

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

**Fakulta mechatroniky
a mezioborových inženýrských studií**

**AUTOREFERÁT
DISERTAČNÍ PRÁCE**

**Numerické modelování
elektrických a elastických polí
ve feroelektrických materiálech**

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky
a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: P2612 Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 3901V025 Přírodovědné inženýrství

Numerické modelování elektrických a elastických polí ve feroelektrických materiálech

Ing. Jiřina Královcová

Školitel: Doc.Dr.Ing. Jiří Maryška, CSc.

Rozsah práce a příloh

Počet stran textu: 90

Počet příloh: 1

Počet obrázků: 17

Počet tabulek: 7

Datum: 29. 10. 2004

Abstract

The thesis deals with the suggestion of models of ferroelectric material properties. Three models were developed to support simulation of mentioned materials. The first model provides evaluation of electric field within heterogeneous anisotropic dielectric material exposed external electric loading. The second model provides evaluation of elastic field within heterogeneous anisotropic elastic material exposed external mechanic loading. The third model provides evaluation of electric and elastic field within an ferroelectric material with internal domain structure exposed external electric and mechanic loading. The models are based on a mixed and hybrid formulation of initial physical description. The finite element method is employed to provide the approximation.

The first pivotal part of the thesis provides physical description of considered materials. The second pivotal part is focused on the model formulation and their approximation using finite elements. The third pivotal part describes the problems related to the computer implementation of formulated models and provides results of some fundamental tasks simulated by the models.

Obsah

1	Úvod	5
2	Základní cíle	6
3	Použitá matematická formulace úlohy	7
4	Model elektrického pole	8
5	Model elastického pole	9
6	Model elektroelastického pole	10
7	Výpočet elektrického pole ve feroelektrickém krystalu	11
8	Závěr	12

Seznam použitých symbolů

Fyzikální symboly

Symbol		Význam
E	Vm^{-1}	vektor intenzity elektrického pole
D	Cm^{-2}	vektor elektrické indukce
P	Cm^{-2}	vektor elektrické polarizace
T	Pa	tenzor mechanického napětí
S	1	tenzor mechanické deformace
φ	V	elektrický potenciál
u	m	vektor mechanického posunutí
ϱ	Cm^{-3}	objemová hustota elektrického náboje
σ	Cm^{-2}	plošná hustota elektrického náboje
ε_0	$CV^{-1}m^{-1}$	permitivita vakua, $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}CV^{-1}m^{-1}$
ε	$CV^{-1}m^{-1}$	tenzor dielektrických koeficientů
ε_r	1	tenzor relativních dielektrických koeficientů
β	VmC^{-1}	tenzor dielektrické impermeability
s	mN^{-1}	tenzor elastických koeficientů
c	Nm^{-1}	tenzor elastických modulů
d	mV^{-1}	tenzor piezoelektrických koeficientů
g	m^2C^{-1}	tenzor piezoelektrických koeficientů
h	Vm^{-1}	tenzor piezoelektrických modulů
e	Cm^{-2}	tenzor piezoelektrických modulů

Matematické symboly

Symbol	Význam
Ω	modelovaná oblast
$\partial\Omega$	hranice oblasti Ω
τ_h	rozklad oblasti Ω
e	podoblast (element) rozkladu τ_h
f	stěna rozkladu τ_h
Γ_D	množina všech vnějších stěn rozkladu τ_h , na kterých je dána Dirichletova okrajová podmínka
Γ_N	množina všech vnějších stěn rozkladu τ_h , na kterých je dána Neumanova okrajová podmínka
Γ_h	množina všech nedorichletovských stěn rozkladu τ_h

1 Úvod

V posledních šedesáti letech byl zaznamenán významný pokrok v oblasti fyziky *feroelektrických látek* – dielektrických látek, které v určitém teplotním oboru vykazují *spontánní polarizaci*. Tyto látky mají v současné době významné aplikace v nejrůznějších technických oborech, a proto je jejich studiu věnována značná pozornost.

Feroelektrika se vyznačují již zmíněnou spontánní polarizací, jejíž směr je možné změnit vnějším elektrickým polem. Feroelektrický materiál musí tedy mít několik základních směrů spontánní polarizace. Ve feroelektrickém krystalu lze potom pozorovat takzvané *domény* – oblasti krystalu, v nichž má spontánní polarizace jednotný směr a *doménové stěny* – hranice mezi doménami. Vlivem vnějšího elektrického pole může docházet k pohybům doménových stěn a tedy i ke změnám vnitřní doménové struktury krystalu, což má za následek změnu efektivních vlastností příslušného materiálu.

Feroelektrika patří do širší skupiny *piezoelektrických látek*, které se vyznačují elektromechanickým spřaženým efektem – vnějším mechanickým zatížením je v těchto materiálech indukována polarizace a naopak působení vnějšího elektrického pole se projeví mimo jiné i deformací materiálu. Feroelektrické materiály tedy obecně vykazují vzájemnou závislost elektrických a mechanických veličin. Jejich vztah lze vyjádřit soustavou piezoelektrických stavových rovnic. Kromě uvedených piezoelektrických vlastností je možno u feroelektrik pozorovat i další zajímavé vlastnosti jako jsou pyroelektrické (změna polarizace s teplotou) nebo optoelektrické vlastnosti.

Cílem této práce byla formulace modelů pro simulaci elektrických a mechanických veličin ve vzorku feroelektrického materiálu vystaveném vnějšímu mechanickému a elektrickému působení založená na smíšené hybridní formulaci úlohy, aproximace úlohy metodou konečných prvků, počítačová implementace modelů a ověření jejich použitelnosti na základních úlohách.

Vzorek feroelektrického materiálu s vnitřní doménovou strukturou je z pohledu dielektrických, elastických a piezoelektrických vlastností anizotropním a heterogenním prostředím, jehož chování je popsáno soustavou parciálních diferenciálních rovnic. Zadávané okrajové podmínky konkrétní úlohy potom odrážejí vnější působení. Modely jsou koncipovány tak, aby umožňovaly simulaci vzorků vystavených vnějšímu elektrickému poli nebo mechanickému namáhání a aby bylo možné použít i pro simulaci elektromechanických polí ve vzorcích s nenulovou hustotou volného náboje v části objemu oblasti nebo na doménových stěnách.

Výsledné modely mohou sloužit jednak pro výpočet elektroelastického pole ve feroelektriku, popřípadě jako základ obecnějšího modelu chování vnitřní feroelektrické doménové struktury studovaného vzorku.

Vlastní text práce je logicky členěn do tří štěžejních částí. První část zahrnuje druhou kapitolu, která obsahuje souhrnný fyzikální popis modelovaných dějů. Je zde stručně uvedena problematika dielektrických, elastických a piezoelektrických

vlastností. Tato kapitola rovněž uvádí základní fyzikální vlastnosti charakteristické právě pro feroelektrické látky.

Druhá část textu zahrnuje kapitoly zabývající se matematickou formulací a aproximací jednotlivých modelů. Třetí kapitola nejprve konkretizuje cíle práce, podává základní souhrn metod použitých pro formulaci modelů a zároveň stanovuje obecné požadavky kladené na modelované oblasti. Čtvrtá kapitola uvádí souhrnně prostory použité dále při formulaci a aproximaci modelů. V dalších třech kapitolách je uvedeno odvození matematické formulace modelů a jejich aproximace metodou konečných prvků. V páté kapitole je studován model elektrického pole v heterogenním anizotropním dielektrickém materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému působení. V šesté kapitole je odvozen model elastického pole v heterogenním anizotropním elastickém materiálu vystaveném působení vnějších mechanických sil. V sedmé kapitole je uveden model elektroelastického pole ve feroelektrickém materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému a mechanickému zatížení.

Třetí část textu obsahuje kapitoly osm a devět, které se zabývají praktickou stránkou předkládané práce. Osmá kapitola je věnována problematice počítačové implementace. Čtenáři je zde poskytnut základní přehled datových struktur modelu, obecný algoritmus výpočtu konkrétní úlohy, formáty vstupních a výstupních datových souborů a přehled významnějších algoritmů implementovaných při realizaci libovolného z navržených modelů. V deváté kapitole jsou uvedeny některé výsledky základních testovacích úloh. Jednotlivé úlohy zařazené v této kapitole jsou voleny s ohledem na ilustrativnost.

V tomto autoreferátu jsou nejprve stručně shrnuty základní cíle práce a použitá metoda. V kapitolách, které se týkají jednotlivých modelů, je nejprve shrnuta výchozí formulace dané úlohy a následně je uvedena struktura výsledné soustavy. Možné výstupy modelů jsou zde demonstrovány jednou vybranou úlohou.

2 Základní cíle

Feroelektrické látky vykazují jisté dielektrické, elastické a piezoelektrické vlastnosti. Z hlediska těchto vlastností se jedná o anizotropní prostředí. Navíc případné doménové stěny znamenají výraznou heterogenitu (skokovou změnu) materiálových vlastností.

Základním cílem této disertační práce je matematická formulace a implementace modelů, které by umožňovaly simulovat rozložení elektrických a mechanických veličin v tenké vrstvě feroelektrického materiálu (s libovolnou vnitřní strukturou feroelektrických domén) vystavené vnějšímu elektrickému a mechanickému zatížení. Na základě bližší specifikace úlohy, i s ohledem na obecnější aplikovatelnost, byly pro formulaci a implementaci modelů vymezeny tři základní úlohy:

1. úloha: *výpočet rozložení elektrických veličin* (elektrický potenciál, elektrická

indukce a intenzita elektrického pole) v heterogenním anizotropním dielektrickém materiálu vystaveném působení vnějšího elektrického pole.

2. úloha: *výpočet rozložení mechanických veličin* (mechanické posunutí, mechanické napětí a mechanická deformace) v heterogenním anizotropním elastickém materiálu vystaveném zatížení vnějších mechanických sil.
3. úloha: *výpočet rozložení elektroelastického pole* (elektrické i mechanické veličiny) ve feroelektrickém materiálu vystaveném vnějšímu elektrickému a mechanickému zatížení.

Fyzikální popis chování feroelektrických (případně pouze dielektrických nebo elastických) látek vede při formulaci libovolné ze stanovených úloh v soustavu parciálních diferenciálních rovnic (PDR) doplněných o zadání okrajových podmínek konkrétní úlohy. Analytické řešení obdobných problémů je možné pouze v případě přijetí velmi zjednodušujících geometrických podmínek. Numerická matematika poskytuje pro řešení problémů popsanych parciálními diferenciálními rovnicemi několik metod (metoda konečných diferencí MKD, metoda konečných prvků MKP, metoda konečných objemů MKO), které mají různé vlastnosti v závislosti na daném problému. Pro řešení výše uvedených úloh byla zvolena metoda konečných prvků (MKP) aplikovaná na smíšenou hybridní formulaci úlohy (MH MKP).

3 Použitá matematická formulace úlohy

Matematická formulace výše definovaných úloh vychází z rovnic fyzikálního popisu doplněných o zadání okrajových podmínek na hranici modelované oblasti. V našem případě budou uvažovány dva typy okrajových podmínek – Dirichletova a Neumanova. *Dirichletova okrajová podmínka* předepisuje zadání potenciálu pro elektrickou část úlohy resp. zadání definovaných posunutí pro elastickou část. *Neumanova okrajová podmínka* zadává velikost vektoru elektrické indukce ve směru vnější normály pro elektrickou část a mechanické zatížení pro elastickou část úlohy.

V obecném případě je možné uvažovat též *Newtonovu okrajovou podmínku*, která zavádí vztah závislosti mezi vektorem elektrické indukce a spádem potenciálu pro elektrickou část úlohy resp. vztahy závislosti posunutí na silovém zatížení pro mechanickou část. Tato podmínka je nejobecnější, avšak formučně i implementačně složitější. V námi uvažovaných reálných aplikacích (studium elektromechanických polí ve feroelektrických vzorcích) není nutné tuto obecnou okrajovou podmínku uplatňovat.

Standardním způsobem přístupu k matematické formulaci uvažovaných úloh je dosazení vztahu pro elektrickou indukci do Maxwellovy rovnice pro uvažovaný materiál v případě elektrické části úlohy resp. dosazení Hookova zákona s využitím definičního vztahu pro tenzor malých deformací do rovnice rovnováhy sil.

Tímto krokem eliminujeme ze soustavy parciálních diferenciálních rovnic vektor elektrické indukce resp. tenzor napětí a získáme parciální diferenciální rovnice v takzvaném divergentním tvaru. Formulace slabého řešení vede na nalezení funkce definující elektrický potenciál v elektrické části úlohy resp. vektorové funkce pro posunutí v mechanické části úlohy. Obvykle se v těchto případech pro aproximaci úloh využívají lineární konečné prvky. Pro výpočet vektoru elektrické indukce a tenzoru mechanického napětí tak dostáváme funkce po částech (elementech) konstantní. Tedy pro tento postup nemohou být splněny rovnice spojitosti vektoru elektrické indukce a rovnováhy sil na mezielementových stěnách.

Vzhledem k tomu, že jedním z hlavních cílů této práce je vytvoření softwarové podpory pro studium elektrických a mechanických polí na rozhraní dvou feroelektrických domén, chceme ve formulaci zajistit splnění podmínek spojitosti pro vektor elektrické indukce a tenzor mechanického napětí. Proto byla pro matematickou formulaci výše uvedených úloh zvolena smíšená metoda. Ta požaduje slabé splnění vztahu pro vektor elektrické indukce, Maxwellovy rovnice pro dielektrický materiál, Hookova zákona s využitím vztahu pro tenzor malých deformací a rovnice rovnováhy sil. Tato formulace nám ve svém výsledku poskytne funkci pro potenciál, funkci pro vektor elektrické indukce, funkci pro vektor posunutí a tenzorovou funkci pro mechanické napětí. Tyto výsledky dosáhneme za cenu složitější formulace a především implementace. Při konkrétní aproximaci může v tomto případě být problematické hledání konečnědimenzionálních podprostorů prostorů funkcí vystupujících ve formulaci úlohy. Komplikace vznikají především při tvorbě báze prostorů vektorových a tenzorových funkcí svázaných s konkrétním rozkladem oblasti. Přesto tato metoda představuje nové pojetí řešení takovýchto úloh. Výše zmíněná komplikace je obvykle řešena hybridizací úlohy, při které jsou vektorové a tenzorové funkce definovány pouze na jednotlivých elementech a formulace je doplněna o vazby vzájemné interakce vektorových a tenzorových veličin na mezielementových stěnách. I když celý postup je velmi komplikovaný, výsledná stavová struktura (matice) je topologicky velmi přehledná, což lze považovat za přednost této formulace. Navíc tato formulace umožňuje zadávat velikost náboje na mezielementových stěnách kompatibilních s případnou doménovou stěnou a právě generování elektrického náboje na části resp. celé doménové stěně je jedním z fyzikálních jevů, které má vytvořený model postihovat.

4 Model elektrického pole

Uvažujeme vzorek dielektrického materiálu zaujímající oblast $\Omega \subset R^2$. Hranice oblasti $\partial\Omega$ je rozdělena na dvě disjunktní části Γ_D, Γ_N , přičemž $\bar{\Gamma}_D \cup \bar{\Gamma}_N = \partial\Omega$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ a $\Gamma_D \neq \emptyset$.

Fyzikální model je popsán soustavou parciálních diferenciálních rovnic a okra-

jových podmínek

$$\mathbf{D} = -\varepsilon \nabla \varphi, \quad \text{v } \Omega, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varrho, \quad \text{v } \Omega, \quad (2)$$

$$\varphi = \varphi_D, \quad \text{na } \Gamma_D, \quad (3)$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = D_N, \quad \text{na } \Gamma_N. \quad (4)$$

Hledaným řešením jsou potom funkce φ a \mathbf{D} , které udávají rozložení elektrického potenciálu a elektrické indukce, splňující rovnice (1)-(4) na oblasti Ω .

Aplikací metody konečných prvků na smíšenou hybridní formulaci úlohy získáme soustavu lineárních algebraických rovnic. Soustava rovnic je indefinitní a symetrická a můžeme ji zapsat v přehledném maticovém tvaru

$$\begin{aligned} \mathbb{A} \mathbf{V} + \mathbb{B} \Phi + \mathbb{C} \Psi &= \mathbf{q}_1 \\ \mathbb{B}^T \mathbf{V} &= \mathbf{q}_2, \\ \mathbb{C}^T \mathbf{V} &= \mathbf{q}_3 \end{aligned} \quad (5)$$

kde \mathbf{V} , Φ a Ψ jsou vektory hledaného řešení, \mathbb{A} , \mathbb{B} , \mathbb{C} jsou matice koeficientů a \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 , \mathbf{q}_3 části vektoru pravé strany.

5 Model elastického pole

Uvažujeme vzorek elastického materiálu zaujímající oblast $\Omega \subset R^2$. Fyzikální model elastických vlastností je popsán parciálními diferenciálními rovnicemi ve tvaru

$$s_{ijkl} T_{kl} - S_{ij} = 0, \quad \text{v } \Omega, \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad i = 1, 2, \quad \text{v } \Omega, \quad (7)$$

kde T_{kl} jsou složky tenzory mechanického napětí a S_{ij} jsou složky tenzoru malých deformací definované vztahem

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (8)$$

Nechť na hranici modelované oblasti jsou zadány okrajové podmínky pro mechanické posunutí \mathbf{u} a mechanické napětí \mathbf{T} ve tvaru

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D, \quad \text{na } \Gamma_{DM} \quad (9)$$

$$T_{ij} \cdot n_j = T_{iN}, \quad i = 1, 2, \quad \text{na } \Gamma_{NM} \quad (10)$$

kde Γ_{DM} je část hranice oblasti, na které je dána výše uvedená Dirichletova okrajová podmínka a Γ_{NM} je část hranice, na které je zadána uvedená Neumanova okrajová podmínka.

Hledaným řešením je rozložení tenzoru mechanického napětí \mathbf{T} a vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} v oblasti Ω .

Aplikací metody konečných prvků na smíšenou hybridní formulaci úlohy získáme soustavu lineárních algebraických rovnic. Soustava rovnic je symetrická a můžeme ji zapsat v přehledném maticovém tvaru

$$\begin{aligned} \mathbb{F} \mathbf{W} + \mathbb{G} \mathbf{U} + \mathbb{H} \boldsymbol{\Lambda} &= \mathbf{q}_4 \\ \mathbb{G}^T \mathbf{W} &= \mathbf{0} , \\ \mathbb{H}^T \mathbf{W} &= \mathbf{q}_5 \end{aligned} \quad (11)$$

kde \mathbf{W} , \mathbf{U} a $\boldsymbol{\Lambda}$ jsou vektory hledaného řešení, \mathbb{F} , \mathbb{G} , \mathbb{H} jsou bloky matice soustavy a \mathbf{q}_4 , \mathbf{q}_5 jsou části vektoru pravé strany.

6 Model elektroelastického pole

Model elektroelastického pole v sobě obsahuje oba modely uvedené v kapitolách 4 a 5 a dále vzájemnou vazbu mezi elektrickými a mechanickými veličinami.

Uvažujeme vzorek heterogenního anizotropního feroelektrického materiálu zaujímající oblast $\Omega \subset R^2$. Fyzikální model studovaného vzorku je popsán piezoelektrickými stavovými rovnicemi ve tvaru

$$s_{ijkl} T_{kl} + g_{nij} D_n - S_{ij} = 0 , \quad (12)$$

$$g_{mkl} T_{kl} - \beta_{nm} D_n + E_m = 0 , \quad (13)$$

kde složky tenzoru mechanické deformace a složky vektoru intenzity elektrického pole jsou definovány vztahem

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad E_m = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_m} \quad (14)$$

a tenzor mechanického napětí a vektor elektrické indukce splňují podmínky rovnováhy

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = 0 , \quad \frac{\partial D_j}{\partial x_j} = \varrho . \quad (15)$$

Požadujeme splnění těchto rovnic v celé oblasti Ω .

Dále předpokládáme zadání Dirichletových okrajových podmínek pro elektrický potenciál φ a pro složky vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} na části hranice

$$u_i = u_{iD}, \quad \text{na } \Gamma_{DM} , \quad (16)$$

$$\varphi = \varphi_D, \quad \text{na } \Gamma_{DE} \quad (17)$$

a zadání Neumanových okrajových podmínek

$$T_{ij} \cdot n_j = T_{iN}, \quad \text{na } \Gamma_{NM} , \quad (18)$$

$$D_j \cdot n_j = D_N, \quad \text{na } \Gamma_{NE} , \quad (19)$$

kde Γ_{DM} je část hranice oblasti, na které je dána Dirichletova okrajová podmínka pro mechanickou část, Γ_{NM} je část hranice, na které je zadána Neumanova okrajová podmínka pro mechanickou část, Γ_{DE} je část hranice, na které je zadána Dirichletova okrajová podmínka pro elektrickou část a Γ_{NE} je část hranice na které je zadána Neumanova okrajová podmínka. Uvažujeme i případy, kdy doménové stěny v modelovaném feroelektrickém vzorku mohou mít nenulovou hustotu plošného náboje σ .

Hledaným řešením je rozložení tenzoru mechanického napětí \mathbf{T} , vektoru mechanického posunutí \mathbf{u} , vektoru elektrické indukce \mathbf{D} a elektrického potenciálu φ na sledované oblasti Ω .

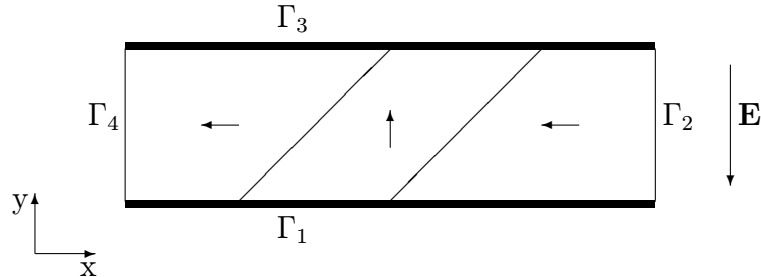
Aplikací metody konečných prvků na smíšenou hybridní formulaci úlohy získáme soustavu lineárních algebraických rovnic. Soustava rovnic je symetrická a můžeme ji zapsat v přehledném maticovém tvaru

$$\begin{array}{rclclclcl}
 \mathbb{F} \mathbf{W} & + & \mathbb{P} \mathbf{V} & + & \mathbb{G} \mathbf{U} & & + & \mathbb{H} \mathbf{\Lambda} & = & \mathbf{q}_4 \\
 \mathbb{P}^T \mathbf{W} & - & \mathbb{A} \mathbf{V} & & & - & \mathbb{B} \mathbf{\Phi} & & - & \mathbf{q}_1 \\
 \mathbb{G}^T \mathbf{W} & & & & & & & & = & \mathbf{0} \\
 & - & \mathbb{B}^T \mathbf{V} & & & & & & = & - \mathbf{q}_2 \\
 \mathbb{H}^T \mathbf{W} & & & & & & & & = & \mathbf{q}_5 \\
 & - & \mathbb{C}^T \mathbf{V} & & & & & & = & - \mathbf{q}_3
 \end{array} , \tag{20}$$

kde \mathbf{W} , \mathbf{V} , \mathbf{U} , $\mathbf{\Lambda}$, $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Psi}$ jsou vektory hledaných neznámých, \mathbb{A} , \mathbb{B} , \mathbb{C} , \mathbb{F} , \mathbb{G} , \mathbb{H} , \mathbb{P} jsou bloky matice soustavy a \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 , \mathbf{q}_3 , \mathbf{q}_4 , \mathbf{q}_5 jsou části vektoru pravé strany.

7 Výpočet elektrického pole ve feroelektrickém krystalu

V této kapitole bude demonstrováno použití modelu pro výpočet rozložení elektrického pole ve vícedoménovém feroelektrickém krystalu. Uvažujme vzorek feroelektrického materiálu obdélníkového tvaru velikosti $10 \times 2mm$ s vnitřní doménovou strukturou vyznačenou na obrázku 1. Vzorek je vystaven vnějšímu elektrickému působení. Materiálové parametry vzorku a okrajové podmínky zadávané



Obrázek 1: Struktura modelovaného feroelektrického vzorku

Tenzor relativních dielektrických koeficientů ε_r	$\begin{pmatrix} 4400 & 0 \\ 0 & 140 \end{pmatrix}$
Podmínka na Γ_1	$\varphi = 0$
Podmínka na Γ_2	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$
Podmínka na Γ_3	$\varphi = 20V$
Podmínka na Γ_4	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$

Tabulka 1: Parametry úlohy

pro výpočet úlohy jsou uvedeny v tabulce 1.

Obrázky 3, 4, 5 ukazují rozložení elektrického potenciálu, vektoru elektrické indukce a vektoru intenzity elektrického pole v modelovaném feroelektrickém vzorku. Vlivem doménových stěn dochází k nerovnoměrnému rozložení elektrického pole v oblasti vzorku.

8 Závěr

Předložená práce řeší velmi důležitou problematiku modelování některých fyzikálních jevů charakteristických pro feroelektrické materiály.

V práci byly postupně formulovány tři modely. První model je zaměřen na simulaci elektrických veličin ve vzorku heterogenního anizotropního dielektrického materiálu vystaveném vlivu vnějšího elektrického pole. Druhý z navržených modelů řeší výpočet mechanických veličin ve vzorku heterogenního anizotropního elastického materiálu vystaveném působení vnějších mechanických sil. Třetí model potom propojuje oba předchozí a zároveň zohledňuje piezoelektrické vlastnosti, slouží k modelování elektroelastického pole ve vzorku feroelektrického materiálu s libovolnou vnitřní strukturou feroelektrických domén vystaveném vnějšímu elektrickému i mechanickému zatížení. Vzhledem k tomu, že modely jsou orientovány na fyzikální jevy tenkých vrstev, byly navrženy a implementovány ve dvoudimenzionální oblasti. Jejich rozšíření na třídimenzionální problém je možné.

Navržené modely jsou založeny na smíšené hybridní formulaci. Pro jejich aproximaci byla zvolena metoda konečných prvků. Aproximace úlohy vede na řešení matice lineárních algebraických rovnic s rozsáhlou symetrickou řídkou maticí. Nutno podotknout, že dimenze soustavy je výrazná zejména v případě modelování piezoelektrických vlastností. Právě problematika formulace, aproximace a generování stavové matice soustavy navržených modelů je stěžejní částí práce a je jedním z hlavních výsledků a přínosů. Zajímavá je v tomto ohledu především mechanická část, ve které je nutno pro modely založené na smíšené formulaci generovat báze prostoru tenzorových funkcí. Problematika volby vhodné báze je sama o sobě velmi obsáhlá.

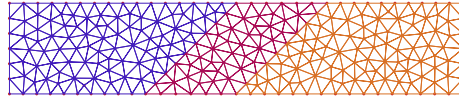
Součástí práce byla rovněž počítačová implementace navržených modelů a jejich otestování na základních úlohách. Kapitoly předloženého textu věnované této problematice jsou vedeny s ohledem na přiměřenou stručnost a přehlednost. Cílem jednotlivých simulací je reálné ověření vhodnosti či nevhodnosti té které zvolené aproximace.

Odvozené matematické modely poskytují prvotně výpočet příslušných fyzikálních veličin ve vzorku modelovaného materiálu. Umožňují rovněž simulaci těchto veličin ve vzorcích s nabitými doménovými stěnami. To samo o sobě může mít velký význam při dalším studiu chování feroelektrických materiálů. Na základě implementovaných modelů je možné vystavět modely chování feroelektrických struktur, popřípadě modely řešící závislost efektivních vlastností materiálu na vnějším působení.

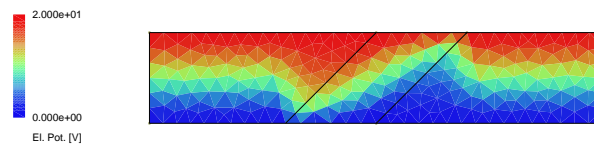
Modely zahrnují dielektrické, elastické, piezoelektrické vlastnosti a předpokládají jejich linearitu. Nutno podotknout, že feroelektrické látky vykazují další významnou závislost polarizace a to závislost polarizace na teplotě. Tato závislost v modelech není uvažována. Lze je tedy použít pro případ modelování příslušných dějů za izotermních popřípadě adiabatických podmínek. Zobecnění modelů i na případy nesplňující uvedené podmínky je možné a bude předmětem další práce. Pro tento případ by bylo nutné doplnit programový nástroj i o model vedení tepla a teplotu jako další stavovou veličinu zahrnout do modelů.

Nutno dodat, že i přes rozsah vykonaných prací zůstávají některé problémy otevřené a budou předmětem dalšího bádání. Jedná se především o uvážení geometrických změn na vzorku například uvážení posunu či ohybu stěny. Tyto změny zavedou do modelu geometrickou nelinearitu a ta zvýší nároky na řešiče generovaných soustav lineárních rovnic. Je vhodné podotknout, že i pro některé úlohy řešené v této práci byla konvergence poskytnutých řešičů na tolik pomalá, že nebylo možné další zjemňování použitých sítí. Tedy pro další rozvoj modelů bude nutný i další výzkum a vývoj v oblasti speciálních řešičů indefinitních soustav rovnic.

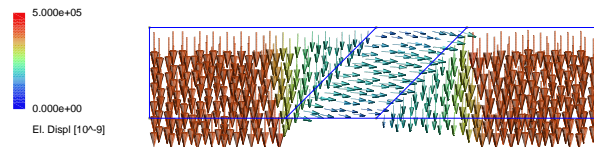
Konečně rešerše při hledání vhodných prostorů tenzorových funkcí prokázala, že i v této oblasti je řada otevřených otázek. Především při návrhu konkrétních bázevých funkcí. V práci byly postupně prozkoumány tři typy lineárních tenzorových funkcí a testovány jejich aproximační vlastnosti. Avšak z hlediska významu modelů založených na smíšené hybridní formulaci by bylo vhodné prověřit další možnosti pro generování tenzorových funkcí.



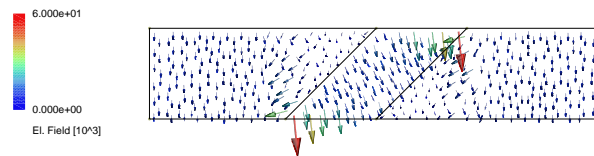
Obrázek 2: Rozklad modelované oblasti.



Obrázek 3: Rozložení elektrického potenciálu v modelovaném feroelektrickém vzorku.



Obrázek 4: Rozložení vektorů elektrické indukce v modelovaném feroelektrickém vzorku.



Obrázek 5: Rozložení vektorů intenzity elektrického pole v modelovaném feroelektrickém vzorku.

Reference

- [1] AMARA, M., THOMAS, J. M.: *Equilibrium finite elements for the linear elasticity problem*. Numer. Math. 33, 367-383(1979).
- [2] ARNOLD, D. N., DOUGLAS, J. R., GUPTA, C. P.: *A family of higher order mixed finite element methods for plane elasticity*. Numer. Math 45, 1-22 (1984).
- [3] ARNOLD, D. N., FALK, R. S.: *A new mixed formulation for elasticity*. <http://www.ima.umn.edu/arnold/publications.html> .
- [4] BRDIČKA, M., SAMEK, L., BRUNO, S. *Mechanika kontinua*. Academia, Praha, 2000.
- [5] BREZZI, F., FORTIN, M.: *Mixed and Hybrid Finite Element Method*. Springer-Verlag, New York, 1991.
- [6] BREZZI, F.: *On the existence, uniqueness, and approximation os saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers*. RAIRO Anal. Numér. 2, 1974, 129-151.
- [7] CIARLET, P. G., LIONS, J. L.: *Handbook of Numerical Analysis. Volume II: Finite Element Methods (Part 1)*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1991.
- [8] CIARLET, P. G., LIONS, J. L.: *Handbook of Numerical Analysis. Volume IV: Finite Element Methods (Part 2), Numerical Methods for Solids (Part 2)* ELSEVIER, Amsterdam, 1996.
- [9] CIARLET, P. G.: *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1978.
- [10] DOMÍNGUEZ, M. C., FERRAGUT, L.: *Adaptive multigrid method using duality in plane elasticity*. Int. J. Numer. Meth. Engng. 50, 95-118.
- [11] FARHLOUL, M., FORTIN, M.: *Dual hybrid methods for the elasticity and the Stokes problems: a unified approach*. Numer. Math. 76, 419-440 (1997).
- [12] HASLINGER, J.: *Metoda konečných prvků pro řešení eliptických rovnic a nerovnic*. Státní pedagogické nakladatelství, Praha, 1980.
- [13] HORÁK, Z., KRUPKA, F., ŠINDELÁŘ, V.: *Technická fyzika* SNTL, Praha, 1961.
- [14] JOHNSON, C., MERCIER, B.: *Some equilibrium finite element methods for two-dimensional elasticity problem*. Numer. Math. 30, 103-116 (1978).

- [15] KAASSCHIETER, E. F., HUIJBEN, A. J. M.: *Mixed-hybrid finite elements and streamline computation fo the potential flow problem*. TNO Institute of Applied Geoscience, Delft, 1990.
- [16] KOVALEV, S., SAKAI, M.: *Numerical Modeling of Electro-elastic Field in Ferroelectric Crystal Containing 90° Twin Boundary*. Acta mater. Vol 46, No. 9, pp. 3015-3026, 1998.
- [17] KRÁLOVCOVÁ, J., MARYŠKA, J.: *Model of Influence of External Electric Field on Domain Wall in Ferroelectrics*. Proceedings of SIMONA 2003, pp. 57-64, Liberec, Czech Republic, 2003.
- [18] KRÁLOVCOVÁ, J., MARYŠKA, J.: *Numerical Model of Influence of External Electric Loading on Electro-Elastic Field in Ferroelectrics*. Proceedings of UFFC 2004, p. 652, Montreal, Canada, 2004.
- [19] KRÁLOVCOVÁ, J., MARYŠKA, J., NOVÁK, J.: *Numerical Model of Electro-Elastic Field in Ferroelectrics Based on Mixed-Hybrid Finite Element Method*. Proceedings of ECAPD 2004, p. 130, Liberec, Czech Republic, 2004.
- [20] KUFNER, A., JOHN, O., FUČÍK, S.: *Function spaces*. Academia, Praha, 1977.
- [21] MARYŠKA, J., ROZLOŽNÍK, M., TŮMA, M.: *Shurr complement systems in the mixed-hybrid finite element approximation of the potential fluid flow problem*. SIAM J. Sci. Comput. 22, 2000, pp. 704-723.
- [22] MENDELS, D. A.: *An introduction to modelling of piezoelectric thin films*. Web publication.
- [23] MIRANDA, S., UBERTINI, F.: *On the consistency of finite element models in thermoelastic analysis*. Comput. Methods Appl. Mech. Engng. 190, 2411-2427 (2001).
- [24] NEČAS, J., HLAVÁČEK, I.: *Úvod do matematické teorie pružných a pružně plastických tělěs*. SNTL, Praha, 1983.
- [25] NYE, J. F.: *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*. Oxford Sci., 2003.
- [26] PEREIRA, E. M. B. R., FREITAS, J. A. T.: *A mixed-hybrid finite element model based on orthogonal functions*. Int. J. for Num. Methods in Engineering 39, 1295-1312 (1996).
- [27] REKTORYS, K. *Přehled užité matematiky I, II, sedmé vydání*. Nakladatelství Prometheus, Praha, 2000.
- [28] REKTORYS, K.: *Variační metody v inženýrských problémech a v problémech matematické fyziky*. Academia, Praha, 1999.

- [29] TEIXEIRA DE FREITAS, J. A.: *Hybrid finite element formulations for elastodynamic analysis in the frequency domain*. Int. J. of Solids and Structures 36 (1999), 1883-1923.
- [30] UCHINO K.: *Ferroelectric Devices*. Marcel Dekker, New York, 2000.
- [31] ZELENKA J.: *Piezelektrické rezonátory a jejich použití v praxi*. Academia, Praha, 1981.