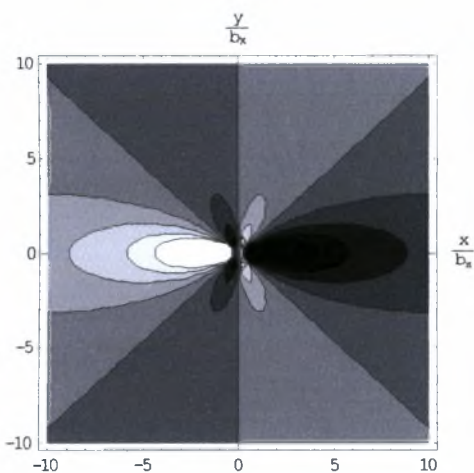
min= -0.2
max= 0.2

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



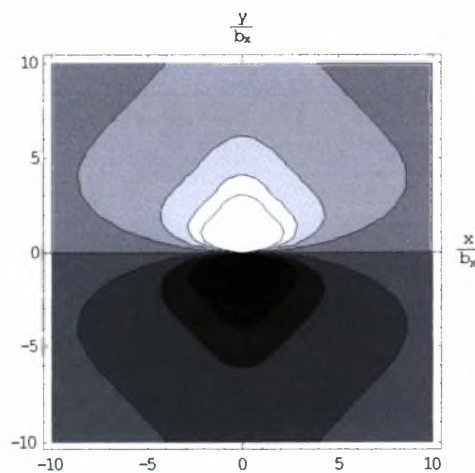
min= -0.2
max= 0.2

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.2
max= 0.2

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.2
max= 0.2

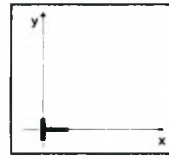
Crystal: **LiF**

H= 5.64

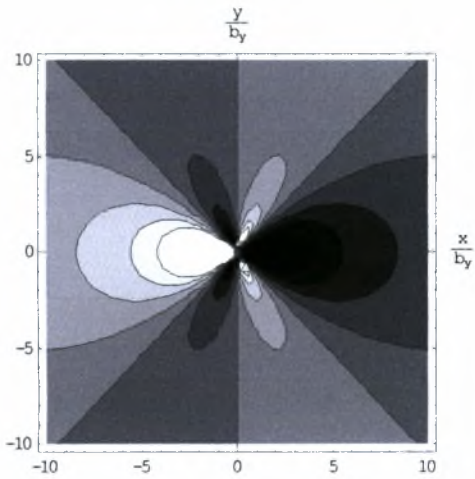
$\nu= 0.215$

$b_x= 0$

$b_y= 1$

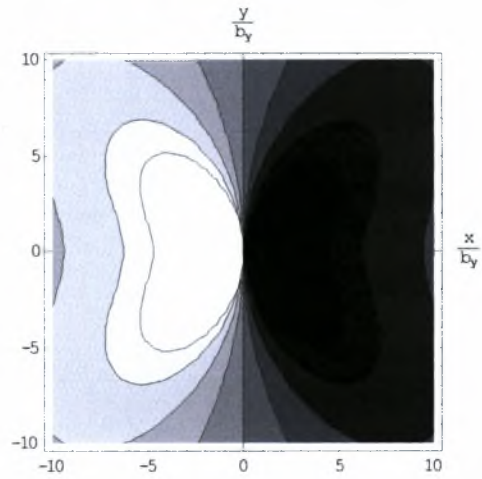


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



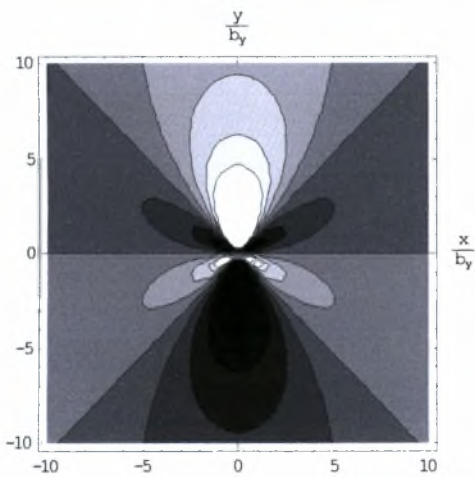
min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



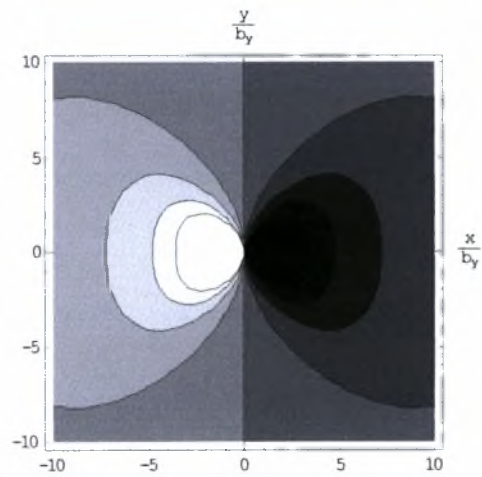
min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



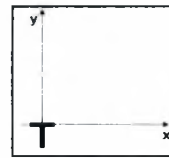
min= -0.4
max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

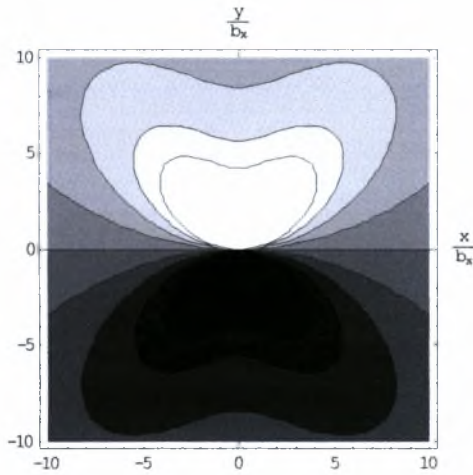


min= -0.4
max= 0.4

Crystal: **LiF**
 H= 5.64 $b_x=1$
 $\nu= 0.215$ $b_y=0$

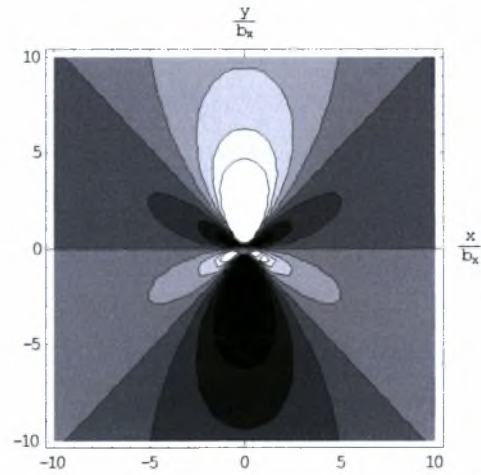


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



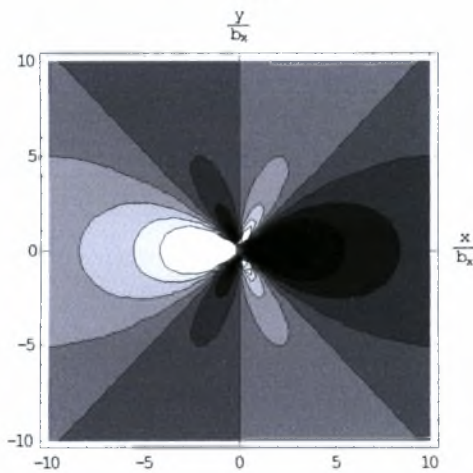
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



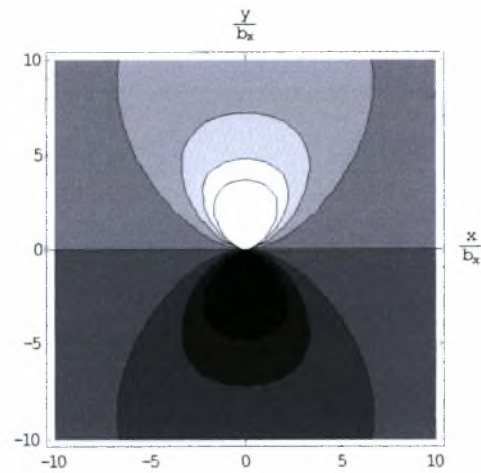
min= -0.4
 max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.4
 max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.4
 max= 0.4

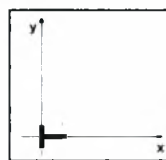
Crystal: **MgO**

H= 9.70

ν= 0.189

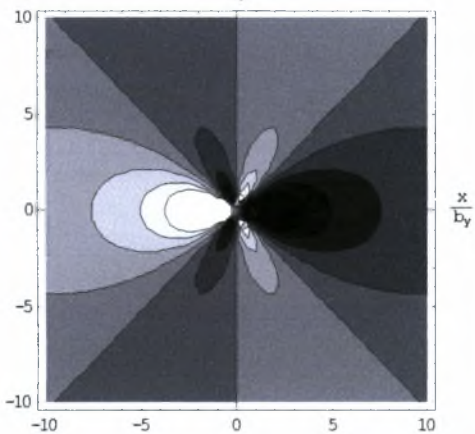
$b_x = 0$

$b_y = 1$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

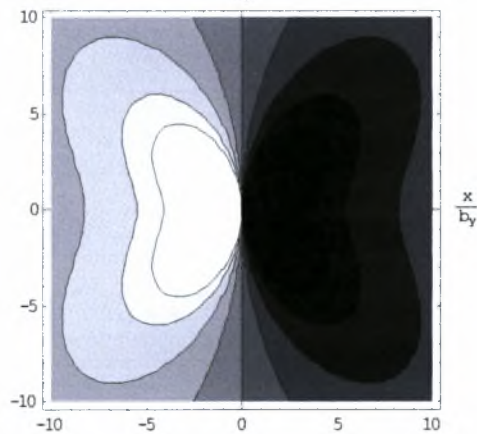
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

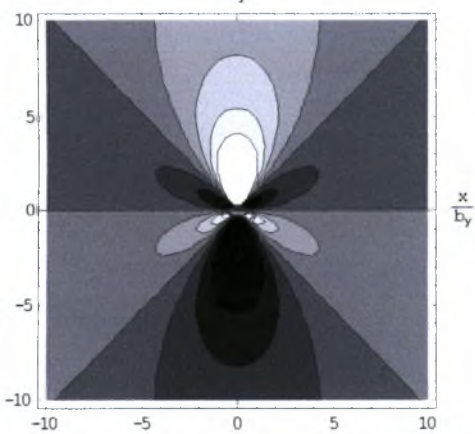
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

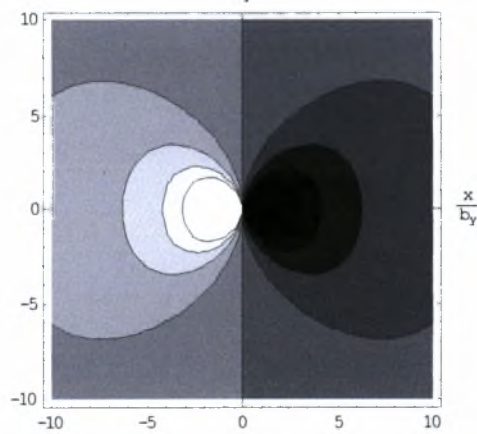
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.4
max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_y}$



min= -0.4
max= 0.4

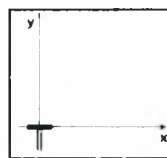
Crystal: **MgO**

H= 9.70

ν= 0.189

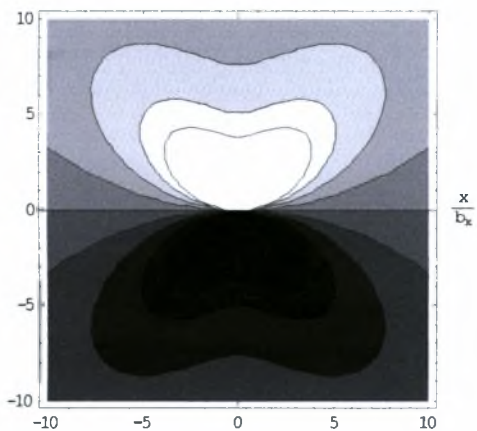
$b_x= 1$

$b_y= 0$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

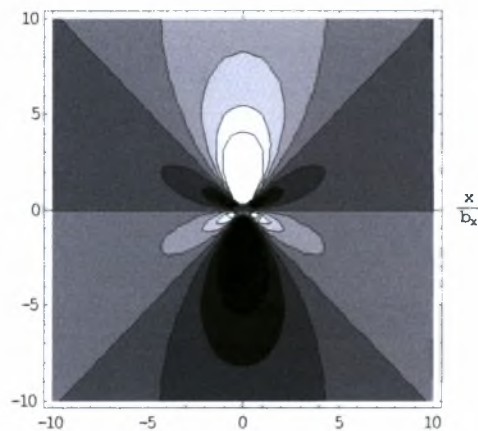
$\frac{y}{b_x}$



min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

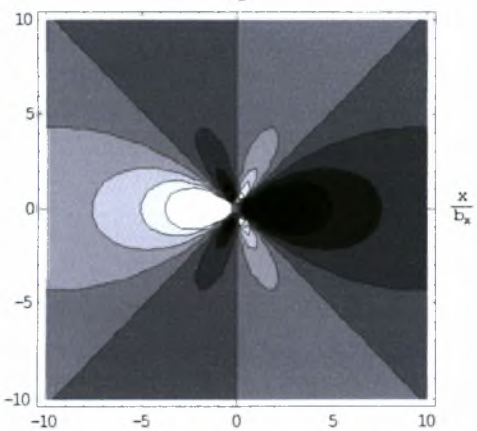
$\frac{y}{b_x}$



min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

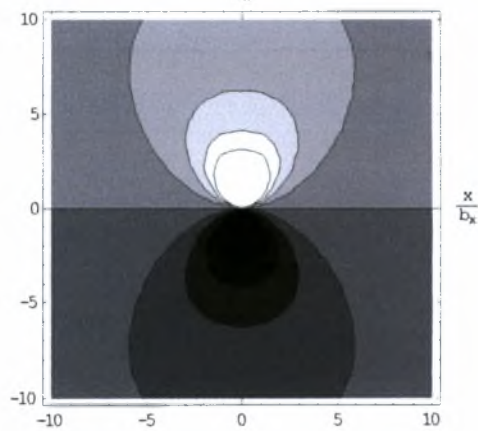
$\frac{y}{b_x}$



min= -0.4
max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_x}$

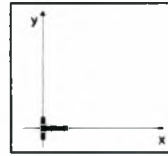


min= -0.4
max= 0.4

Crystal: **NaCl**

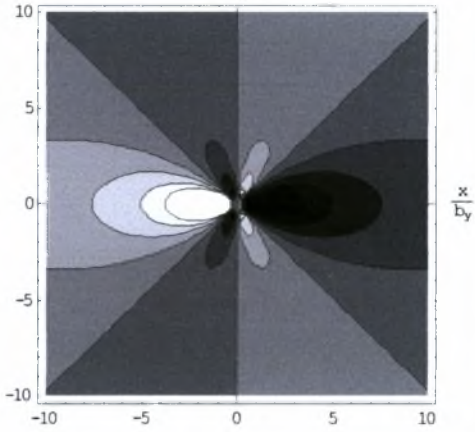
H= -1.11 $b_x= 0$

$\nu= 0.169$ $b_y= 1$



$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

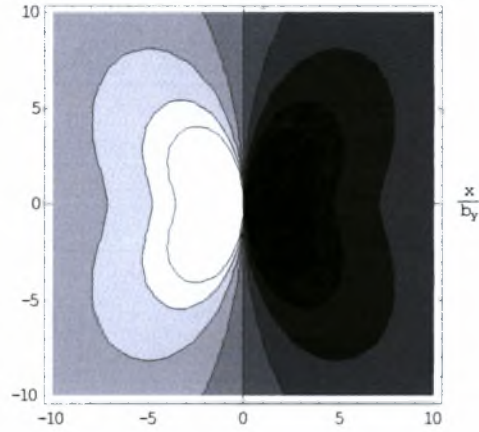
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

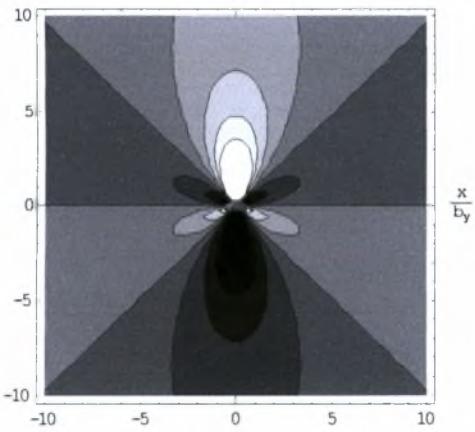
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

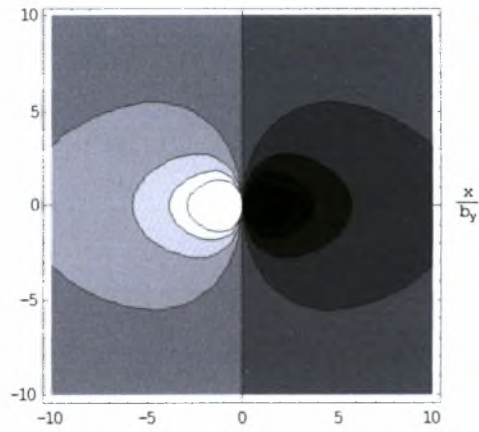
$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

$\frac{y}{b_y}$



min= -0.3
max= 0.3

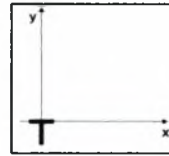
Crystal: **NaCl**

H= -1.11

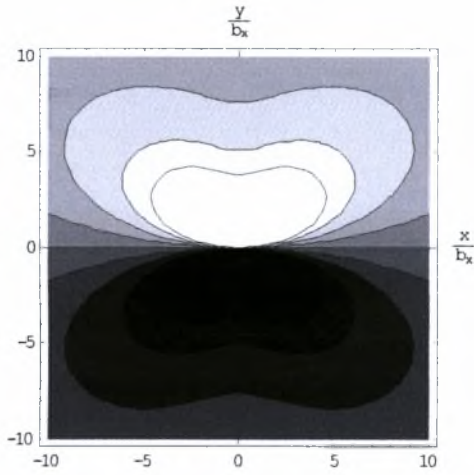
ν= 0.169

$b_x= 1$

$b_y= 0$

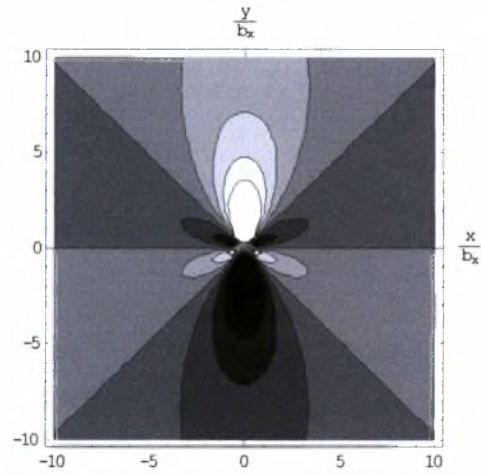


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



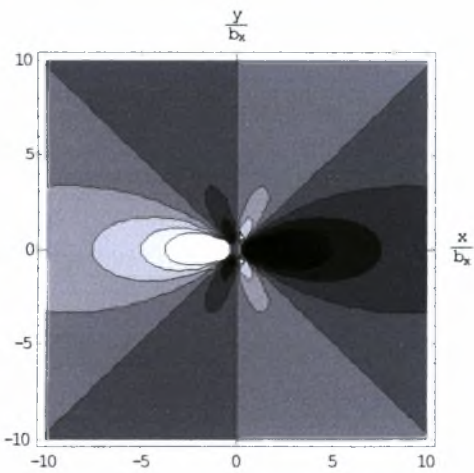
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



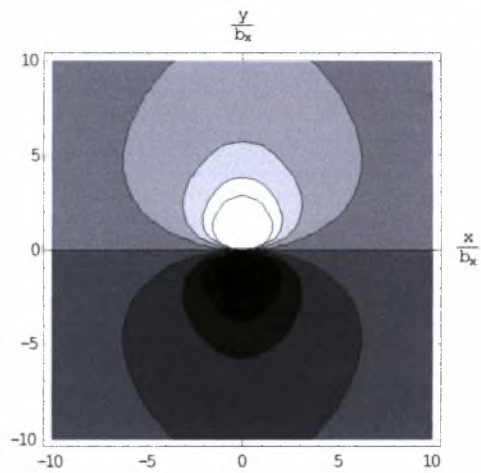
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



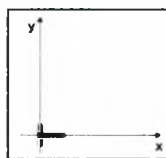
min= -0.3
max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

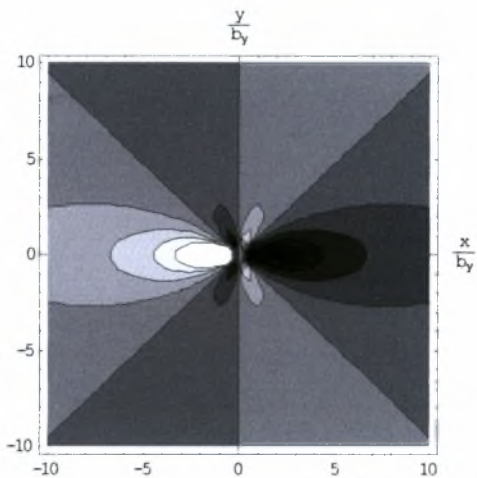


min= -0.3
max= 0.3

Crystal: **PbS**
 H= -4.76 $b_x=0$
 $\nu=0.160$ $b_y=1$

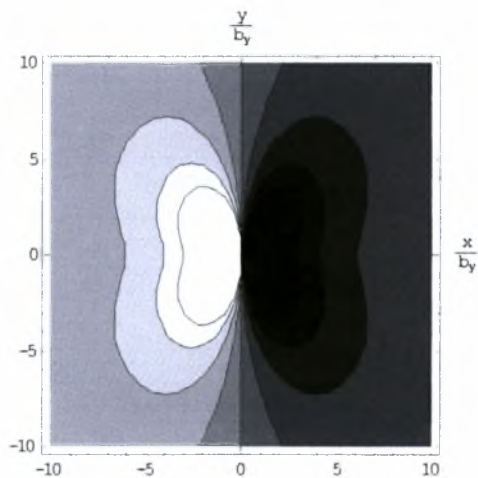


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



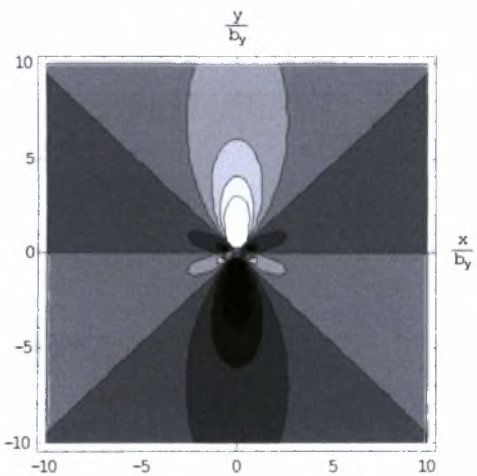
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



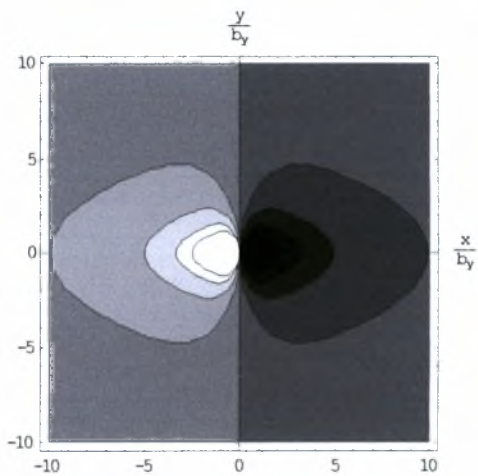
min= -0.3
 max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
 max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
 max= 0.3

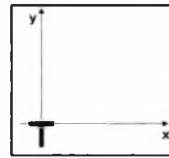
Crystal: **PbS**

H= -4.76

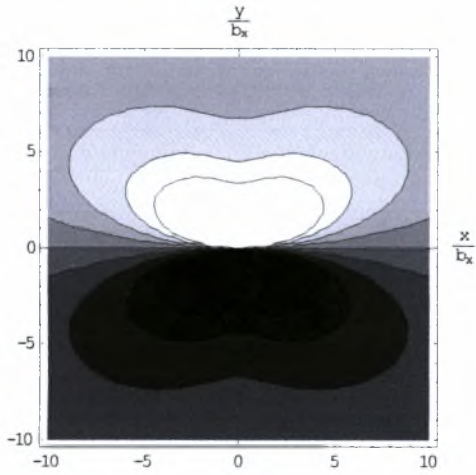
ν= 0.160

$b_x= 1$

$b_y= 0$

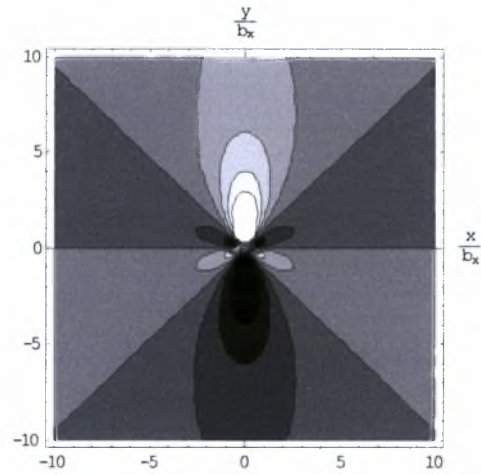


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



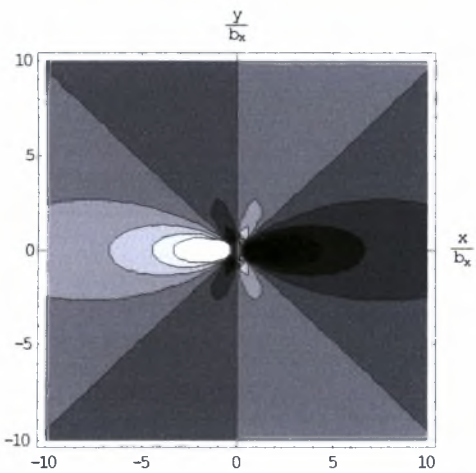
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



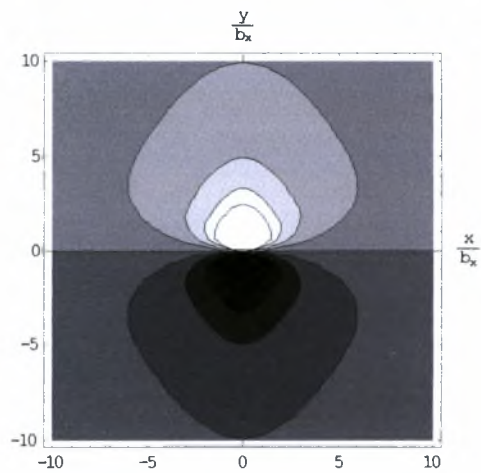
min= -0.3
max= 0.3

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
max= 0.3

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.3
max= 0.3

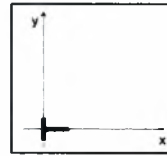
Crystal: **Diamond**

H= 20.10

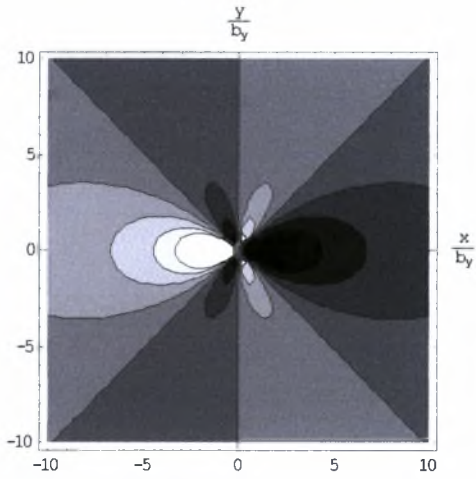
$b_x= 0$

$\nu= 0.094$

$b_y= 1$

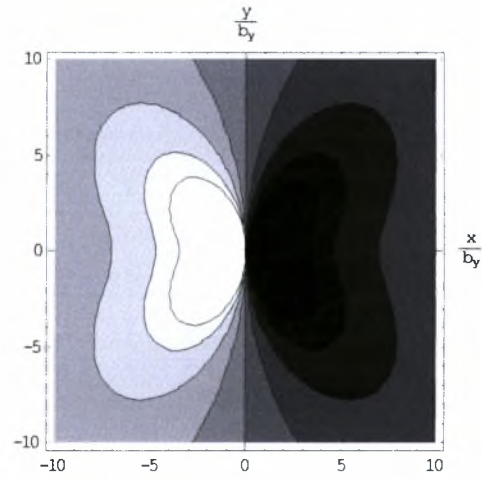


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



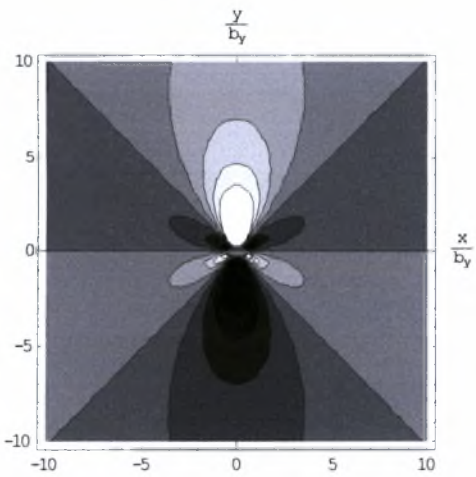
min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



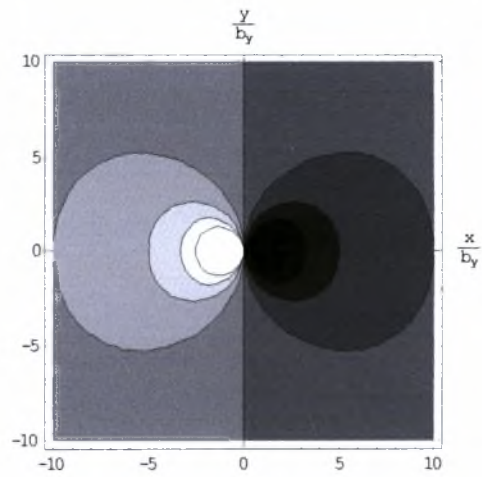
min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.4
max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



min= -0.4
max= 0.4

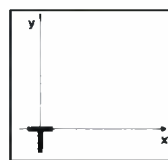
Crystal: **Diamond**

H= 20.10

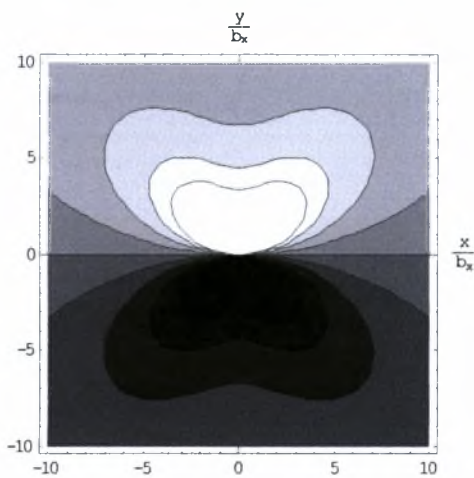
$b_x= 1$

$\nu= 0.094$

$b_y= 0$

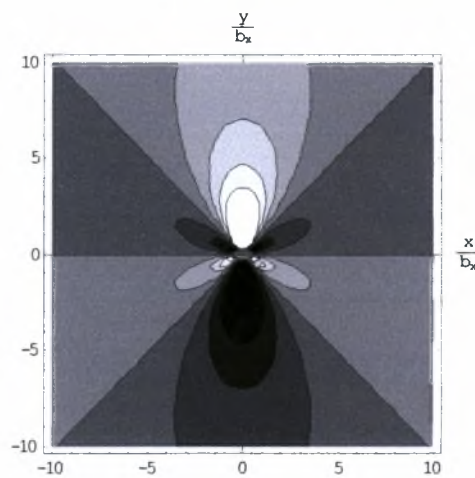


$$\sigma_{xx} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



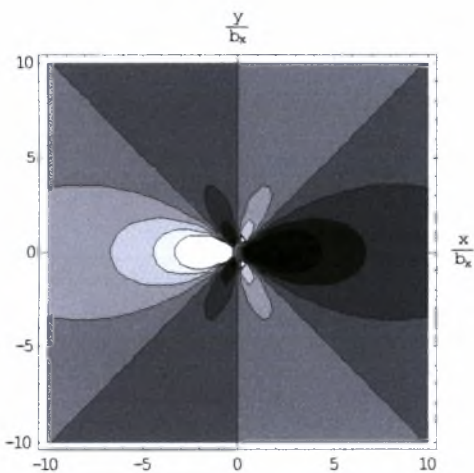
min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{yy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



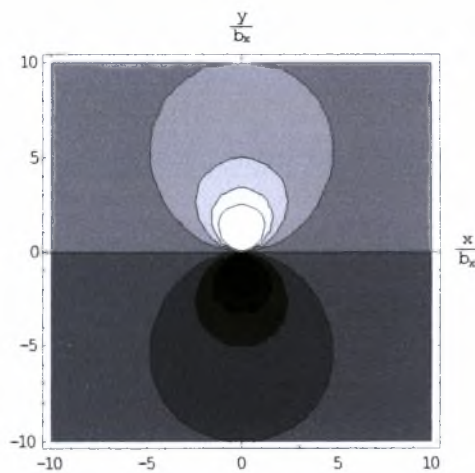
min= -0.4
max= 0.4

$$\sigma_{xy} \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$



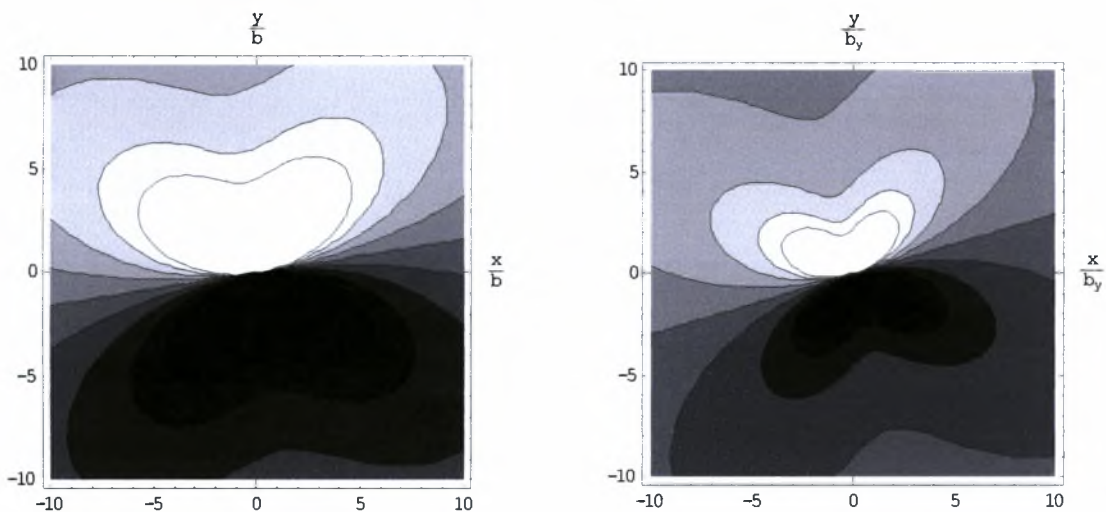
min= -0.4
max= 0.4

$$\left(\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \right) \frac{4\pi(1-\nu^2)}{E}$$

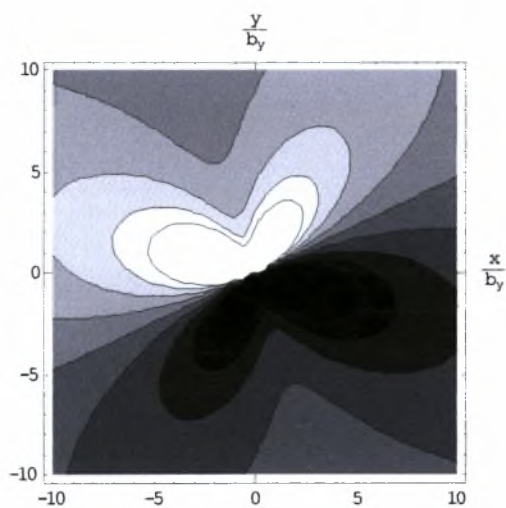


min= -0.4
max= 0.4

Μέσω των σχέσεων (43) και (44) υπολογίζουμε τα πεδία των τάσεων για τυχαία γωνία της ατέλειας. Για γωνία 30° θέτουμε $b_x=2$ και $b_y=1$, για γωνία 45° θέτουμε $b_x=b_y=1$ και για γωνία 60° θέτουμε $b_x=1$ και $b_y=2$. Ενδεικτικά, παρουσιάζονται μόνο οι κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b για το υλικό W με εύρος ισοτασικών $(-0,6, 0,6)$ Pa/m.



Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b για γωνία ατέλειας 30° (αριστερά) και 45° (δεξιά)



Κανονικοποιημένες τάσεις σ_{xx}/b για γωνία ατέλειας 45°

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

Στο παράρτημα αυτό παρουσιάζονται όλοι οι κώδικες (inputs) που εισάχθηκαν στο πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων.

1. Κώδικας για υπολογισμό τάσεων ατέλειας $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε ισότροπο υλικό (W)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE IN "INFINITE" MEDIUM
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFill, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NCO1, GENERATE
16101, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NCO1, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1

```

```

30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP, GENERATE
5121, 5200, 1
**
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE

```

```

95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
41, 10281, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
2881, 3040, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
30, 10270, 160
*ELSET, ELSET=E, GENERATE
45, 6445, 160
*ELSET, ELSET=F, GENERATE
5761, 5920, 1
*ELSET, ELSET=G, GENERATE
4481, 4640, 1
*ELSET, ELSET=N, GENERATE
14001, 14160, 1
**
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** E in 10^10 Pa (Tangsten W)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC
38.97, 0.218
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC
38.97, 0.218
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
**
*BOUNDARY
50162, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 5.688177
**
*EL PRINT, ELSET=UP, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22

```



```

*EL PRINT, ELSET=DOWN, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=A, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=C, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=D, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=F, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=G, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, FREQUENCY=1000, TOTALS=YES
ELSE
**EL PRINT, ELSET, WHOLE, FREQUENCY, 1000, TOTALS=YES
**ELSE
*END STEP
**

```

2. Κώδικας για υπολογισμό τάσεων ατέλειας $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε ανισότροπο υλικό (Cu)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE IN "INFINITE" MEDIUM
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFILL, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200

```

```
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NC01, GENERATE
16101, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NC01, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
```

```

*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP, GENERATE
5121, 5200, 1
**
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
41, 10281, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
2881, 3040, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
30, 10270, 160
*ELSET, ELSET=E, GENERATE
45, 6445, 160
*ELSET, ELSET=F, GENERATE
5761, 5920, 1
*ELSET, ELSET=G, GENERATE
4481, 4640, 1
*ELSET, ELSET=N, GENERATE
14001, 14160, 1
**
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** by
** in 10^10 Pa (Copper Cu)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
16.84, 12.14, 22.03, 12.14, 6.95, 22.03, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
16.84, 12.14, 22.03, 12.14, 6.95, 22.03, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**

```

```

**
*BOUNDARY
50162, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 5.349966
**
*EL PRINT, ELSET=UP, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=DOWN, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=A, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=C, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=D, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=F, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=G, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, FREQUENCY=1000, TOTALS=YES
ELSE
**EL PRINT, ELSET, WHOLE, FREQUENCY, 1000, TOTALS=YES
**ELSE
*END STEP
**

```

3. Κώδικας για υπολογισμό τάσεων ατέλειας $\mathbf{b}=(b_x, 0)$ σε ανισότροπο υλικό (Cu)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE IN "INFINITE" MEDIUM
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN

```



```
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFILL, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NCO1, GENERATE
16101, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NCO1, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
```

```

30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP, GENERATE
5121, 5200, 1
**
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
41, 10281, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
2881, 3040, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
30, 10270, 160
*ELSET, ELSET=E, GENERATE
45, 6445, 160
*ELSET, ELSET=F, GENERATE
5761, 5920, 1
*ELSET, ELSET=G, GENERATE
4481, 4640, 1
*ELSET, ELSET=N, GENERATE
14001, 14160, 1
**
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0

```

```

**
** bx
** in 10^10 Pa (Copper Cu)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
22.03, 12.14, 16.84, 12.14, 12.14, 16.84, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
22.03, 12.14, 16.84, 12.14, 12.14, 16.84, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
**
*BOUNDARY
50162, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 5.349966
**
*EL PRINT, ELSET=UP, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=DOWN, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=A, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=C, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=D, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=F, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=G, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, FREQUENCY=1000, TOTALS=YES
ELSE
**EL PRINT, ELSET, WHOLE, FREQUENCY, 1000, TOTALS=YES
**ELSE
*END STEP
**

```

4. Κώδικας για υπολογισμό τάσεων ατέλειας $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε ανισότροπο υλικό (Cγ)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE IN "INFINITE" MEDIUM
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFill, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NCO1, GENERATE
16101, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NCO1, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD

```



```

1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP, GENERATE
5121, 5200, 1
**
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
41, 10281, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
2881, 3040, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE

```

```

30, 10270, 160
*ELSET, ELSET=E, GENERATE
45, 6445, 160
*ELSET, ELSET=F, GENERATE
5761, 5920, 1
*ELSET, ELSET=G, GENERATE
4481, 4640, 1
*ELSET, ELSET=N, GENERATE
14001, 14160, 1
**
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** by
** in 10^10 Pa (Chromium Cr)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
35.00, 5.78, 30.49, 5.78, 10.29, 30.49, 10.1, 10.1
14.61
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
35.00, 5.78, 30.49, 5.78, 10.29, 30.49, 10.1, 10.1
14.61
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
**
*BOUNDARY
50162, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 6.163885
**
*EL PRINT, ELSET=UP, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=DOWN, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=A, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000

```

```

S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=C, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=D, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=F, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=G, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, FREQUENCY=1000, TOTALS=YES
ELSE
**EL PRINT, ELSET, WHOLE, FREQUENCY, 1000, TOTALS=YES
**ELSE
*END STEP
**

```

5. Κώδικας για υπολογισμό τάσεων ατέλειας $b=(b_x, 0)$ σε ανισότροπο υλικό (Cu)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE IN "INFINITE" MEDIUM
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFILL, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**

```

```
*NSET, NSET=NC01, GENERATE
16101, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NC01, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES
```



```
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP, GENERATE
5121, 5200, 1
**
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
41, 10281, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
2881, 3040, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
30, 10270, 160
*ELSET, ELSET=E, GENERATE
45, 6445, 160
*ELSET, ELSET=F, GENERATE
5761, 5920, 1
*ELSET, ELSET=G, GENERATE
4481, 4640, 1
*ELSET, ELSET=N, GENERATE
14001, 14160, 1
**
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** bx
** in 10^10 Pa (Chromium Cr)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
30.49, 5.78, 35.00, 5.78, 10.29, 35.00, 10.1, 10.1
14.61
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
30.49, 5.78, 35.00, 5.78, 10.29, 35.00, 10.1, 10.1
14.61
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
**
*BOUNDARY
50162, 1, 2
```

```

**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 6.163885
**
*EL PRINT, ELSET=UP, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=DOWN, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=A, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=C, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12, S33, E11, E22
*EL PRINT, ELSET=D, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=F, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=G, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000
S22, S11, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, FREQUENCY=1000, TOTALS=YES
ELSE
**EL PRINT, ELSET, WHOLE, FREQUENCY, 1000, TOTALS=YES
**ELSE
*END STEP
**

```

6. Κώδικας για υπολογισμό δύναμης Peach-Koehler ατέλειας $\mathbf{b}=(0, b_y)$ κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια σε ισότροπο υλικό (W)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE NEAR FREE SURFACE
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200

```

```
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFILL, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=PUSH1
EGG, 40162, 60000
*NSET, NSET=PUSH2
NOPE, 92202, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NC01, GENERATE
16095, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NC01, 76101
*NSET, NSET=NC0U1, GENERATE
15895, 15981, 1
*NSET, NSET=NCOU
NC0U1, 75901
*NSET, NSET=NCOR1, GENERATE
16096, 16181, 1
*NSET, NSET=NCR
NCOR1, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
```

```

7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=GONE
40000, 40002, ADT, TOPBG, TOPMD
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES, GONE
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP1, GENERATE
5121, 5200, 1
*ELSET, ELSET=LOOP2, GENERATE
5200, 5230, 1
**
*ELSET, ELSET=HOLE
5161
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
65, 10305, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
3041, 3200, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
7201, 7360, 1
**
*NSET, NSET=PIN1, GENERATE
16068, 16081, 1
*NSET, NSET=PIN2, GENERATE
15868, 15881, 1

```



```

***NSET, NSET=PEACH
**16095
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
***NODE
**15895, 94.00, -79.50
**16295, 94.00, -79.50
***ELSET, ELSET=MARCEN
**5054, 5214
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP1, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
***SOLID SECTION, ELSET=MARCEN, MATERIAL=SQ1, ORIENT=RECT
**1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** bx
** E in 10^10 Pa (Tangsten W)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC
38.97, 0.218
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC
38.97, 0.218
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
***MATERIAL, NAME=SQ1
***ELASTIC
**38.97, 0.218
***EXPANSION, TYPE=ORTHO
**0.0, 0.0, 0.0, 20.0
**
*BOUNDARY
50162, 2
92202, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
** this input is to find Fx=-dW/dx, multiply by 1/2
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 1.422044252
**NCR, 1.422044252
**by=h for optimal results
**

```

```

*EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000, TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*END STEP
**
***STEP
***STATIC
**** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
**** this input is to find Fy=-dW/dy, multiply by 1/2
***TEMPERATURE, OP=MOD
**NCOU, 1.422044252
****by=h for optimal results
**
***EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
**COORD, S11, S22, S12
***EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
**COORD, S11, S22, S12
***EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
**ELSE
***END STEP
**
*STEP
*STATIC
*MODEL CHANGE, REMOVE
GONE
*EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000, TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
ELSE
***NODE PRINT, NSET=PEACH, GLOBAL=YES, FREQUENCY=1000, SUMMARY=NO,
TOTALS=NO
**COORD, RF1, RF2
*END STEP
**

```

7. Κώδικας για υπολογισμό δύναμης Peach-Koehler ατέλειας $\mathbf{b}=(0, b_y)$ κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια σε ανισότροπο υλικό (Cu)

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE NEAR FREE SURFACE
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160
32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660

```

```

50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFILL, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=PUSH1
EGG, 40162, 60000
*NSET, NSET=PUSH2
NOPE, 92202, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NC01, GENERATE
16095, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NC01, 76101
*NSET, NSET=NCOU1, GENERATE
15895, 15981, 1
*NSET, NSET=NCOU
NCOU1, 75901
*NSET, NSET=NCOR1, GENERATE
16096, 16181, 1
*NSET, NSET=NCR
NCOR1, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162
30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4

```

```
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=GONE
40000, 40002, ADT, TOPBG, TOPMD
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES, GONE
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP1, GENERATE
5121, 5200, 1
*ELSET, ELSET=LOOP2, GENERATE
5200, 5230, 1
**
*ELSET, ELSET=HOLE
5161
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
65, 10305, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
```



```

3041, 3200, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
7201, 7360, 1
**
*NSET, NSET=PIN1, GENERATE
16068, 16081, 1
*NSET, NSET=PIN2, GENERATE
15868, 15881, 1
***NSET, NSET=PEACH
**16095
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
***NODE
**15895, 94.00, -79.50
**16295, 94.00, -79.50
***ELSET, ELSET=MARCEN
**5054, 5214
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP1, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
***SOLID SECTION, ELSET=MARCEN, MATERIAL=SQ1, ORIENT=RECT
**1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** bx
** E in 10^10 Pa (Copper Cu)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
16.84, 12.14, 22.03, 12.14, 6.95, 22.03, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
16.84, 12.14, 22.03, 12.14, 6.95, 22.03, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*BOUNDARY
50162, 2
92202, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
** this input is to find Fx=-dW/dx, multiply by 1/2

```

```

*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 1.3374915
**NCR, 1.3374915
**by=h for optimal results
**
*EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000, TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*END STEP
**
***STEP
***STATIC
**** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
**** this input is to find Fy=-dW/dy, multiply by 1/2
***TEMPERATURE, OP=MOD
**NCOU, 1.3374915
****by=h for optimal results
**
***EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
**COORD, S11, S22, S12
***EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
**COORD, S11, S22, S12
***EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
**ELSE
***END STEP
**
*STEP
*STATIC
*MODEL CHANGE, REMOVE
GONE
*EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000, TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
ELSE
***NODE PRINT, NSET=PEACH, GLOBAL=YES, FREQUENCY=1000, SUMMARY=NO,
TOTALS=NO
**COORD, RF1, RF2
*END STEP
**

```

8. Κώδικας για υπολογισμό δύναμης Peach-Koehler ατέλειας $\mathbf{b}=(0, b_y)$ κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια σε ανισότροπο υλικό (Cu) με στραμμένο κρύσταλλο κατά 90°

```

*HEADING
DISLOCATION EDGE NEAR FREE SURFACE
*NODE
1, 0, 0
161, 160, 0
162, 660, 0
32201, 0, -160
32361, 160, -160

```

```

32362, 660, -160
40001, 0, 500
40161, 160, 500
40162, 660, 500
50001, 0, -660
50161, 160, -660
50162, 660, -660
60000, -500, 500
60001, -500, 0
92201, -500, -160
92202, -500, -660
*NGEN, NSET=GIN
162, 32362, 200
60001, 92201, 200
*NGEN, NSET=EGG
40001, 40161, 1
*NGEN, NSET=NOPE
50001, 50161, 1
*NGEN, NSET=TOP
1, 161, 1
*NGEN, NSET=BOT
32201, 32361, 1
*NFILL, NSET=BOSH
TOP, BOT, 161, 200
*NSET, NSET=FOUR
92202, 60000, 40162, 50162
*NSET, NSET=PUSH1
EGG, 40162, 60000
*NSET, NSET=PUSH2
NOPE, 92202, 50162
*NSET, NSET=ALL
BOSH, GIN, EGG, NOPE, FOUR
*NSET, NSET=LEFT, GENERATE
1, 32201, 200
*NSET, NSET=RIGHT, GENERATE
161, 32361, 100
**
*NSET, NSET=NC01, GENERATE
16095, 16181, 1
*NSET, NSET=NCO
NC01, 76101
*NSET, NSET=NCOU1, GENERATE
15895, 15981, 1
*NSET, NSET=NCOU
NCOU1, 75901
*NSET, NSET=NCOR1, GENERATE
16096, 16181, 1
*NSET, NSET=NCR
NCOR1, 76101
**
*ELEMENT, TYPE=CPE4
20001, 161, 961, 962, 162
1, 1, 801, 802, 2
30001, 60001, 60801, 801, 1
*ELGEN, ELSET=TOPBG
1, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30001, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
1601, 8001, 8601, 8602, 8002
20011, 8161, 8761, 8762, 8162

```

```

30011, 68001, 68601, 8601, 8001
*ELGEN, ELSET=TOPMD
1601, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30011, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
3041, 13401, 13601, 13602, 13402
20020, 13561, 13761, 13762, 13562
30020, 73401, 73601, 13601, 13401
*ELGEN, ELSET=FINE
3041, 160, 1, 1, 27, 200, 160
20020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
30020, 1, 1, 1, 27, 200, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
7361, 18801, 19401, 19402, 18802
20047, 18961, 19561, 19562, 18962
30047, 78801, 79401, 19401, 18801
*ELGEN, ELSET=BOTMD
7361, 160, 1, 1, 9, 600, 160
20047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
30047, 1, 1, 1, 9, 600, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
8801, 24201, 25001, 25002, 24202
20056, 24361, 25161, 25162, 24362
30056, 84201, 85001, 25001, 24201
*ELGEN, ELSET=BOTBG
8801, 160, 1, 1, 10, 800, 160
20056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
30056, 1, 1, 1, 10, 800, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
12001, 40001, 1, 2, 40002
*ELGEN, ELSET=ADT
12001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4
14001, 32201, 50001, 50002, 32202
*ELGEN, ELSET=ADB
14001, 160, 1, 1
*ELEMENT, TYPE=CPE4, ELSET=QUARES
40000, 60000, 60001, 1, 40001
40002, 40161, 161, 162, 40162
40004, 32361, 50161, 50162, 32362
40006, 92201, 92202, 50001, 32201
*ELSET, ELSET=GONE
40000, 40002, ADT, TOPBG, TOPMD
*ELSET, ELSET=WHOLE
TOPBG, TOPMD, FINE, BOTMD, BOTBG
ADT, ADB, QUARES, GONE
**
*ELSET, ELSET=AGY
30033
*ELSET, ELSET=LOOP1, GENERATE
5121, 5200, 1
*ELSET, ELSET=LOOP2, GENERATE
5200, 5230, 1
**
*ELSET, ELSET=HOLE
5161
*ELSET, ELSET=UP, GENERATE
1, 160, 1
*ELSET, ELSET=DOWN, GENERATE
10241, 10400, 1

```

```
**
*ELSET, ELSET=A, GENERATE
65, 10305, 160
*ELSET, ELSET=B, GENERATE
95, 10335, 160
*ELSET, ELSET=C, GENERATE
3041, 3200, 1
*ELSET, ELSET=D, GENERATE
7201, 7360, 1
**
*NSET, NSET=PIN1, GENERATE
16068, 16081, 1
*NSET, NSET=PIN2, GENERATE
15868, 15881, 1
***NSET, NSET=PEACH
**16095
*ELSET, ELSET=BIG
WHOLE
***NODE
**15895, 94.00, -79.50
**16295, 94.00, -79.50
***ELSET, ELSET=MARCEN
**5054, 5214
**
*SOLID SECTION, ELSET=WHOLE, MATERIAL=AL, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=LOOP1, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
*SOLID SECTION, ELSET=AGY, MATERIAL=SQ, ORIENT=RECT
1.0, 0.0, 0.0
***SOLID SECTION, ELSET=MARCEN, MATERIAL=SQ1, ORIENT=RECT
**1.0, 0.0, 0.0
**
*ORIENTATION, NAME=RECT, SYSTEM=RECTANGULAR, DEFINITION=COORDINATES
1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0
**
** bx
** E in 10^10 Pa (Copper Cu)
**
*MATERIAL, NAME=AL
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
22.03, 12.14, 16.84, 12.14, 12.14, 16.84, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*MATERIAL, NAME=SQ
*ELASTIC, TYPE=ORTHOTROPIC
22.03, 12.14, 16.84, 12.14, 12.14, 16.84, 7.54, 7.54
2.35
*EXPANSION, TYPE=ORTHO
0.0, 1.0, 0.0, 20.0
**
*BOUNDARY
50162, 2
92202, 1, 2
**
**
*INITIAL CONDITIONS, TYPE=TEMPERATURE
ALL, 0.0
*RESTART, WRITE, FREQ=500
```

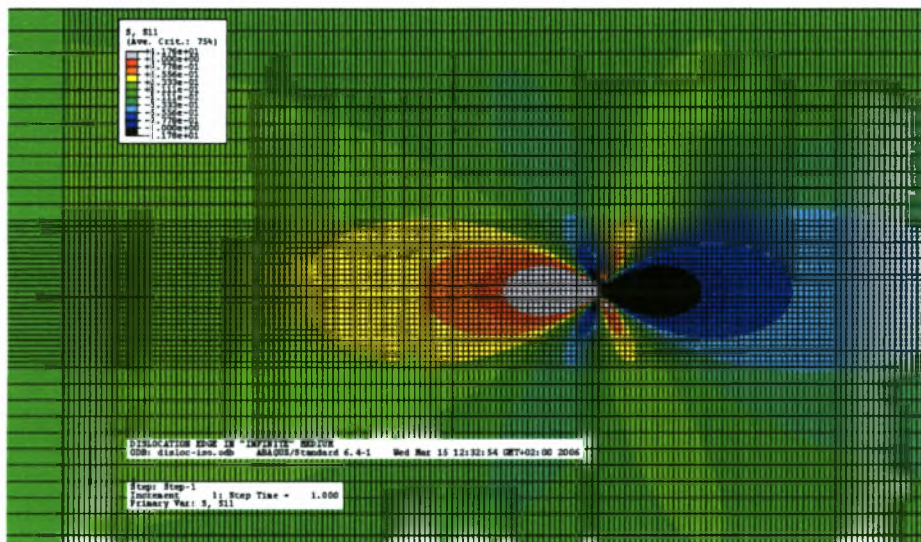


```
**
**
*STEP
*STATIC
** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
** this input is to find Fx=-dW/dx, multiply by 1/2
*TEMPERATURE, OP=MOD
NCO, 1.3374915
**NCR, 1.3374915
**by=h for optimal results
**
*EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000, TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*END STEP
**
***STEP
***STATIC
**** a*DT= by/(2*(1+nu)*h)*(2/0.57735)
**** this input is to find Fy=-dW/dy, multiply by 1/2
***TEMPERATURE, OP=MOD
**NCOU, 1.3374915
****by=h for optimal results
**
***EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
**COORD, S11, S22, S12
***EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
**COORD, S11, S22, S12
***EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
**ELSE
***END STEP
**
*STEP
*STATIC
*MODEL CHANGE, REMOVE
GONE
*EL PRINT, ELSET=LOOP2, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=B, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000, TOTALS=NO
COORD, S11, S22, S12
*EL PRINT, ELSET=WHOLE, POSITION=CENTROIDAL, FREQUENCY=1000,
TOTALS=YES
ELSE
***NODE PRINT, NSET=PEACH, GLOBAL=YES, FREQUENCY=1000, SUMMARY=NO,
TOTALS=NO
**COORD, RF1, RF2
*END STEP
**
```

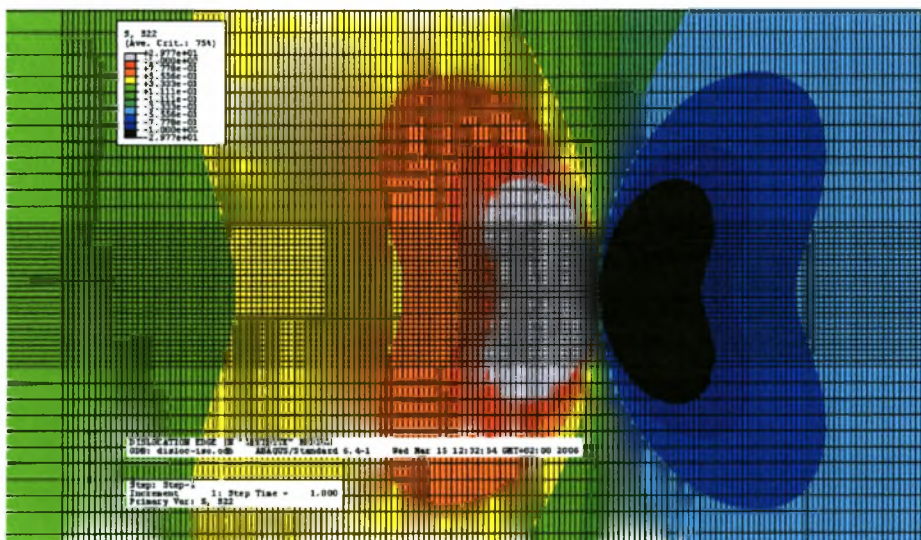
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ

Στο παράρτημα αυτό παρουσιάζονται όλα τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τα πεπερασμένα στοιχεία με τους κώδικες του παραρτήματος Β.

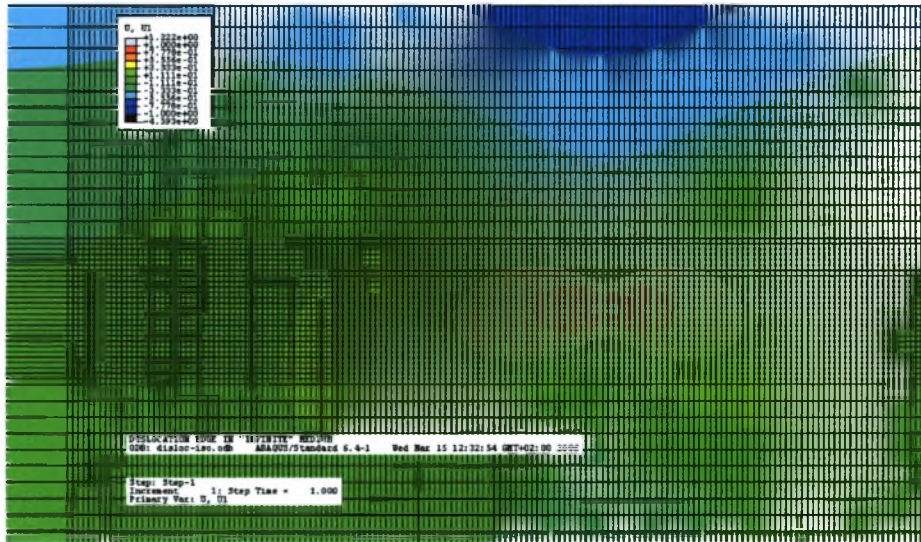
1. Αποτελέσματα για ατέλεια $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε ισότροπο υλικό (W)



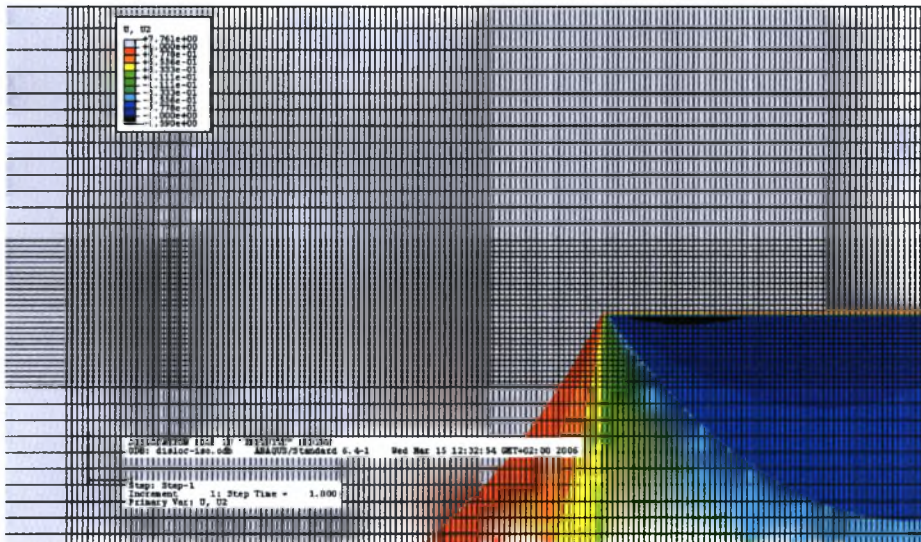
Τάσεις σ_{xx} με εύρος ισοτασικών (-1,0, 1,0) Pa/m



Τάσεις σ_{yy} με εύρος ισοτασικών (-1,0, 1,0) Pa/m

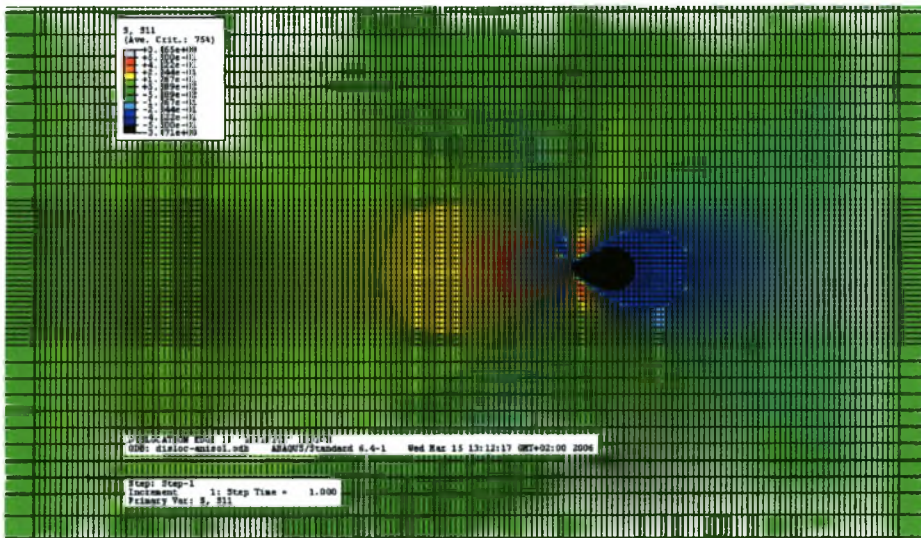


Παραμορφώσεις u_1 με εύρος καμπλών (-1,0, 1,0)

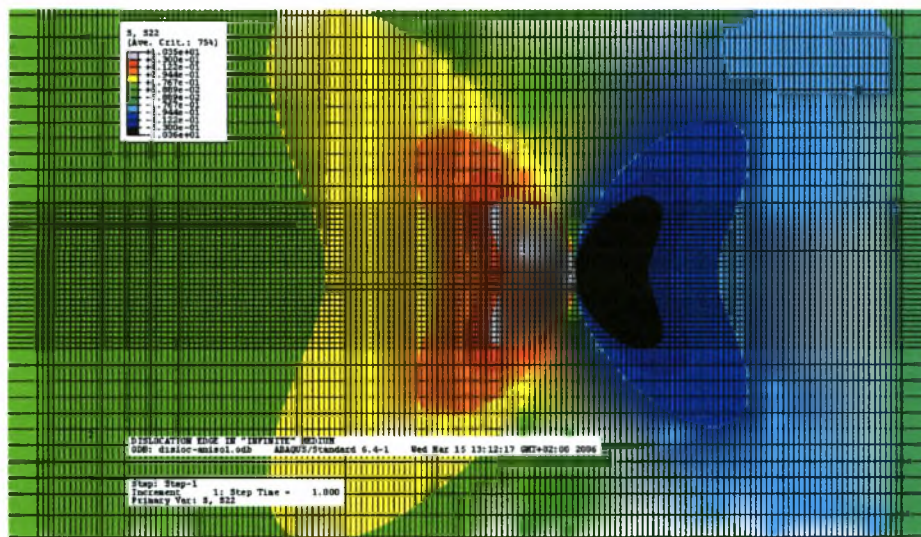


Παραμορφώσεις u_1 με εύρος καμπλών (-1,0, 1,0)

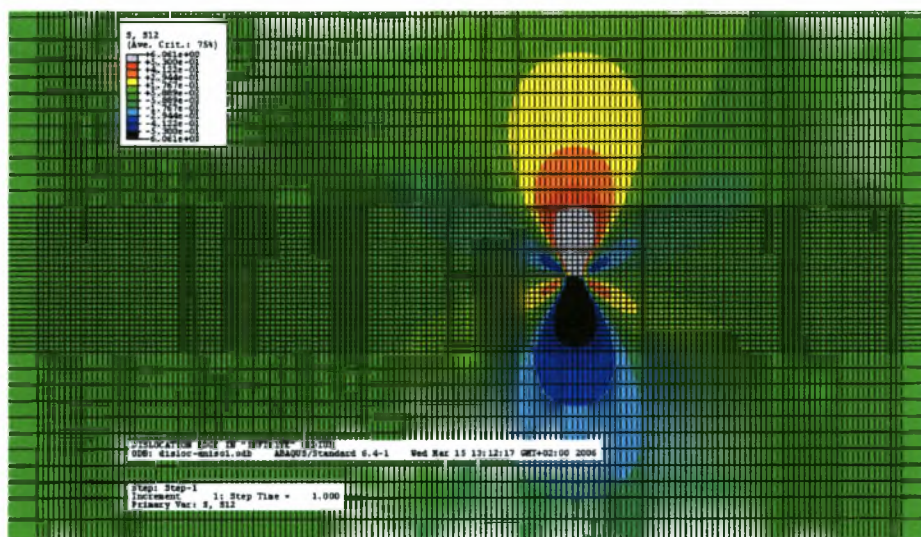
2. Αποτελέσματα για ατέλεια $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε ανισότροπο υλικό (Cu)



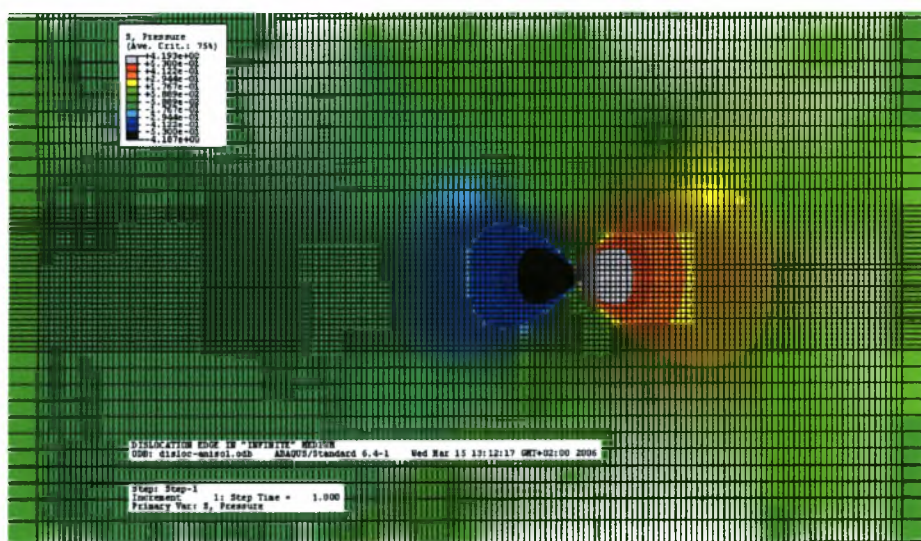
Τάσεις σ_{xx} με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m



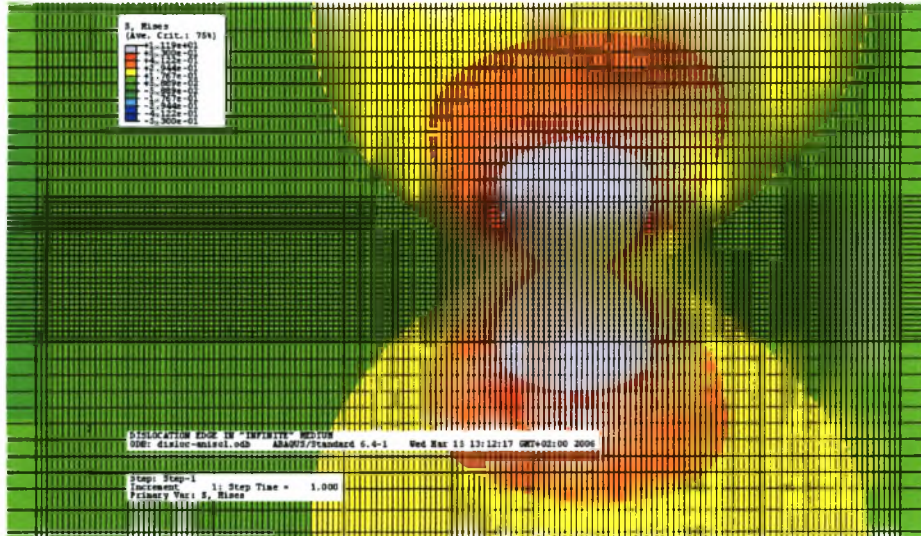
Τάσεις σ_{yy} με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m



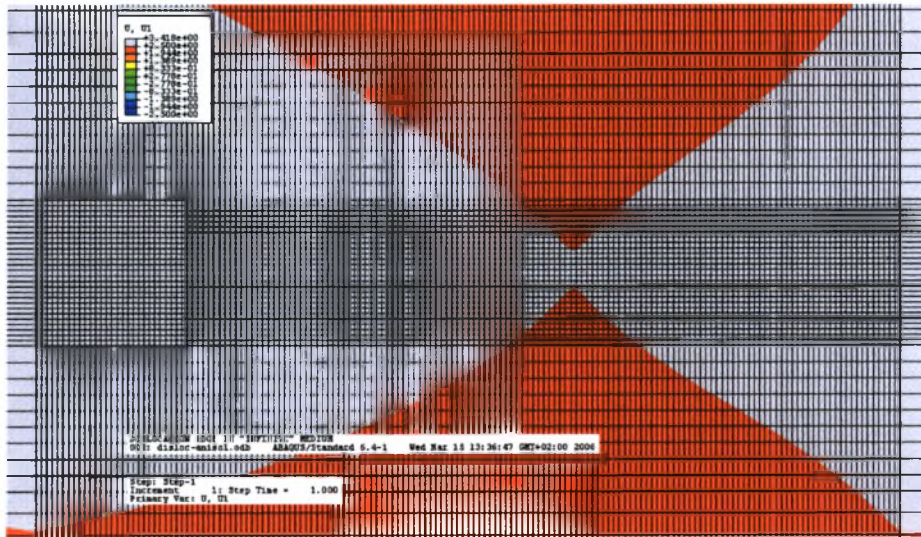
Τάσεις σ_{xy} με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m



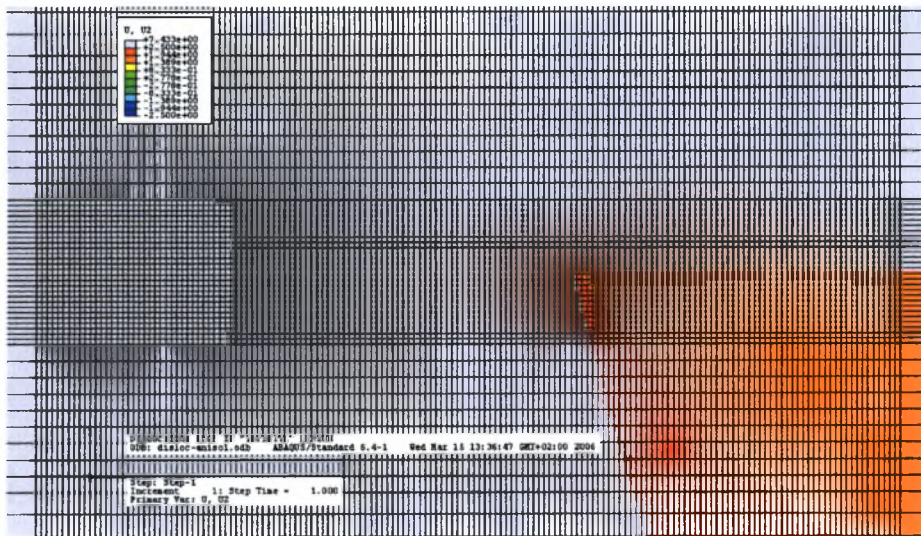
Τάσεις σ_H με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m



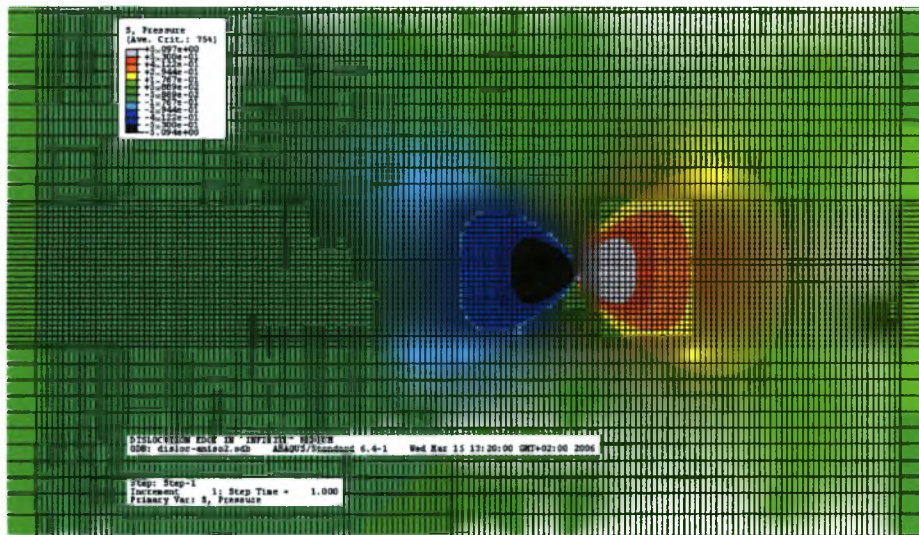
Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m



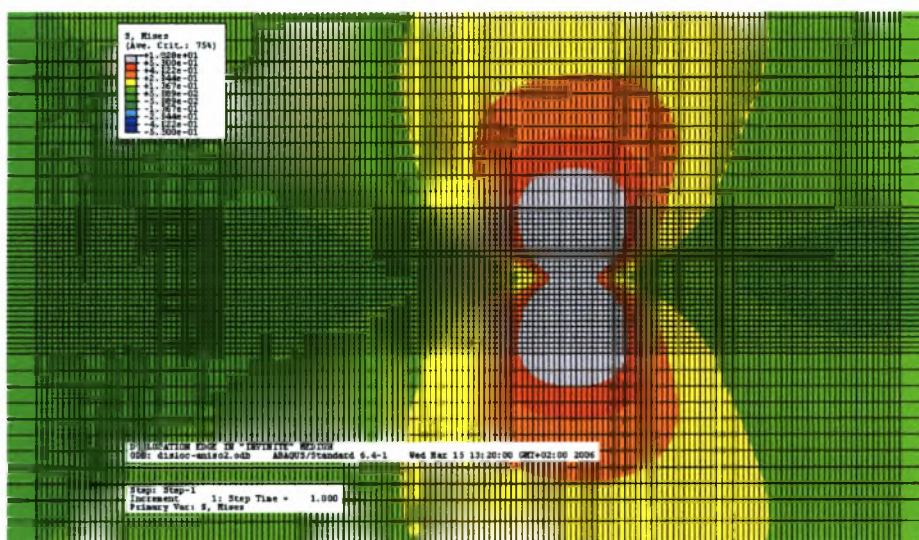
Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπυλών (-0,53, 0,53)



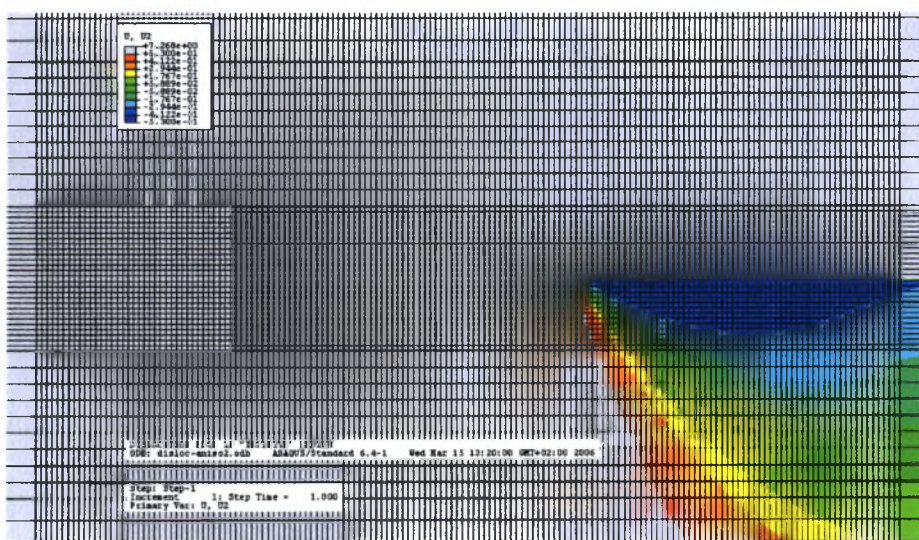
Παραμορφώσεις u_y με εύρος καμπυλών (-0,53, 0,53)



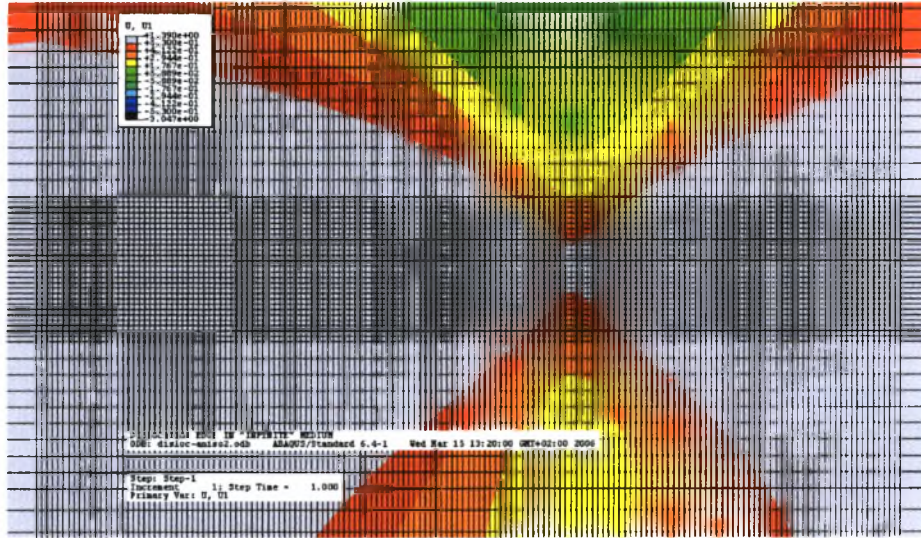
Τάσεις σ_{11} με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m



Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,53, 0,53) Pa/m

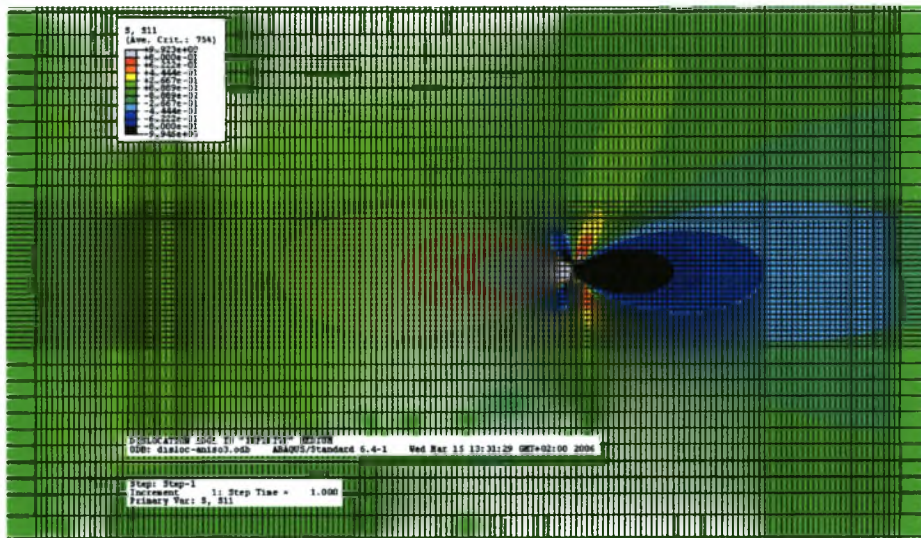


Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπυλών (-0,53, 0,53)

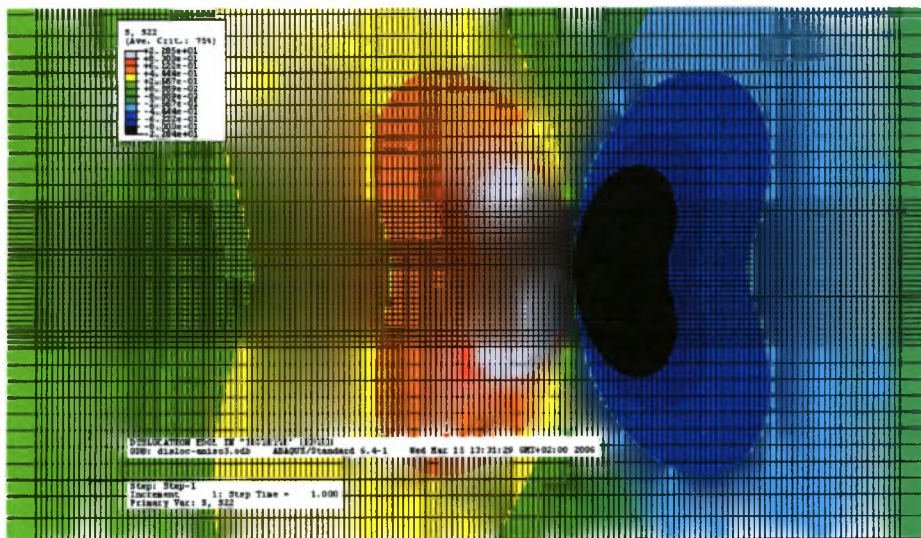


Παραμορφώσεις u, v με εύρος καμπυλών $(-0,53, 0,53)$

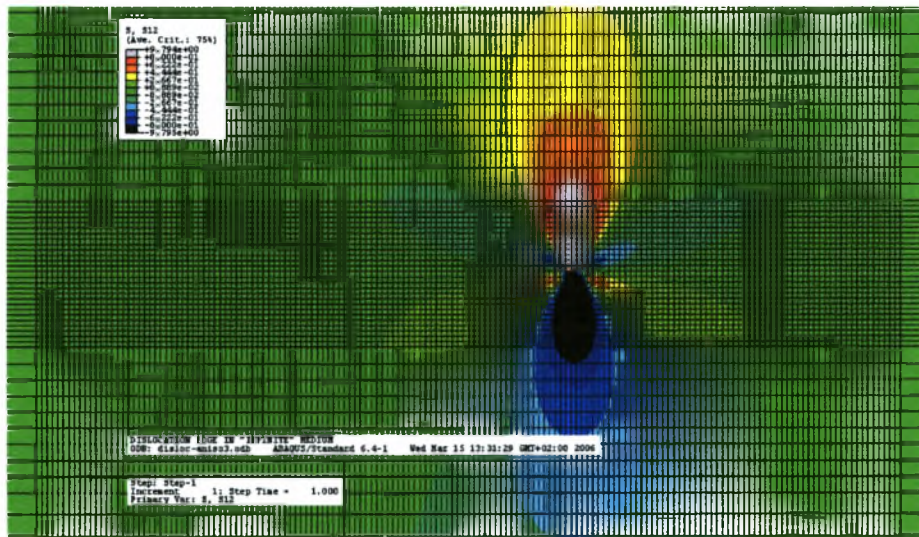
4. Αποτελέσματα για ατέλεια $b=(0, b_y)$ σε ανισότροπο υλικό (Cr)



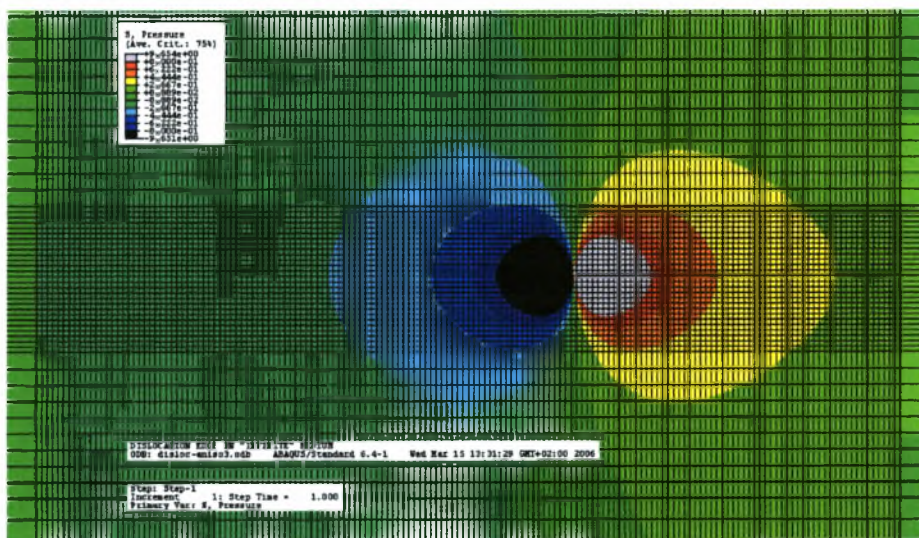
Τάσεις σ_{xx} με εύρος ισοτασικών $(-0,80, 0,80)$ Pa/m



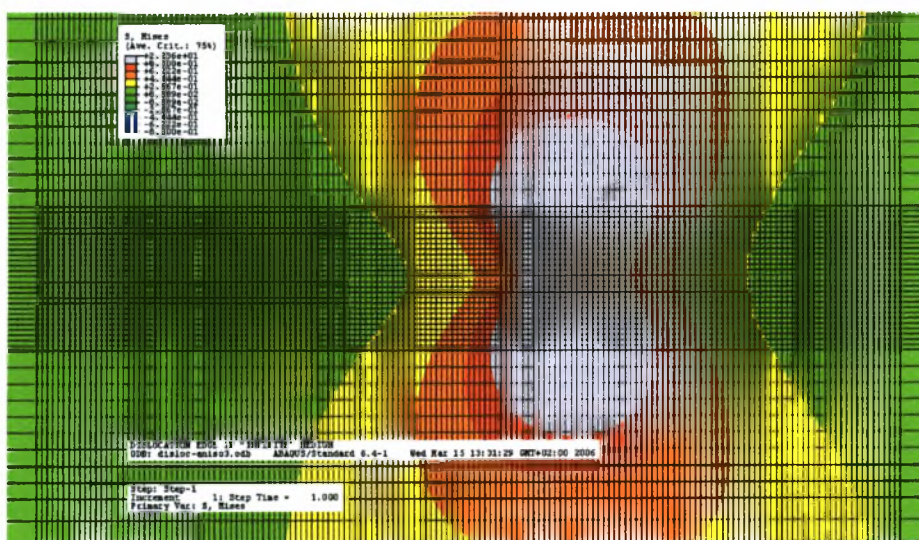
Τάσεις σ_{yy} με εύρος ισοτασικών $(-0,80, 0,80)$ Pa/m



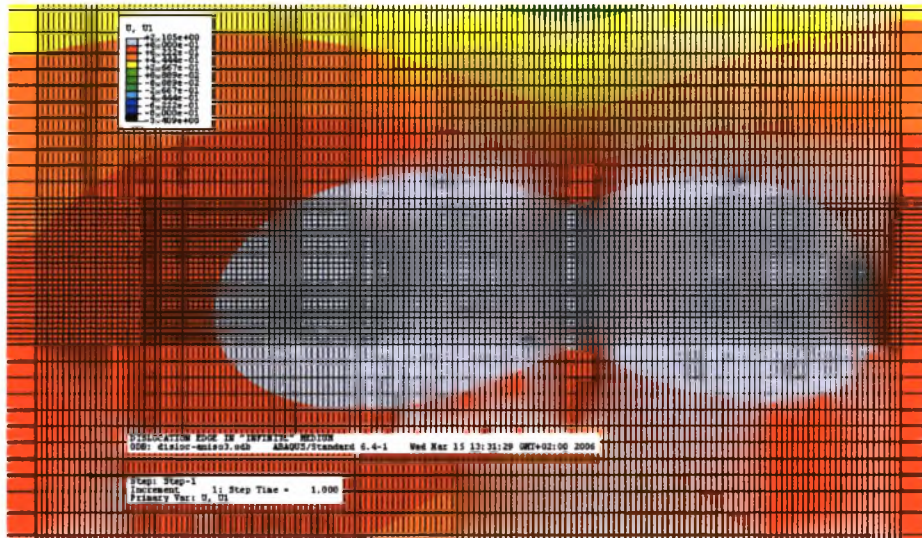
Τάσεις σ_{xy} με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m



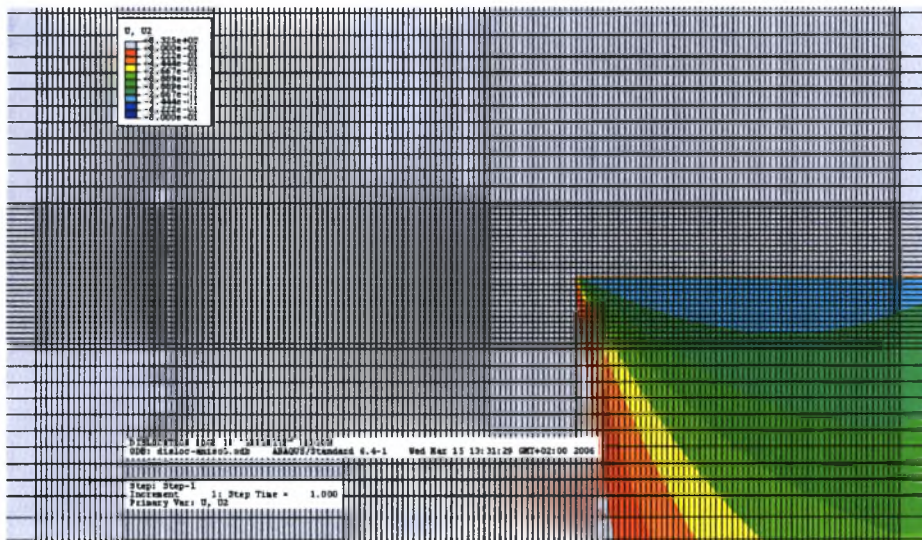
Τάσεις σ_H με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m



Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m

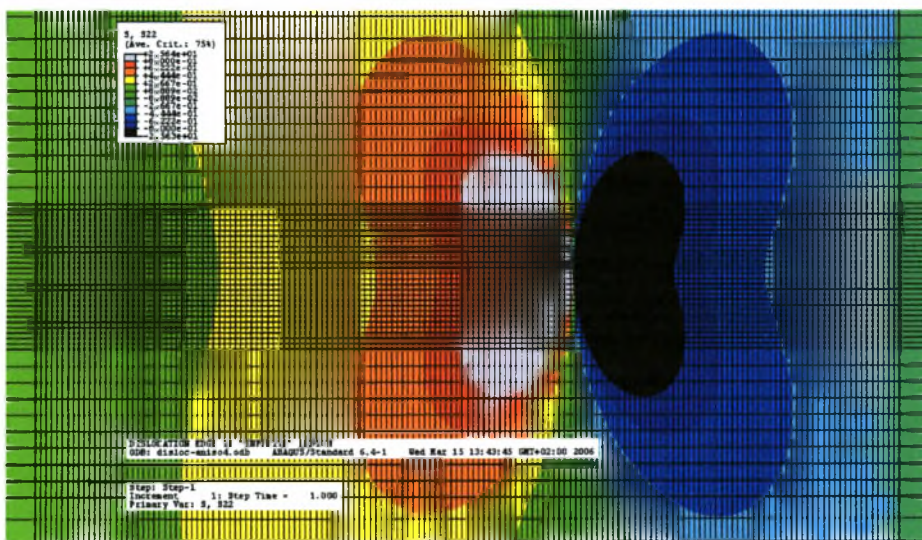


Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπυλών $(-0,80, 0,80)$

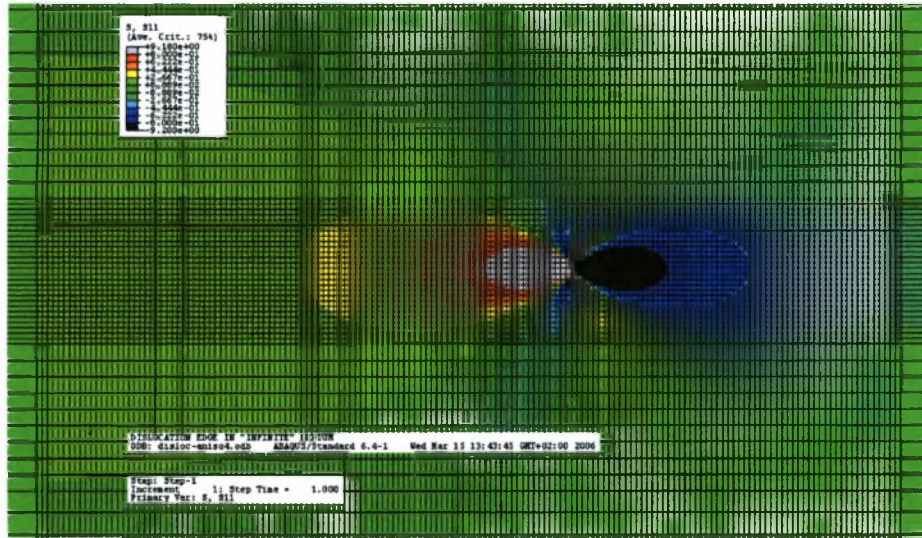


Παραμορφώσεις u_y με εύρος καμπυλών $(-0,80, 0,80)$

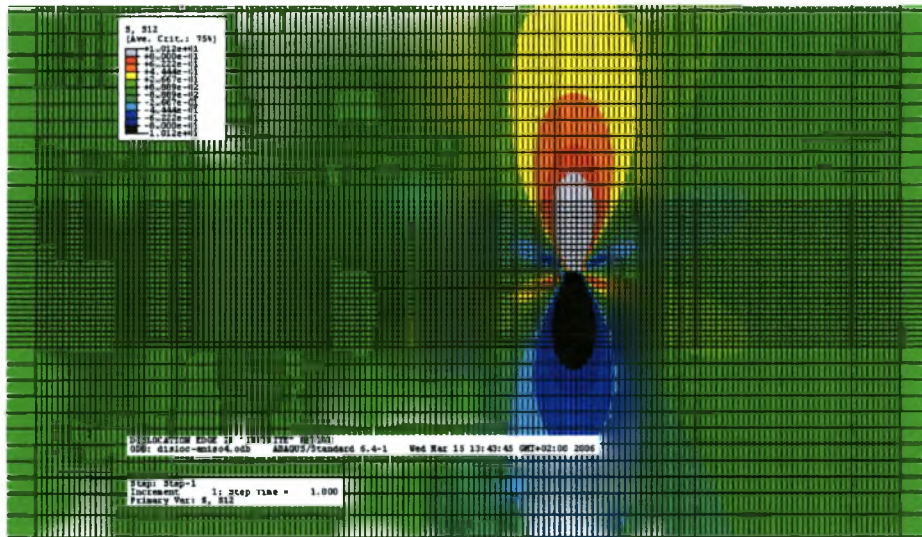
5. Αποτελέσματα για ατέλεια $\mathbf{b}=(b_x, 0)$ σε ανισότροπο υλικό (Cr)



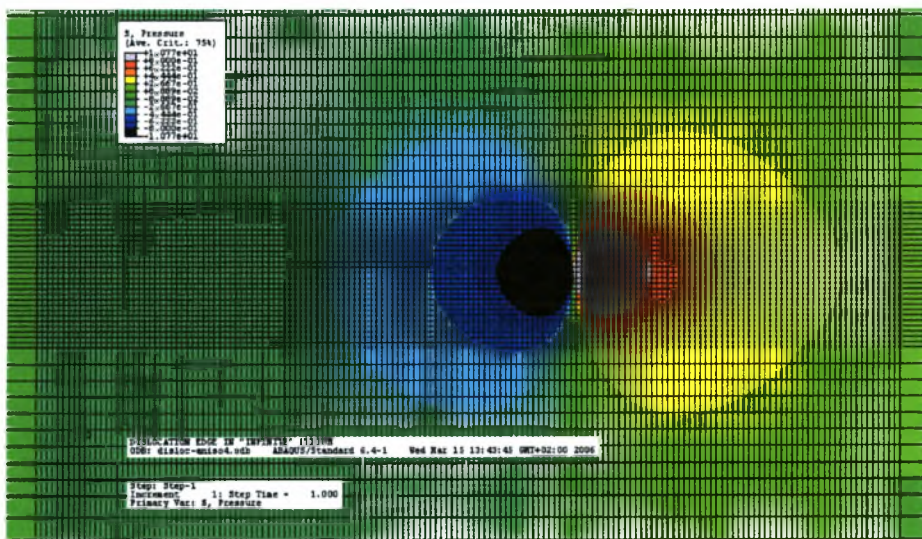
Τάσεις σ_{xx} με εύρος ισοτασικών $(-0,80, 0,80)$ Pa/m



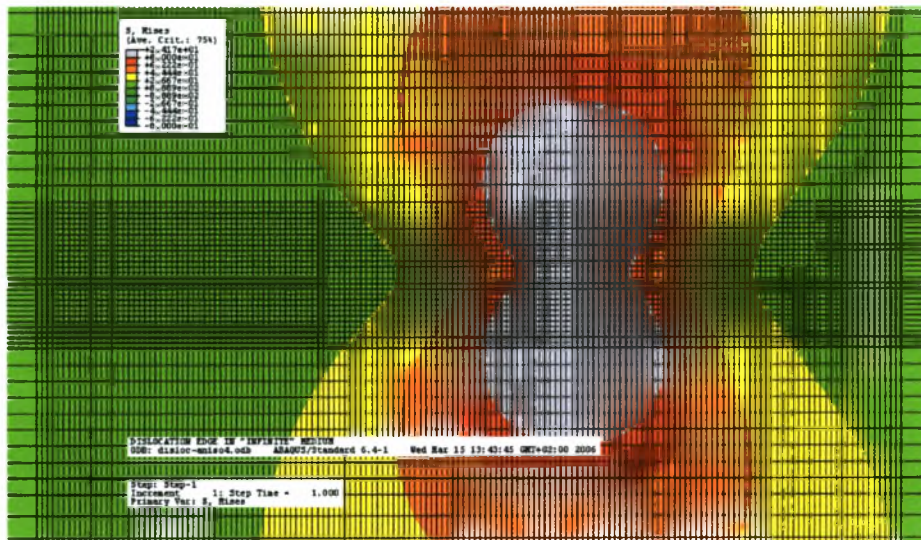
Τάσεις σ_{yy} με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m



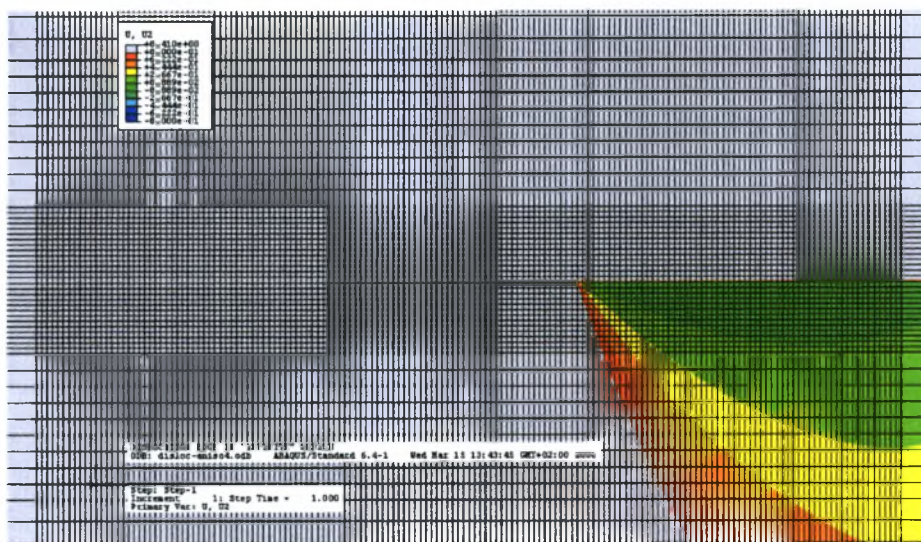
Τάσεις σ_{xy} με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m



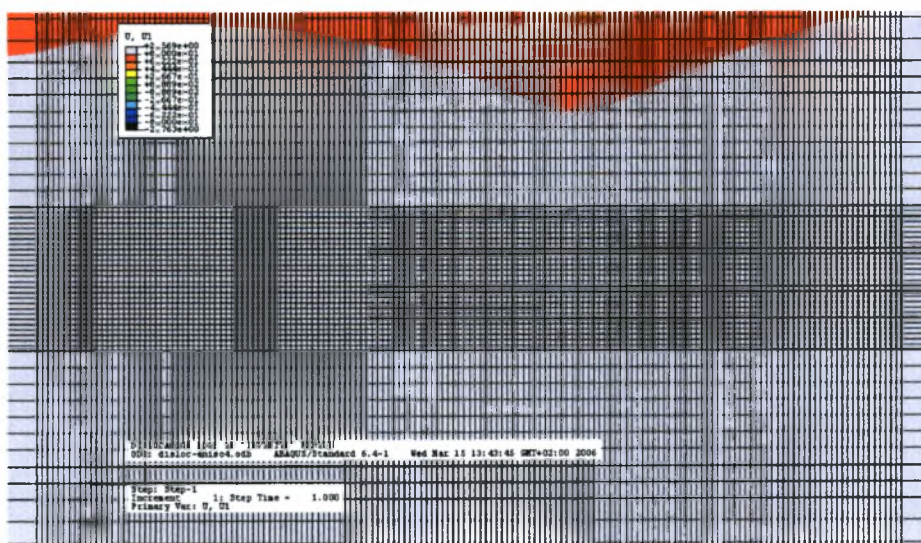
Τάσεις σ_{zz} με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m



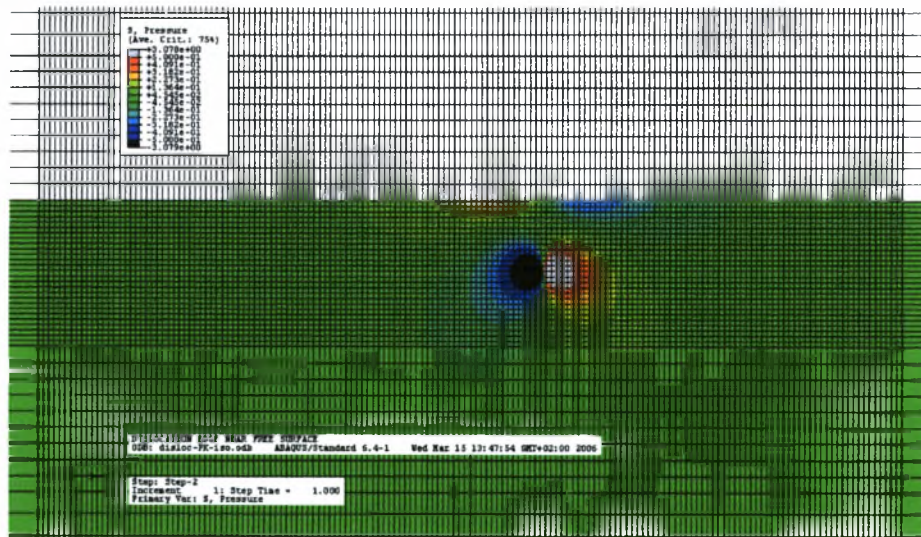
Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,80, 0,80) Pa/m



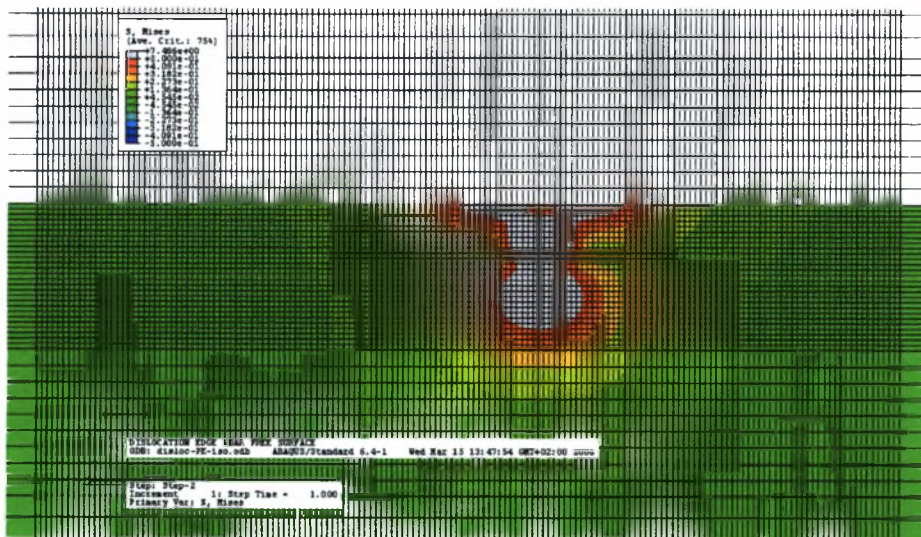
Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπυλών (-0,80, 0,80)



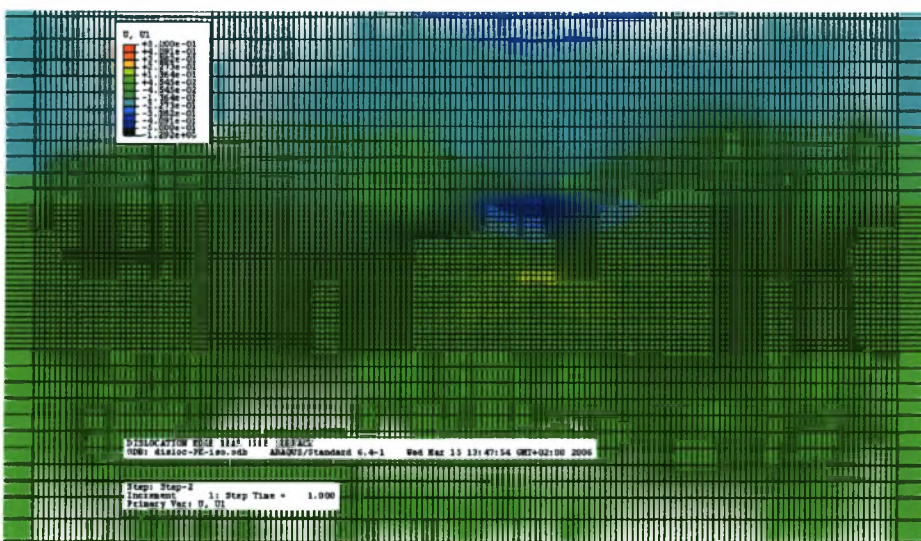
Παραμορφώσεις u_y με εύρος καμπυλών (-0,80, 0,80)



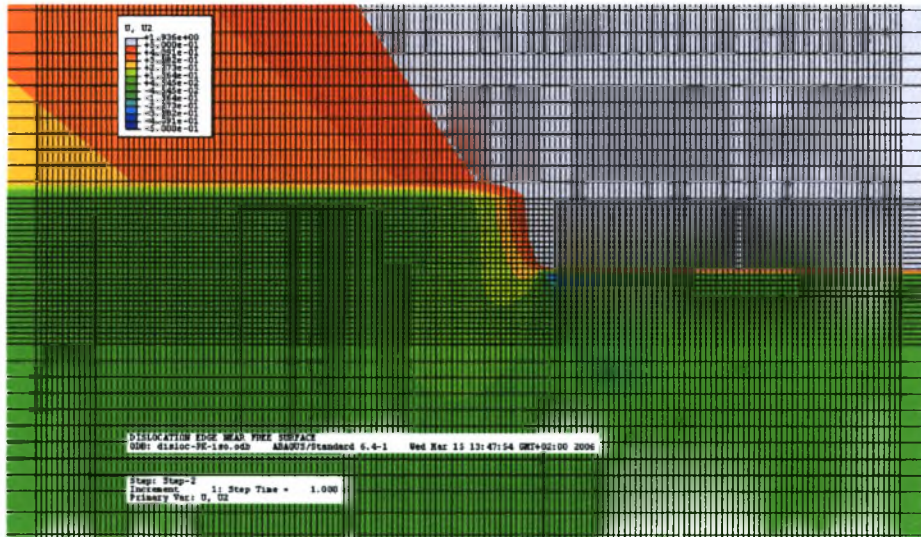
Τάσεις σ_H με εύρος ισοτασικών (-0,50, 0,50) Pa/m



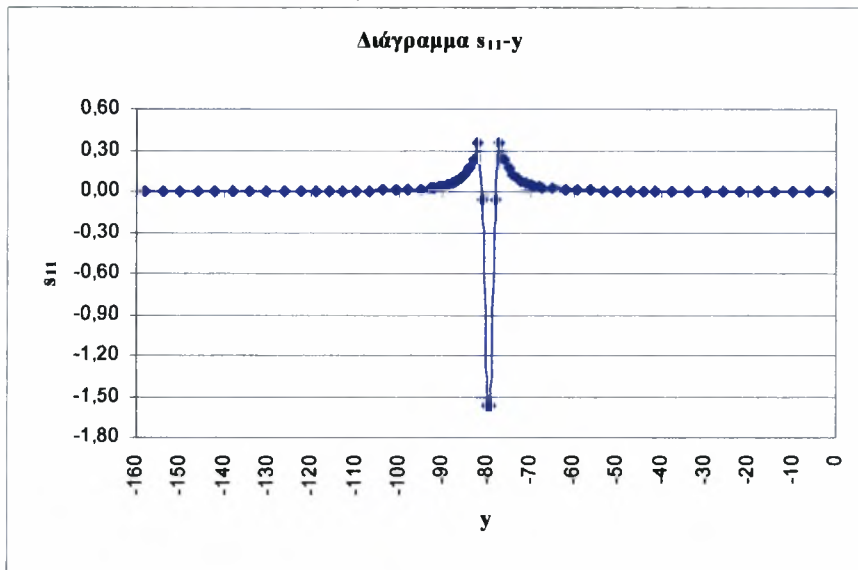
Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,50, 0,50) Pa/m



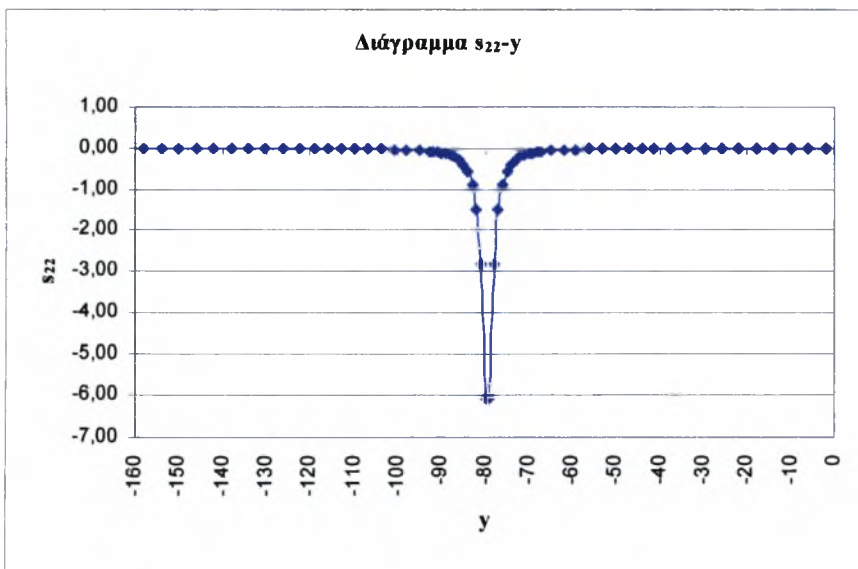
Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπυλών (-0,50, 0,50)



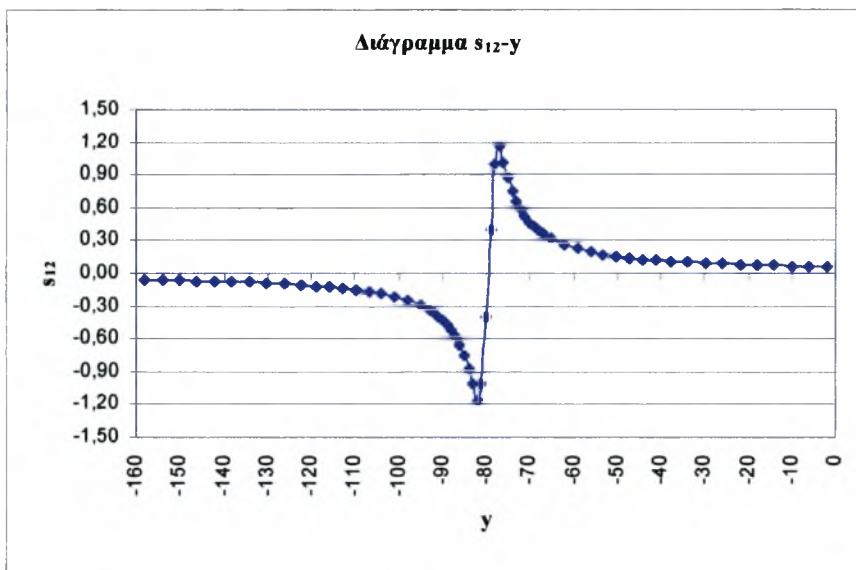
Παραμορφώσεις u_y με εύρος καμπυλών (-0,50, 0,50)



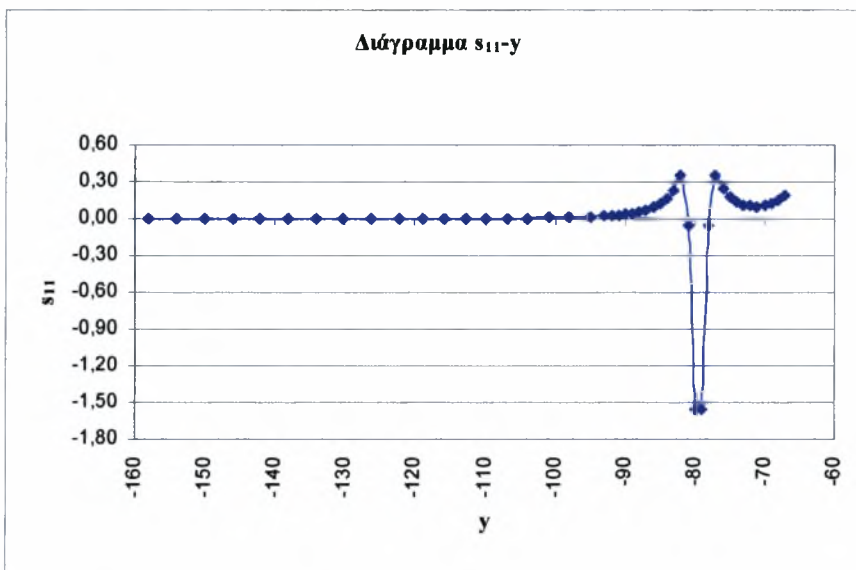
Κατανομή τάσεων σ_{xx} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



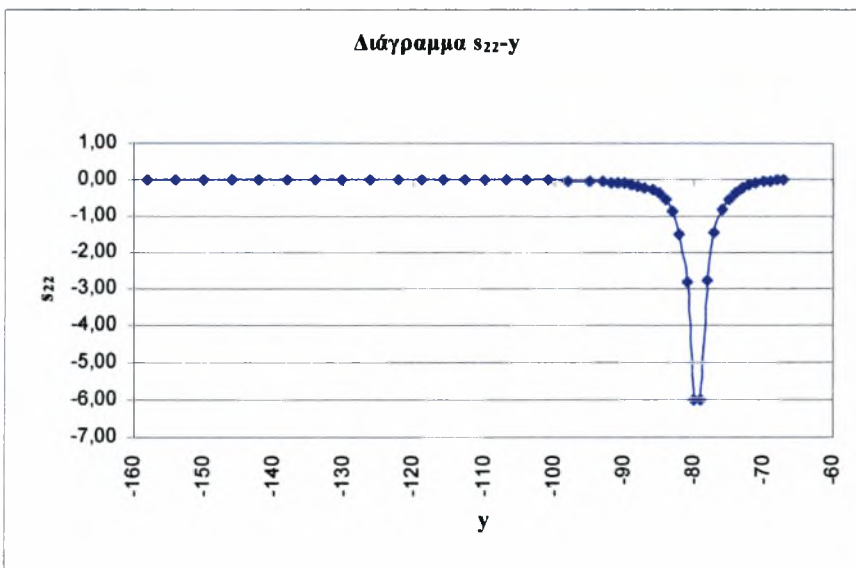
Κατανομή τάσεων σ_{yy} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



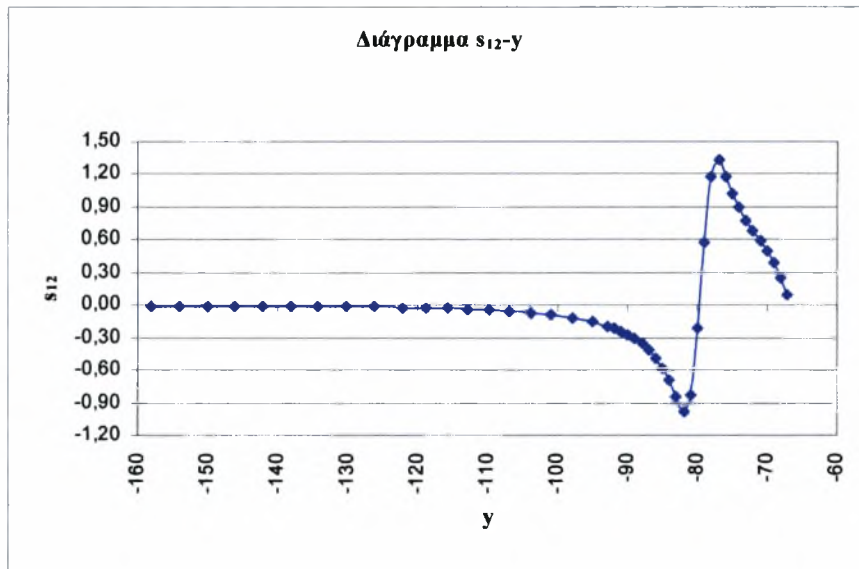
Κατανομή τάσεων σ_{xy} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



Κατανομή τάσεων σ_{xx} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

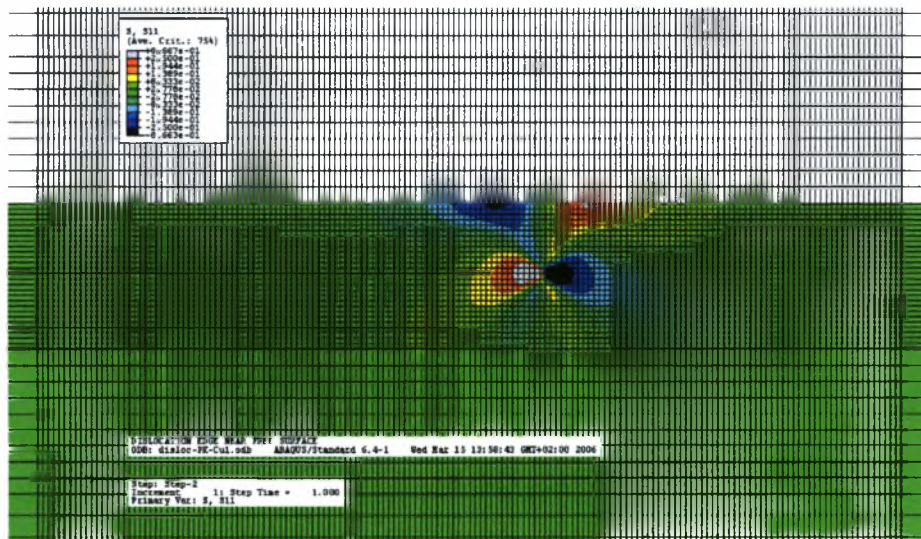


Κατανομή τάσεων σ_{yy} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

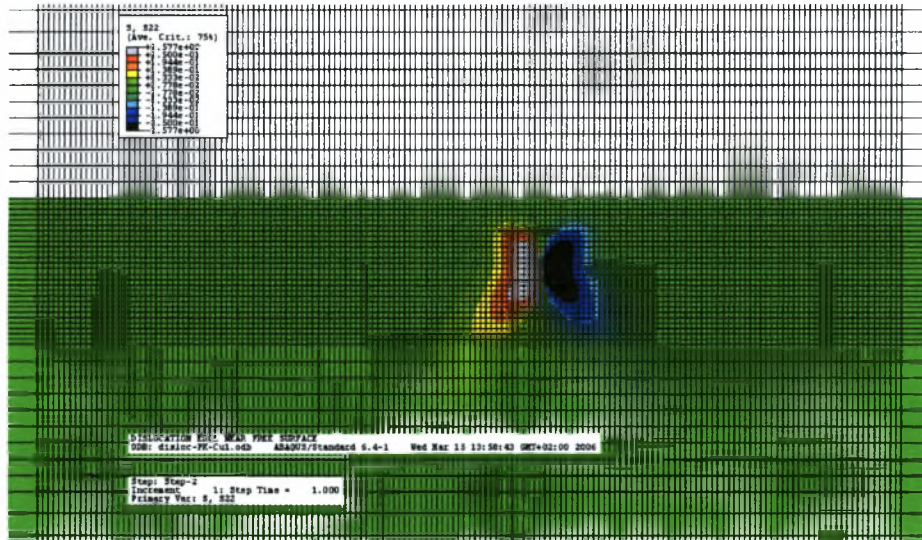


Κατανομή τάσεων σ_{xy} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

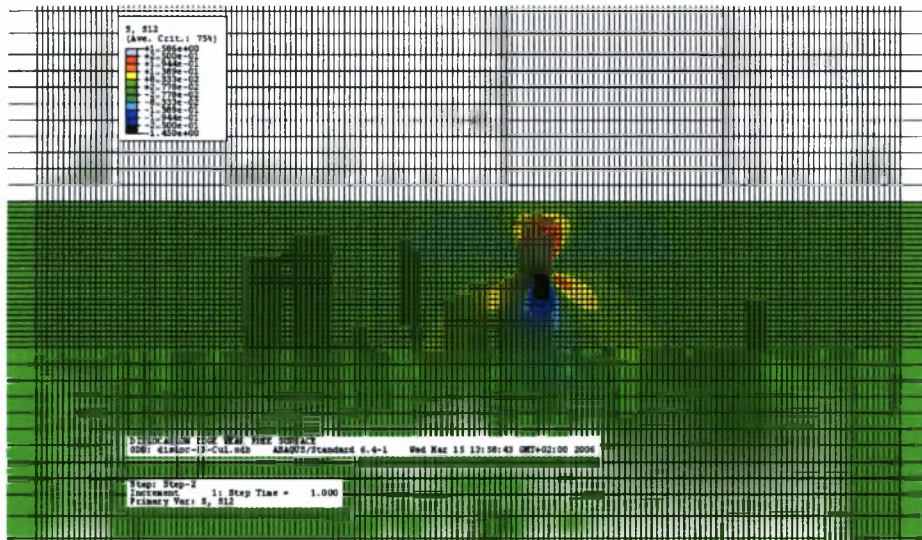
7. Αποτελέσματα για ατέλεια $\mathbf{b}=(0, b_y)$ σε ανισότροπο υλικό (Cu) κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια



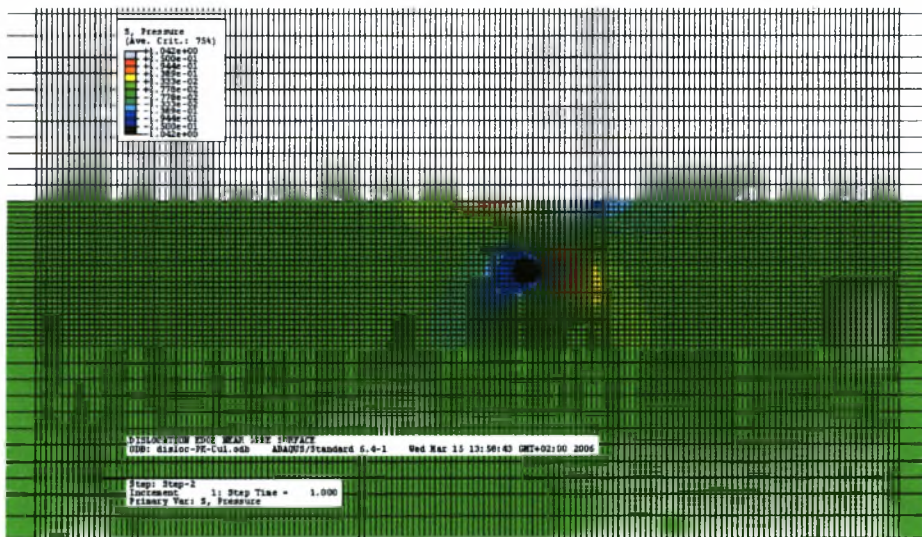
Τάσεις σ_{xx} με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



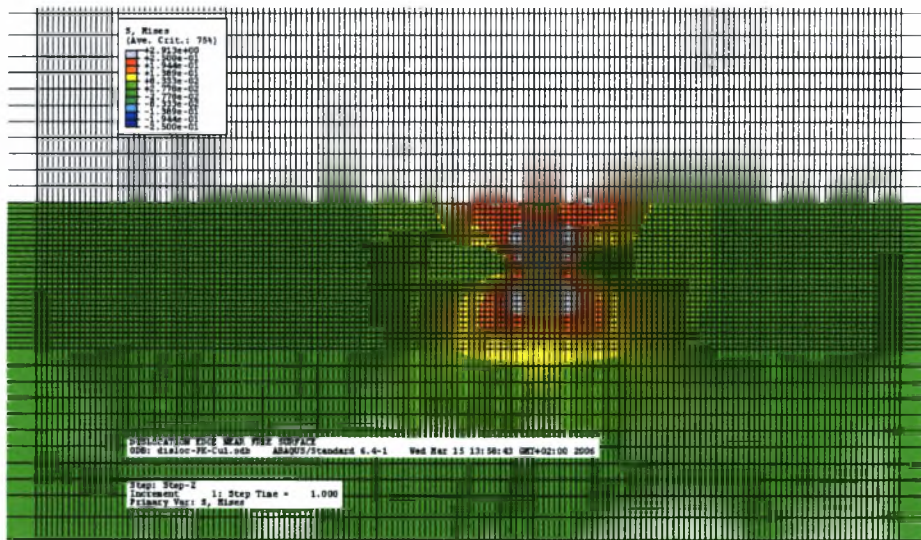
Τάσεις σ_{yy} με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



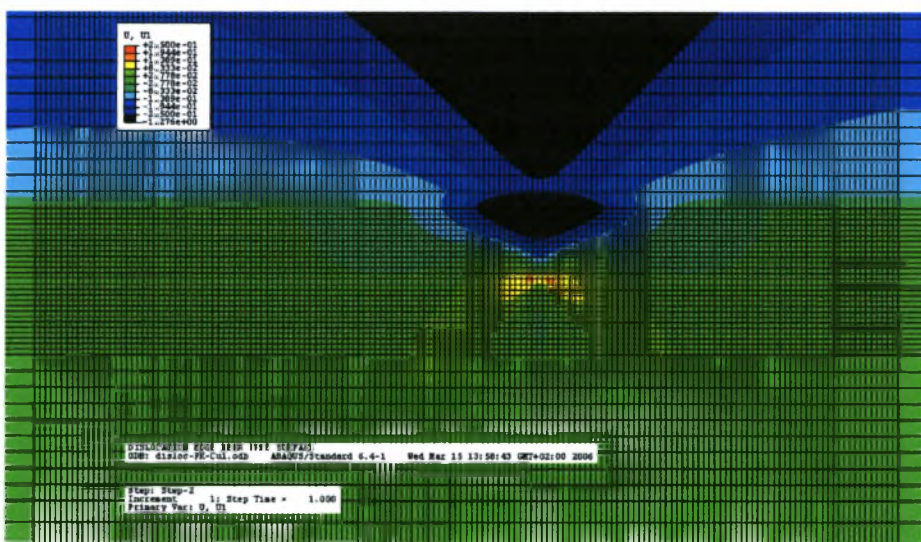
Τάσεις σ_{xy} με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



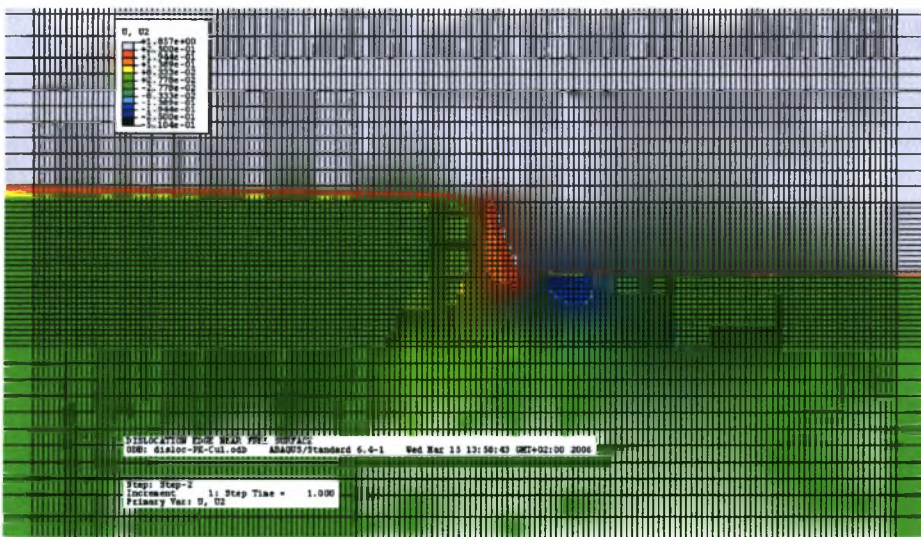
Τάσεις σ_H με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



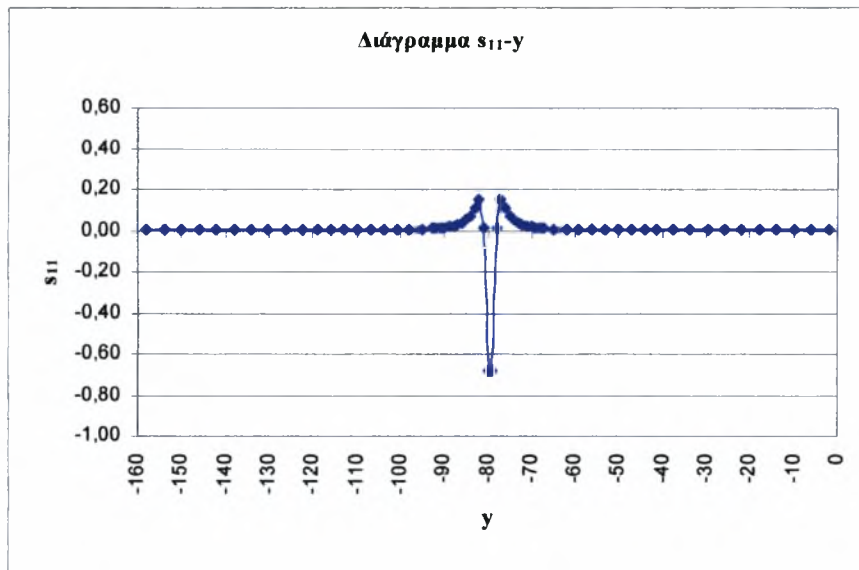
Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



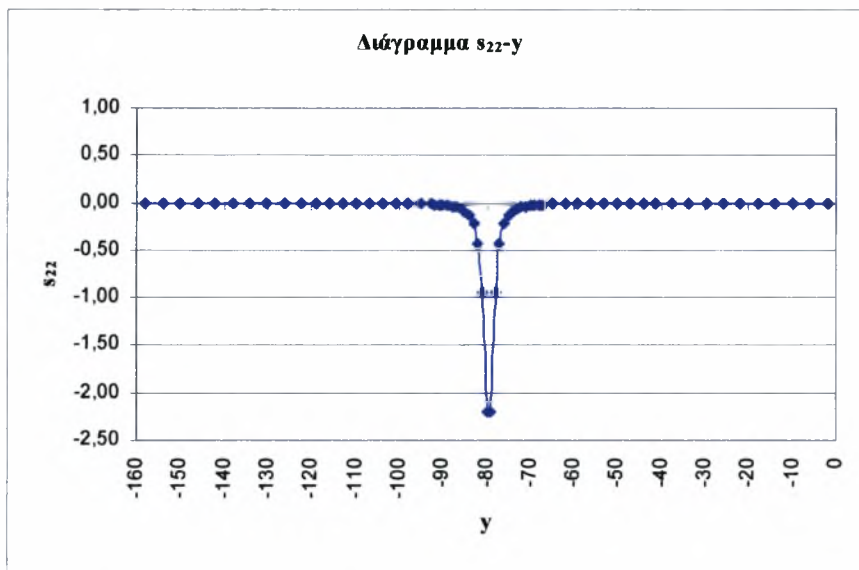
Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπυλών (-0,25, 0,25)



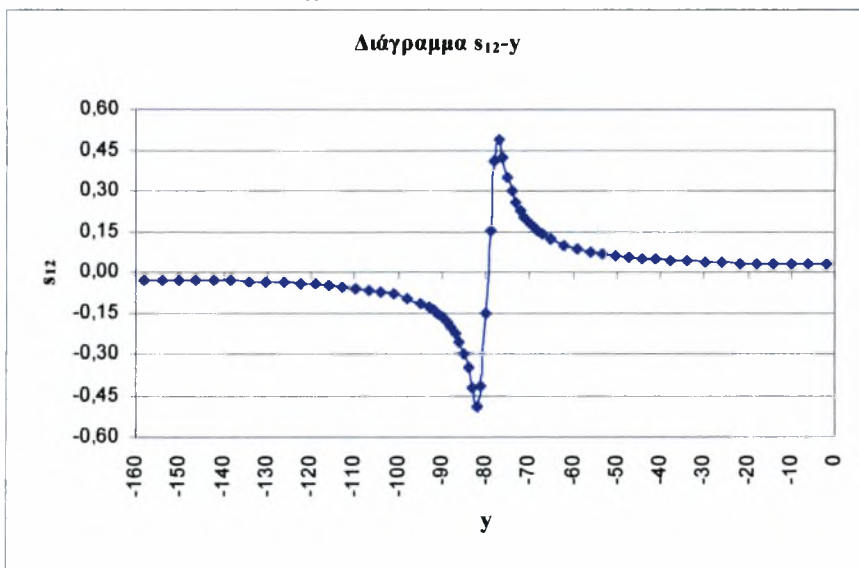
Παραμορφώσεις u_y με εύρος καμπυλών (-0,25, 0,25)



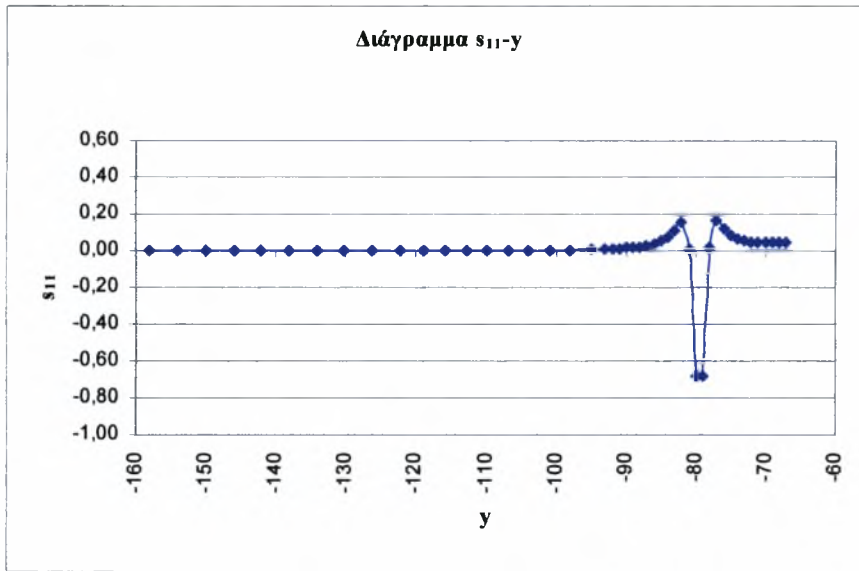
Κατανομή τάσεων σ_{xx} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



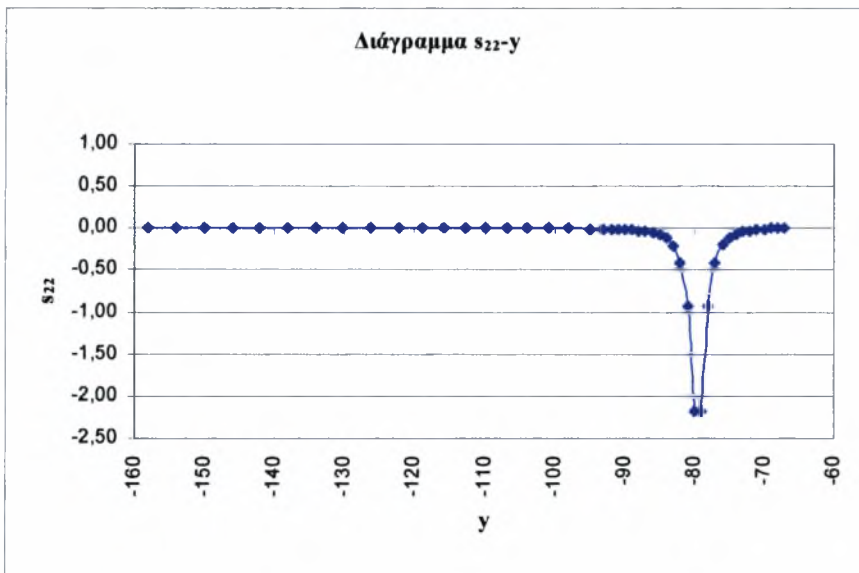
Κατανομή τάσεων σ_{yy} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



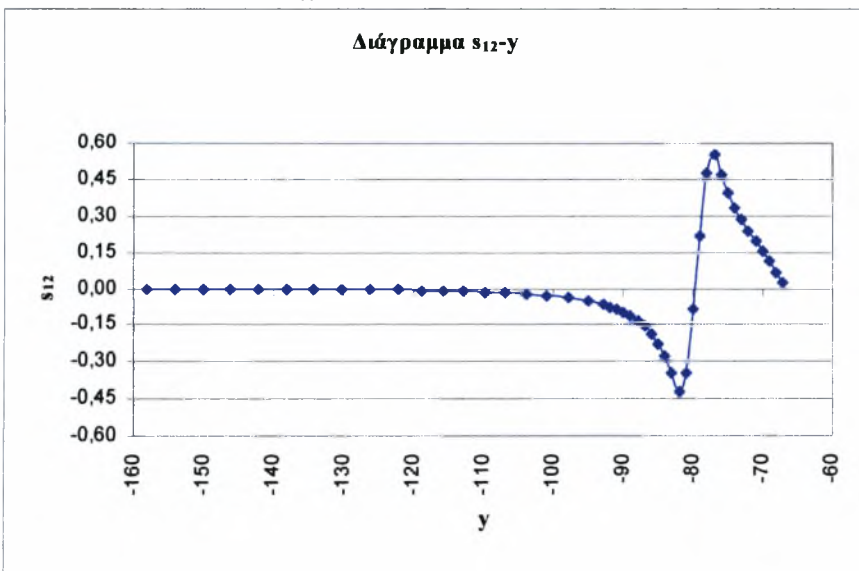
Κατανομή τάσεων σ_{xy} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



Κατανομή τάσεων σ_{xx} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

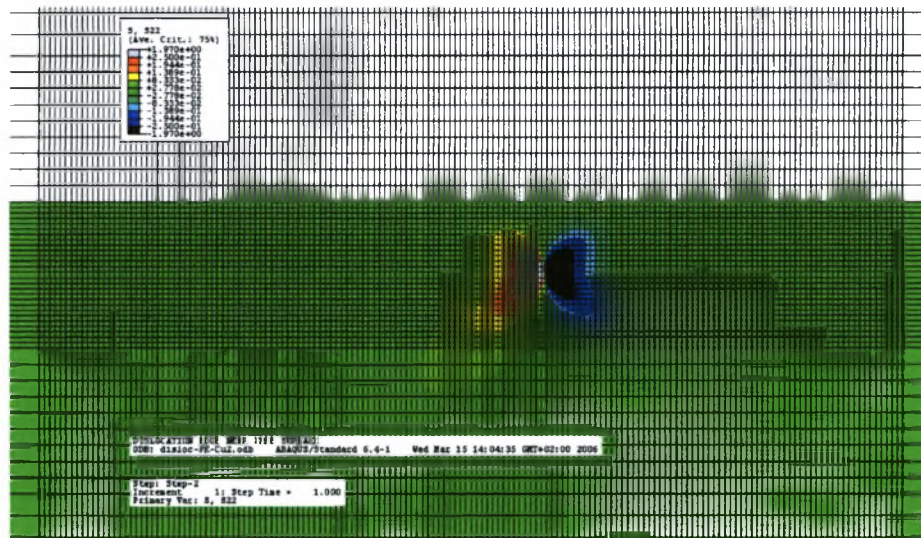


Κατανομή τάσεων σ_{yy} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

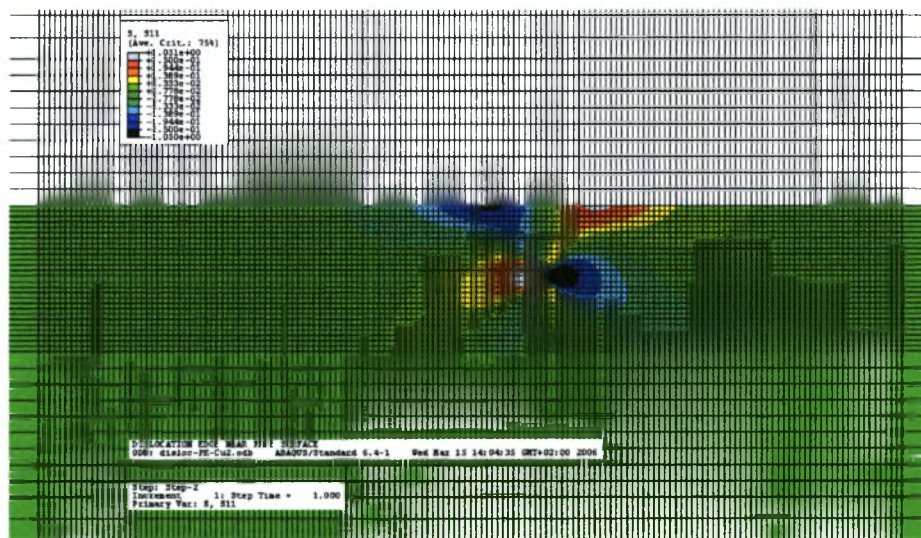


Κατανομή τάσεων σ_{xy} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

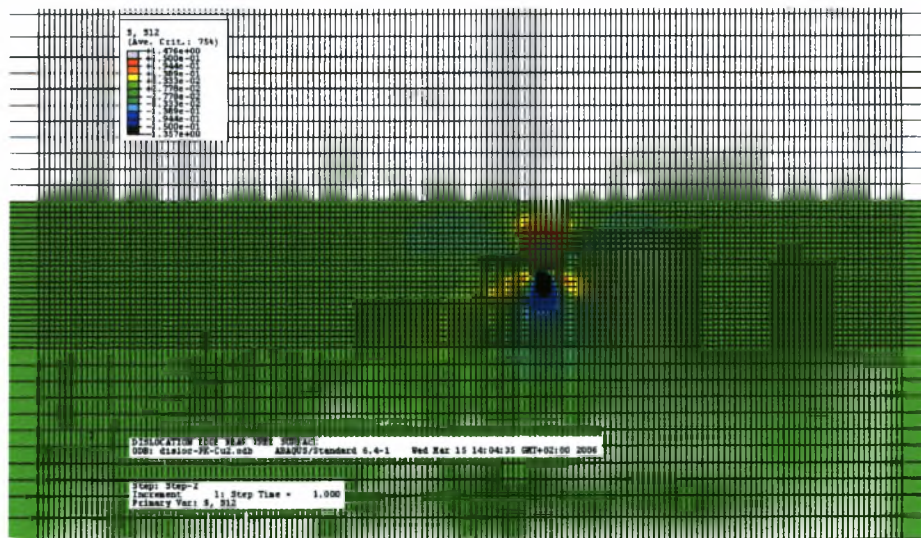
8. Αποτελέσματα για ατέλεια $\mathbf{b}=(b_x, 0)$ σε ανισότροπο υλικό (Cu) κοντά σε ελεύθερη επιφάνεια



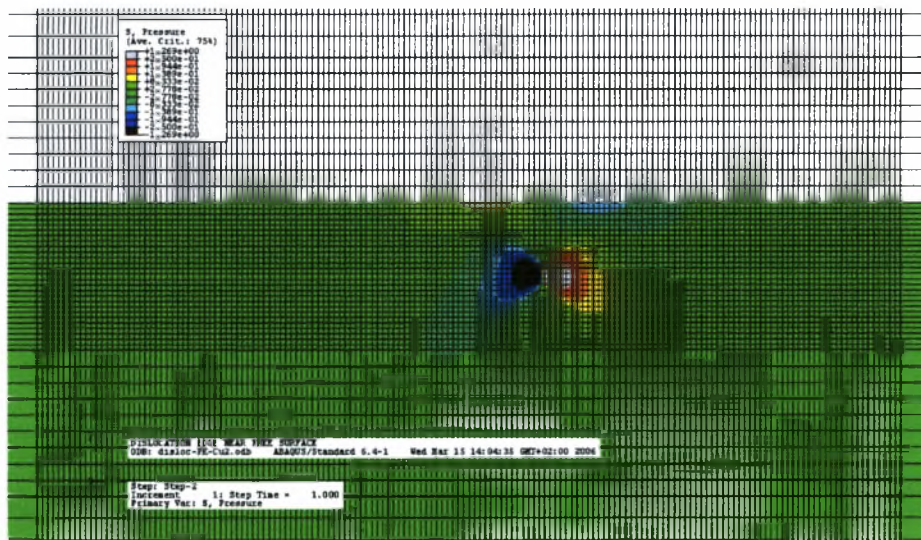
Τάσεις σ_{xx} με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



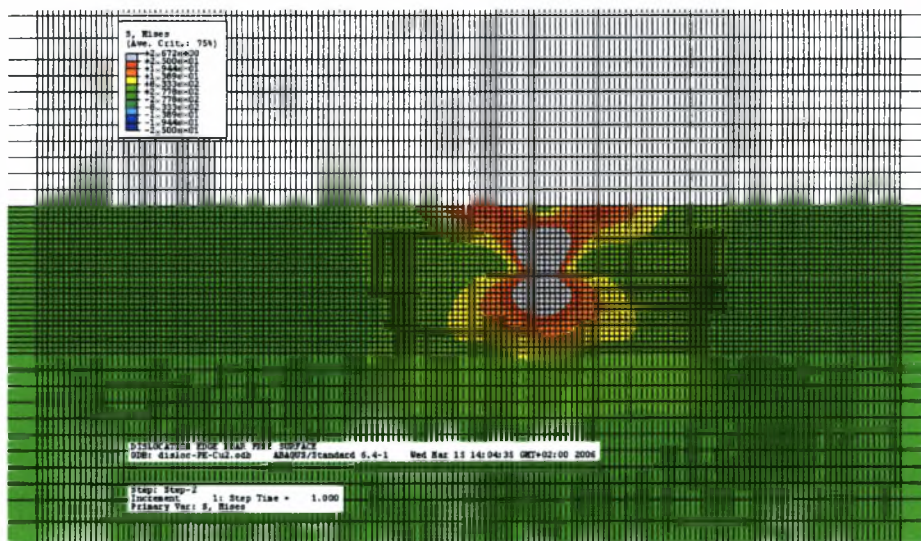
Τάσεις σ_{yy} με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



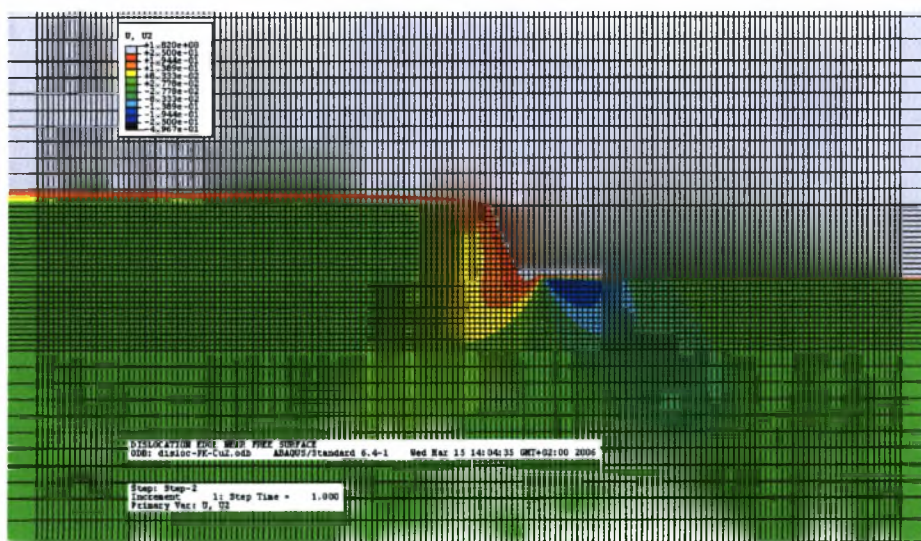
Τάσεις σ_{xy} με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



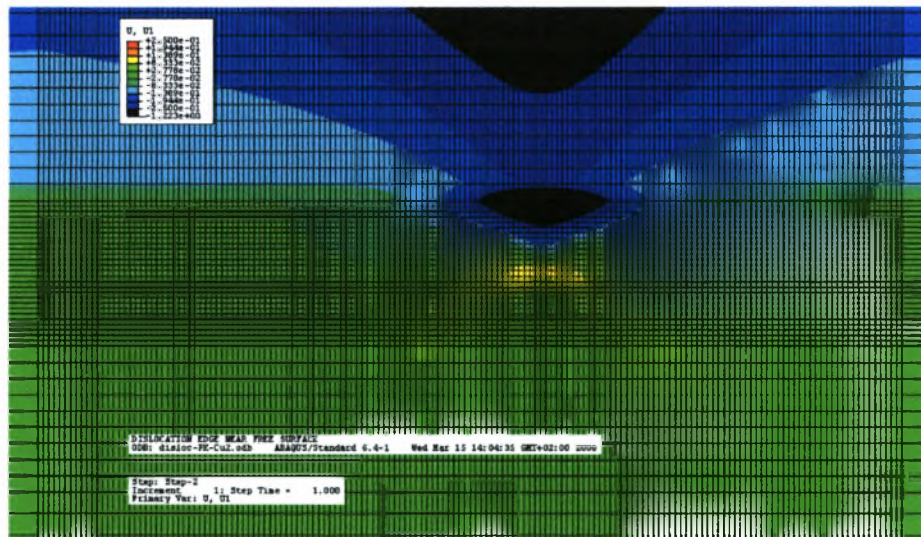
Τάσεις σ_H με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



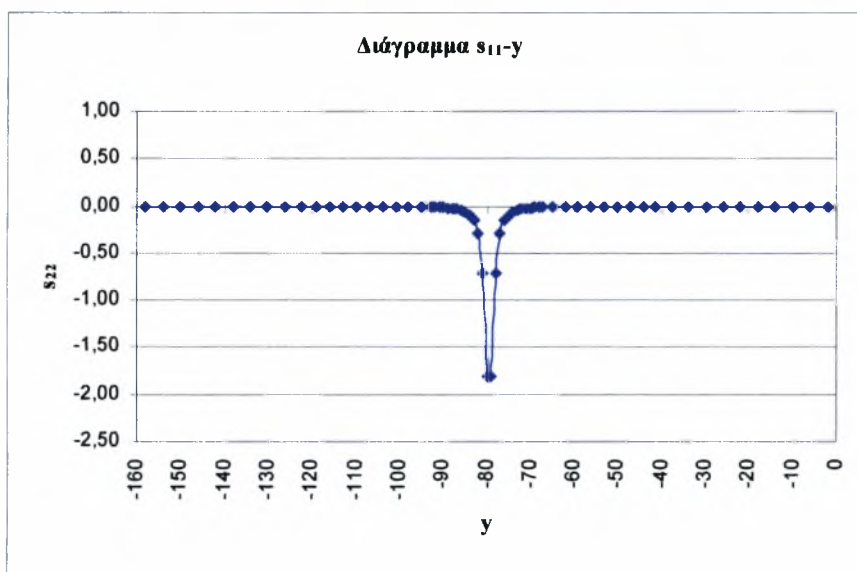
Τάσεις Mises με εύρος ισοτασικών (-0,25, 0,25) Pa/m



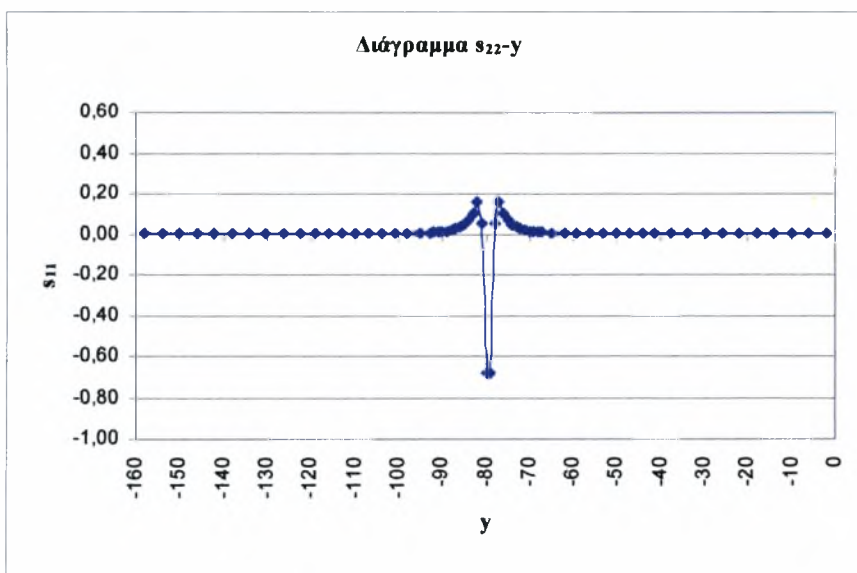
Παραμορφώσεις u_x με εύρος καμπλών (-0,25, 0,25)



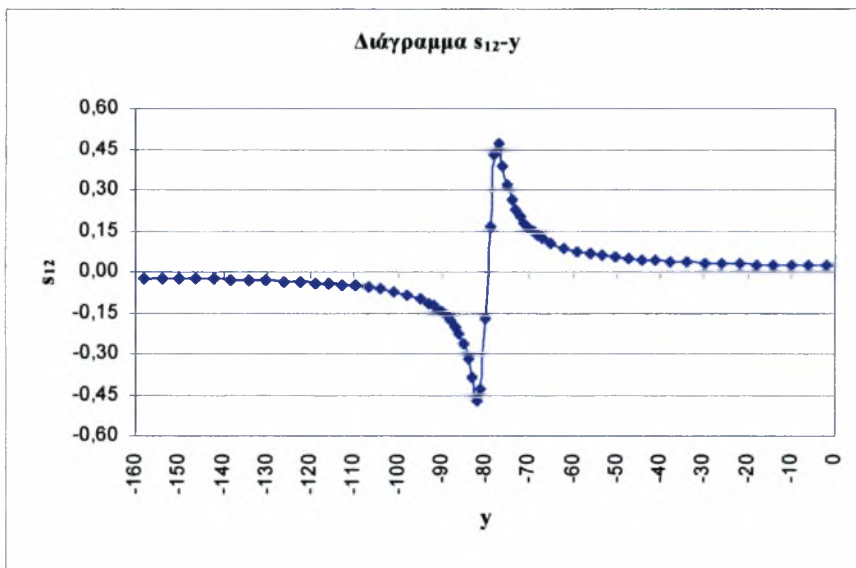
Παραμορφώσεις u_y με εύρος καμπλών (-0,25, 0,25)



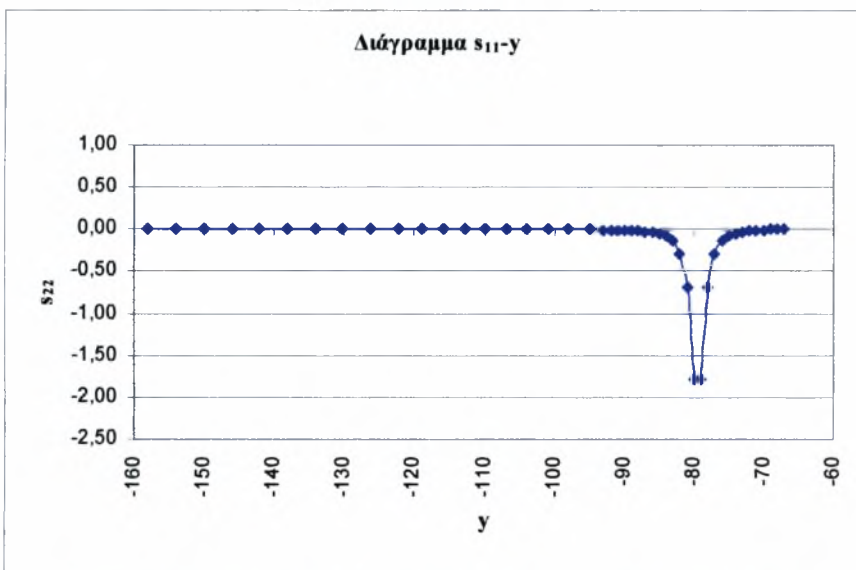
Κατανομή τάσεων σ_{xx} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



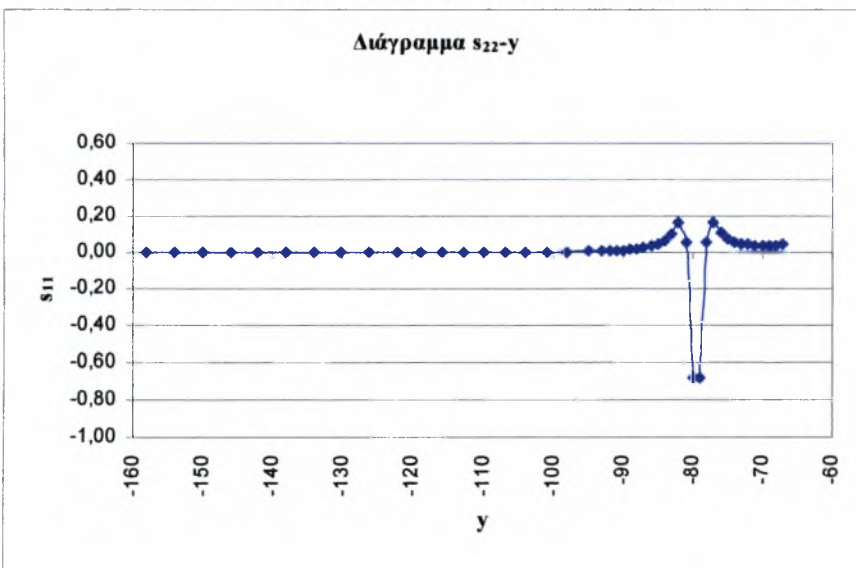
Κατανομή τάσεων σ_{yy} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



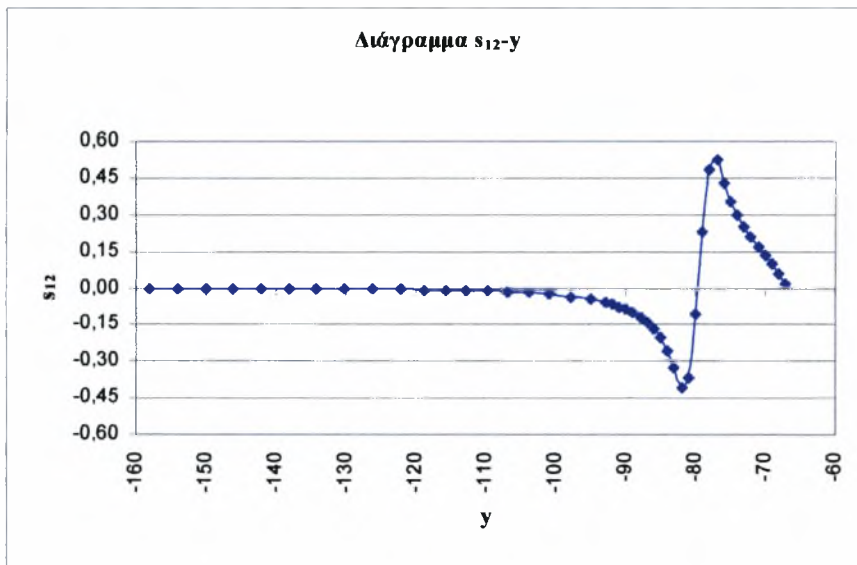
Κατανομή τάσεων σ_{xy} πριν τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



Κατανομή τάσεων σ_{xx} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



Κατανομή τάσεων σ_{yy} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας



Κατανομή τάσεων σ_{xy} μετά τη δημιουργία ελεύθερης επιφάνειας

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ

Ένα μέρος της παρούσας εργασίας παρουσιάστηκε στο διεθνές συνέδριο με τίτλο «International Symposium on the Mechanics of Material Forces», που έλαβε χώρα στη Σύμη από τις 3 μέχρι τις 8 Ιουλίου 2005.

International Symposium

on

the Mechanics of Material Forces

Symi, Greece

3-8 July 2005

jointly organized by

the University of California – San Diego

and the National Technical University of Athens

Friday, 8 July, 9:00 – 13:00:

(X. Markenscoff and H.G. Georgiadis, Chairs)

C. Le University of Ruhr – Bochum	Microcrack nucleation in brittle solids
Cristian Dascalu Universite de Paris IV	Configurational forces in microfractured bodies
Vlado Lubarda, Xanthippi Markenscoff University of California – SD	A configurational force on the lattice dislocation and the lattice friction stress
Antonios Giannakopoulos, K.P. Baxevanakis, A. Gouldstone University of Thessaly	Finite element analysis of Volterra-type dislocations: A thermal analogue

Στη συνέχεια ακολούθησε η συγγραφή επιστημονικού άρθρου (paper) το οποίο έγινε αποδεκτό για δημοσίευση από διεθνές περιοδικό (Archive of Applied Mechanics). Στις επόμενες σελίδες ακολουθεί το άρθρο στα αγγλικά.

Archive of Applied Mechanics



Draft Manuscript for Review

[S2] Finite element analysis of Volterra dislocations in anisotropic crystals: A thermal analogue

Journal:	<i>Archive of Applied Mechanics</i>
Manuscript ID:	AAM-05-0173
Manuscript Type:	Originals
Date Submitted by the Author:	15-Dec-2005
Complete List of Authors:	Giannakopoulos, Antonios; University of Thessaly, Civil Engineering, Laboratory of Strength of Materials and Micromechanics Baxevanakis, Konstantinos; University of Thessaly, Civil Engineering, Laboratory of Strength of Materials and Micromechanics Gouldstone, Andrew; Stony Brook University
Keywords:	Dislocations, Finite Elements, Anisotropic Elasticity

powered by ScholarOne
Manuscript Central™

Finite element analysis of Volterra dislocations in anisotropic crystals: A thermal analogue

A. E. Giannakopoulos^{*1}, K. P. Baxevanakis*, A. Gouldstone**

**Laboratory of Strength of Materials and Micromechanics, University of Thessaly, Volos, 38334, Greece*

***Stony Brook University, Stony Brook, NY 11794-2275, USA*

Abstract

The present work gives a systematic and rigorous implementation of Volterra dislocations in ordinary two-dimensional finite elements using the thermal analogue and the integral representation of dislocations through the stresses. The full fields are given for edge dislocations in anisotropic crystals and the Peach-Koehler forces are found for some important examples.

Keywords: Dislocations, Finite Elements, Anisotropic Elasticity.

1. Introduction

Dislocations are line defects in crystalline materials with well documented existence, formation, interaction and motion. Their importance in science and technology is enormous. The mechanics of dislocations is a prominent and difficult subject of Linear Elasticity, Hirth and Lothe (1982). Closed form solutions exist for relatively simple problems, whereas more complex geometries, as well as anisotropy, introduce substantial difficulties. In many cases, the detailed stress fields around dislocations are not known explicitly, especially when dislocations are interacting with boundaries or other dislocations.

The knowledge of the stresses around dislocations is important. The equilibrium position of a dislocation and its stability requires that the resulting shear stress be balanced by the non-linear atomic interactions across the glide plane. This resisting to the free motion stress is called the Peierls stress, Peierls (1940) and Nabarro (1947). The assessment of such stresses is important for the physical theories of plasticity, fatigue and fracture, micro and nano-indentation, strength of nano-composites and micro-electro-mechanical devices etc (see for example Phillips, 2001; Cottrell, 1961; Petch, 1953; Hall, 1951; Rice, 1992).

Atomistic calculations are still not in regular engineering use, despite important attempts to be included in finite element methodologies, e.g. Tadmor et al. (1996). In the present work we use an analogue from thermoelasticity to describe discrete dislocations within the context of classic finite element methodology. Biot (1935) presented a thermal analogue to model the elastic fields around dislocations and the method has been applied as an experimental technique to study dislocations with optical methods. The integral representation of the Burgers vector in terms of stresses has been shown by Mindlin and Salvadori (1950) and has been recently used by Dundurs and Markenscoff (1993). We use the previous ideas, together with a suitable

¹ Associate Professor, Head of the Laboratory of Strength of Materials and Micromechanics
Tel.: +24210-74179, Fax:+24210-74169, E-mail: agiannak@uth.gr

temperature distribution to circumvent the displacement incompatibility that is needed by the mathematical description of a Volterra dislocation, however, not allowed by ordinary finite elements. The present work is focusing on the two-dimensional edge dislocations in anisotropic crystals, following our initial work on isotropic materials, Gouldstone and Giannakopoulos (2005).

2. The thermal analogue and its implementation in finite elements

2.1. The thermal analogue for two dimensional edge dislocations

We will consider an elastic solid under plane deformation. In the absence of body forces, the contents of the stress tensor σ_{ij} must obey the equilibrium conditions which in Cartesian coordinates (x, y, z) are:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

The linear strain components must meet the local compatibility condition

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2} = 0 \quad (2)$$

Consider an Airy function $\Phi(x, y)$ so as (1) are satisfied

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}, \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \quad (3)$$

The local compatibility condition is necessary for given strain components to yield continuum displacements (u_x, u_y) , but is not sufficient if the domain is multiply connected. According to Michell (1899), global compatibility conditions in the form of line integrals must be imported. For closed contours surrounding a Volterra dislocation (Fig. 1):

$$\oint d\omega_z = 0 \quad \text{where} \quad \omega_z = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \quad \text{is the material rotation} \quad (4)$$

$$\oint du_x = b_x \quad \text{and} \quad \oint du_y = b_y \quad (5)$$

Equation (4) is necessary in order not to have any edge disclination (Somigliana type of dislocation). The quantities b_x and b_y are the components of the Burgers vector of an edge dislocation.

[Figure 1]

Recall the strain-displacement relations

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \quad (6)$$

Then equation (4) becomes:

$$0 = \oint \left[\left(\frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial y} \right) dx + \left(\frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial y} \right) dy \right] \quad (7)$$

Taking into account equations (5), (6), (7) and (2), we obtain:

$$b_x = -\oint x \left(\frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial x} dx - \frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial y} dy \right) - \oint y \left[\frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial x} dx - \left(\frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial y} - 2 \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial y} \right) dy \right] \quad (8)$$

$$b_y = -\oint x \left[\left(2 \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial y} \right) dx + \frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial x} dy \right] - \oint y \left(\frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial x} dx + \frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial y} dy \right) \quad (9)$$

Let us consider the tangent and the perpendicular vectors of the closed contours (Fig. 1):

$$\underline{n} = \left\{ \frac{dy}{ds}, -\frac{dx}{ds} \right\}^T, \quad \underline{s} = \left\{ \frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds} \right\}^T \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} ds = \frac{\partial}{\partial x} dy - \frac{\partial}{\partial y} dx, \quad \frac{\partial}{\partial s} ds = \frac{\partial}{\partial x} dx + \frac{\partial}{\partial y} dy \quad (11)$$

Next, consider an anisotropic thermoelastic medium with cubic crystal symmetry in its elastic properties (3 elastic constants are needed: c_{11} , c_{12} , c_{44}). The constitutive expressions between the strains and the stresses in plane-stain deformation are:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1+\nu}{E} \left[\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \right] + \alpha(1+\nu)\theta \quad (12)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{1+\nu}{E} \left[\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \right] + \alpha(1+\nu)\theta, \quad \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{xy}$$

In the absence of the temperature distribution $\theta(x, y)$, the stresses relate to the deformations in the following way:

$$\{\sigma_{ij}\} = \{c_{ijkl}\}_{6 \times 6} \{\varepsilon_{kl}\} \quad (13)$$

Taking into account the equations above, we obtain

$$\mu = c_{44}, \quad \nu = \frac{c_{12}}{c_{11} + 2c_{12}}, \quad E = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 3c_{12})}{c_{11} + 2c_{12}} \quad (14)$$

$H = 2c_{44} + c_{12} - c_{11}$ is the anisotropy factor and $A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}$ is the anisotropy

ratio (see Table 1 for particular examples used in this work).

From the Michell equations (8) and (9) and from continuity of $x\sigma_{xx}$, $y\sigma_{yy}$ and $y\sigma_{xy}$, $x\sigma_{xy}$ we obtain:

$$b_x = \alpha(1+\nu) \oint \left(x \frac{\partial \theta}{\partial s} - y \frac{\partial \theta}{\partial n} \right) ds + \frac{(1-\nu^2)}{E} \oint \left(x \frac{\partial(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial s} - y \frac{\partial(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial n} \right) ds \quad (15)$$

$$- \frac{(1+\nu)}{E} \oint (\sigma_{xy} n_x + \sigma_{yy} n_y) ds + \left(\frac{1}{\mu} - \frac{2(1+\nu)}{E} \right) \oint \sigma_{xy} dy$$

$$b_y = \alpha(1+\nu) \oint \left(x \frac{\partial \theta}{\partial n} + y \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) ds + \frac{(1-\nu^2)}{E} \oint \left(x \frac{\partial(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial n} + y \frac{\partial(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})}{\partial s} \right) ds \quad (16)$$

$$+ \frac{(1+\nu)}{E} \oint (\sigma_{xx} n_x + \sigma_{yy} n_y) ds + \left(\frac{2(1+\nu)}{E} - \frac{1}{\mu} \right) \oint \sigma_{xy} dx$$

From the compatibility equation, we obtain

$$\frac{(1-\nu^2)}{E} \left[\frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 \Phi}{\partial y^4} + 2 \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^2 \partial y^2} \right] + \left(\frac{1}{\mu} - \frac{2(1+\nu)}{E} \right) \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^2 \partial y^2} = -\alpha(1+\nu) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \quad (17)$$

Also recall that all stresses are continuous so that

$$\oint \sigma_{xy} dy = 0, \quad \oint \sigma_{xy} dx = 0, \quad \nabla^2 \Phi = - \frac{\alpha(1+\nu)\theta}{\frac{(1-\nu^2)}{E} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \frac{2(1+\nu)}{E} \right)} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} \quad (18)$$

From overall equilibrium of the tractions at the contours we have:

$$\oint (\sigma_{xy}n_x + \sigma_{yy}n_y) ds = 0 \quad , \quad \oint (\sigma_{xx}n_x + \sigma_{xy}n_y) ds = 0 \quad (19)$$

Now assume a steady state thermal distribution:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \theta = 0 \quad (20)$$

Then, eqs. (2) and (7) hold true and eqs. (15) and (16) become:

$$b_x = -(1+\nu)\alpha \oint \left(y \frac{\partial \theta}{\partial n} - x \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) ds \quad , \quad b_y = (1+\nu)\alpha \oint \left(y \frac{\partial \theta}{\partial s} + x \frac{\partial \theta}{\partial n} \right) ds \quad (21)$$

The temperature θ must satisfy equation (20) in order to avoid disclinations.

As an example, select $\theta(x, y)$ as:

$$\begin{aligned} \theta &= \Delta T & y=0 & & x \leq 0 \\ \theta &= \Delta T \frac{y+h}{h} & h \leq y \leq 0 & & x \leq 0 \\ \theta &= \Delta T \frac{h-y}{h} & 0 \leq y \leq h & & x \leq 0 \\ \theta &= 0 & \text{everywhere else} & & \end{aligned} \quad (22)$$

The distribution described by (22) satisfies (20) and when inserted in (21) gives

$$b_y = -2(1+\nu)\alpha \Delta T h \quad (23a)$$

In a similar way (by selecting an appropriate temperature distribution), we can obtain

$$b_x = 2(1+\nu)\alpha \Delta T h \quad (23b)$$

Note that eqs. (21) are the key theoretical results that need to be implemented in the finite element codes and then, after selecting an appropriate temperature field as in (22), solve the resulting thermoelastic problem.

[Figure 2]

2.2. Finite elements implementation

Turning to the Finite Element Method, assume that around the edge dislocation there is a fine element distribution of element size h , Fig. 2. Assuming linear thermoelastic response, we can assign a temperature distribution as in equations (22), on the dashed strips of elements shown in Fig. 2, with

$$\Delta T = -\frac{b_y}{2(1+\nu)\alpha_y h}, \quad a_y = a, \quad a_x = 0, \quad a_z = 0 \quad (24)$$

and/or

$$\Delta T = \frac{b_x}{2(1+\nu)\alpha_x h}, \quad a_x = a, \quad a_y = 0, \quad a_z = 0 \quad (25)$$

so that effectively an edge dislocation with predefined components of the Burgers vector (b_x, b_y) is inserted through a temperature distribution. It should be noted that the thermal expansion coefficients α_x, α_y ($\alpha_z = 0$ in all cases) are not the physical ones, but take apparent values that are suitable for the computations, keeping in mind that there is no actual temperature field in the problem. This procedure forces ordinary finite elements to produce dislocation stress fields in a straightforward way. It should also be reminded that the finite element enforcement of the integrals (21) is done through Gauss integration at selected points and therefore, the type of element is important for the precise

implementation of (21). If four-noded elements are to be used, then the inputs (24) and (25) need to be multiplied by 1/0.57735.

The ABAQUS general purpose finite element code was used and a mesh of 10000 four-noded elements was picked for all applications. The outer boundary was 150 times the Burgers vector in all directions, to model the conditions at infinity, $\sigma_y \rightarrow O\left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right)$ as $\sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty$. Note that no special attention was taken for mesh optimization (which will be presented in future work).

[Figure 3]

3. Numerical examples

3.1. Single edge dislocations

An edge dislocation under plane strain, in an isotropic infinite medium, produces the following classic stresses:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, & \sigma_{yy} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{xy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, & \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}, & \sigma_{xz} &= \sigma_{yz} = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

[Table 1]

The corresponding stresses around an edge dislocation in anisotropic infinite medium have been found by Eshelby et al. (1955) and are:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{Mb_x}{2\pi\rho^4 c_{22}'} \left\{ \left[(\bar{c}_{11}' - c_{12}')(\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}') - \bar{c}_{11}' c_{66}' \right] x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'^2 c_{66}'}{c_{22}'} y^3 \right\} + \frac{Mb_y c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(\frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} xy^2 - x^3 \right) \\ \sigma_{yy} &= \frac{Mb_x c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^3 \right) - \frac{Mb_y}{2\pi\rho^4 c_{11}'} \left\{ \left[(\bar{c}_{11}' - c_{12}')(\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}') - \bar{c}_{11}' c_{66}' \right] xy^2 + c_{22}' c_{66}' x^3 \right\} \\ \sigma_{xy} &= \frac{Mb_x c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^3 + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} xy^2 \right) + \frac{Mb_y c_{66}'}{2\pi\rho^4} \left(-x^2 y + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^3 \right) \end{aligned} \quad (27)$$

$$\text{where} \quad M = (\bar{c}_{11}' + c_{12}') \left[\frac{\bar{c}_{11}' - c_{12}'}{c_{22}' c_{66}' (\bar{c}_{11}' + c_{12}' + 2c_{66}')} \right]^{1/2}$$

$$\rho^4 = \left(x^2 + \frac{\bar{c}_{11}'}{c_{22}'} y^2 \right)^2 + \frac{(\bar{c}_{11}' + c_{12}')(\bar{c}_{11}' - c_{12}' - 2c_{66}')}{c_{22}' c_{66}'} x^2 y^2 \quad (28)$$

$$\bar{c}_{11}' = (c_{11}' c_{22}')^{1/2}, \quad c_{11}' = c_{11}, \quad c_{12}' = c_{12}, \quad c_{66}' = c_{55}' = c_{44}, \quad c_{22}' = c_{11}' + \frac{1}{2} H$$

With these expressions we obtain the stresses fields shown in the following figures 4 and 5. For brevity, we show only the σ_{xx} fields which are the ones that are influenced mostly by the anisotropy. The left parts of the Figures are the finite element predictions whereas the right parts are the theoretical predictions.

[Figures 4a, 4b, 5a, 5b]

3.2. Influence of a free surface

Consider an edge dislocation with $\mathbf{b} = (0, b_y)$, at a distance l from a free surface, Fig. 6.

[Figure 6]

The stress fields in this occasion are not symmetric as in the dislocation in an infinite medium and can be found in the book of Hirth and Lothe (1982). Such asymmetry will create a configurational (material) force on the dislocation, no other than the Peach-Koehler force (Peach and Koehler, 1950). The Peach-Koehler force per unit dislocation length that will attempt to move the dislocation is given by the form

$$F_k = -\varepsilon_{ijk} \xi_i \sigma_{jl} b_l \quad \text{or} \quad \mathbf{F} = \mathbf{G} \times \boldsymbol{\xi} = (G_y \xi_z) \mathbf{i} + (-G_x \xi_z) \mathbf{j} \quad (29)$$

where $\xi_z = 1$ is the direction of the dislocation line (in this case in the out-of-plane direction z) and

$$G_x = \sigma_{xx} b_x + \sigma_{xy} b_y, \quad G_y = \sigma_{yx} b_x + \sigma_{yy} b_y \quad (30)$$

The resulting force is an attraction toward the free surface and is equal to

$$F_y = \frac{\mu b_y^2}{4\pi(1-\nu)l} = -\frac{\Delta W}{\Delta s} = -\frac{W' - W}{\Delta s}, \quad F_x = 0 \quad (31)$$

Consider that the dislocation's distance from the free surface is $l=13b_y$ and the material is W. From eq. (31) and table 1, we obtain the theoretical solution of the acting force,

$$F_y = \frac{\mu b_y^2}{4\pi(1-\nu)l} = \frac{16b_y^2}{4\pi(1-0.218)13b_y} = 0.125 \quad b_y \times 10^{10} \quad (\text{N/m}).$$

Calculating the force in terms of stresses, we lead in $F_y=0.170 \quad b_y \times 10^{10}$ (N/m). We can improve the precision of that result by doing a cubic interpolation near the tip and reach to $F_y=0.167 \quad b_y \times 10^{10}$ (N/m), that is an overestimation of 34%.

It is clear that the poor resolution of the mesh (13 elements between the dislocation and the free surface) seems to be inadequate for an exact evaluation of (F_x, F_y) although the overall stress distribution seem to be accurate.

To improve the estimation of (F_x, F_y) , without changing the mesh density, an alternative methodology is proposed, based on the energy released by a small advancement of the dislocation in the x and y directions respectively. Then,

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}, \quad F_y = -\frac{\partial U}{\partial y} \quad (32)$$

where U is the total elastic energy of the material with the dislocation. In the numerical implementation of eq. (32), we move the dislocation (and the associate temperature distribution) by one finite element of length h in the (positive) x and the (positive) y direction, separately. Then, we compute the total energy in the initial and in the new positions of the dislocation to find the changes of energy ΔU . The forces were computed from the discretized form of eq. (32) with $\Delta x=h$ and $\Delta y=h$ respectively.

$$F_x = -\frac{\Delta U}{\Delta x} = -\frac{U_{\text{new}} - U_{\text{initial}}}{h}, \quad F_y = -\frac{\Delta U}{\Delta y} = -\frac{U_{\text{new}} - U_{\text{initial}}}{h} \quad (33)$$

In terms of the change of the total energy of the system, we obtain an almost

exact result $F_y = 0.1056 \frac{\mu b_y^2}{l}$ (N/m) and $F_x=0$. In the same way, for Cu, we obtain

$$F_y = 0.0802 \frac{\mu b_y^2}{l} \quad (\text{N/m}), \quad F_x=0 \quad \text{and} \quad F_y = 0.0698 \frac{\mu b_y^2}{l} \quad (\text{N/m}), \quad F_y=0 \quad \text{if the crystal is}$$

rotated by 90° . Whether the dislocation will actually move towards the free surface will depend on the opposing Peierls force (Peierls, 1940; Nabarro, 1947) $\tau_p \cdot L$ where L is the length of the dislocation. For Cu, the value of the Peierls stress is given in the following table ($b=0.255$ nm, $\tau_p=2.43$ MPa).

For a dislocation length $L=1\mu\text{m}$, the minimum distance to avoid attraction of the dislocation towards the free surface for the two cases of Cu crystal is $l=1.619$ μm and $l=1.409$ μm respectively. The isotropic approximation gives $F_y = 0.1129 \frac{\mu b_y^2}{l}$ (N/m) and $l=2.279\mu\text{m}$.

[Table 2]
[Figure 7]

4. Conclusions and further work

The present work gives the development of a robust finite element computational tool for two dimensional edge dislocations in anisotropic crystals. Existing analytical solutions were checked and completed with presentations of the full stress fields. Extensive presentations of dislocation interactions with material interfaces, grain boundaries, spherical particles etc. will be given in future work. The method can be extended to study dynamic dislocations, dislocations in piezoelectrics, the influence of large deformations and disclinated dislocations (to model better the dislocation cores).

Acknowledgements

The authors are grateful to Prof. N. Aravas for allowing the use of the computational facilities of the Laboratory for Computational Mechanics.

References

- [21] ABAQUS Version 6.4 Finite Element Code. Hibbitt, Karlsson and Sorensen, Inc., Pawtucket, R. I.
- [22] Barnett DM (1999) Elastic Anisotropy, Mechanics and Materials: Fundamentals and Linkages. Edited by M. A. Heyers, R. W. Armstrong, H. Kirchner. John Wiley & Sons, pp 71-98
- [23] Biot MA (1935) Distributed gravity and temperature loading in two dimensional elasticity replaced by boundary pressures and dislocations. J. Appl. Mech. IV(2):A41-45
- [24] Cottrell AH (1961) *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*. Oxford University Press, London
- [25] Dundurs J, Markenscoff X (1993) Invariance of stresses under a change in elastic compliances. Proc. R. Soc. London A, A443:289-300
- [26] Eshelby JD, Read WT, Shockley W (1953) Anisotropic Elasticity with applications to dislocation theory. Acta Metallurgica 1:251-259
- [27] Gouldstone A, Giannakopoulos AE (2005) A finite element method for plain-strain and axisymmetric problems of microstructures with dislocations, under preparation
- [28] Hall EO (1951) The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results. Proc. Phys. Soc. London, Sect B, 64:747-53

[29] Hirth JP, Lothe J (1982) *Theory of Dislocations*, 2nd edition. John Wiley & Sons, New York

[30] Michell JH (1899) On the direct determination of stress in an elastic solid, with application to the theory of plates. Proc. London Math. Soc.31:100-124

[31] Mindlin RD, Salvadori MG (1950) In Handbook of experimental stress analysis. Edited by M. Hetenyi. John Wiley & Sons, New York, pp 700-827

[32] Nabarro FRN (1947) Dislocations in a single cubic lattice. Proc. Phys. Soc. 59:256-272

[33] Nabarro FRN (1997) Theoretical and experimental estimates of the Peierls stress. Phil. Mag. A75:703-711

[34] Peach M, Koehler JS (1950) The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. Physical Review 80:436-439

[35] Peierls R (1940) The size of a dislocation. Proc. Phys. Soc.52:34-37

[36] Petch NJ (1953) The cleavage of polycrystals. J. Iron Steel. Inst. 174:25-8

[37] Phillips R (2001) *Crystals, Defects and Microstructures: Models Across Scales*. Cambridge University Press.

[38] Rice JR (1992) Dislocation nucleation from a crack tip: An analysis based on the Peierls concept. J. Mech. Phys. Solids 40:239-271

[39] Tadmor EB, Ortiz M, Phillips R (1996) Quasicontinuum analysis of defects in solids. Phil. Mag. A73:1529-1563

[40] Wang JN (1996) Prediction of Peierls stresses for different crystals. Mater. Sci. Eng. A206:259-269

Table 1: Elastic constants of Cr, Cu and W (after Hirth and Lothe, 1982).

Crystal	c_{11} (10^{10} Pa)	c_{12} (10^{10} Pa)	c_{44} (10^{10} Pa)	H (10^{10} Pa)	A	μ (10^{10} Pa)	E (10^{10} Pa)	ν
Cr	35.00	5.78	10.10	-9.02	0.69	10.10	32.85	0.124
Cu	16.84	12.14	7.54	10.38	3.21	7.54	6.09	0.295
W	52.10	20.10	16.00	0.00	1.00	16.00	38.97	0.218

Table 2: Predominant slip systems and corresponding Peierls stresses for Cu (after Wang, 1996).

Material	Structure	Burgers vector and length b	Primary slip system d {plane}/ b <direction>	Theoretical τ_p/μ at 0° K	Experimental τ_p/μ at 0° K
Cu	Simple fcc	$\langle 1\bar{1}0 \rangle, a_0\sqrt{2}/2$ $b=0.255$ nm	$\frac{\sqrt{6}}{3}a_0\{111\}/\frac{\sqrt{2}}{2}a_0\langle 1\bar{1}0 \rangle$	3.22×10^{-5}	5.31×10^{-6} 1.04×10^{-5}

Figure 1: The components of the Burgers vector of an edge type Volterra dislocation and the corresponding contours surrounding them.

Figure 2: The implementation of the thermal analogue to finite elements.

Figure 3: The normalized stresses σ_{xx}/b_y for material W. The Burgers vector is $\mathbf{b}=(0, b_y)$. The isocontours range is (2.0, -2.0) Pa/m. On the left are the finite element results and on the right the theoretical results. The detail of the discretization is also shown.

Figure 4a: The normalized stresses σ_{xx}/b_y for material Cu. The Burgers vector is $\mathbf{b}=(0, b_y)$. The isocontours range is (0.7, -0.7) Pa/m. On the left are the finite element results and on the right the theoretical results. The detail of the discretization is also shown.

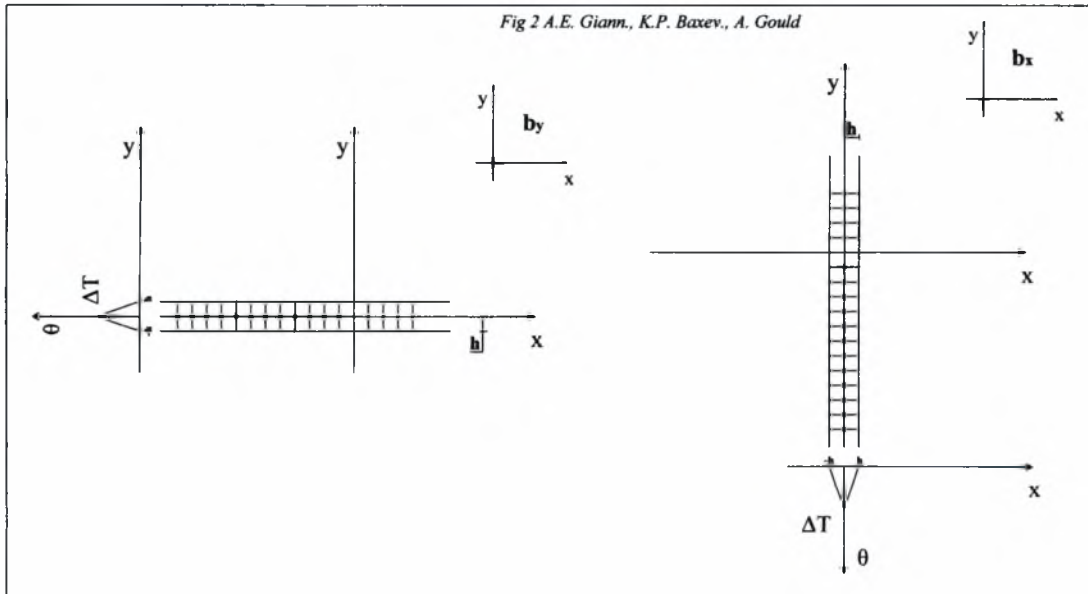
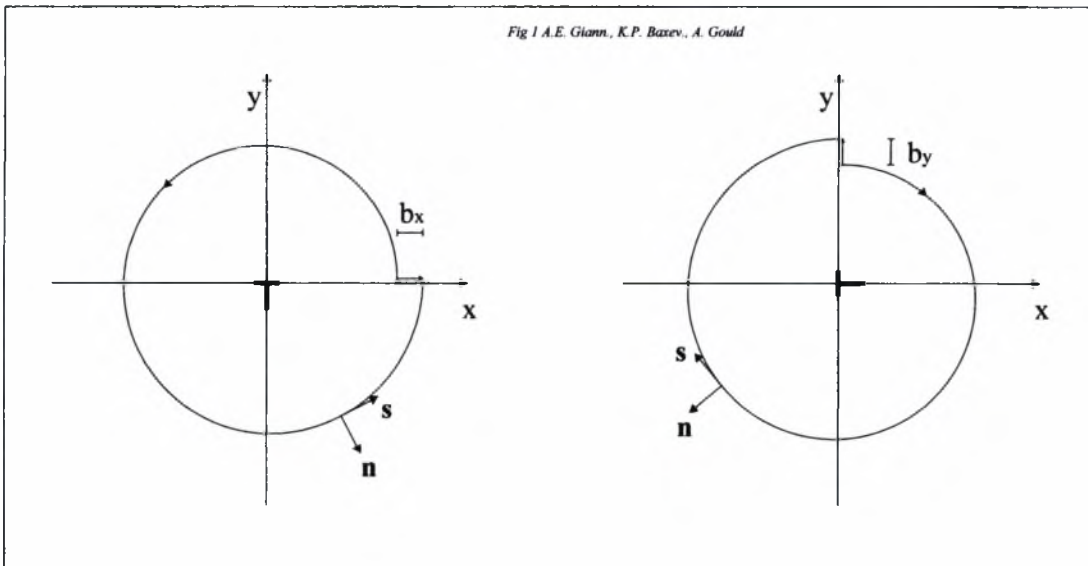
Figure 4b: The normalized stresses σ_{xx}/b_x for material Cu. The Burgers vector is $\mathbf{b}=(b_x, 0)$. The isocontours range is (0.7, -0.7) Pa/m. On the left are the finite element results and on the right the theoretical results. The detail of the discretization is also shown.

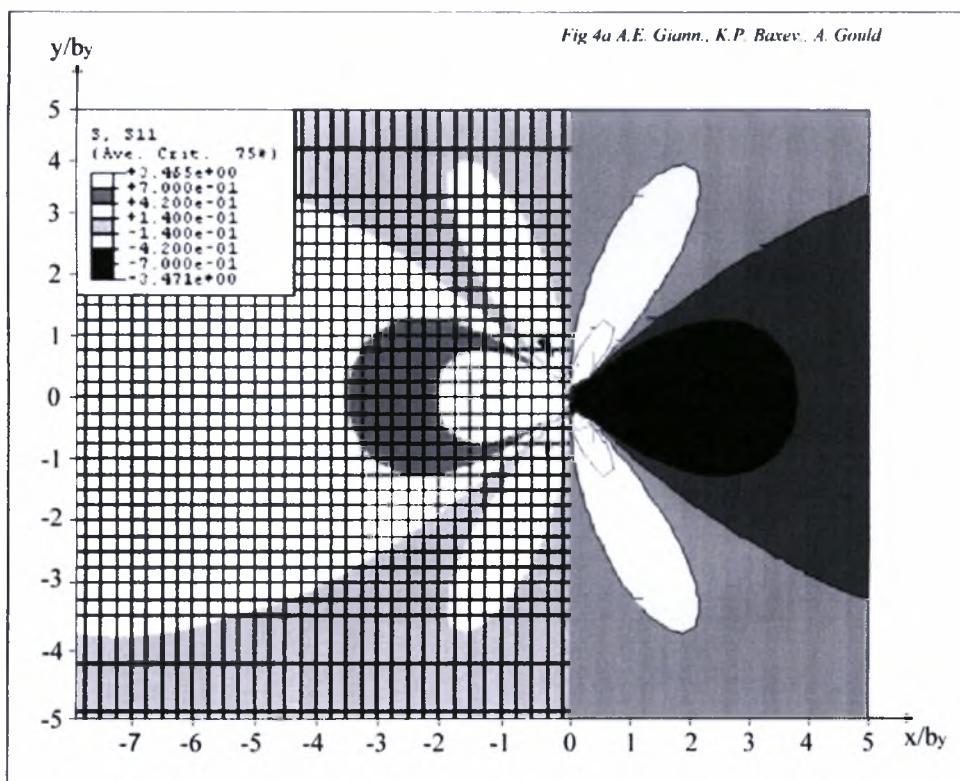
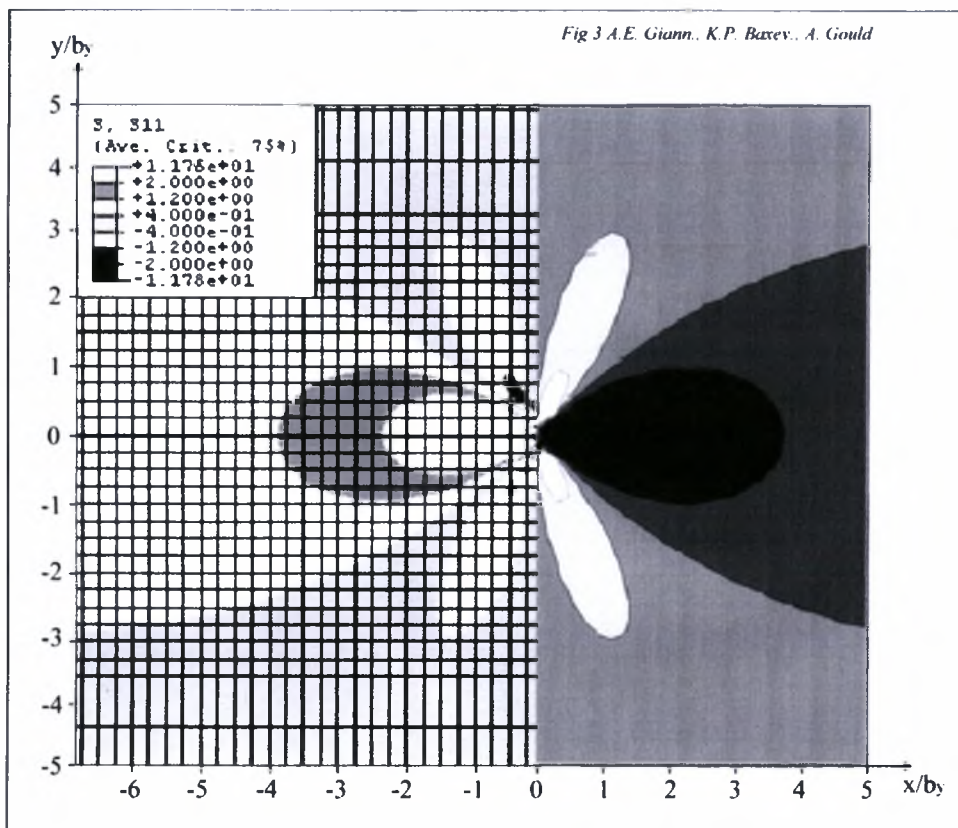
Figure 5a: The normalized stresses σ_{xx}/b_y for material Cr. The Burgers vector is $\mathbf{b}=(0, b_y)$. The isocontours range is (2.0, -2.0) Pa/m. On the left are the finite element results and on the right the theoretical results. The detail of the discretization is also shown.

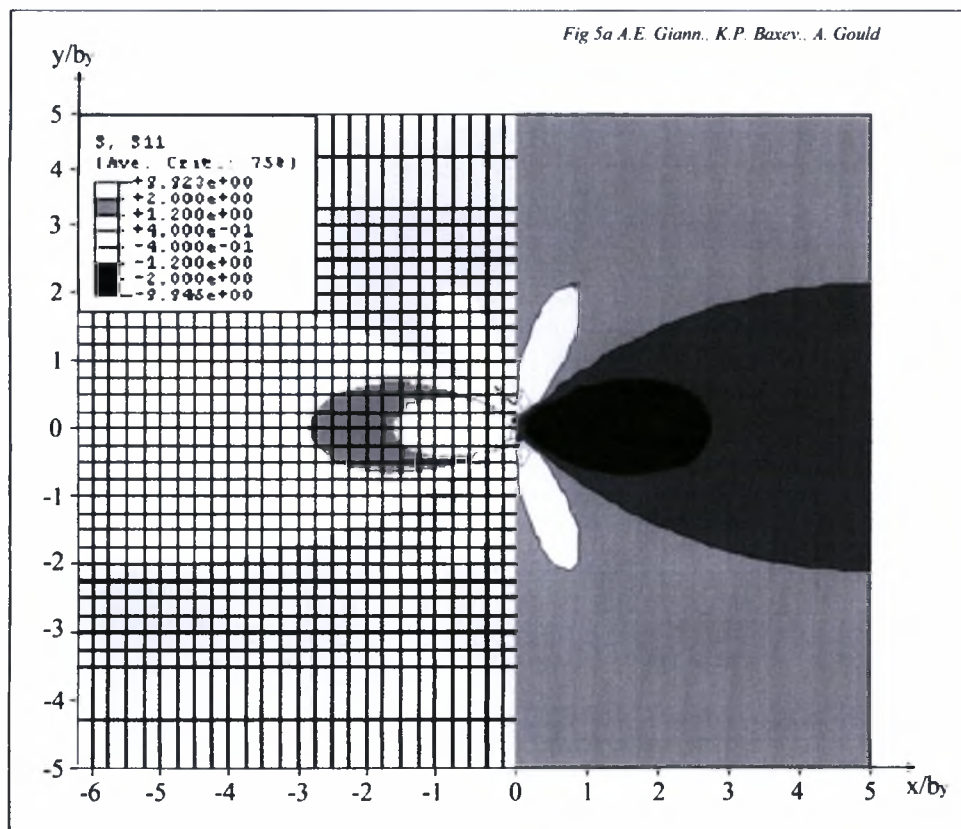
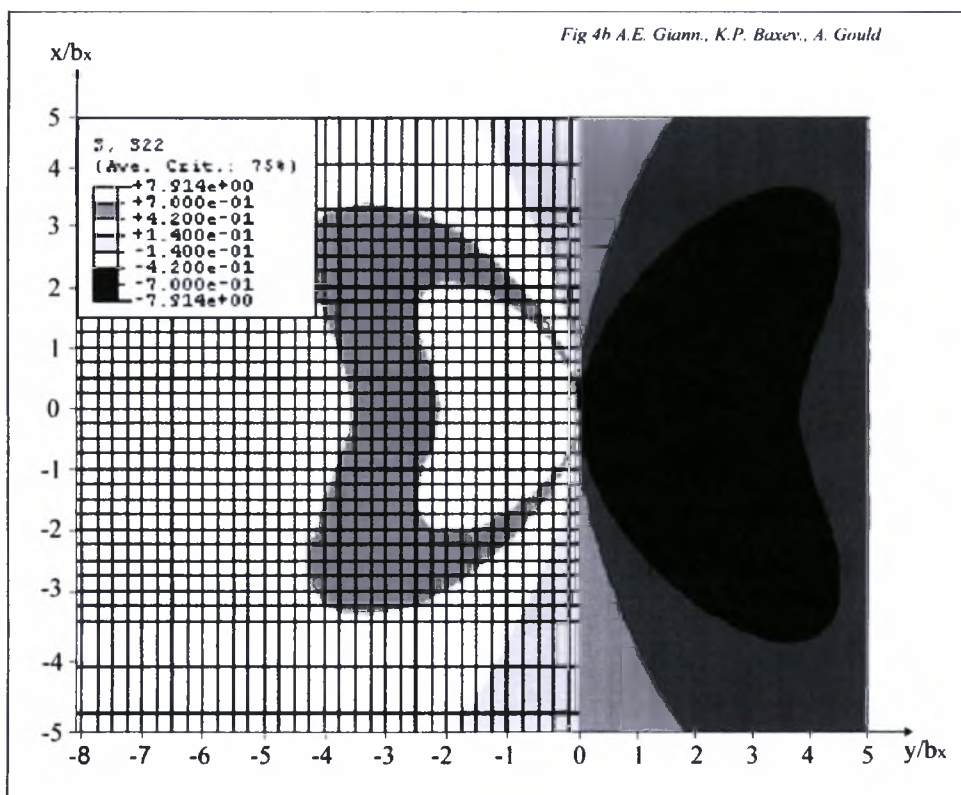
Figure 5b: The normalized stresses σ_{xx}/b_x for material Cr. The Burgers vector is $\mathbf{b}=(b_x, 0)$. The isocontours range is (2.0, -2.0) Pa/m. On the left are the finite element results and on the right the theoretical results. The detail of the discretization is also shown.

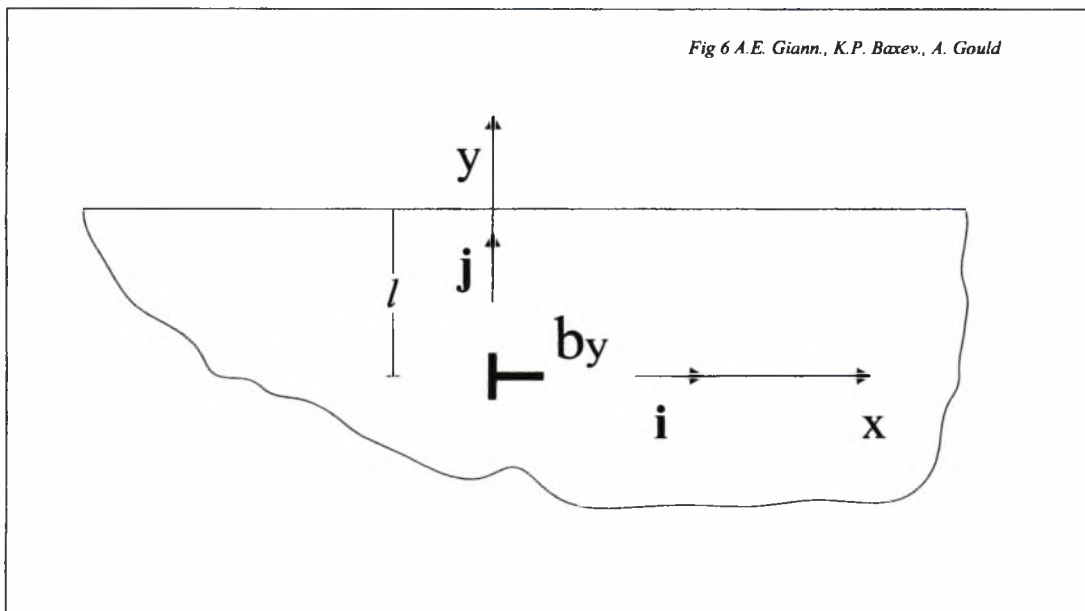
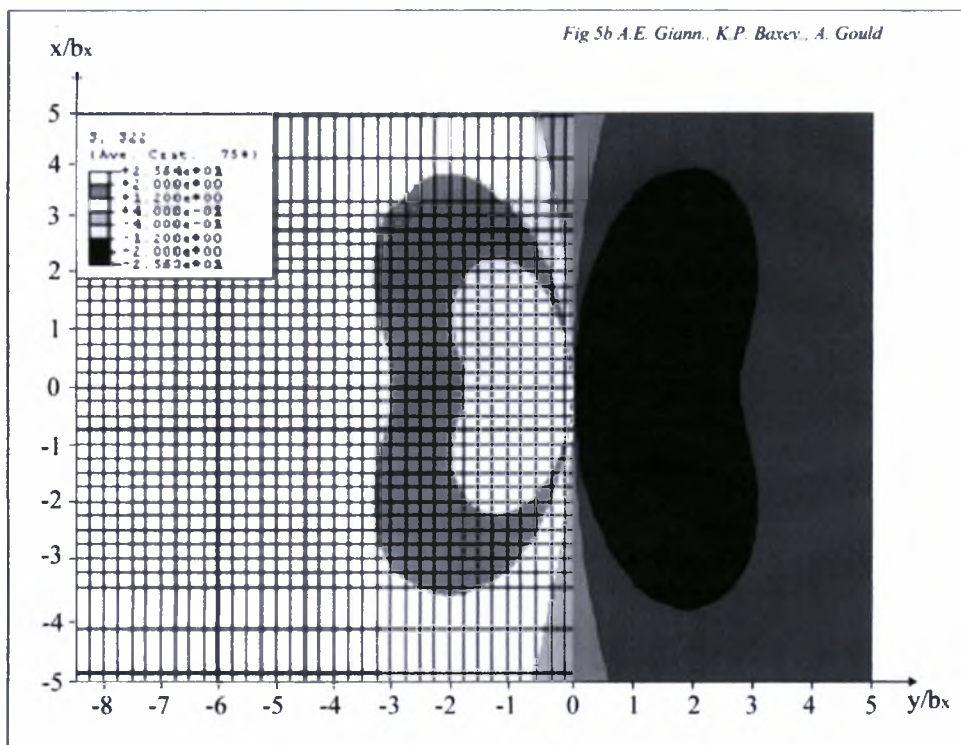
Figure 6: An edge dislocation at a distance l from the free surface.

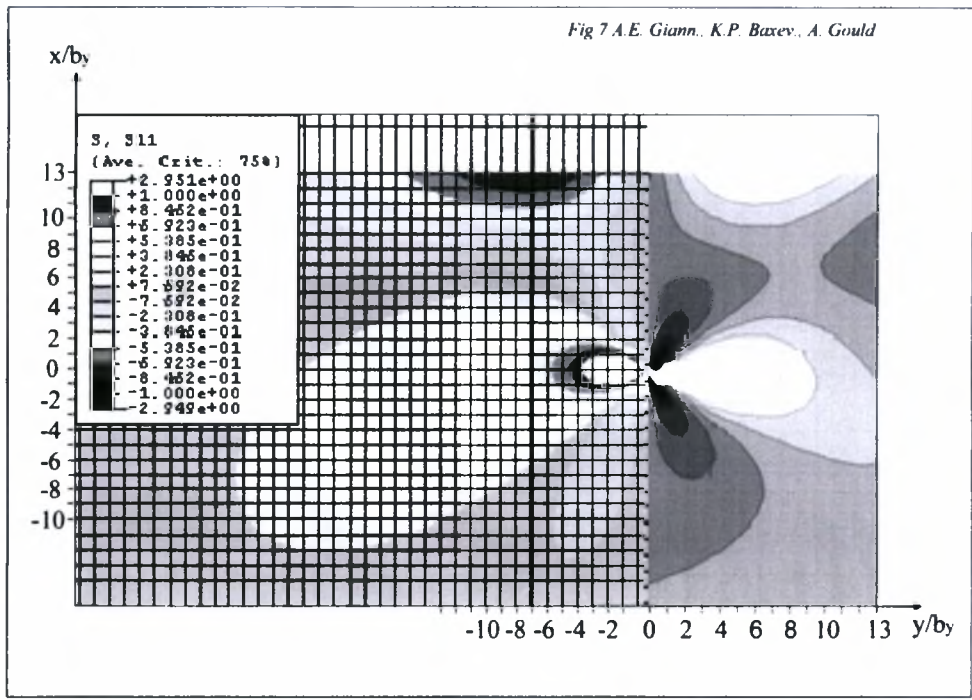
Figure 7: The normalized stresses σ_{xx}/b_y for material W near the free surface. The Burgers vector is $\mathbf{b}=(0, b_y)$. The isocontours range is (1.0, -1.0) Pa/m. On the left are the finite element results and on the right the theoretical results. The detail of the discretization is also shown.













ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ



004000085950

