

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе

Санкт-Петербургский государственный
университет



С.В. Микушев

«04» _____ 2022 г.

ОТЗЫВ

ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный
университет»

на диссертацию Семенова Артема Семеновича

**«МНОГОУРОВНЕВНЫЕ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ
МАТЕРИАЛОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ РЕШЕНИИ КРАЕВЫХ
ЗАДАЧ»,**

представленную к защите на соискание ученой степени доктора физико-
математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – Механика
деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации

Наблюдаемое в последние годы интенсивное внедрение на практике сложных смарт систем и широкое использование активных элементов конструкций приводит к необходимости повышения точности описания их напряженно-деформированного состояния, обеспечения гарантированных запасов прочности и долговечности. Интерес к разработке математических моделей сегнетоэлектродупругих материалов продиктован потребностями авиационной, автомобильной и других отраслей промышленности,

современной микроэлектроники, машиностроении и медицины при создании высокоточной и быстродействующей техники. В настоящее время универсальные модели, описывающие нелинейное поведение сегнетоэлектрорупругих материалов в при комбинированном многоосном переменном электро-механическом воздействии высокой интенсивности с учетом деградации свойств и чувствительности к скорости нагружения отсутствуют, поэтому представленные в диссертационном исследовании подходы описания необратимых процессов деформирования и поляризации сегнетоэлектрорупругих сред с учетом различных структурных уровней актуальны как с теоретической, так и с практической точки зрения.

Новизна полученных результатов и выводов

В работе предложен новый многоуровневый подход для описания нелинейного поведения поликристаллических и монокристаллических сегнетоэлектрорупругих материалов с учетом эволюции и взаимодействия мультидоменной и дефектной подструктур, многофазного состава, анизотропии свойств и диссипативного характера движения доменных стенок.

Для решения нелинейных связанных электромеханических краевых задач впервые предложена векторно-потенциальная вариационная формулировка задачи сегнетоэлектрорупругости, лишенная недостатков стандартной скалярно-потенциальной вариационной формулировки.

Полученные с помощью разработанной модели новые результаты позволяют дать объяснение ряду принципиальных эффектов поведения рассматриваемого класса материалов: наличию экстремальных физико-механических свойств вблизи морфотропной фазовой границы для двухфазной и трехфазной смесей, открывающее возможность синтеза сегнетоэлектрорупругих материалов с оптимальной структурной организацией, эффектам доменного и кристаллитного упрочнения, эффектам смещения и среза петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов, процессам старения.

Структура и содержание диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, списка использованной литературы и 6 приложений.

Во введении обосновывается актуальность, научная новизна и достоверность результатов работы, сформулирована цель исследования, приведены основные положения, выносимые на защиту, данные о диссертации, апробации и публикациях соискателя по теме работы.

Первая глава посвящена обзору экспериментальных и теоретических основ процессов переключения в сегнетоэлектродупругих материалах. Приведены сведения об основных областях практического применения сегнетоэлектродупругих материалов в современной технике и микроэлектронике. Представлено описание структуры сегнетоэлектродупругих материалов на различных масштабных уровнях, рассмотрены принципы формирования доменной структуры, показаны особенности поведения вблизи морфотропной фазовой границы. В работе дан систематический обзор имеющихся экспериментальных данных по необратимому деформированию и поляризации при монотонном и циклическом, одноосном и многоосном, механическом, электрическом или комбинированном нагружении. Отдельный параграф диссертации посвящен детальному обзору литературы по существующим микроструктурным и феноменологическим моделям описания процессов необратимого деформирования и поляризации сегнетоэлектродупругих материалов. В заключительном параграфе введения представлены уравнения механики деформируемого твердого тела, электростатики и термодинамики, дана формулировка связанной краевой задачи электромеханики.

Вторая глава посвящена описанию предложенных в работе математических (микроструктурных и феноменологических) моделей сегнетоэлектродупругого материала.

Многоуровневая *микроструктурная* модель учитывает процессы изменения структуры и особенности механизмов деформирования и

поляризации на разных структурных уровнях (элементарная ячейка кристаллической решетки, домен, кристалл, поликристалл). Математическая формулировка определяющих уравнений использует аналогию с моделями пластичности кристаллов. Для описания поведения поликристаллического сегнетоэластичного материала на макроуровне используется метод многоуровневой гомогенизации. Связь между макроскопическими (для поликристалла) механическими и электрическими переменными и переменными на мезоуровне (для кристаллита) определяется на основе прямых методов гомогенизации с использованием конечно-элементного решения краевых задач для представительного элемента поликристалла. Гомогенизация при переходе с уровня домена на уровень монокристалла осуществляется аналитически в рамках осреднения Рейсса. Введение второго уровня гомогенизации производится в упрощенной форме с целью учесть полидоменную структуру кристаллита на микроуровне при описании процессов поляризации без значительного усложнения модели. Формулировка определяющих уравнений микроструктурной модели с учетом дефектов основана на введении в рассмотрение двух дополнительных внутренних переменных: вектора поляризации и тензора деформации, учитывающих наличие полярных точечных дефектов в кристаллической решетке.

Для описания поведения сегнетоэластичного материала на макроуровне также рассматривается *феноменологическая модель*, основанная на концепции «стандартного материала с диссипацией». Определяющие уравнения получаются следствием принципа максимума диссипации на основе задания двух выпуклых потенциалов: плотности свободной энергии и функции нагружения (переключений).

Третья глава посвящена описанию предложенных в работе методов решения нелинейных связанных краевых задач сегнетоэластичности.

В диссертации предложена оригинальная векторно-потенциальная вариационная формулировка задач сегнетоэластичности в целях

устранения проблемам со сходимостью итерационных процедур, возникающих при использовании стандартной скалярно-потенциальной вариационной формулировки с характерными для рассматриваемых классов материалов невыпуклыми диаграммами деформирования. Для обеспечения единственности векторного потенциала предложены и апробированы специальные виды граничных условий для односвязных и многосвязных областей.

В целях повышения точности интегрирования определяющих уравнений сегнетоэлектростатичности, представляющих собой систему нелинейных жестких дифференциально-алгебраических уравнений, предложен метод возвратного отображения. Для обеспечения квадратичной скорости сходимости глобальной итерационной процедуры Ньютона-Рафсона в работе получены выражения для согласованного касательного оператора на основе линеаризации дискретной задачи, соответствующей методу возвратного отображения.

Модели сегнетоэлектростатичного материала имплементированы в разработанном автором конечно-элементном программном комплексе PANTOCRATOR. Эффективность предложенных методов решения продемонстрирована результатами расчетов пьезоэлектрической пластины при комбинированном электромеханическом нагружении, радиальной поляризации полого цилиндра, параллелепипеда с цилиндрическим включением, параллелепипеда с периодическими сферическими включениями, поляризации пластины с отверстием, представительного объема поликристаллического агрегата, призматического образца с центральной краевой трещиной при четырехточечном изгибе и многослойного актуатора.

Четвертая глава посвящена верификации микроструктурных и феноменологических моделей сегнетоэлектростатичного материала.

При использовании двухфазной тетрагонально-ромбоэдрической микроструктурной модели с реальными константами материала,

определенными на основе данных измерения параметров кристаллической решетки, удастся получить хорошее соответствие результатов расчета поведения поликристалла с данными опытов для поликристаллических сегнетопъезокерамик PZT, PLZT и BaTiO_3 . Получено убедительное качественное и количественное соответствие экспериментам для диэлектрического, электромеханического и механического гистерезисов, эффекта памяти формы, кривых деполяризации, эффекта наложения постоянного механического напряжения на циклическое электрическое поле, эффекта наложения постоянного циклического электрического поля на кривые механического нагружения/разгрузки, а также для кривых переполяризации при непропорциональном электрическом воздействии.

В работе показано, что использование однофазной тетрагональной микроструктурной модели может приводить к значительным отличиям от результатов экспериментов при описании электромеханического гистерезиса, кривых деполяризации и др.

При использовании феноменологической модели удастся получить хорошее соответствие результатов расчета с данными опытов для поликристаллической сегнетопъезокерамики при пропорциональном нагружении. Установлено, что при комбинированном и непропорциональном нагружении точность прогнозов феноменологической модели ниже в сравнении с результатами микромеханической модели.

Показано, что идентификация констант материала феноменологической модели и вида функциональной зависимости потенциалов (свободной энергии и функции переключений) может осуществляться как на основе данных макроопыта, так и на основе результатов вычислительных экспериментов с использованием микроструктурной модели на основе гомогенизации при различных видах нагружения.

Пятая глава посвящена описанию поведения сегнетоэлектродупругих материалов вблизи морфотропной фазовой границы.

Использование в расчетах двухфазной тетрагонально-ромбоэдрической микроструктурной модели позволяет описать появление экстремальных значений остаточной деформации и поляризации поликристаллической пьезокерамики при определенном сочетании объемных долей тетрагональной и ромбоэдрической фаз (называемом морфотропной фазовой границей). Применение однофазных моделей с реальными константами материала при учете только тетрагональной или только ромбоэдрической фазы приводит к существенно заниженным уровням остаточных деформаций.

В диссертации установлено, что основными причинами появления концентрационного максимума остаточной деформации и поляризации поликристалла в смесях являются принципиальные отличия в анизотропии деформационных свойств различных фаз. В смеси наблюдается увеличение числа направлений с максимальной остаточной деформацией и поляризацией, приводящее к более точному выстраиванию направлений поляризации кристаллитов в поликристалле в соответствии с направлением внешнего воздействия. Кроме этого в смеси, в отличие от одиночных фаз, отсутствуют направления с нулевыми остаточными деформациями в монокристалле, что снижает уровень микронапряжений в поликристалле и в результате приводит к отсутствию изменения остаточной деформации и поляризации при разгрузке.

Шестая глава посвящена моделированию поведения сегнетоэлектродупругих материалов при учете наличия точечных дефектов (акцепторных или донорных легирующих примесей, подвижных вакансий).

Сравнение результатов расчета смещения петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов с использованием предложенной микроструктурной модели материала с учетом (неизменяющихся или эволюционирующих) полярных точечных дефектов с данными экспериментальных исследований для различных материалов: BaTiO_3 , PMS-PZT,

PMN-PZT, KTS и PZT PIC151 показало удовлетворительное соответствие. Сравнение проводилось как для поликристаллических, так и для монокристаллических материалов с тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической структурой. В работе проанализировано влияние ориентации полярных дефектов на вид петли гистерезиса моно- и поликристаллических материалов.

Учет в модели дефектов позволил корректно описать наблюдаемое в экспериментах изменение формы поверхности переключения после предварительной поляризации и последующей разгрузки для образцов из BaTiO_3 и поликристаллической пьезокерамики PZT-5H.

Модель материала с учетом изменяющихся дефектов демонстрирует способность корректного описания процесса старения после предварительной поляризации, а также эффект деэджинга, связанный с уменьшением начального поля смещения при интенсивном циклическом нагружении.

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы. В приложениях представлены сведения о направлениях переключения микроструктурных моделей и аналитические решения ряда краевых задач.

Значимость результатов для науки и производства

Практическая значимость диссертационной работы заключается в возможности применения разработанной модели (включая методы решения нелинейных краевых связанных задач, алгоритмы и реализующего их конечно-элементного комплекса программ) для анализа напряженно-деформированного состояния элементов автомобильной, авиационной и медицинской техники, изготовленных с применением сегнетоэлектродупругих материалов. Полученные аналитические оценки и результаты численного решения краевой задачи о многослойном актуаторе актуальны для практики.

Теоретическая значимость работы заключается в разработке подхода к построению многоуровневых термодинамически согласованных моделей

прогнозирования нелинейного поведения материалов с учетом изменяющейся микроструктуры, многофазности и наличия эволюционирующих дефектов.

Рекомендации по использованию результатов диссертации

Полученные в диссертации результаты могут быть использованы в Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого, Физико-технический Институт им. А.Ф. Иоффе, Южном федеральном университете, Институте проблем машиноведения РАН, Южном научном центре РАН, Санкт-Петербургском государственном университете, Донском государственном техническом университете и в других учреждениях Российской академии наук, высших учебных заведениях и прочих организациях, занимающихся разработкой и исследованием активных материалов со сложной внутренней структурой, механикой связанных полей.

Достоверность результатов диссертации

Достоверность результатов работы обеспечивается качественным и количественным соответствием экспериментальным данным, удовлетворительным соответствием результатов, полученных различными методами решения.

Соответствие содержания диссертации автореферату и указанной специальности

Автореферат соответствует и достаточно полно отражает содержание диссертации. Область исследования соответствует требованиям паспорта **специальности 1.1.8.** (ранее 01.02.04) - Механика деформируемого твердого тела (п. 4. Механика интеллектуальных материалов и конструкций, п. 3. Мезомеханика многоуровневых сред со структурой, п. 2. Теория моделей деформируемых тел со сложной структурой, п. 7. Постановка и решение краевых задач при механических и электромагнитных воздействиях).

Апробация работы и публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в 45 работах, в том числе в 16 изданиях, рекомендованных ВАК России или входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus. Результаты исследований докладывались соискателем на нескольких десятках международных и всероссийских научных конференций по научной специальности диссертации, в том числе в полном объеме — на четырех семинарах. Выполнение отдельных частей работы было поддержано грантами РФФИ, РНФ и DFG.

Замечания по диссертационной работе

- 1) Предложенная модель сегнетоэластичного материала не учитывает влияние температуры на процессы переключения в сегнетоэластичных материалах. Влияет ли это предположение (упрощение) на точность результатов?
- 2) При формулировке микроструктурной модели рассмотрение ограничено только тремя классами симметрии кристаллических решеток: тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической. Отсутствует объяснение отказа от рассмотрения остальных 4 из 7 вариантов кристаллографических систем (сингоний).
- 3) Автор ограничился рассмотрением линейной теории дефектов с использованием свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы от внутренних переменных, характеризующих дефектное состояние. Насколько обоснован отказ от рассмотрения нелинейных моделей эволюции дефектов?
- 4) Выбор граничных условий для векторного потенциала (см., например, Табл. 3.2 или (3.25)) является нетривиальным. Существует ли теоретическое обоснование возможности использования подобных вариантов граничных условий?
- 5) В предлагаемой модели автор учитывает релаксационные процессы, связанные с перестройкой структуры пьезоэлектрика, привлекая сугубо

нелинейные кинетические уравнения, что вместе с нелинейным процессом деформирования приводит к новой краевой задаче. Сравнение решений этой же задачи с решением задачи в классической постановке у автора отсутствует, хотя очевидно, что учет выше указанных факторов должен начинаться с определенных значений параметров пьезоэлектрика и внешних воздействий.

- б) В работе правильно подчеркивается принципиальная роль процессов релаксации. Основной же характеристикой любого релаксационного процесса является характерное время релаксации, часто выступающее в качестве важнейшего инварианта. Однако в диссертации количественная оценка этого параметра в большинстве случаев отсутствует.

Заключение по диссертации

Диссертация Семенова Артема Семеновича «Многоуровневые модели сегнетоэлектрoупругих материалов и их применение при решении краевых задач» является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как решение крупной научной проблемы механики деформируемого твердого тела в части разработки подходов описания необратимых процессов деформирования и поляризации сегнетоэлектрoупругих сред с учетом различных структурных уровней, многофазного состава и эволюции дефектов.

Диссертационная работа является завершенным научным исследованием, выполненным на высоком научно-методическом уровне, соответствует паспорту специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – Механика деформируемого твердого тела и имеет важное научное значение и практические приложения.

Диссертационная работа Семенова А.С. отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук в соответствии с Положением о порядке присуждения ученых степеней,

утвержденным постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – Механика деформируемого твердого тела.

Отзыв подготовлен доцентом кафедры теории упругости, кандидатом физико-математических наук, доцентом Б.Н. Семеновым.

Отзыв заслушан, обсужден и одобрен на заседании кафедры теории упругости Санкт-Петербургского государственного университета (Протокол №44/8/22-02-6 от 06 июня 2022 г.).

Заведующий кафедрой теории упругости
академик РАН,

доктор физико-математических наук, профессор

Н.Ф.Морозов

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

Адрес: 199034, Россия, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д 7/9.

Тел. +7(812)328-20-00, e-mail: spbu@spbu.ru, Веб-сайт <http://spbu.ru>

ПОДПИСЬ РУКИ
УДОСТОВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК УПРАВЛЕНИЯ КАДРОВ
МОРОЗОВА С. В.

07 ИЮН 2022

