

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»



Семенов Артем Семенович

**Многоуровневые модели сегнетоэлектроупругих материалов и их
применение при решении краевых задач**

Специальность 1.1.8 (ранее 01.02.04) – Механика деформируемого твердого тела

Диссертация

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2022

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
ГЛАВА 1. ОБЗОР ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ МАТЕРИАЛАХ	15
1.1 Сегнетоэлектрoупругие материалы.....	15
1.1.1 Области применения.....	15
1.1.2 Пьезоэлектрики, пирoeлектрики, сегнетоэлектрики, мультиферроики	20
1.1.3 Структура элементарной ячейки	23
1.1.4 Доменная структура.....	30
1.1.5 Морфотропная фазовая граница.....	34
1.2 Экспериментальные основы	37
1.2.1 Электрическое воздействие	37
1.2.2 Механическое воздействие	52
1.2.3 Комбинированное электромеханическое воздействие.....	56
1.3 Обзор математических моделей	64
1.3.1 Феноменологические модели	64
1.3.2 Микроструктурные модели.....	83
1.4 Краевая задача механики связанных полей	91
1.4.1 Уравнения механостатики	91
1.4.2 Уравнения электростатики.....	93
1.4.3 Уравнения связанной квазистатической задачи электромеханики деформируемых диэлектрических сред.....	96
1.4.4 Уравнения термодинамики	98
1.4.5 Определяющие уравнения	102
1.5 Краткие выводы к главе 1	110
ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГОГО МАТЕРИАЛА	111
2.1 Микроструктурные модели.....	111
2.1.1 Модель монокристалла без учета дефектов	115
2.1.2 Модель монокристалла с учетом дефектов	127
2.2 Феноменологические модели	146
2.2.1 Модель поликристалла без учета дефектов	146
2.2.2 Модель поликристалла с учетом дефектов	161
2.3 Краткие выводы к главе 2	164

ГЛАВА 3. РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ СВЯЗАННЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГОСТИ 166

3.1	Векторно-потенциальная формулировка.....	167
3.1.1	Скалярный и векторный потенциалы	167
3.1.2	Мотивация использования векторно-потенциальной формулировки	167
3.1.3	Формулировки краевых задач электростатики	171
3.1.4	Кулоновская калибровка электрического векторного потенциала.....	172
3.1.5	Векторно-потенциальная формулировка краевой задачи электростатики	174
3.1.6	Формулировка краевой задачи сегнетоэлектростатической упругости.....	177
3.1.7	Вариационная формулировка задачи сегнетоэлектростатической упругости	179
3.1.8	Конечно-элементная формулировка задачи сегнетоэлектростатической упругости	180
3.2	Метод возвратного отображения.....	181
3.2.1	Неявный интегратор	183
3.2.2	Электростатический предиктор.....	184
3.2.3	Сегнетоэлектростатический корректор	185
3.2.4	Геометрическая интерпретация. Метод наискратчайшей проекции.....	187
3.3	Согласованная матрица жесткости	190
3.3.1	Линеаризация конечно-элементных уравнений	190
3.3.2	Согласованные сегнетоэлектростатические касательные модули.....	192
3.3.3	Анализ частных случаев.....	194
3.4	Примеры решения связанных краевых задач.....	195
3.4.1	Программное обеспечение	195
3.4.2	Пьезоэлектрическая пластина при комбинированном нагружении	196
3.4.3	Радиальная поляризация полого цилиндра	205
3.4.4	Параллелепипед с цилиндрическим включением	212
3.4.5	Параллелепипед с периодическими сферическими включениями	219
3.4.6	Поляризация пьезоэлектрической пластины с отверстием	224
3.4.7	Четырехточечный изгиб образца с краевой трещиной	225
3.4.8	Многослойный сегнетоэлектрический актуатор	227
3.5	Краткие выводы к главе 3	232

ГЛАВА 4. ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГОГО МАТЕРИАЛА..... 234

4.1	Верификация микроструктурных моделей	234
4.1.1	Интерпретация кристаллитов в ЭПО	234
4.1.2	Влияние числа конечных элементов.....	235

4.1.3	Сравнение результатов расчетов с использованием различных моделей.....	238
4.1.4	Сравнение результатов расчетов с использованием однофазной модели поликристалла с экспериментальными данными	241
4.1.5	Сравнение результатов расчетов с использованием двухфазной модели поликристалла с экспериментальными данными	244
4.1.6	Сравнение результатов расчетов с данными расчетов других авторов.....	254
4.1.7	Параметрический анализ микроструктурной модели	256
4.2	Верификация феноменологических моделей.....	271
4.3	Краткие выводы к главе 4	279
ГЛАВА 5. ОПИСАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ ВБЛИЗИ МОРФОТРОПНОЙ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ		281
5.1	Блокирующий эффект поликристалла вследствие взаимного влияния кристаллитов.....	281
5.1.1	Ориентационная зависимость остаточной деформации и остаточной поляризации для монокристалла	281
5.1.2	Учет взаимного влияния кристаллитов в поликристалле на основе реологической модели.....	299
5.1.3	Оценка взаимного влияния кристаллитов в поликристалле на основе конечно- элементной модели	308
5.2	Экстремальные свойства композиций различного фазового состава	316
5.3	Краткие выводы к главе 5	331
ГЛАВА 6. ОПИСАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ УЧЕТЕ НАЛИЧИЯ ДЕФЕКТОВ.....		334
6.1	Верификация микроструктурных моделей с учетом дефектов.....	341
6.2	Параметрический анализ для монокристалла	352
6.3	Параметрический анализ для поликристалла	365
6.4	Влияние ориентации дефектов на форму гистерезиса в монокристаллах	371
6.5	Способы описания смещения и среза петель гистерезиса монокристалла и поликристалла с дефектами	374
6.6	Краткие выводы к главе 6	376
ЗАКЛЮЧЕНИЕ		378

ПРИЛОЖЕНИЕ А. Вектор спонтанной поляризации и тензор спонтанной деформации для различных доменов микромеханических моделей.....	380
А.1. Тетрагональный кристалл	380
А.1. Ромбоэдрический кристалл	380
А.2. Орторомбический кристалл	382
ПРИЛОЖЕНИЕ Б. Аналитические решения для описания процессов переключения тетрагонального монокристалла.....	384
Б.1. Механическое воздействие	384
Б.1.1 Реономная модель с порогом переключения	386
Б.1.2 Реономная модель без порога переключения	395
Б.1.3 Склерономная модель с порогом переключения	403
Б.2. Электрическое воздействие	410
Б.2.1 Реономная модель с порогом переключения	412
Б.2.2 Реономная модель без порога переключения	422
Б.2.3 Склерономная модель с порогом переключения	430
Б.3. Выводы.....	437
ПРИЛОЖЕНИЕ В. Аналитические решения для векторного потенциала в параллелепипеде с однородным полем.....	438
ПРИЛОЖЕНИЕ Г. Аналитическое решение задачи о радиальной поляризации сегнетоэлектрического цилиндра	440
ПРИЛОЖЕНИЕ Д. Аналитическое решение задачи о диэлектрическом цилиндре в однородном поле	443
ПРИЛОЖЕНИЕ Е. Аналитическое решение задачи о диэлектрической сфере в однородном поле.....	445
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	447

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность и степень разработанности темы исследования. Одним из ключевых атрибутов научно-технического прогресса является разработка и активное внедрение новых материалов, к числу которых в настоящее время относятся *активные (смарт) материалы*. Создание и применение подобных многофункциональных материалов в значительной мере определяется возможностью их детального математического моделирования. Интенсивное внедрение на практике сложных смарт систем и активных элементов конструкций приводит к необходимости анализа их прочности и долговечности, а также к повышению точности предсказания неоднородного напряженно-деформированного состояния.

Сегнетоэлектрoупругие материалы (сегнетоэлектрики и сегнетоэластики), наиболее характерным примером которых является поликристаллическая пьезоке-рамика, представляют собой активные (многофункциональные, интеллектуальные, смарт, адаптивные) материалы, являющиеся перспективными материалами новой техники, находящими благодаря своим уникальным свойствам все более широкое применение на практике. Сегнетоэлектрoупругие материалы используются в качестве рабочих элементов сенсоров и актуаторов (топливные инжекторы, нанопозиционеры, микромоторы, приводы сканирующих туннельных микроскопов, гасители вибраций), пьезотрансформаторов, элементов памяти, датчиков быстропеременных давлений и др. Для оценки точности позиционирования и прочности рассматриваемых устройств являются актуальными разработка уточненных моделей деформирования и поляризации сегнетоэлектрoупругого материала и использование эффективных методов решения нелинейных связанных краевых задач.

Наибольший интерес и сложность представляет математическое *моделирование* необратимых процессов деформирования и поляризации, гистерезисных явлений, деполяризации и реполяризации, ползучести, старения, усталости, дезэджинга, совместное комплексное описание которых в рамках трехмерных моделей в настоящее время отсутствует. Значительный вклад в разработку нелинейных феноменологических и микроструктурных моделей сегнетоэлектрoупругой среды внесли В.Л. Гинзбург, А.В. Белокопъ, А.С. Скалиух, А.В. Наседкин, А.В. Турик, А.Ю. Белов, A.F. Devonshire, W. Cochran, G.A. Maugin, R.M. McMeeking, J.E. Huber, C.M.

Landis, M. Kamlah, H. Balke, P. Neumeister, S. Stark, R. Müller, J. Schröder, D.C. Lupascu, W.S. Kreher, C.S. Lynch, F. Li и др.

Многие из указанных моделей основаны на обобщениях подходов нелинейной механики деформируемого твердого тела, в частности теории пластичности. Существенный вклад в развитие методологии создания макрофеноменологических моделей неупругого деформирования внесли А.А. Ильюшин, В.В. Новожилов, Ю.И. Кадашев, В.А. Пальмов, Р.А. Васин, В.Г. Зубчанинов, П.В. Трусов, О.С. Садаков, В.С. Бондарь, Ю.Г. Коротких, Е.В. Ломакин, Б.Е. Мельников, Л.Б. Гецов, А.Ю. Ишлинский, Д.Д. Ивлев, А.А. Вакуленко, И.Э. Келлер, А.А. Роговой, R. Mises, W. Prager, R. Hill, J.L. Chaboche, E. Kröner, J. Lubliner, Z. Mróz, K.C. Valanis, H. Ziegler и др.

Большой вклад в разработку многоуровневых моделей материалов с явным учетом микроструктуры и специфики механизмов деформирования на разных масштабных уровнях внесен В.А. Лихачевым, В.Г. Малининым, П.В. Трусовым, М.Я. Леоновым, А.Н. Мохелем, Р.Л. Салгаником, С.А. Христиановичем, В.Е. Паниным, В.В. Рыбиным, Ю.В. Соколкиным, А.А. Ташкиновым, А.М. Кривцовым, В.А. Романовой, А.И. Швейкиным, В.А. Скрипняк, А.Е. Волковым, С.А. Кукушкиным, L. Anand, R.J. Asaro, G. Cailletaud, E. Busso, R. Hill, D. Raabe, A. Staroselsky и др.

Анализ поведения поликристаллической сегнетопьезокерамики при комбинированном многоосном непропорциональном переменном электромеханическом воздействии высокой интенсивности приводит к необходимости рассмотрения трех характерных структурных уровней: микро- (домен), мезо- (кристаллит), макро- (поликристалл) и установлению связей между переменными на различных уровнях (двухуровневая гомогенизация). Предложенная в данной работе многоуровневая модель трехмерного континуума позволяет объединить достижения микроструктурных и феноменологических моделей сегнетоэлектрорупругого материала, учесть многофазное строение, анизотропию, взаимное влияние кристаллитов, эволюцию микроструктуры и наличие дефектов.

Точечные дефекты кристаллической решетки оказывают значительное влияние на процессы формирования и движения доменных границ, размеры и форму гистерезисных кривых, время переключения, процессы деградации электромеханических

свойств (усталость, старение), диэлектрические, пьезоэлектрические и механические свойства, что подтверждается многочисленными экспериментами, выполненными на BaTiO_3 , PZT, PLZT, PMS-PZT, PMN-PZT, BNT–BT, KNN, TGS, KTS и др. Однако в современных моделях сегнетоэлектроругого континуума не проводится непосредственный учет наличия дефектов и их эволюции.

Дефекты кристаллической решетки могут быть как собственными, так и созданными искусственно в процессе выращивания кристалла с помощью введения акцепторных или донорных легирующих примесей, а также путем воздействия на кристалл высокоэнергетическими частицами. Создание пространственно упорядоченных полярных дефектов заданной концентрации открывает возможность целенаправленного изменения электромеханических свойств сегнетоэлектроругих материалов и является одним из способов доменной инженерии.

Актуальным для поиска экологически чистых бессвинцовых сегнетоэлектроругих материалов, приходящих на смену имеющей в настоящее время широкое распространение свинец-содержащей ПЦТ-пьезокерамики, является выявление концентрационных границ оптимального состава, обеспечивающих экстремальные деформационные способности многосвязной смеси. Проведение многовариантных вычислительных экспериментов с вариацией микроструктурных параметров позволяет сократить объем длительных дорогостоящих экспериментов.

Целью диссертационной работы является развитие подходов описания необратимых процессов деформирования и поляризации сегнетоэлектроругих сред с учетом различных структурных уровней, многофазного состава и эволюции дефектов.

Для достижения поставленной цели сформулированы и решены следующие **научные задачи**:

1. Разработка *микроструктурной модели* сегнетоэлектроругого материала с учетом мультидоменной структуры, многофазного состава, анизотропии свойств, наличия и эволюции полярных точечных дефектов и диссипативного характера движения доменных стенок для описания гистерезисного поведения сегнетоэлектриков/сегнетоэластиков в условиях сложного многоосного комбинированного электрического и/или механического нагружения.

2. Разработка линейной теории эволюции заряженных точечных дефектов на основе выбора свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы вектора поляризации и тензора деформации дефектов, уравнения эволюции которых априори удовлетворяют диссипативному неравенству.
3. Разработка *феноменологической модели* склерономного сегнетоэлектродупругого материала с уравнениями эволюции внутренних переменных, получаемыми следствием *принципа максимума диссипации* при наличии ограничения в виде функции переключения. Конкретизация выражений для свободной энергии и функции переключения для *изотропного* и *трансверсально-изотропного* приближений в рамках теории инвариантов. Идентификация свободной энергии и функции переключения на основе гомогенизации результатов расчетов с использованием микроструктурной модели.
4. Разработка *векторно-потенциальной вариационной формулировки*, соответствующей принципу виртуальной электромеханической работы, обеспечивающей сходимость итерационных решений нелинейных задач во всем диапазоне нагрузок. Формулировка граничных условий для векторного потенциала для односвязных и многосвязных областей, обеспечивающих наряду с калибровкой в объеме его единственность.
5. Развитие *метода возвратного отображения*, представляющего собой эффективную схему интегрирования нелинейных определяющих уравнений эволюционного типа при наличии ограничений. Получение матрицы согласованных касательных модулей для обеспечения квадратичной скорости асимптотической сходимости глобальной итерационной процедуры Ньютона-Рафсона.
6. Создание алгоритмов и *программная реализация* разработанных моделей материала и методов *гомогенизации* в конечно-элементном программном комплексе.
7. *Верификация* предложенных вариационных формулировок, способов задания граничных условий, методов решения нелинейных задач на основе сравнения полученных результатов с аналитическими решениями и результатами экспериментов. Исследование скорости сходимости численного решения, диапазонов допустимых значений штрафных параметров.

8. Анализ *взаимного влияния кристаллитов* для описания эффектов значительного *снижения* уровня остаточной деформации поликристалла в сравнении со спонтанной деформацией. Исследование механизмов возникновения в поликристалле *микронапряжений* вследствие наличия у кристаллитов запирающих (необратимо недеформируемых) направлений. Анализ ориентационных зависимостей остаточной деформации и поляризации для тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического *монокристаллов*.
9. Объяснение экстремальных свойств вблизи морфотропной фазовой границы. Анализ возможностей двухфазной Т/Р и трехфазной Т/Р/О микроструктурных моделей для описания эффекта проявления экстремальных свойств вблизи морфотропной фазовой границы. Анализ возможности синтеза сегнетоэлектродупругих материалов с оптимальной структурной организацией вещества путем управления его метастабильными состояниями.
10. Описание явлений *смещения* и *среза* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов на основе предложенной микроструктурной модели материала с учетом (неизменяющихся или эволюционирующих) полярных точечных дефектов. Систематическое исследование *влияния ориентации дефектов* на форму петель гистерезиса.

Методы исследования. В работе используются фундаментальные законы механики и физики твердого тела, термодинамики сплошных сред. Запись определяющих и балансовых уравнений основана на использовании прямого тензорного исчисления. Формулировка определяющих уравнений феноменологической модели на макроуровне основана на введении внутренних переменных, применении методов теории инвариантов. Учет взаимного влияния кристаллитов в поликристалле произведен на основе использования в расчетах метода двухуровневой конечно-элементной гомогенизации. Интегрирование нелинейных определяющих уравнений осуществляется с помощью метода возвратного отображения. При решении нелинейных задач используется метод Ньютона-Рафсона.

Предметом исследования являются процессы необратимого деформирования и поляризации при монотонном и циклическом, пропорциональном и многоосном, механическом, электрическом или комбинированном нагружении.

Область исследования соответствует требованиям паспорта специальности 01.02.04 - Механика деформируемого твердого тела (пункт 4. Механика интеллектуальных материалов и конструкций, 3. Мезомеханика многоуровневых сред со структурой, 2. Теория моделей деформируемых тел со сложной структурой, 7. Постановка и решение краевых задач при механических и электромагнитных воздействиях).

Научная новизна. В диссертации разработан новый многоуровневый подход прогнозирования нелинейного поведения поликристаллических и монокристаллических сегнетоэлектродупругих материалов с учетом эволюции и взаимодействия мультидоменной и дефектной подструктур, многофазного состава, анизотропии свойств материала и диссипативного характера движения доменных стенок.

В предложенной микромеханической модели выполнен учет тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической фаз и их смесей. В настоящее время существующие модели ограничены рассмотрением только тетрагональной фазы или смеси тетрагональной и ромбоэдрической фаз.

Для решения нелинейных электромеханических краевых задач предложена *векторно-потенциальная вариационная формулировка*, лишенная недостатков стандартной скалярно-потенциальной вариационной формулировки. Для верификации предложенных формулировок, способов задания граничных условий, методов решения нелинейных задач получены оригинальные *аналитические решения* линейных и нелинейных краевых задач сегнетоэлектродупругости в трехмерной постановке.

Систематический анализ взаимного влияния структурных элементов на различных масштабных уровнях позволил установить эффекты доменного и кристаллитного *упрочнения*. Установлен механизм возникновения в поликристалле микронапряжений вследствие наличия у кристаллитов запирающих (необратимо недеформируемых) направлений, приводящих к парадоксальному снижению уровня остаточной деформации поликристалла с ростом спонтанной деформации.

Предложено количественное описание эффекта экстремальных свойств вблизи морфотропной фазовой границы для двухфазной Т/Р и трехфазной Т/Р/О смесей, открывающее возможность синтеза сегнетоэлектродупругих материалов с оптимальной структурной организацией.

Произведено систематическое исследование влияния *ориентации дефектов* на форму петель гистерезиса. Исследованы возможности описания эффектов *смещения* и *среза петель* диэлектрического и электромеханического гистерезисов, процессов *старения* и *деэйджинга* с использованием предложенных микроструктурных моделей с учетом (неизменяющихся или эволюционирующих) полярных точечных дефектов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. *Микроструктурная модель* сегнетоэластичного материала с учетом наличия и эволюции полярных точечных дефектов, многофазного состава, анизотропии свойств, мультидоменной структуры и диссипативного характера движения доменных стенок.
2. *Линейная теория эволюции точечных дефектов* в сегнетоэластичных материалах на основе выбора свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы вектора поляризации и тензора деформации дефектов, уравнения эволюции которых получены на основе диссипативного неравенства.
3. *Векторно-потенциальная вариационная формулировка*, соответствующая принципу виртуальной электромеханической работы и приводящая к положительно-определенной матрице жесткости. Для обеспечения единственности векторного потенциала наряду с калибровкой в объеме предложены и апробированы специальные виды граничных условий для односвязных и многосвязных областей.
4. Предложено объяснение и количественное описание эффектов:
 - микроструктурного (доменного и кристаллитного) упрочнения,
 - экстремальных свойств вблизи *морфотропной фазовой границы* на основе двухфазной Т/Р микроструктурной модели,
 - экстремальных свойств остаточной деформации и поляризации трехфазных Т/Р/О композиций различного фазового состава,
 - наличия *максимума* в зависимости остаточной деформации тетрагонального и ромбоэдрического поликристалла от спонтанной деформации,
 - процесса *старения* после предварительной поляризации,
 - *деэйджинга*, связанного с уменьшением начального поля смещения при интенсивном циклическом нагружении.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования предложенного аппарата (многоуровневых моделей и реализующего их комплекса программ), методов решения нелинейных краевых связанных задач для исследования поведения сегнетоэлектрорупругих материалов в качестве рабочих элементов сенсоров и актуаторов при комбинированном электромеханическом воздействии. Получены аналитические и численные решения для ряда актуальных для практики краевых задач.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были представлены на 47 Всероссийских и Международных конференциях, в том числе на 14th Symposium «Smart Structures and Materials» (2007 San Diego, USA); 2nd GAMM-Seminar on «Multiscale Material Modelling» (2008 Stuttgart, Germany); IUTAM Symposium «Multiscale Modelling of Fatigue, Damage and Fracture in Smart Materials Systems» (2009 Freiberg, Germany); MRS Spring Meeting «Modeling and Simulation for Smart, Ferroic and Multiferroic Materials» (2005 San Francisco, USA); 67th, 69th, 75th, 81st GAMM Annual Meeting (1996 Prag, Czech Republic; 1998 Bremen, Germany; 2004 Dresden, Germany; 2010 Karlsruhe, Germany); 19th FEM-Symposium (2006 Chemnitz, Germany); X, XI, XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (2011 Нижний Новгород; 2015 Казань; 2019 Уфа); 5^{ый}, 6^{ой}, 8^{ой} Международный междисциплинарный молодежный симпозиум «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов (LFPM)» (2016, 2017, 2019 Туапсе/Ростов-на-Дону); XXII, XXIII, XXIV, XXVII межд. конф. «Математическое моделирование в механике деформируемых тел и конструкций. Методы граничных и конечных элементов (BEM&FEM)» (2007, 2009, 2011, 2017 С.-Петербург); 4th Scientific Symposium «Lightweight Design by Integrating Functions (CRC/Transregio 39)» (2013 Nuremberg, Germany); V, VI, VII межд. конф. «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решения (RELMAS)» (2003, 2005, 2008 С.-Петербург); VI, VII, VIII межд. симпозиум «Современные проблемы пластичности и устойчивости в механике деформируемого твердого тела» (2006, 2010, 2015 Тверь); Международные научные симпозиумы по проблемам механики деформируемых тел, посвященные 105 и 110-летию А.А. Ильюшина (2016, 2021 Москва); XLI, XLII, XLVIII, XLIX Int. Summer School – Conference

«Advanced Problems in Mechanics» (2013, 2014, 2020, 2021 St. Petersburg); EUROMECH Colloquim-458. Advanced Methods in Validation and Identification of Non-linear Constitutive Equations in Solid Mechanics (2004 Moscow); XXI Петербургские чтения по проблемам прочности. К 100-летию со дня рождения Л.М. Качанова и Ю.Н. Работнова (2014 С.-Петербург); XXXVII, XXXVIII, XXXIX, XL, XLI, XLII, XLIII, XLIV, XLV, XLVI, XLVII, XLVIII Неделя науки СПбПУ. Межд. научно-практическая конф. (2008, 2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015, 2016, 2017, 2018, 2019 С.-Петербург); Int. conf. «Emerging Trends in Applied and Computational Physics» (2019 St. Petersburg).

Достоверность результатов работы обеспечивается строгой математической постановкой задач; предельными переходами к известным случаям; сопоставлением результатов, полученных разными методами; применением математически обоснованных методов решения; качественным и количественным совпадением с *экспериментальными* результатами.

Личный вклад. Автором или с его непосредственным лидирующим участием получены все включенные в диссертацию результаты: аналитический обзор литературы, постановки цели и задач исследования, обоснование и формулировка основных положений, анализ результатов экспериментальных исследований и формулировка основных закономерностей нелинейного поведения сегнетоэлектрoупругих материалов при различных видах нагружения, разработка программ, проведение вычислительных экспериментов, анализ и обобщение аналитических и численных результатов моделирования, формулировка выводов. Базовые работы по тематике исследований [86–89] выполнены без соавторов.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 45 работ, в том числе 16 работ, входящих в международные базы цитирования Web of Science и SCOPUS.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, заключения, списка использованной литературы и 6 приложений. Работа изложена на 470 страницах (основной текст занимает 379 страниц), содержит 190 рисунков и 32 таблицы. Список литературы включает 515 наименований.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ МАТЕРИАЛАХ

1.1 Сегнетоэлектрoупругие материалы

1.1.1 Области применения

Сегнетоэлектрoупругие материалы (сегнетоэлектрики [49, 80, 107, 109] и сегнетоэластики [25, 49, 128]), наиболее характерным примером которых является поликристаллическая пьезокерамика [270], представляют собой активные [5] (многофункциональные [379], интеллектуальные [117], смарт [441]) материалы, являющиеся перспективными материалами новой техники, находящими благодаря своим уникальным свойствам все более широкое применение на практике. Сегнетоэлектрoупругие материалы используются (см. детальное описание в обзорах [10, 22, 49, 76, 79, 379, 464]) в качестве рабочих элементов сенсоров и актуаторов (топливные инжекторы, нанопозиционеры, микромоторы, приводы сканирующих туннельных микроскопов, гасители вибраций), пьезотрансформаторов, элементов памяти, датчиков быстропеременных давлений.

Благодаря рекордно высоким значениям пьезоэлектрических модулей у сегнетоэлектрoупругих материалов [79] в пьезоэлектрической технике наиболее широкое применение находят сегнетоэлектрики, в частности сегнетоэлектрическая керамика типа ЦТС (PZT, $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$). Наиболее высокие значения пьезоэлектрических коэффициентов также имеют место у сегнетоэлектрических материалов, поэтому для изготовления приемников теплового излучения применяются именно сегнетоэлектрики. Высокая диэлектрическая проницаемость предопределяет использование сегнетоэлектриков в качестве конденсаторов. Традиционными областями применения сегнетопьезокерамики являются устройства, основанные на использовании прямого и обратного пьезоэффекта, их комбинации, нелинейных свойств материала, возможности процессов переключения [10, 76, 79]:

- ***автомобильная и авиакосмическая техника*** (пьезоуправляемые инжекторные клапаны впрыска топлива, датчики детонации, датчики

уровня заправочных жидкостей, передние ультразвуковые дистанционные датчики (предотвращения столкновений), задние (парковочные) ультразвуковые дистанционные датчики, пьезоп приводы зеркал и фар, пьезоп приводы системы регулировки подвески, актуаторные системы антиблокировки тормозов, аварийные датчики-сенсоры подушек безопасности, космическая робототехника, пьезоп приводы рулевых тяг, гасители вибраций [243], системы морфинга плоскостей летательных аппаратов);

- **машиностроение и точная механика** (системы высокоточного позиционирования (разрешающая способность 10-100 мкм), исполнительные механизмы манипуляторов роботов, точная подстройка инструментов станка, высокоскоростной сервопривод, некруговое шлифование, ударное бурение, виброкомпенсация, компенсация износа, привод игольчатого клапана, привод туннельного сканирующего микроскопа, нанопозиционеры, микронасосы, линейные моторы, позиционирование кромки ножа в экструзионных инструментах, микрогравировочные системы, генераторы ударной волны);
- **медицинская техника** (устройства получения изображения внутренних органов с помощью ультразвуковой локации (УЗИ), сканирующие микроскопы, ионизаторы и озонаторы помещений, датчики тонов Короткова, нанолитровые насосы, генные манипуляторы, системы проникновения в клетки, микродиспенсеры (раздаточные аппараты), микромоторы для хирургии);
- **компьютерная техника и микроэлектроника** (сегнетоэлектрические устройства памяти на основе сегнетопленок в компонентах DRAM (динамическая память с произвольной выборкой) и FeRAM (долговременная память с произвольной выборкой) [268], интегрированные сегнето-полупроводниковые устройства, пьезоэлектрическая печатающая головка струйного принтера, устройства торможения вращения дисков, лифтовой механизм в системе позиционирования диска, конденсаторы,

трансформаторы, фильтры, вариконды, сверхвысокочастотные компоненты на основе активных диэлектриков, элементы мобильных телефонов/смартфонов (микрофон (работает на основе прямого пьезоэффекта), телефон (работает на основе обратного пьезоэффекта), радиочастотные фильтры (реализованы на поверхностных акустических волнах, создаваемых в сегнетоэлектрических пленках), сверхминиатюрные керамические конденсаторы));

- **оптико-лазерная техника** (устройства позиционирования положения зеркал и линз в интерферометрических модулях с нанометровой точностью, системы управления лазерным лучом, системы управления зеркалами путем деформирования в телескопах наземного и космического базирования, сканирующие зеркала, стабилизаторы изображения, сканирующие микроскопы, системы автоматической фокусировки, интерферометрия, оптоволоконное коммутирование, акустооптические модуляторы в лазерной технике);
- **спортивный инвентарь** (подавление вибраций в лыжах [444] и теннисных ракетках [304], самовозобновляемые автономные источники электрической энергии на основе пьезогенераторных накопителей [1]).

Ярким примером повышения эксплуатационных качеств дизельных двигателей легковых и грузовых автомобилей является разработка и внедрение пьезокерамических высокоскоростных клапанов для топливной аппаратуры. Пьезоэлектрический инжектор является основным компонентом общей топливной магистрали, обеспечивающим высокое быстродействие и гибкое управление процессом впрыскивания топлива. Применение пьезоэлектрических актуаторов обеспечивает возможность соответствия автомобильному стандарту Евро-6 и даже более жестким стандартам в будущем. Система впрыска топлива с использованием многослойных пьезоактуаторов уменьшает задержку воспламенения топлива за счет [10]: высокого давления впрыска и сверхтонкого равномерного распыления топлива, быст-

рого и независимого управления форсунками, что позволяет осуществлять несколько (до 7) впрысков в течение одного цикла сгорания, высокоточного дозирования количества топлива на различных фазах работы двигателя, управления формой и длительностью импульса впрыска, что заметно увеличивает экономичность и экологичность двигателя, а также увеличивает срок его службы.

Еще одним примером практического применения пьезокерамики в повседневной жизни, приводящего к существенному повышению эксплуатационных характеристик, является инновационная разработка Tamron самого компактного и легкого в мире объектива с 15-кратным зумом для цифровых зеркальных фотокамер (18-270mm F/3.5-6.3 Di II VC PZD), получившая престижную премию EISA Awards в 2011-2012 гг. Использование пьезопривода позволило уменьшить на 20 % вес объектива, значительно повысить его быстродействие, обеспечить мгновенную бесшумную фокусировку с высокой точностью.

Принцип работы большинства из перечисленных выше устройств основан на использовании линейного пьезоэффекта. Однако в ряде случаев наблюдается отклонение от линейности, вызванное концентрацией электрического поля (например, в окрестности вершины электрода) или механических напряжений, приводящей к деполяризации и изменению электромеханических свойств. Для ряда пьезоприводов прецизионной точности (нанопозиционеры, приводы сканирующих туннельных микроскопов) принципиально важен учет эффектов вязкости для компенсации дрейфа. Ряд устройств (например, энергонезависимая долговременная память FeRAM, запоминающие устройства автоматики, сегнетокерамические запирающие реле) использует возможность нелинейных процессов переключения в сегнетоэлектриках.

Полученная в результате спекания поликристаллическая керамика представляет собой набор произвольно ориентированных кристаллитов и доменов, является изотропной и не обладает направленной поляризацией. Непосредственному использованию на практике предшествует обязательная стадия начальной поляризации, в результате которой пьезокерамика подвергается действию сильного электри-

ческого поля, приводящего в неблагоприятно ориентированных доменах к нелинейным процессам переключения, сопровождающимся переориентацией вектора спонтанной поляризации элементарных ячеек в направлении, наиболее близком к направлению внешнего электрического поля. Остаточная поляризация образца сохраняется после снятия поляризующего поля. Таким образом, начальная поляризация является первым нелинейным процессом, которому подвергается каждый пьезокерамический образец.

Наряду с традиционным дизайном многослойных актуаторов, у которых каждый слой подвергается однородной начальной поляризации, в последнее время все большее распространение получают конструкционные решения с неоднородной начальной поляризацией, анализ процесса которой требует решения нелинейных краевых задач. Примерами подобных объектов являются: однослойные актуаторы с периодической структурой чередующихся в одной плоскости разнополярных электродов (Interdigitated Electrodes или IDE) [149], импульсные монолитные широкополосные преобразователи для неразрушающего контроля [6], пьезокерамические трансформаторы с различной поляризацией для возбудительной и генераторной секций.

Прецизионное измерение изменения расстояния между двумя близко расположенными точками на плоскости может быть произведено при помощи тонкопленочных пьезодатчиков больших деформаций, регистрирующих сигналы во время процессов переключения доменов.

Другим характерным примером непосредственного применения нелинейных свойств на практике являются энергонезависимая память FeRAM на основе сегнетоэлектрических пленок, основанная на использовании диэлектрического гистерезиса. Сегнетопленка в зависимости от направления спонтанной поляризации «запирает» или «открывает» канал полевого транзистора и позволяет осуществить запись бита информации. Направление спонтанной поляризации сохраняется долгое время даже при выключенном питании. Другим преимуществом сегнетоэлектрической памяти является ее высокое быстродействие (при толщинах пленок менее 10^{-6} м время переключения поляризации составляет менее 10^{-9} с [79]).

При изготовлении и/или эксплуатации элементы из сегнетоэлектрoупругих материалов могут подвергаться значительным электрическим и механическим воздействиям, что может приводить к их повреждению, изменению свойств и даже разрушению. В связи с этим становятся актуальными исследования поведения сегнетоэлектрoупругих материалов, не сопровождающегося в рабочем диапазоне температур структурными фазовыми переходами, но связанного с процессами поляризации, необратимого деформирования и разрушения. При этом возникает необходимость детального учета нелинейного электромеханического поведения, приводящая к разработке уточненных моделей материала и использованию эффективных методов численного решения нелинейных краевых задач.

1.1.2 Пьезоэлектрики, пироэлектрики, сегнетоэлектрики, мультиферроики

В настоящее время число известных сегнетоэлектриков/сегнетоэластиков превосходит 600, а с их твердыми растворами превышает 5000 [79]. Общими чертами сегнетоэлектрoупругих материалов являются [49]: (i) наличие спонтанной поляризации и/или остаточной деформации в отсутствие внешнего воздействия и (ii) способность изменять направление поляризации и/или остаточную деформацию при приложении внешнего электромеханического воздействия. Поведение сегнетоэлектрoупругих материалов непосредственно связано с особенностями асимметрии элементарных ячеек.

Из 32 кристаллографических классов (32 групп точечной симметрии) 20 нецентросимметричных обладают способностью к поляризации при механическом воздействии (прямой пьезоэлектрический эффект) и поэтому классифицируются как *пьезоэлектрики* (см. Рисунок 1.1). Среди 20 классов пьезоэлектрических кристаллов 10 имеют уникальную полярную ось, вдоль которой возникает спонтанная поляризация, чувствительная к изменению температуры (пироэлектрический эффект), что позволяет идентифицировать их как *пироэлектрики*. Некоторые из пироэлектриков обладают несколькими равновесными ориентациями вектора спонтанной поляризации и способностью переключаться между этими ориентациями под действием

внешнего электрического и/или механического воздействия, что позволяет определить их как *сегнетоэлектрики*. Таким образом, сегнетоэлектрические материалы являются подмножеством пьезоэлектрических материалов, которые в свою очередь являются подмножеством пьезоэлектрических материалов.



Рисунок 1.1 – Взаимосвязь между классами пьезоэлектрических, пьроэлектрических и сегнетоэлектрических кристаллов с позиции свойств симметрии [237]

Термины сегнетоэлектричество и сегнетоэлектрик происходят от названия кристалла сегнетовой соли (тетрагидрат двойной натриево-калиевой соли винной кислоты $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$), которая была названа в честь французского аптекаря Э. Сегнетти (E. Seignette, 1632-1698), синтезировавшего ее впервые. Эксперименты с сегнетовой солью позволили обнаружить в 1920 году чешскому исследователю Дж. Валашке [467] нелинейные электрические свойства, аналогичные нелинейным магнитным свойствам ферромагнетиков (наличие фазовых переходов, точки Кюри, доменной структуры и петель гистерезиса). Поэтому в настоящее время в зарубежной литературе широко используются для рассматриваемых явлений термины ферроэлектричество (ferroelectricity) и ферроэлектрик (ferroelectrics).

Среди сегнетоэлектрoупругих материалов следует различать (i) *чистые сегнетоэластики* [24] (ортофосфат свинца $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$, тригидроселенит калия $\text{KH}_3(\text{SeO}_3)_2$ и др.), обладающие только сегнетоупругими свойствами, но не являющиеся сегнетоэлектриками, (ii) *чистые сегнетоэлектрики* (например, триглицинсульфат $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$ [457] и др.) и (iii) *смешанные сегнетоэлектрики/сегнетоэластики* (титанат бария BaTiO_3 , титанат свинца PbTiO_3 , молибдат гадолиния $\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$, дигидрофосфат калия KH_2PO_4 и др), обладающие одновременно сегнетоупругими и сегнетоэлектрическими свойствами. Впервые на возможность существования чистых сегнетоэластиков указал В.Л. Инденбом (СССР) в 1960 году. К. Аизу (Япония) ввел термин сегнетоэластик (ferroelastic) и исследовал особенности их кристаллической структуры в 1969 году [128].

Сегнетоэлектрoупругие материалы могут рассматриваться также как разновидность *мультиферроиков*, понятия, введенного Г. Шмидом [408] для обозначения среды, которая одновременно обладает как минимум двумя из трех свойств (видов упорядочения): ферромагнитным, сегнетоэлектрическим и сегнетоупругим. Обладание хотя бы одним из трех вышеперечисленных свойств определяет принадлежность к классу *ферроиков* или ферроактивных материалов [72].

1.1.3 Структура элементарной ячейки

В настоящее время благодаря высоким значениям пьезоэлектрических и диэлектрических свойств наибольшее распространение при создании пьезокерамических устройств получила поликристаллическая сегнетопьезокерамика на основе твердых растворов цирконата-титаната свинца $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ (ЦТС или PZT). Пьезокерамика PZT, как и большинство промышленных сегнетоэлектриков (титанат бария BaTiO_3 , цирконат-титанат свинца-лантана PLZT, титанат свинца PbTiO_3 (PT), магнониобат свинца $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ (PMN), $(\text{Na,K})\text{NbO}_3$ и др.), принадлежит к структурному типу *перовскита*¹ (группа кислородно-октаэдрических сегнетоэлектриков).

Структура перовскита содержит одну формульную единицу ABO_3 . Элементарная ячейка перовскитной структуры представлена на Рисунке 1.2. Выше температуры Кюри ($T > T_c$) кристаллическая структура перовскита является кубической (Рисунок 1.2а). В восьми вершинах куба находятся большие катионы А (свинец в PZT или барий в BaTiO_3), в центре малый катион В (титан или цирконий в PZT или титан в BaTiO_3), а в центрах граней - атомы кислорода, образующие октаэдры BO_6 . Ниже температуры Кюри ($T < T_c$) элементарная ячейка слегка деформируется (Рисунок 1.2б), ионы A^{2+} и B^{4+} смещаются относительно ионов O^{2-} . В результате образуется электрический диполь за счет разделения положительных и отрицательных центров заряда. Величина дипольного момента на единицу объема представляет собой спонтанную поляризацию. Смещение «сегнетоактивного» катиона B^{4+} дает наибольший вклад в дипольный момент. Причиной большого смещения маленького по размеру катиона B^{4+} в кислородном октаэдре является то, что окружающие его анионы O^{2-} , отталкивая друг друга, оставляют внутри октаэдра большую свободу для смещения малого иона B^{4+} [79], что в итоге и приводит к появлению в материалах с перовскитной структурой заметной спонтанной поляризации.

¹ Данный структурный тип получил название от кубического минерала перовскита (CaTiO_3), предложенное немецким минералогом Густавом Роуза (1798-1873) в честь русского минералога и политика Льва Алексеевича Перовского (1792-1856).

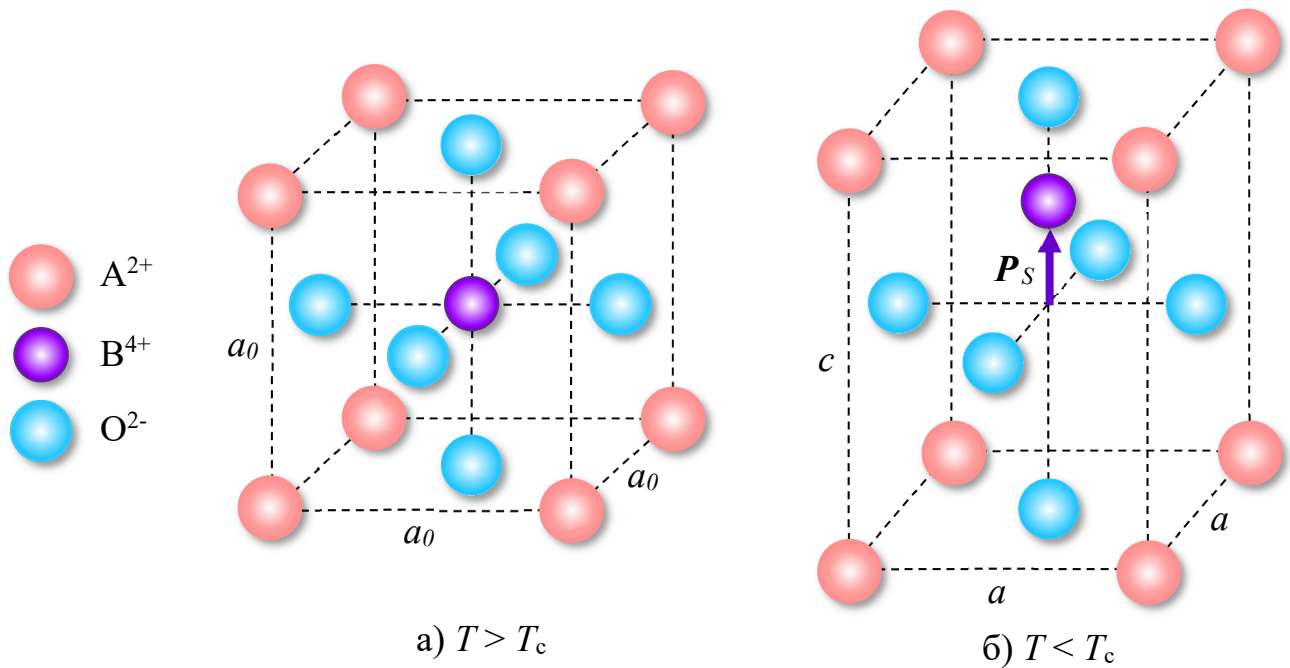


Рисунок 1.2 – Перовскитная структура ABO_3 . Элементарная ячейка кристаллической решетки а) параэлектрическая фаза с кубической структурой (выше температуры Кюри) и б) сегнетоэлектрическая фаза с тетрагональной структурой (ниже температуры Кюри)

Выше температуры Кюри перовскиты не обладают ни пьезоэлектрическими, ни сегнетоэлектрическими свойствами. В этом случае реализуется параэлектрическая фаза с кубической (центрально симметричной) элементарной ячейкой (Рисунок 1.2а). При понижении температуры при переходе через температуру Кюри происходит фазовый переход из параэлектрической (неполярной) фазы (с кубической структурой) к сегнетоэлектрической (полярной) фазе (с тетрагональной структурой). Фазовый переход сопровождается изменением кристаллической структуры, возникновением спонтанной поляризации, аномалиями ряда физических свойств и понижением симметрии кристалла.

При дальнейшем понижении температуры возможны также и другие фазовые переходы. Например, для титаната бария $BaTiO_3$ при понижении температуры (при атмосферном давлении) происходят следующие три фазовых перехода I рода (см. Рисунок 1.3) [270]:

- при $130\text{ }^{\circ}\text{C}$ кубическая параэлектрическая фаза ($m\bar{3}m$) переходит в *тетрагональную* сегнетоэлектрическую фазу ($4mm$),

- при 0°C *тетрагональная* сегнетоэлектрическая фаза переходит в *орт ромбическую* сегнетоэлектрическую фазу ($mm2$),
- при -90°C *орт ромбическая* сегнетоэлектрическая фаза переходит в *ромбоэдрическую* сегнетоэлектрическую фазу ($3m$) (см. Рисунок 1.3).

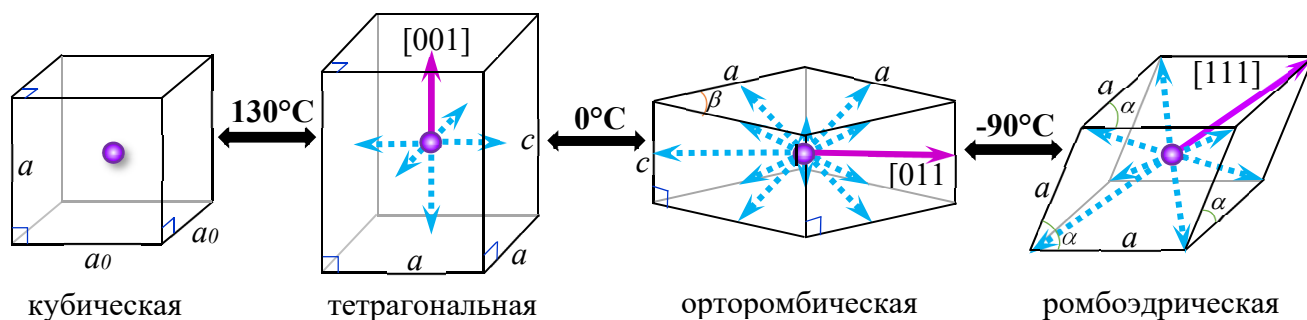


Рисунок 1.3 – Изменение кристаллической структуры BaTiO₃ при фазовых переходах [270].
Стрелками показаны возможные направления поляризации

В *тетрагональном* монокристалле возможны 6 ориентаций спонтанной поляризации $\langle 001 \rangle$ (вдоль положительных и отрицательных направлений трех кристаллографических осей) (см. Рисунок 1.3). Элементарная ячейка имеет форму прямого параллелепипеда ($c \times a \times a$) с квадратом ($a \times a$) у основания и может быть получена путем растяжения куба в направлении $\langle 001 \rangle$. В *орт ромбическом* монокристалле реализуется 12 ориентаций спонтанной поляризации $\langle 011 \rangle$ (вдоль диагоналей граней кристаллической ячейки). Элементарная ячейка получается деформированием кубика в направлении $\langle 011 \rangle$, в результате которого принимает форму прямого параллелепипеда с ромбом у основания, характеризуемым углом β . В *ромбоэдрическом* монокристалле реализуется 8 ориентаций спонтанной поляризации $\langle 111 \rangle$ (вдоль направлений четырех главных диагоналей кристаллической ячейки). Элементарная ячейка имеет форму наклонного параллелепипеда ($a \times a \times a$) с равными соответствующими углами α на каждой грани, который может быть получен деформированием кубика в направлении $\langle 111 \rangle$.

Размеры кристаллической решетки для BaTiO₃, полученные на основе метода рентгеновской дифракции, имеют следующие значения [106, 270, 285, 300]:

- для кубической решетки при $130\text{ }^{\circ}\text{C}$ $a_0 = 4,009\text{ }\text{\AA}$,
- для тетрагональной решетки при $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ $a = 3,993\text{ }\text{\AA}$ и $c = 4,037\text{ }\text{\AA}$,
- для орторомбической при $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ $a = a_m = 5,682\text{ }\text{\AA}$, $b = b_m = 5,669\text{ }\text{\AA}$ и $c = 3,990\text{ }\text{\AA}$ ($\beta = 89,86^{\circ}$),
- для ромбоэдрической при $-90\text{ }^{\circ}\text{C}$ $a = 3,998\text{ }\text{\AA}$ и $\alpha = 89,88^{\circ}$.

В результате фазового перехода из кубической в тетрагональную фазу в ВаТiО₃ происходит смещение центров положительных и отрицательных зарядов на величину $0,1\text{ }\text{\AA}$, что приводит к спонтанной поляризации $P_s = 0,26\text{ Кл/м}^2$. Спонтанная деформация в тетрагональной фазе, рассчитанная на основе вышеприведенных параметров решетки (в предположении сохранения объема), составляет

$$\varepsilon_s = \frac{c - a_0}{a_0} = \frac{c - \sqrt[3]{a^2 c}}{\sqrt[3]{a^2 c}} \approx 0,73\%. \quad (1.1)$$

При переходе из кубической параэлектрической фазы в тетрагональную сегнетоэлектрическую фазу возможны 6 вариантов ориентации спонтанной поляризации и 3 варианта спонтанной деформации кристаллической решетки (см. Рисунок 1.4).

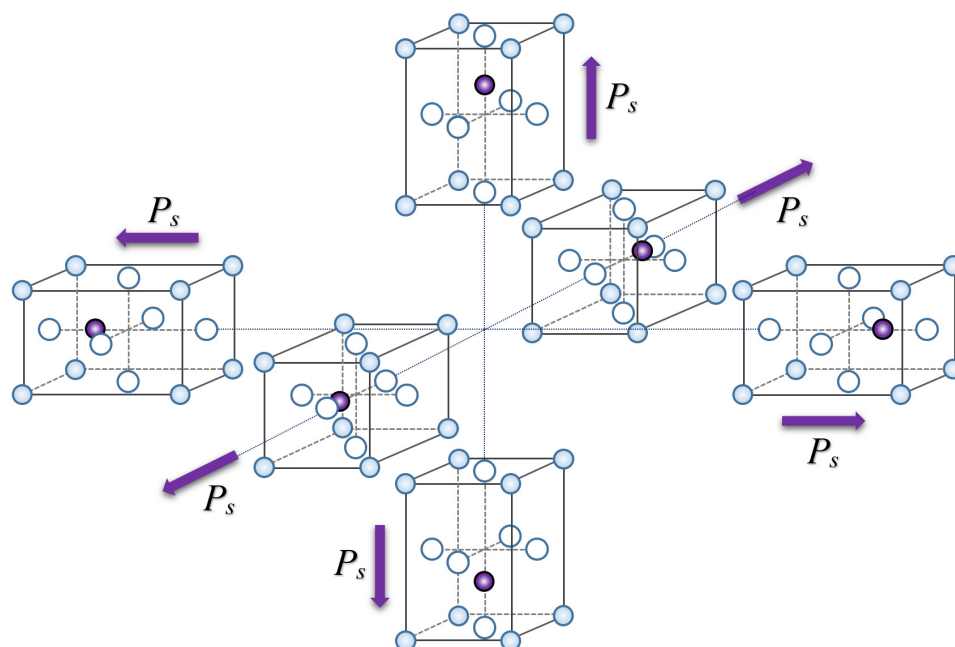


Рисунок 1.4 – Возможные ориентации спонтанной поляризации в тетрагональной решетке

При невысоком уровне внешнего воздействия (ниже коэрцитивного) элементарная ячейка претерпевает *обратимое* изменение одним из двух способов:

- внешнее механическое воздействие деформирует ячейку, что приводит к незначительному относительному смещению положительных и отрицательных ионов;
- внешнее электрическое воздействие вызывает относительное смещение положительных и отрицательных ионов, что приводит к деформации элементарной ячейки.

Эти линейные эффекты вызывают *линейное* поведение кристалла. Направление спонтанной поляризации (одно из 6 возможных, показанных на Рисунке 1.4) в элементарной ячейке при этом сохраняется. Для описания вышеуказанного поведения достаточно линейной теории *электроупругости* (линейной теории пьезоэлектричества).

Когда уровень внешнего (электрического или механического) воздействия достигает коэрцитивного значения, в ячейке начинается процесс переключения. Сегнетоактивный В-ион (центральный в параэлектрической фазе) скачком меняет свое местоположение, перемещаясь в один из 6 возможных для тетрагональной решетки нецентральных местоположений (см. Рисунок 1.4). Для описания процессов переключения необходимо использовать физически *нелинейные* модели материала.

Под действием внешнего электрического поля возможны переключения направления спонтанной поляризации на 180° и на 90° (см. Рисунок 1.5). Вектор спонтанной поляризации стремится приобрести ориентацию, максимально близкую к направлению внешнего электрического поля. Следует отметить, что при 180° переключении деформирования элементарной ячейки не происходит, изменяется только направление поляризации на противоположное.

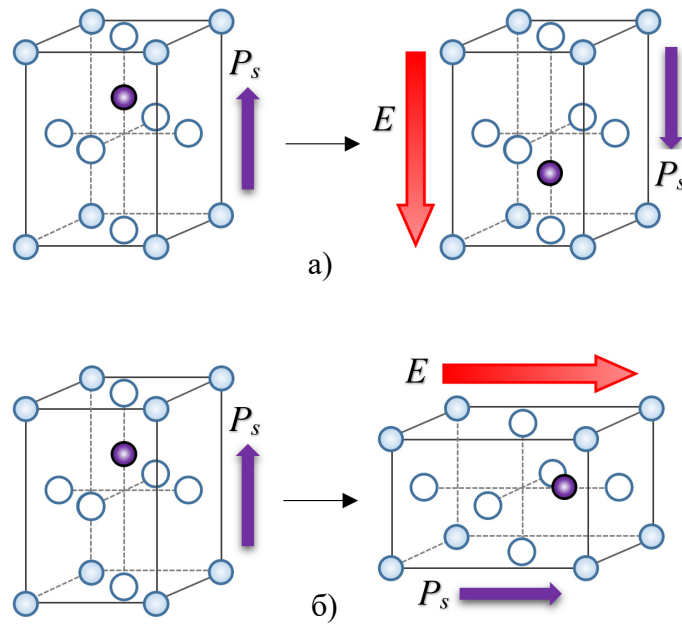


Рисунок 1.5 – Схематическое представление изменения спонтанной поляризации и спонтанной деформации в тетрагональной ячейке под действием электрического поля ($E \geq E_c$):
а) 180° переключение, б) 90° переключение

При внешнем механическом воздействии возможны только 90° процессы переключения направления спонтанной поляризации. При *растяжении* в направлении, ортогональном начальной поляризации, происходит переориентация поляризации вдоль одного из двух равновероятных направлений, параллельных линии действия нагрузки (см. Рисунок 1.6). В результате переключения меняется также спонтанная деформация ячейки, приводящая к переориентации (большей) c -оси ячейки вдоль линии действия нагрузки. При растяжении вдоль направления начальной поляризации процессов переключения не происходит.

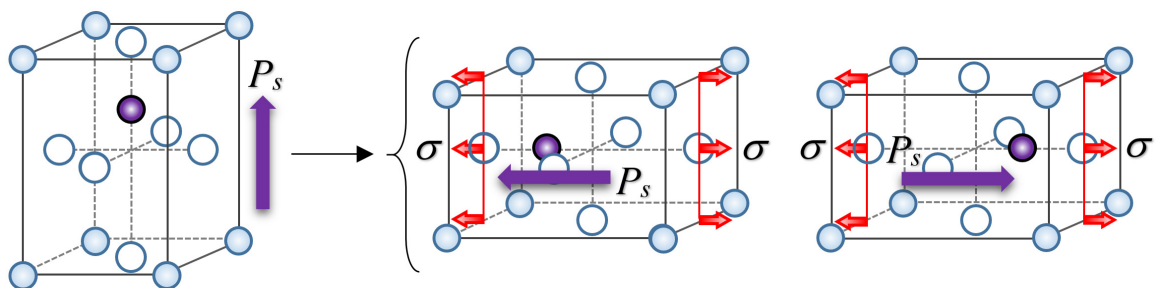


Рисунок 1.6 – Изменение спонтанной поляризации и спонтанной деформации в тетрагональной ячейке при *растяжении* ($\sigma \geq \sigma_c$)

При *сжатии* вдоль направления начальной поляризации происходит 90° переключение поляризации в одно из четырех равновероятных направлений, лежащих в плоскости, ортогональной линии действия нагрузки (см. Рисунок 1.7). В результате переключения меняется также спонтанная деформация ячейки, приводящая к переориентации (большей) c -оси ячейки в направлении, ортогональном линии действия нагрузки. При сжатии вдоль направления, перпендикулярного начальной поляризации, процессов переключения не происходит.

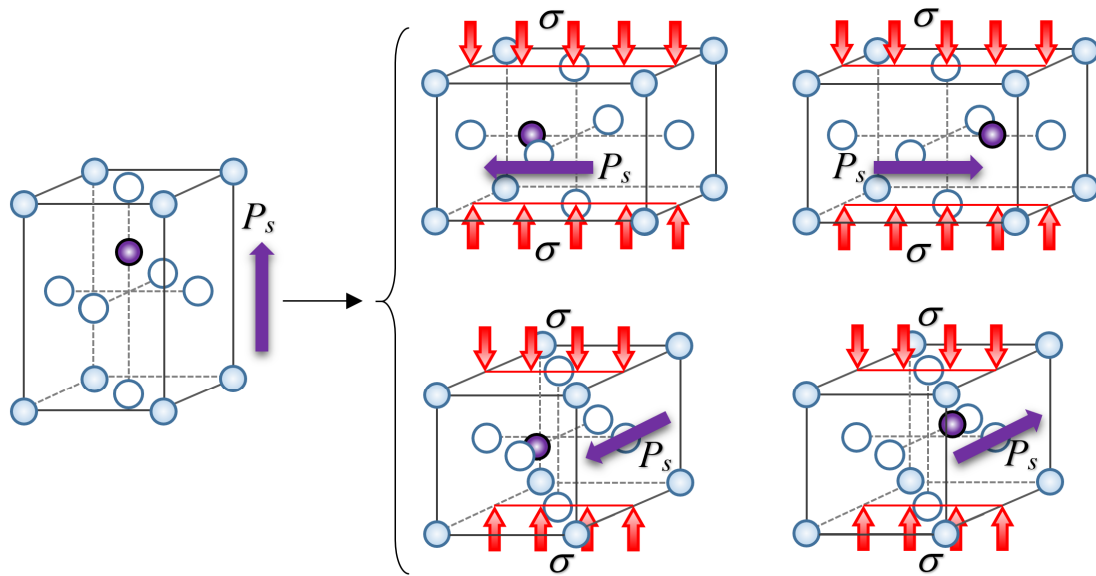


Рисунок 1.7 – Изменение спонтанной поляризации и спонтанной деформации в тетрагональной ячейке при *сжатии* ($|\sigma| \geq \sigma_c$)

Таким образом, внешнее воздействие приводит к процессам переключения в случае несовпадения направления начальной поляризации с направлением прикладываемого внешнего электрического поля или несовпадения c -оси элементарной ячейки с направлением максимальной главной деформации, вызванной внешним механическим воздействием.

1.1.4 Доменная структура

Отличительным признаком сегнетоэлектрoупругих материалов является наличие доменной структуры. Домен представляет собой макроскопическую область в кристалле, в пределах которой все элементарные ячейки поляризованы одинаковым образом [102]. Доменная структура (совокупность всех доменов) оказывает существенное влияние на свойства сегнетоэлектрoупругих материалов.

Причиной образования полидоменной структуры (ниже температуры фазового перехода) в сегнетоэлектрических кристаллах является стремление системы к уменьшению свободной энергии [79]. Монодоменный кристалл создает электрическое поле в окружающем пространстве, что приводит к дополнительному увеличению энергии. В двухдоменном кристалле энергия внешнего поля локализуется и будет меньше, чем в монодоменном. Таким образом, формирование полидоменной структуры понижает общую энергию кристалла. Однако увеличение числа доменов приводит также и к росту энергии, затрачиваемой на образование доменных стенок. В результате формируется сложная равновесная доменная структура с конечным числом и характерным размером доменов, минимизирующая суммарную результирующую энергию кристалла вследствие компромисса между уменьшающейся электростатической энергией деполяризующего поля и увеличивающейся энергией доменных границ. Формирование 180° -доменных стенок (границ) уменьшает электрическую энергию деполяризации, а всех отличных от 180° -доменных стенок уменьшает упругую энергию [209].

Доменная структура характерна как для монокристаллов (см. Рисунок. 1.8а), так и для поликристаллов (см. Рисунок. 1.8б). В монокристаллах ориентация доменов и доменных стенок определяется кристаллографической ориентацией самого кристалла. В монокристалле BaTiO_3 в диапазоне температур от 0°C до 130°C реализуется тетрагональная структура, для которой характерно формирование 180° - и 90° -доменных стенок (Рисунок. 1.8в). В поликристалле доменная структура имеет весьма сложный характер (Рисунок. 1.8б и г) благодаря наличию произвольно ориентированных зерен (монокристаллов) и влиянию границ зерен на формирование доменов.

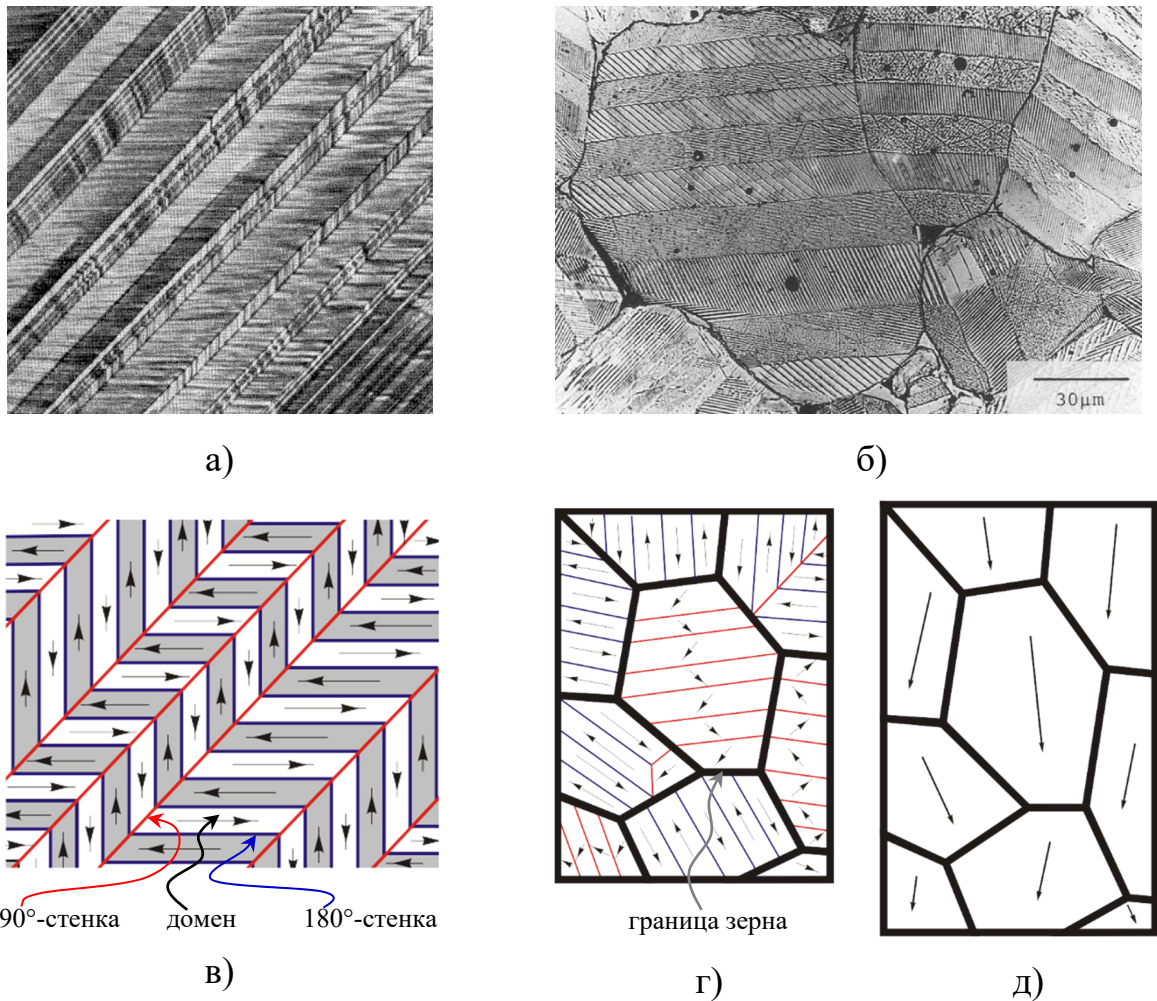


Рисунок 1.8 – Доменная структура в BaTiO₃: а) микрофотография монокристалла [251], б) микрофотография поликристалла [130], в) схематическое изображение монокристаллической доменной структуры с двумя типами доменных стенок, г) схематическое изображение поликристаллической доменной структуры до поляризации, д) схематическое изображение поликристаллической доменной структуры после поляризации

В неполяризованном состоянии (например, после спекания) у поликристаллической сегнетопьезокерамики наблюдается ярко выраженная полидоменная структура кристаллитов (Рисунок 1.8г), которая в результате глубокой начальной поляризации под действием электрического поля (многократно превышающего коэрцитивное) переходит в монодоменную (Рисунок 1.8д). В силу произвольности кристаллографических ориентаций кристаллитов в поликристалле наблюдаются некоторые отклонения поляризации отдельных кристаллитов от результирующей остаточной поляризации поликристалла (см. Рисунок 1.8д). Вследствие чего наблюдается отличие в поляризации насыщения поликристалла и спонтанной поляризации кристаллита.

Для нетекстурированных поликристаллов тетрагональной структуры поляризация насыщения $P_{sat} = 0,83 P_s$ [270, 309], деформация насыщения при растяжении $\varepsilon_{sat}^{tens} = 0,55 \varepsilon_s$ [276, 309], деформация насыщения при сжатии $\varepsilon_{sat}^{tens} = 0,40 \varepsilon_s$ [276, 309].

При рассмотрении поведения монокристалла BaTiO_3 в более широком диапазоне температур кроме тетрагональной возникает ромбоэдрическая и орторомбическая фазы (Рисунок. 1.3). В общем случае при моделировании необходимо учитывать возможность возникновения следующих доменных стенок [343]:

- В *тетрагональной* структуре: 180° - и 90° -доменные стенки;
- В *ромбоэдрической* структуре: 180° -, 109° - и 71° -доменные стенки;
- В *орторомбической* структуре: 180° -, 120° -, 90° - и 60° -доменные стенки.

Простейшие варианты совместных конфигураций двухвариантных доменов для перечисленных выше случаев доменных стенок показаны на Рисунке 1.9.

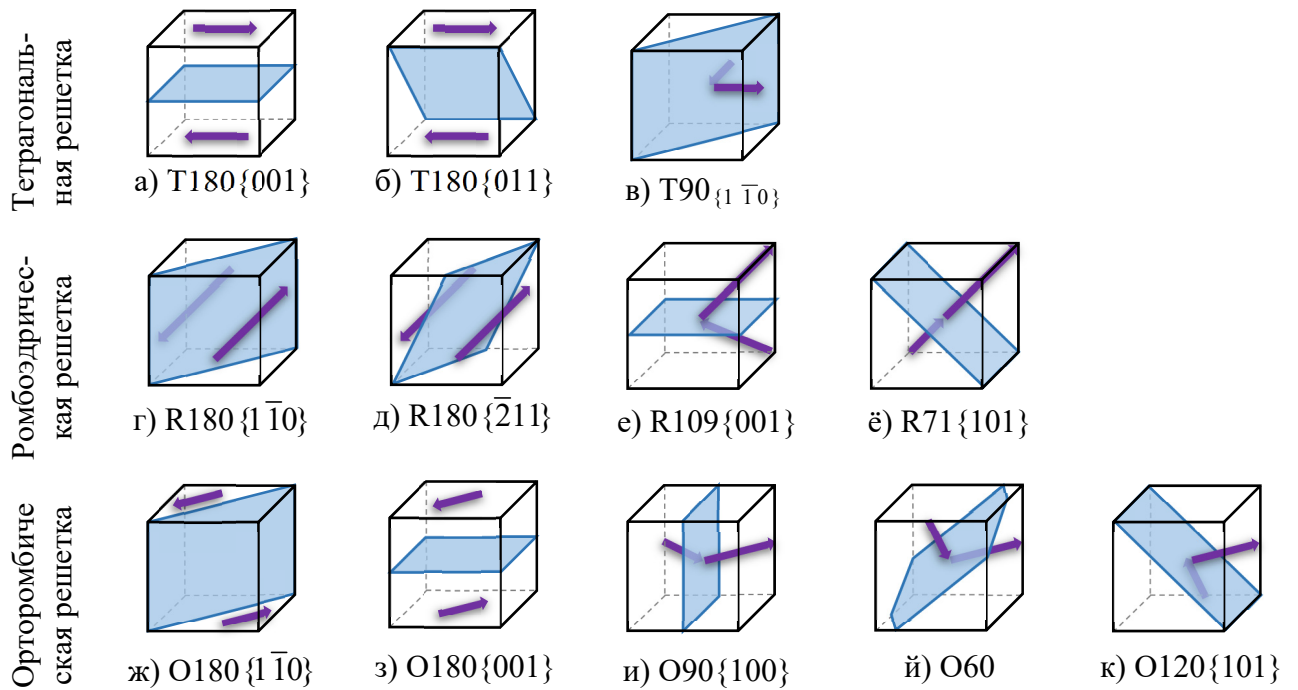


Рисунок 1.9 – Характерные ориентации доменных стенок для BaTiO_3 : а) тетраг., 180° , $\{001\}$; б) тетраг., 180° , $\{011\}$; в) тетраг., 90° , $\{1\bar{1}0\}$; г) ромбоэдр., 180° , $\{1\bar{1}0\}$; д) ромбоэдр., 180° , $\{2\bar{1}1\}$; е) ромбоэдр., 109° , $\{001\}$; ё) ромбоэдр., 71° , $\{101\}$; ж) орторомб., 180° , $\{1\bar{1}0\}$; з) орторомб., 180° , $\{001\}$; и) орторомб., 90° , $\{100\}$; й) орторомб., 60° , $\{1\bar{1}\bar{1}\}$; к) орторомб., 120° , $\{101\}$ [343]

В реальности реализуются сложные многослойные ламинатные конфигурации доменной структуры [320, 363, 463]. При анализе возможных конфигураций доменной структуры необходимо выполнить условия совместности (на электрически нейтральной) доменной стенке, разделяющей i -ый и j -ый домены, которые при малых деформациях в условиях отсутствия внешнего воздействия имеют вид [390, 435, 463]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i - \boldsymbol{\varepsilon}_j = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{a}), \quad (1.2)$$

$$(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (1.3)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ - тензор деформации, $\mathbf{P}$ - вектор поляризации, $\mathbf{n}$ - вектор нормали к доменной стенке, $\mathbf{a}$ - произвольный вектор. Уравнение (1.2) получено следствием общего уравнения совместности деформаций $\mathbf{n} \times (\boldsymbol{\varepsilon}_i - \boldsymbol{\varepsilon}_j) \times \mathbf{n} = 0$.

Формирование доменной структуры сопровождается деформацией элементарных ячеек. Механических напряжений на 180° -стенке не возникает, поскольку соседние 180° -домены обладают одинаковой осевой деформацией. Однако в окрестности 90° -стенки, наклоненной под углом 45° к осям совмещаемых доменов, возникают значительные напряжения, поскольку совмещение соседних 90° -доменов при сохранении сплошности кристаллической структуры сопровождается значительными деформациями ячеек, входящих в доменную стенку. Это вызывает концентрацию напряжений в окрестности 90° -стенки, что может приводить к появлению микротрещин и даже разрушению образца [6].

Одним из основных механизмов переполаризации монокристаллов под действием внешних нагрузок является образование зародышей клиновидной формы на существующих доменных стенках [360], приводящее к боковому движению 180° доменных границ [49] (см. Рисунок 1.10). В результате зарождения, двумерного роста, слияния зародышей (ступенчатых доменов обратной начальной поляризации), вызывающего движение доменных стенок и приводящего к увеличению объема доменов с поляризацией, близкой к сонаправленной с внешним воздействием, происходит изменение поляризации монокристалла. Толщина клиновидного зародыша доменов, соответствующая величине смещения стенки, составляет порядка одной

элементарной ячейки. Образование зародышей доменов происходит на краях монокристалла или на пересечении движущейся доменной стенки с другими доменными стенками [360], а также в невозмущенных областях стенки [434].

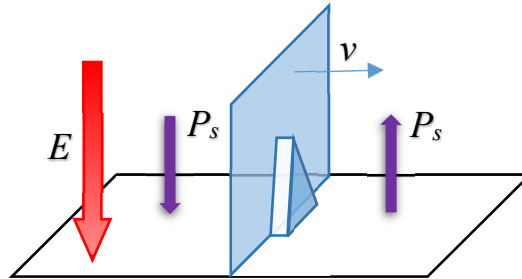


Рисунок 1.10 – Схематическое изображение движения 180° доменной стенки путем возникновения зародыша клиновидной формы

Таким образом, изменение макроскопической поляризации в сегнетоэлектростатических материалах осуществляется путем перемещения доменных стенок. Процессы переключения доменов и движение доменных стенок являются *необратимыми* и сопровождаются процессами *диссипации* энергии. Поэтому при разработке математических моделей сегнетоэлектростатических материалов принципиально учитывать подобные эффекты.

Микроструктурная инженерия, включающая в себя *доменную инженерию* (создание системы доменов с нужными геометрическими параметрами), текстурирование и создание гетерогенных структур, наряду с композиционной инженерией, основанной на использовании составов вблизи *морфотропной фазовой границы* и введении примесных добавок (допинг), являются основными направлениями улучшения электромеханических свойств сегнетоэлектростатических материалов [315, 317].

1.1.5 Морфотропная фазовая граница

Прогресс в развитии сегнетопьезокерамических материалов связан с открытием в 1950х годах экстремальных значений диэлектрической проницаемости и пьезоэлектрических параметров ЦТС вблизи морфотропной фазовой границы (МФГ). Аббревиатура ЦТС (PZT) обозначает бинарный твердый раствор цирконата-титаната свинца $(1-x)\text{PbZrO}_3 - x\text{PbTiO}_3$ ($0 < x < 1$). Его химическая формула имеет вид $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ [79].

Фазовая диаграмма «молярная концентрация x – температура T » твердого раствора ЦТС показана на Рисунке 1.11. Синяя линия соответствует границе между высокотемпературной кубической параэлектрической фазой и низкотемпературными сегнетоэлектрическими фазами. МФГ, обозначенная на Рисунке 1.11 красной линией, разделяет область сегнетоэлектрических фаз на две части: *тетрагональную* сегнетоэлектрическую фазу в правой нижней части диаграммы (со стороны преобладания Ti) и *ромбоэдрическую* сегнетоэлектрическую фазу в левой нижней части диаграммы (со стороны преобладания Zr). При комнатной температуре МФГ проходит в области $x \approx 47 \div 48\%$ (Ti/Zr $\approx 47/53 \div 48/52$) [270]. В области малых x : $0 < x < 6\%$ твердый раствор переходит в антисегнетоэлектрическую орторомбическую фазу (отделенную от ромбоэдрической фазы на Рисунке 1.11 серой линией), не обладающую заметным пьезоэлектрическим эффектом.

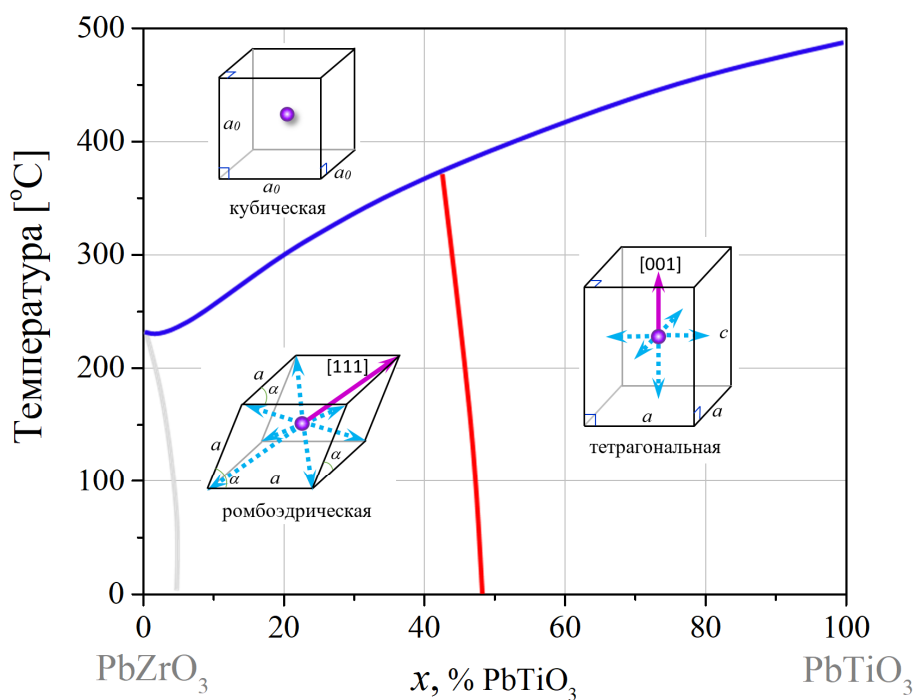


Рисунок 1.11 – Схематическое представление фазовой x - T -диаграммы системы ЦТС (твердого раствора $(1-x)\text{PbZrO}_3 - x\text{PbTiO}_3$) [270]

Данные рентгеноструктурного анализа [299, 450] и нейтронографии [483] показали, что при изменении химического состава с ростом x при переходе через МФГ происходит постепенная (в пределах 10% изменения x) смена фазового состава в сторону увеличения доли тетрагональной фазы c_t (см. Рисунок 1.12).

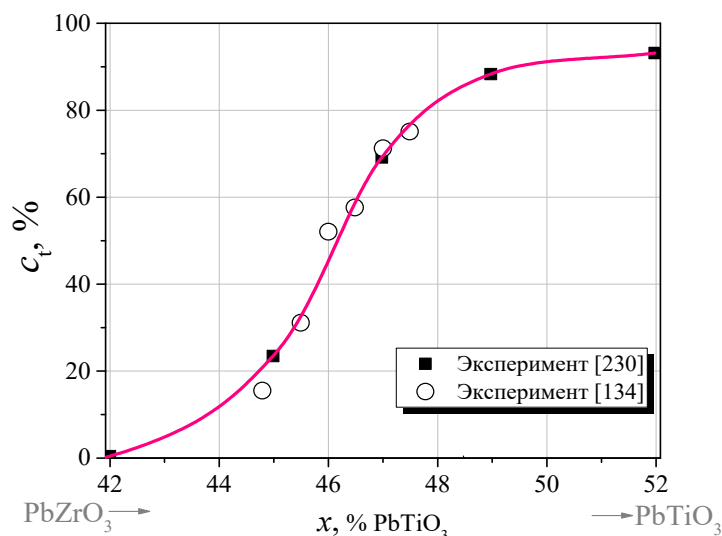


Рисунок 1.12 – Зависимость доли тетрагональной фазы от состава бинарной системы ЦТС (твердого раствора $(1-x)$ PbZrO_3 — x PbTiO_3) [299, 450]

Экстремальные свойства электромеханического отклика вблизи МФГ наиболее полно характеризует зависимость (планарного) коэффициента электромеханической связи k_p [270] (определяющего, какая часть электрической энергии может быть преобразована в механическую, и вычисляемого как корень из отношения пьезоэлектрического модуля к произведению упругой податливости на диэлектрическую проницаемость) от доли PbTiO_3 в твердом расплаве $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$, представленная на Рисунке 1.13.

Существует ряд объяснений появления максимума характеристик электромеханического отклика вблизи МФГ. В качестве одной из причин рассматривалось уменьшение спонтанной деформации элементарной ячейки при приближении к МФГ [79]. Также ранее на основе экспериментальных исследований структуры решетки выдвигалась гипотеза, что ромбоэдрическая и тетрагональная фазы разделены узкой областью промежуточных моноклинных фаз [235, 371–373], что способствует облегчению поворота вектора поляризации. Однако недавние эксперименты не подтвердили это предположение [299, 461]. В данной работе на основе результатов вычислительных экспериментов с использованием микромеханической модели с учетом смеси тетрагональной и ромбоэдрических фаз также анализируется возможность описания появления максимума.

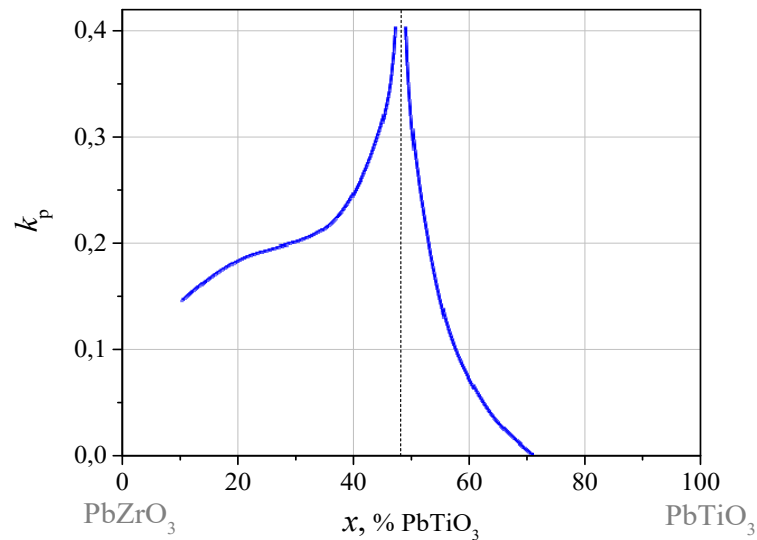


Рисунок 1.13 – Зависимость коэффициента электромеханической связи k_p от состава бинарной системы ЦТС (твердого раствора $(1-x)\text{PbZrO}_3 — x\text{PbTiO}_3$) [270]

1.2 Экспериментальные основы

Результаты экспериментальных исследований являются основой для разработки и верификации феноменологических и микроструктурных моделей сегнетоэлектродупругого материала, а также идентификации параметров разрабатываемых моделей. Обзор представленных ниже результатов основан на экспериментальных работах: D. Zhou, M. Kamlah [502], T. Fett et al [214–216] для PZT PIC151, C.S. Lynch [341] для 8/65/35 PLZT, J.E. Huber et al. [255, 326, 433] для PZT-5H, D. Fang et al. [208] для PZT-51, P.J. Chen et al. [171] для PZT 65/35.

1.2.1 Электрическое воздействие

Характерные кривые диэлектрического и электромеханического гистерезиса для поликристаллической мягкой сегнетопьезокерамики при одноосном биполярном циклическом электрическом (квазистатическом) нагружении из натурального (неполяризованного) состояния при комнатной температуре показаны на Рисунках 1.14. и 1.15.

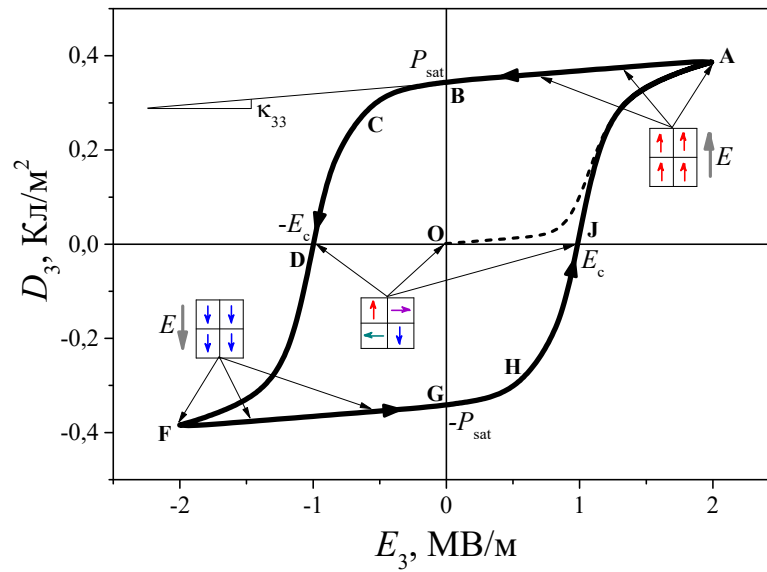


Рисунок 1.14 – Кривая диэлектрического гистерезиса [502]

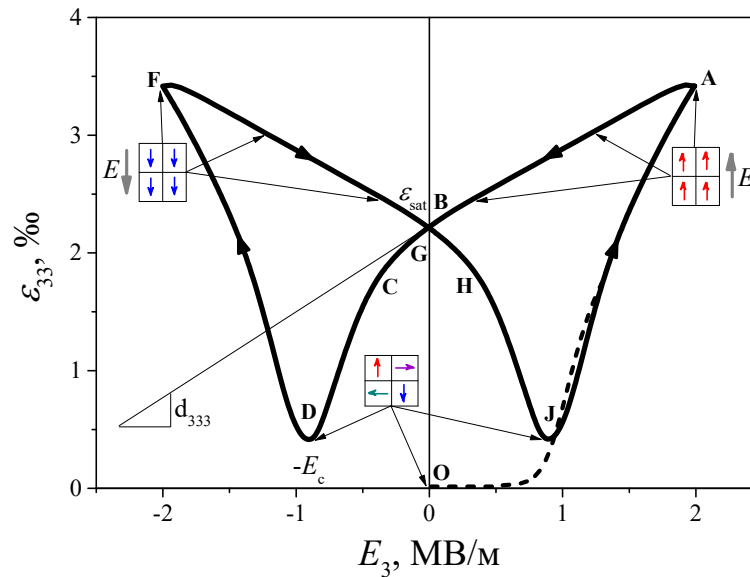


Рисунок 1.15 – Кривая электромеханического гистерезиса (петля типа «бабочка» продольной деформации) [502]

В начальном (неполяризованном) состоянии (точка **O** на Рисунках 1.14 и 1.15) кристаллиты и домены поликристаллической сегнетопьезокерамики ориентированы случайным образом [6, 49, 276]. При этом свойства материала, содержащего огромное количество кристаллитов и доменов, на макроуровне близки к *изотропным* [6, 49, 276]. Макроскопическая поляризация и деформация не наблюдаются, поскольку спонтанные поляризации и деформации доменов взаимно компенсируются. При

приложении достаточно малого электрического поля материал будет демонстрировать линейное обратимое диэлектрическое поведение (см. начальный участок пунктирной кривой на Рисунках 1.14 и 1.15).

При дальнейшем увеличении электрического поля после того, как оно достигает так называемого коэрцитивного поля E_c , начинается процесс переключения доменов, сопровождающийся изменением направления спонтанной поляризации в ячейке и приводящий к стремительному росту поляризации и деформации на макроуровне. При этом изменение вектора электрической индукции и тензора деформации связано как с *необратимыми* процессами переключения (вследствие увеличения числа доменов, переориентированных вдоль направления наиболее близкого к направлению поля), так и с увеличением *обратимых* составляющих в соответствии с обратным пьезоэлектрическим эффектом. Поворот векторов спонтанной поляризации ячеек под действием электрического поля происходит в строго определенных дискретных направлениях в соответствии с их кристаллографической структурой и фазой. В результате начальной поляризации керамики углы между осями доменов и направлением поля значительно уменьшаются по сравнению с начальным неполяризованным состоянием, но остаются отличными от нуля и укладываются в некотором конусе [6, 508].

При значительном уровне электрического воздействия (см., например, состояние **A** на Рисунках 1.14 и 1.15), когда все возможности для переключения доменов исчерпаны и процессы переключения завершены, наблюдается состояние *насыщения*. Реакция материала соответствует поведению одиночного домена. Изменение электрической индукции и деформации с ростом электрического поля становится линейным и обратимым [6, 49, 276].

При *разгрузке* до нуля (состояние **B** на Рисунках 1.14 и 1.15) приобретенная ориентация доменов в большинстве своем сохраняется, что обеспечивает практически неизменным накопленный уровень остаточной поляризации P_{sat} и деформации ε_{sat} . Вектор остаточной поляризации и тензор остаточной деформации определяются как осреднение векторов спонтанных поляризаций и тензоров спонтанной

деформации элементарных ячеек, входящих в представительный объем материала [6]. В технических приложениях, как правило, используется близкое к линейному пьезоэлектрическое поведение для электрических полей с малой амплитудой в окрестности точки **В**. Для его реализации на практике принципиально необходим процесс предварительной начальной поляризации (**ОАВ**). Наклон касательной к кривой диэлектрического гистерезиса в точке **В** определяет диэлектрическую проницаемость κ_{33} : $D_3 = \kappa_{33}E_3 + P_{sat}$. Наклон касательной к кривой электромеханического гистерезиса в точке **В** определяет пьезоэлектрический коэффициент d_{333} : $\varepsilon_{33} = d_{333}E_3 + \varepsilon_{sat}$.

При воздействии электрического поля в направлении, противоположном первоначальному, при достижении уровня **С** (см. Рисунки 1.14 и 1.15) начинается процесс обратного переключения (*электрической деполяризации*), приводящий к уменьшению степени упорядоченности доменов, что приводит в результате к уменьшению уровня остаточной поляризации и деформации.

В точке **Д** (при $E = -E_c$) наблюдается полная разориентация доменов, аналогичная начальному неполяризованному состоянию. Электрическая деполяризация приводит к потере обратного пьезоэлектрического эффекта. Поляризация становится равной нулю, а деформация проходит через резкий минимум.

При дальнейшем уменьшении электрического поля процесс переключения доменов снова достигает насыщения. В состоянии **Е** все домены стремятся выровняться вдоль направления, близкого к направлению действующего (отрицательного) поля. Результирующая поляризация в **Е** имеет направление, противоположное реализованному в точке **А**. Остаточная деформация в **Е** совпадает с наблюдаемой в **А**.

При дальнейшем изменении электрического поля в соответствии с программой нагружения **FGHJA** в материале наблюдаются процессы микроструктурных изменений, аналогичные произошедшим на участке **ABCD**. Идеализированная петля диэлектрического гистерезиса бездефектного материала обладает центральной симметрией $D_3(-E_3) = -D_3(E_3)$, а идеализированная петля электромеханического гистерезиса является симметричной относительно вертикальной оси

$\varepsilon_{33}(-E_3) = \varepsilon_{33}(E_3)$. Быстрая стабилизация формы петель диэлектрического и электро-механического гистерезиса наблюдается после нескольких циклов (например, 6 для PIC151 [502], стр. 44).

Следует отметить, что в качестве коэрцитивного поля E_c для сегнетопьезокерамики обычно определяют значение электрического поля, при котором происходит наиболее интенсивный процесс переключения. Коэрцитивное поле чувствительно к температуре, механическим напряжениям, частоте циклического нагружения.

Как видно из вышеприведенного описания представленных гистерезисных кривых, *нелинейные* свойства сегнетоэлектроупругого материала определяются процессами *переключения доменов* и динамикой движения *доменных стенок*.

На практике для анализа кривых диэлектрического гистерезиса используется электрическая схема Сойера-Тауэра [6, 112, 502] и ее модификации [210, 502].

Результаты экспериментов D. Zhou [502], представленные на Рисунках 1.14-1.15, производились на призматических первоначально неполяризованных образцах размером 5 мм×5 мм×15 мм, выполненных из мягкой пьезокерамики PIC151 при квазистатическом нагружении амплитудой 2 МВ/м и скоростью нагружения (0,8 МВ/(м·с), соответствующей 0,01 Гц. Аналогичные результаты для 8/65/35 PLZT представлены в работе C.S. Lynch [341].

Кривая электромеханического гистерезиса для *поперечной* деформации (Рисунок 1.16) имеет форму, близкую к полученной путем отражения относительно горизонтальной оси кривой гистерезиса для *продольной* деформации (Рисунок 1.15) с коэффициентом масштабирования в вертикальном направлении $\frac{1}{2}$. В работах [167, 341] отмечается, что возникающие в процессе поляризации остаточные деформации можно приближенно считать удовлетворяющими условию несжимаемости ($\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{33} + 2 \varepsilon_{11} \approx 0$). В частности, в работе [167] указано, что относительная разница объемов в поляризованном и неполяризованном состояниях для керамики PZT 65/35 составляет 0,0135 %.

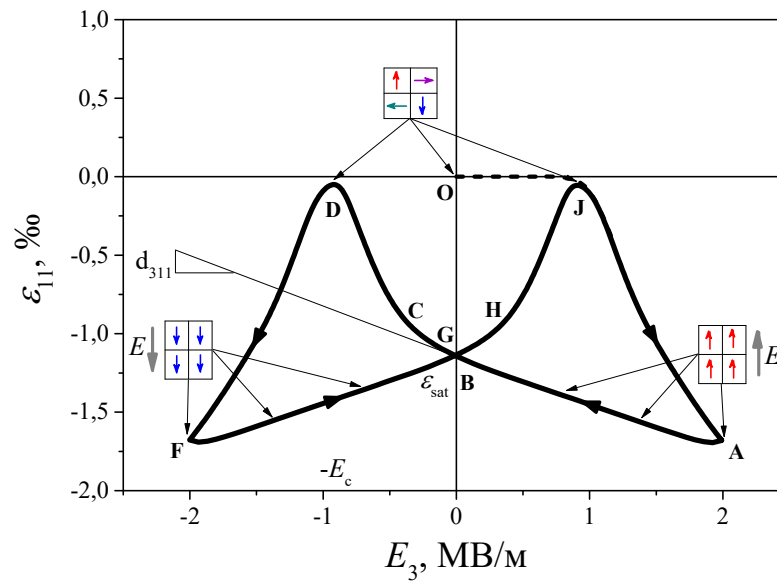


Рисунок 1.16 – Кривая электромеханического гистерезиса (петля типа «бабочка» поперечной деформации) [502]

У монокристаллов, в отличие от рассмотренных выше поликристаллов, при анализе петель диэлектрического гистерезиса (Рисунок 1.17) наблюдаются резкие переходы в монокристаллическое состояние, низкое значение коэрцитивного поля и более высокое значение остаточной поляризации [270]. Наличие большого числа ориентированных произвольным образом кристаллитов в поликристаллической сегнето-пьезокерамике приводит к многостадийности процесса переключений, и как следствие этого, на макроуровне наблюдаются сглаженные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 1.17).

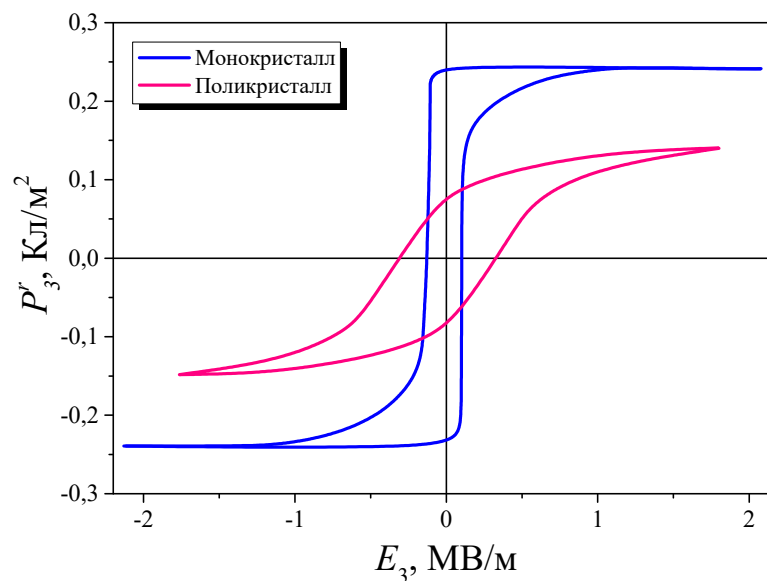


Рисунок 1.17 – Сравнение кривых диэлектрического гистерезиса для монокристалла BaTiO₃ ориентации [100] и поликристаллической пьезокерамики [270]

Добавление в PZT, представляющего собой твердый раствор $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$, небольших количеств модифицирующих добавок позволяет изменять в широком диапазоне диэлектрические и пьезоэлектрические свойства. Получающиеся сегнето-пьезокерамики условно можно разделить на сегнетомягкие и сегнетожесткие керамики. Сравнение кривых диэлектрического гистерезиса для сегнетомягких и сегнетожестких керамик представлено на Рисунке 1.18.

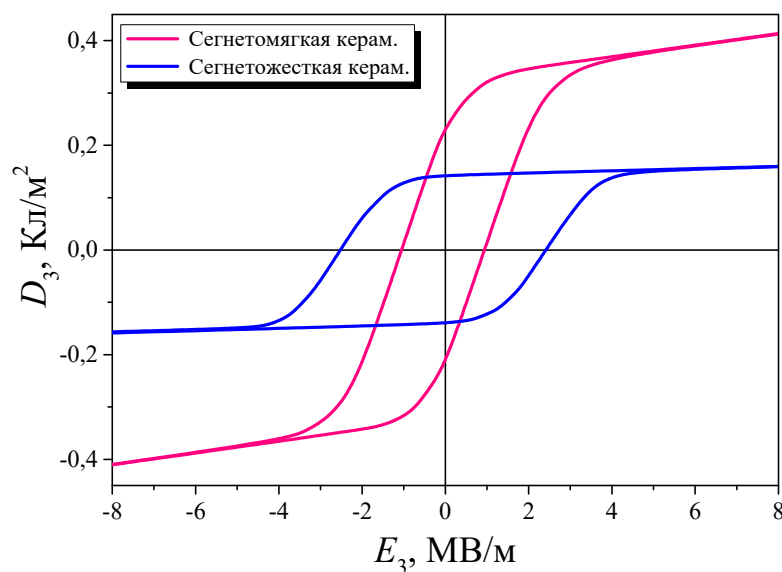


Рисунок 1.18 – Схематическое представление кривых диэлектрического гистерезиса для сегнетомягкой и сегнетожесткой пьезокерамики [451]

Сегнетомягкие пьезокерамики получают путем введения донорных добавок путем создания вакансий атомов металла (катионные вакансии) в кристаллической структуре (например, заменой Ti^{4+} на Nb^{5+} или Pb^{2+} на La^{3+}) [112]. Они характеризуются высокими значениями диэлектрической проницаемости и пьезоэлектрических модулей, относительно низким значением коэрцитивного поля E_c , им свойственны повышенные диэлектрические потери. Сегнетомягкие пьезокерамики используются преимущественно в чувствительных несиловых элементах.

Сегнетожесткие пьезокерамики получают путем введения акцепторных добавок путем создания вакансий по кислороду (анионные вакансии) в кристалли-

ческой структуре (например, заменой Ti^{4+} на Fe^{2+} или Pb^{2+} на Na^+) [112]. Они характеризуются низкими значениями диэлектрической проницаемости и пьезоэлектрических модулей, высоким значением коэрцитивного поля E_c . Сегнетожесткие пьезокерамики используются преимущественно в нечувствительных силовых элементах. Введение примесей приводит к созданию заряженных дефектов, играющих роль локальных препятствий при движении доменных стенок, что оказывает влияние на коэрцитивное поле и другие электромеханические свойства.

Нелинейное поведение сегнетопьезокерамики чувствительно к уровню температуры [6, 250, 312, 474]. С ее ростом у поликристаллической сегнетопьезокерамики уменьшается коэрцитивное поле и остаточная поляризация в цикле (Рисунок 1.19) [312]. Зависимость указанных параметров от температуры для мягких сегнетопьезокерамик в рассматриваемом диапазоне температур близка к линейной [6, 312, 474].

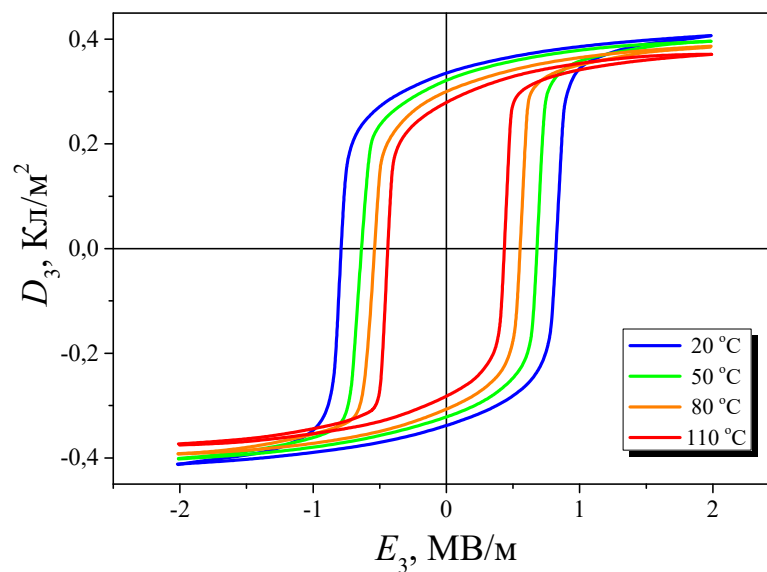


Рисунок 1.19 – Влияние температуры на диэлектрический гистерезис для поликристаллической пьезокерамики [312]

В работе [419] исследовалось влияние предыстории на изменение линейных модулей (диэлектрической проницаемости κ_{33} , пьезоэлектрического коэффициента d_{333} и модуля Юнга). Для этого задавалось одностороннее (однополярное) циклическое электрическое нагружение с нарастающей от цикла к циклу амплитудой и

анализировалось изменение наклонов кривых циклического нагружения ($D_3(E_3)$ на Рисунке 1.20а и $\varepsilon_{33}(E_3)$ на Рисунке 1.20б) в процессе циклирования. Было установлено, что предыстория нагружения практически не влияет на κ_{33} (Рисунок 1.20в) и наблюдается линейная зависимость d_{333} от остаточной поляризации P^r (Рисунок 1.20г).

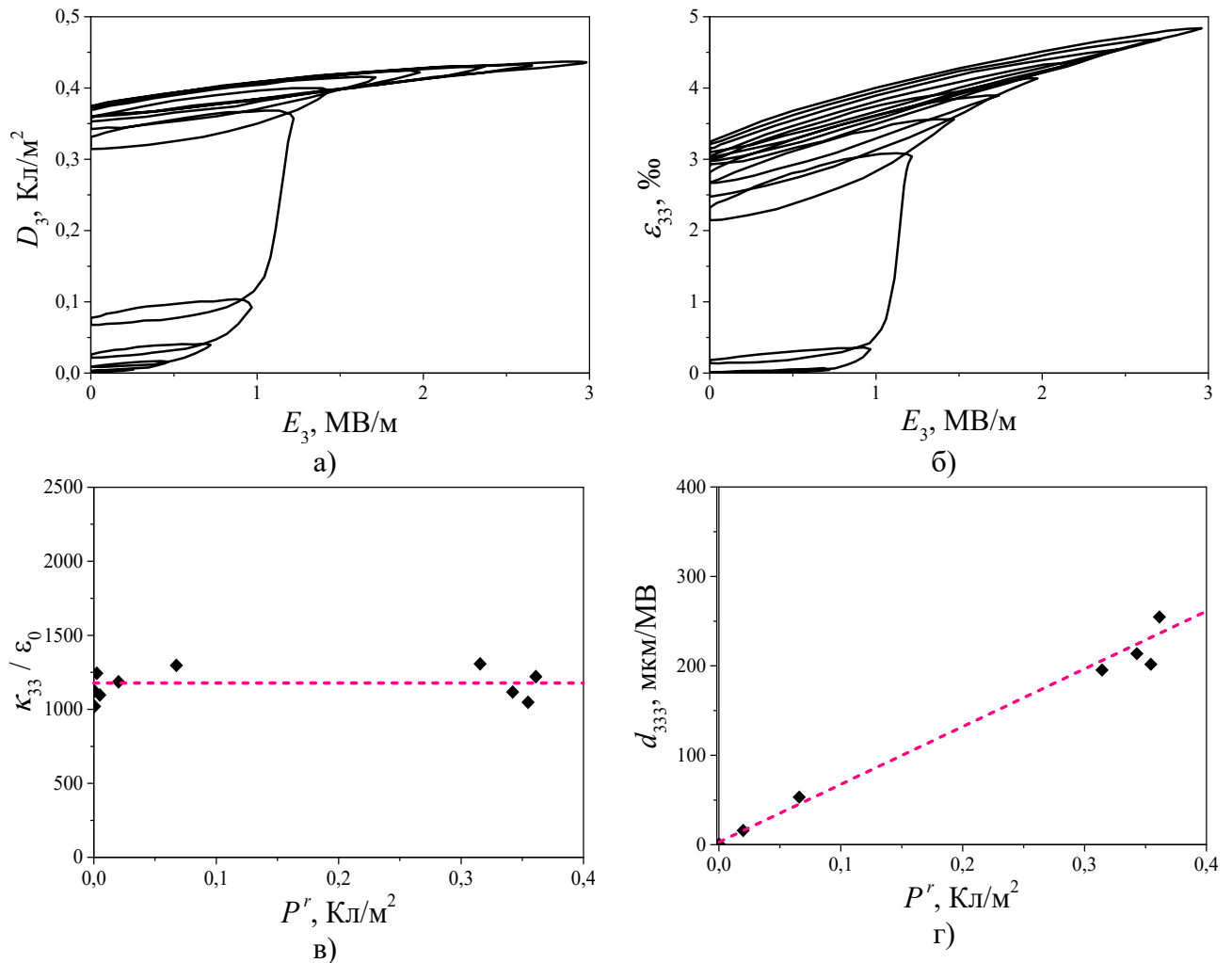


Рисунок 1.20 – Кривые а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса при однополярном циклическом нагружении с возрастающей амплитудой [419]. Зависимости в) диэлектрической проницаемости κ_{33} , г) пьезоэлектрического коэффициента d_{333} от поляризации P^r

При постоянных электрических и механических нагрузках в сегнетопьезокерамических материалах наблюдаются изменения *во времени* остаточной электрической индукции и остаточной деформации (*ползучесть*) даже при комнатной температуре. В опытах Liu, Huber [326] (см. Рисунок 1.21) при нагружении образцов

поликристаллической сегнетомягкой предварительно неполяризованной пьезоке-
рамики PZT-5Н постоянным электрическим полем в течение 300 с производился
анализ изменения деформации и электрического смещения во времени при различ-
ных уровнях постоянного электрического поля в диапазоне от $0,5 E_c$ до $1,5 E_c$. Уста-
новлено, что наиболее интенсивный рост остаточной поляризации и деформаций
происходит при нагрузках вблизи коэрцитивного поля. В работе [326] предложена
степенная зависимость скорости остаточной поляризации от уровня электриче-
ского поля $\dot{P}_3^r = (E/E_c)^m h(P_3^r)$ с достаточно высоким показателем $m = 22$.

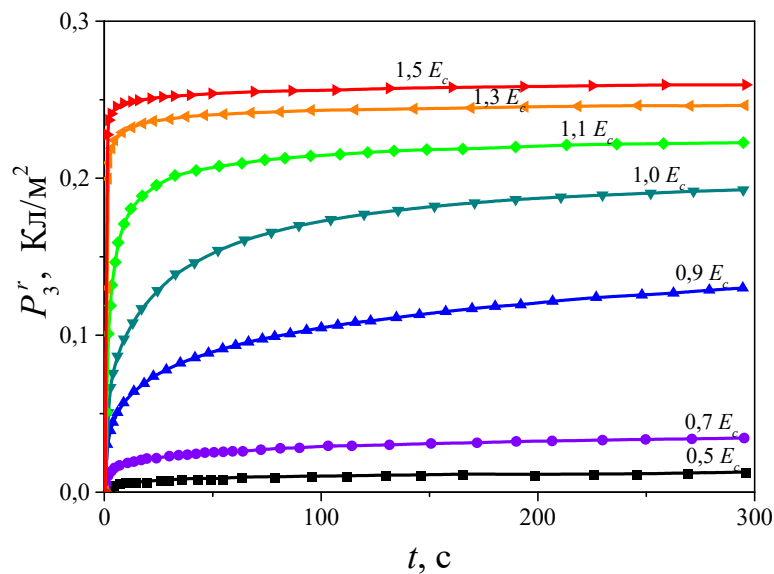


Рисунок 1.21 – Изменение поляризации во времени (ползучесть) при постоянном электриче-
ском поле различной интенсивности [326]

Экспериментальное исследование *реономных эффектов* в сегнетоэлектро-
упругих материалах включает также прямое изучение времени переполаризации и
динамики доменной структуры [353], анализ процессов неустановившейся ползу-
чести деформаций [216, 234, 244, 325, 454, 502, 506] и поляризации [244, 325, 326,
502, 506] на макроуровне, релаксацию напряжений [205] и электрического поля
[21], чувствительность кривых диэлектрического [468, 502, 508] (см. Рисунок 1.22)
и электромеханического гистерезиса (в форме бабочки) [468, 502, 508] к частоте
внешнего воздействия. Трудности исследования неравновесных явлений в полидо-
менных сегнетоэлектроупругих материалах связаны с их неоднородностью вслед-

ствие наличия доменных стенок, обладающих множеством метастабильных состояний, отделенных друг от друга и от основного равновесного состояния большими энергетическими барьерами из-за наличия дефектов. В результате одновременно наблюдаются как быстрые процессы переполаризации, так и медленные термоактивационные процессы [21].

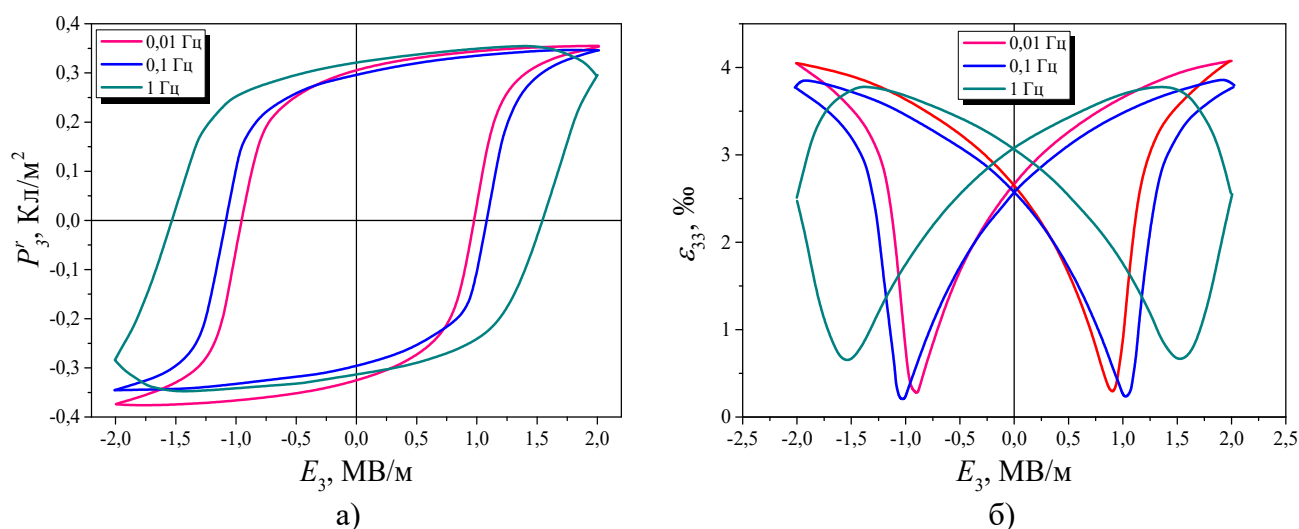


Рисунок 1.22 – Кривые а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса при различных скоростях циклического нагружения: 0,01 Гц (0,08 МВ/(м с)); 0,1 Гц (0,8 МВ/(м с)); 1 Гц (8 МВ/(м с)) [508]

Наиболее трудоемкими являются экспериментальные исследования поведения сегнетоупругих материалов при *многоосном непропорциональном нагружении*. В ряде работ, например, в [255] для PZT-5Н, в [433] для PZT-4D, PZT-5Н и BaTiO₃, в [503, 507] для PZT PIC151 представлены результаты экспериментов по определению кривых переполаризации и поверхности переключения после предварительной поляризации неполяризованных пластин. После поляризации из пластины под различными углами к направлению первоначальной поляризации вырезались призматические образцы меньшего размера, которые подвергались последующему электрическому нагружению вплоть до уровня начальной поляризации. Зависимости изменения поляризации на втором этапе двухлучевого нагружения показаны на Рисунке 1.23а для различных путей непропорционального нагружения, определяемых углом отклонения от направления начальной поляризации (вдоль E_3). При значительных углах от-

клонения пути вторичного нагружения ($\geq 90^\circ$) наблюдается стремительный рост изменения поляризации. При 180° изменение достигает удвоенного значения начальной поляризации.

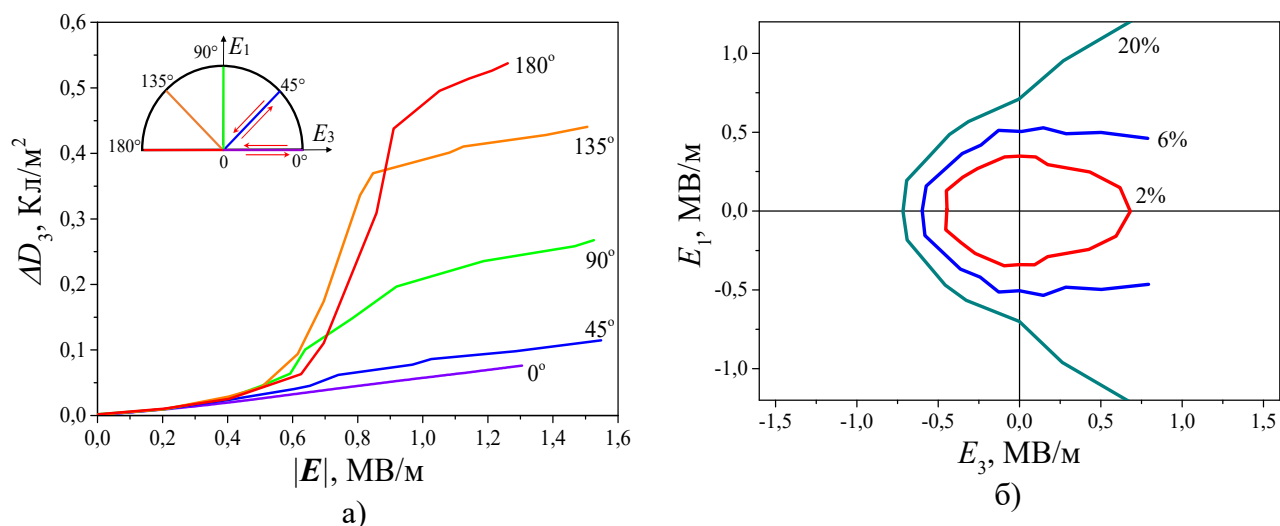


Рисунок 1.23 – Результаты опытов на многоосное непропорциональное нагружение: а) изменение поляризации при различных путях нагружения, б) поверхности переключения после предварительной поляризации вдоль E_3 (показаны поверхности для различных допусков на изменение остаточной поляризации: 2%, 6%, 20%) [255]

Двумерное сечение поверхности переключения после предварительного нагружения, полученное на основе серии двухлучевых радиальных нагружений на плоскости компонент вектора интенсивности электрического поля E_3 – E_1 с шагом в 15° в пределах от 0° до 180° , показано на Рисунке 1.23б. На первом этапе нагружения (при начальной поляризации) прикладывалось электрическое поле $E_3 = 1,5$ МВ/м и $E_1 = 0$ МВ/м. После разгрузки и последующего нагружения под углом к начальному направлению нагружения фиксировался момент изменения поляризации на заданный допуск. На Рисунке 1.23б показаны кривые переключения для различных допусков на изменение остаточной поляризации: 2%, 6%, 20%. Кривая при минимальном допуске в 2% наиболее точно отражает начало процессов переключения без учета влияния упрочнения и насыщения. Начальная поверхность переключения имеет форму окружности. Предварительная поляризация приводит к искажению формы, связанному с увеличением размеров вдоль направления первичной поляризации и уменьшением размеров в поперечном направлении. Также наблюдается смещение центра поверхности переключения в направлении начальной поляризации,

что является основанием для использования моделей кинематического упрочнения для описания ее эволюции. Наличие поверхности переключения и аналогичный описанному выше характер изменения ее формы и центра в процессе нагружения подтверждается в опытах для различных сегнетоэлектродупругих материалов (Рисунок 1.24). Однако характер эволюции формы поверхности переключения для сегнетомягких пьезокерамик (PZT-5H и PIC151 на Рисунках 1.24в и г) отличается от сегнетожесткой пьезокерамики PZT-4D (Рисунок 1.24б) и BaTiO₃ (Рисунок 1.24а).

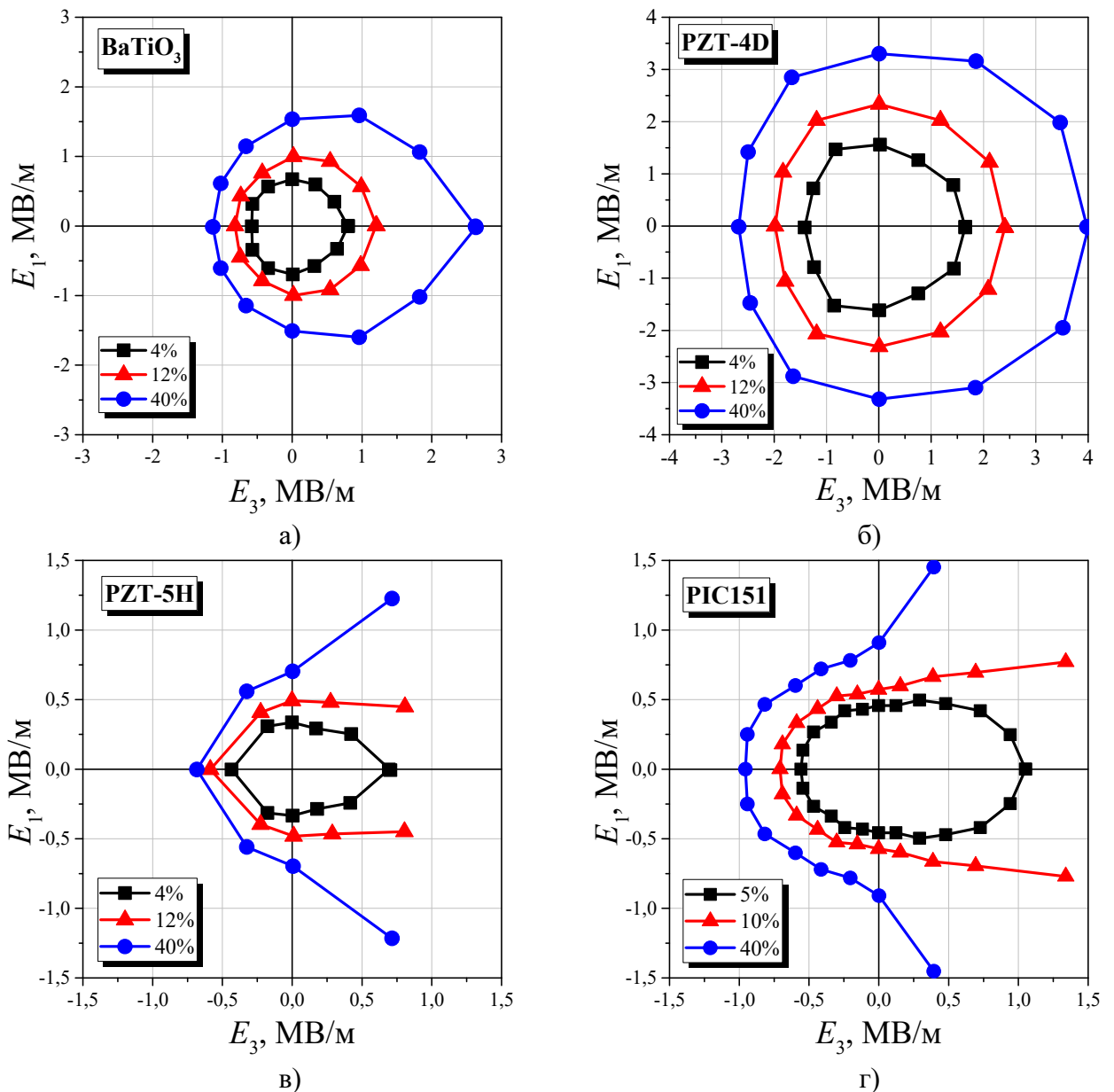


Рисунок 1.24 – Поверхности переключения после предварительной поляризации вдоль E_3 (при различных допусках на изменение остаточной поляризации) для различных материалов: а) BaTiO₃ [433], б) PZT-4D [433], в) PZT-5H [433], г) PIC151 [507]

Сегнетопъезокерамика подвержена действию деградации свойств [223] при циклическом изменении нагрузок (*усталость*), а также с течением времени даже в условиях отсутствия внешних нагрузок (*старение*). Наиболее характерным проявлением усталости является уменьшение уровня остаточной поляризации с ростом числа циклов (Рисунок 1.25а) [223]. Детальное представление эволюции кривых электромеханического и диэлектрического гистерезиса с ростом числа циклов при усталости показано на Рисунке 1.26 [339, 436]. Старение проявляется в искажении формы петли гистерезиса, понижении уровня остаточной поляризации при биполярном нагружении (Рисунок 1.25б) [223]. Также наблюдается *смещение петли гистерезиса* (Рисунок 1.25в) [478] вследствие наличия внутреннего поля смещения (как результат перераспределения зарядов в объеме или переориентации дипольных дефектов или инжекции через поверхностный диэлектрический зазор).

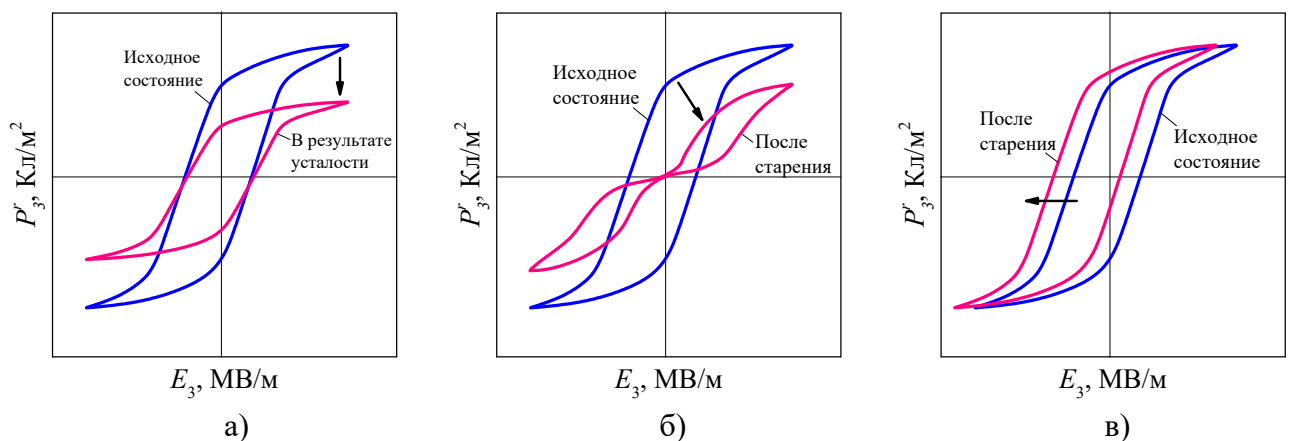


Рисунок 1.25 – Схематическое представление вариантов деградации сегнетопъезокерамики:

а) уменьшение высоты петли гистерезиса вследствие усталости [223], б) искажение формы петли гистерезиса вследствие старения [223], в) смещение петли гистерезиса [478]

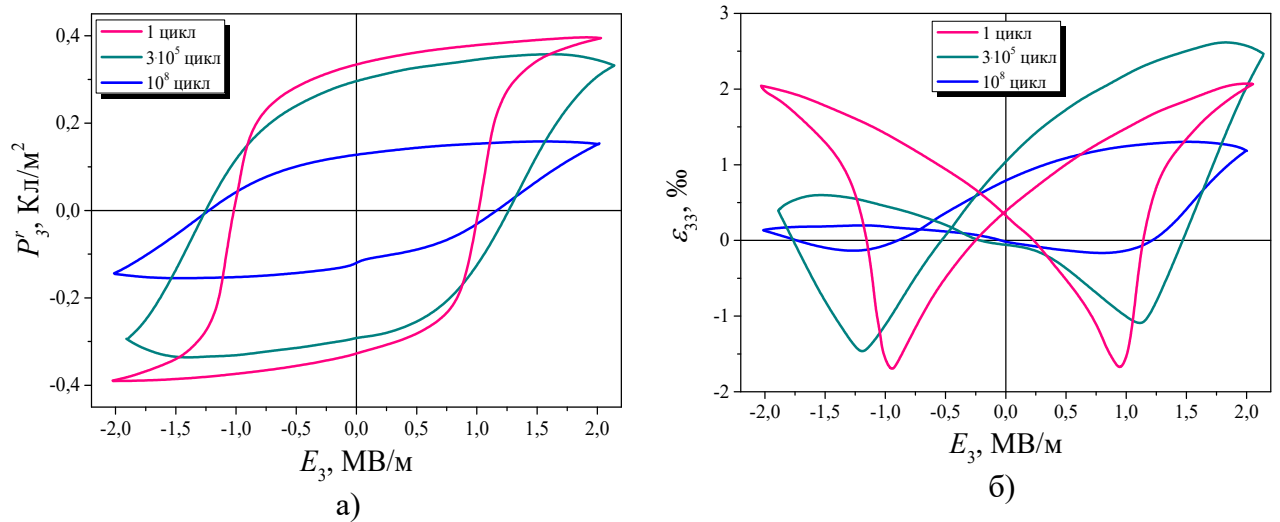


Рисунок 1.26 – Изменение кривых а) диэлектрического гистерезиса и б) электромеханического гистерезиса в процессе циклического нагружения [339, 436]

Основной причиной, вызывающей явления усталости и старения пьезокерамики, являются *точечные дефекты*, которые возникают вследствие легирования разновалентными ионами или попадания примесей из сырья, используемого для приготовления керамики [223]. Подвижные заряженные дефекты стабилизируют существующую доменную конфигурацию, создавая внутреннее поле смещения, которое противодействует изменению поляризации при приложении электрического поля. Carl and Härdtl [160] выделили три основных механизма деградации свойств материала: (i) объемный эффект (вызванный перераспределением зарядов в объеме элементарной ячейки вследствие возникновения диполя из-за дефекта, образованного акцепторным ионом и кислородной вакансией) [132], (ii) доменный эффект (связан с диффузией заряженных дефектов к доменным стенкам, приводящей к закреплению их позиций) [389], (iii) эффект интерфейса (включает диффузию ионов, вакансий или электронов к границам зерен или границам раздела разнородных фаз (электроды, вторые фазы) с образованием слоев пространственного заряда [458], а также возникновение микротрещин в области, близкой к электроду [223]).

1.2.2 Механическое воздействие

Характерные кривые деформирования при одноосном сжатии с последующей разгрузкой для поликристаллической мягкой сегнетопьезокерамики из натурального (неполяризованного) состояния при комнатной температуре показаны на Рисунках 1.27 и 1.28.

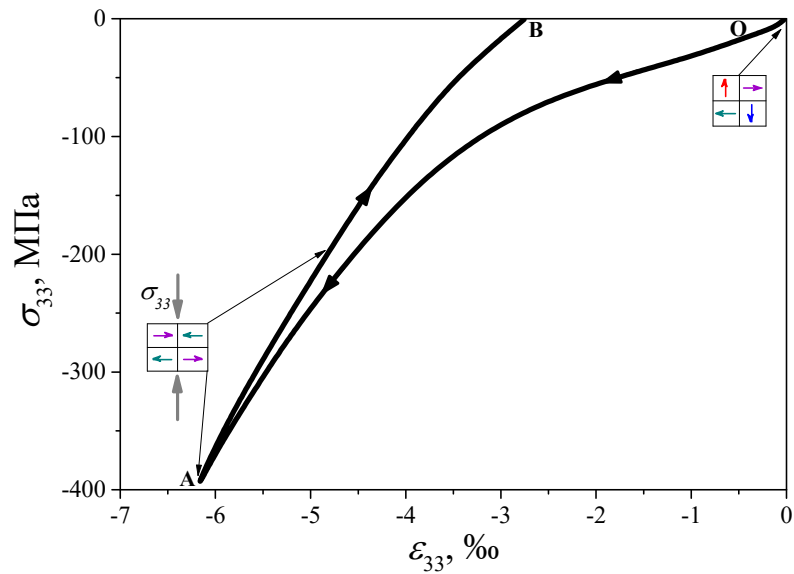


Рисунок 1.27 – Кривая деформирования для продольной деформации при сжатии неполяризованной керамики [502]

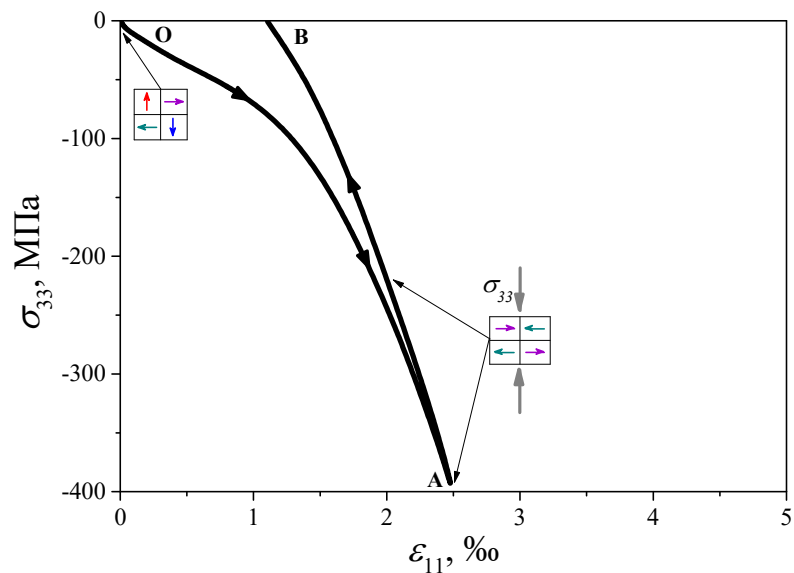


Рисунок 1.28 – Кривая деформирования для поперечной деформации при сжатии неполяризованной керамики [502]

В начальном (неполяризованном) состоянии (точка **О** на Рисунках 1.27 и 1.28) многочисленные кристаллиты и домены поликристаллической сегнетопъезокерамики ориентированы случайным образом. При приложении достаточно малого напряжения (в пределах нескольких МПа) сегнетопъезокерамический материал демонстрирует линейное обратимое механическое поведение.

При дальнейшем увеличении сжимающих напряжений при превышении некоторого (порогового) значения напряжений начинается процесс переключения, сопровождающийся изменением направления спонтанной поляризации в ячейках и приводящий к росту остаточной (пластической) деформации. Домены стремятся переориентироваться так, чтобы *c*-оси ячеек располагались в плоскости, перпендикулярной направлению действия нагрузки (см. Рисунок 1.7). Ориентация *c*-осей в пределах указанной плоскости остается произвольной. При этом остаточной поляризации не возникает, наблюдаются отрицательные продольные остаточные деформации и положительные остаточные поперечные деформации, одинаковые для любого направления в плоскости. Изменение тензора деформации связано как с *необратимыми* процессами переключения доменов, так и с увеличением *обратимых* составляющих.

При значительном уровне сжимающих напряжений (см., например, состояние **А** на Рисунках 1.18 и 1.19), когда все возможности для переключения доменов исчерпаны и процессы переключения завершены, наблюдается состояние *насыщения*. Изменение деформации с ростом напряжений становится линейным и обратимым.

При *разгрузке* до нуля (состояние **В** на Рисунках 1.27 и 1.28) приобретенная ориентация доменов в большинстве своем сохраняется, что обеспечивает практически неизменным накопленный уровень остаточной деформации.

Результаты экспериментов D. Zhou [502], представленные на Рисунках 1.27 и 1.28, производились на призматических образцах размером 5 мм×5 мм×15 мм, выполненных из мягкой пьезокерамики PIC151 при квазистатическом нагружении до -400 МПа и скоростью нагружения 5 МПа/с.

Результаты экспериментов [214] показали, что кривые деформирования при растяжении и сжатии при одних и тех же абсолютных значениях напряжений различны (Рисунок 1.29).

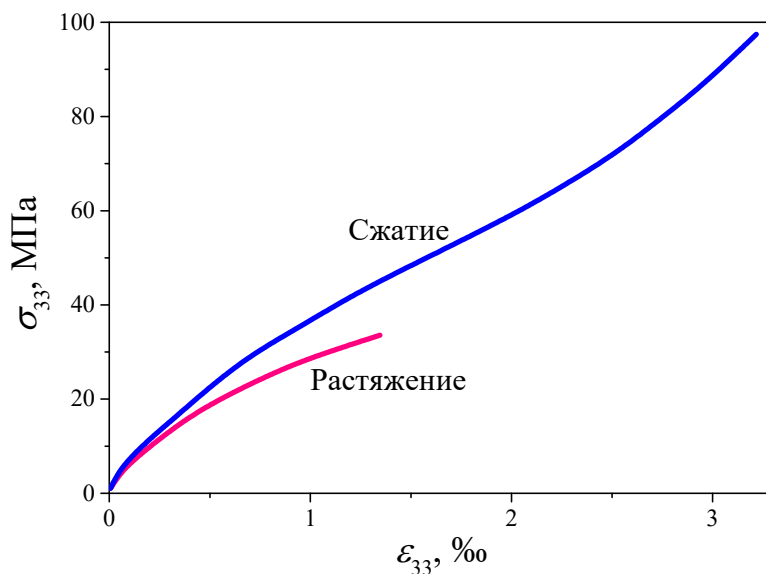


Рисунок 1.29 – Кривые деформирования при сжатии и растяжении для неполяризованной керамики [214]

Результаты экспериментальных исследований формы *поверхности переключения* при чисто механическом нагружении (Рисунок 1.30) для поляризованной и неполяризованной керамики представлены в работе Chen, Lynch [175]. Эксперименты на многоосное нагружение выполнялись на поликристаллической пьезокерамике 6/65/35/ PLZT. В опытах на трубчатых образцах (с внутренним диаметром 10,2 мм, внешним диаметром 12,7 мм и длиной 25 мм) задавалось независимо внутреннее и внешнее давление, а также осевая (сжимающая) сила. Поверхность переключения идентифицировалась по допуску на изменение остаточных деформаций 0,05%. В [175] установлено, что наилучшее совпадение с данными опыта наблюдается у критерия Треска (Рисунок 1.30) $\max\{|\sigma_1 - \sigma_2|, |\sigma_2 - \sigma_3|, |\sigma_3 - \sigma_1|\} = \sigma_c$. В работе Fett, Munz, Thun [215] на основе данных опытов на кручение, растяжение и сжатие утверждается, что наиболее точный прогноз обеспечивает критерий Друкера-Прагера.

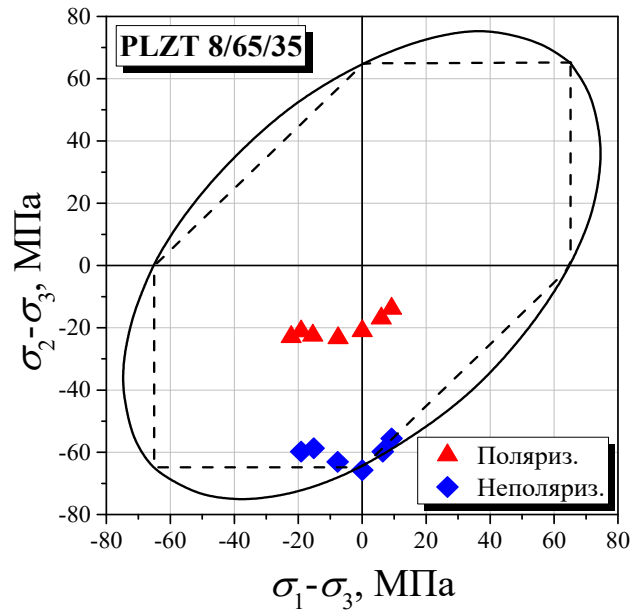


Рисунок 1.30 – Поверхности переключения для поляризованной и неполяризованной керамики 8/65/35 PLZT [175]

Значительные отличия в уровне напряжений переключения для поляризованной и неполяризованной керамик (см. Рисунок. 1.30) связаны со смещением поверхности переключений вверх (направление начальной поляризации соответствует направлению действия главного напряжения σ_2). Для описания подобных эффектов в [175] предлагается использовать модели с учетом кинематического и изотропного упрочнения.

Поликристаллическая пьезокерамика обладает свойствами *ползучести* и *обратного последдействия* при комнатной температуре (см. Рисунок 1.31) [216]. Данные работ [216, 502, 506] позволяют утверждать, что изменяющиеся во времени остаточные деформации накапливаются как при растяжении, так и при сжатии, и как для предварительно поляризованной, так и неполяризованной керамики. В [216] предложена степенная зависимость необратимых реономных деформаций от уровня напряжений и времени $\varepsilon^c = B\sigma^n t^m$. Для рассматриваемой в [216] сегнетопьезокерамики PZT PIC151 $n = 1,52$ и $m = 0,27$.

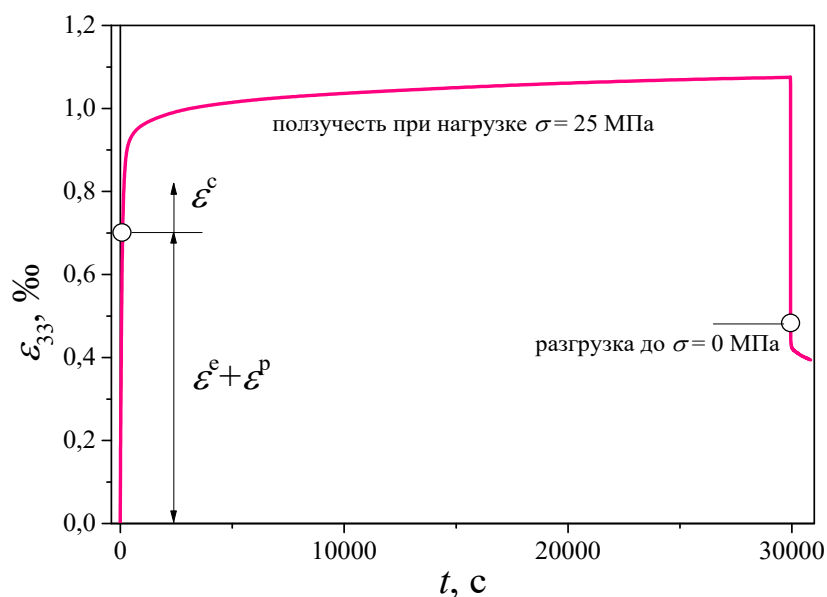


Рисунок 1.31 – Кривая ползучести при нагрузке $\sigma = 25$ МПа и обратного последствия после разгрузки до нуля для неполяризованной керамики [216]

1.2.3 Комбинированное электромеханическое воздействие

Наибольший интерес для практики представляют экспериментальные исследования отклика сегнетопьезокерамики при совместном действии электрического поля и механической нагрузки.

Характерные кривые деформирования **ОРQAB** при одноосном сжатии после предварительной поляризации (так называемые кривые механической деполяризации) для поликристаллической мягкой сегнетопьезокерамики показаны на Рисунках 1.32 и 1.33.

В начальном (неполяризованном) состоянии (точка **О** на Рисунках 1.32 и 1.33) многочисленные кристаллиты и домены поликристаллической сегнетопьезокерамики ориентированы случайным образом.

В результате начальной поляризации под действием электрического поля (точка **Р** на Рисунках 1.32 и 1.33) домены выстраиваются вдоль направления, наиболее близкого к направлению поля. После снятия поля наблюдается уменьшение деформаций вследствие исчезновения обратимой составляющей, возникшей в соответствии с обратным пьезоэлектрическим эффектом (точка **Q** на Рисунках 1.32 и 1.33).

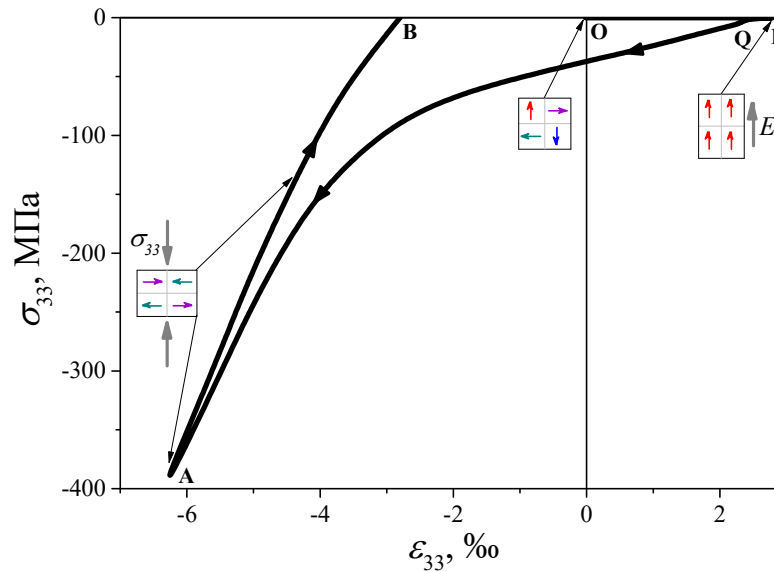


Рисунок 1.32 – Кривая деформирования для продольной деформации при сжатии предварительно поляризованной керамики [502]

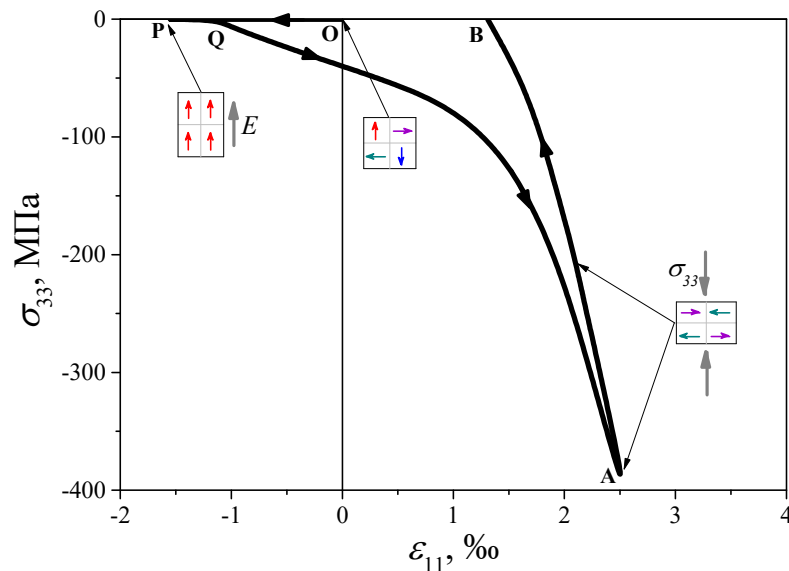


Рисунок 1.33 – Кривая деформирования для поперечной деформации при сжатии предварительно поляризованной керамики [502]

При приложении сжимающих напряжений начинается процесс переключения, сопровождающийся изменением направления спонтанной поляризации в ячейках и приводящий к изменению остаточной (пластической) деформации. Домены стремятся переориентироваться так, чтобы c -оси ячеек, изначально ориентированные вдоль направления действия поля, совпадающего с направлением действия напряжений, отклонились и расположились в плоскости, перпендикулярной направлению действия нагрузки (см. Рисунок 1.32 и 1.33).

Насыщение (состояние **A** на Рисунках 1.32 и 1.33) наблюдается при значительном уровне сжимающих напряжений, когда все возможности для переключения доменов исчерпаны.

При *разгрузке* до нуля (состояние **B** на Рисунках 1.32 и 1.33) приобретенная ориентация доменов в большинстве своем сохраняется, что обеспечивает практически неизменным накопленный уровень остаточной деформации. Следует отметить, что уровень остаточных деформаций первоначально неполяризованной и поляризованной керамики практически одинаков (ср. Рисунок 1.27 с 1.32 и Рисунок 1.28 с 1.33).

Вышеописанный механизм изменения ориентации доменов первоначально поляризованной керамики под действием сжимающих напряжений позволяет объяснить эффект *деполяризации* (см. кривую **OPQAB** на Рисунке 1.34). Сжимающее осевое напряжение деформирует ячейку и, как следствие этого, поворачивает вектор спонтанной поляризации так, чтобы он лежал в плоскости, перпендикулярной оси действия напряжения, то есть приводит к существенному уменьшению поляризации в направлении оси действия напряжения (близость точки **B** к **O** на Рисунке 1.34).

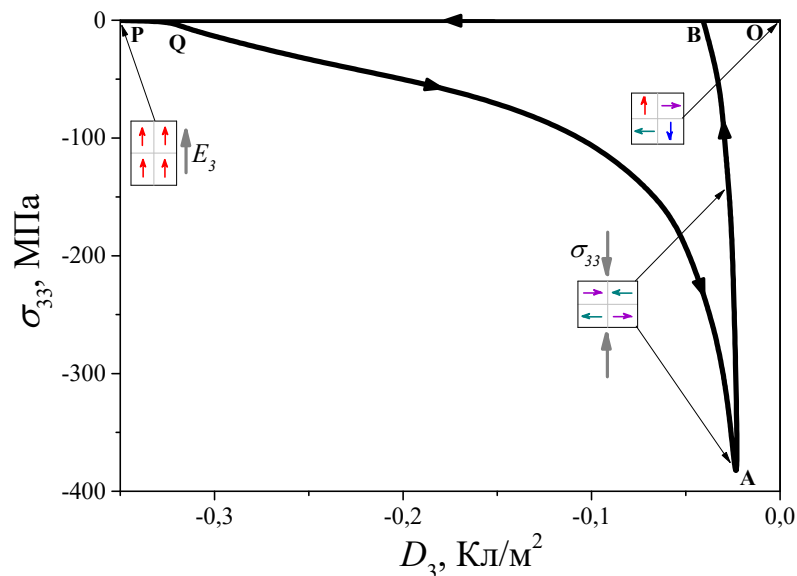


Рисунок 1.34 – Кривая деполяризации при сжатии предварительно поляризованной керамики [502]

Результаты влияния постоянных сжимающих напряжений различной варьируемой величины на кривые диэлектрического гистерезиса и электромеханического гистерезиса показаны на Рисунках 1.35 и 1.36 [502, 509].

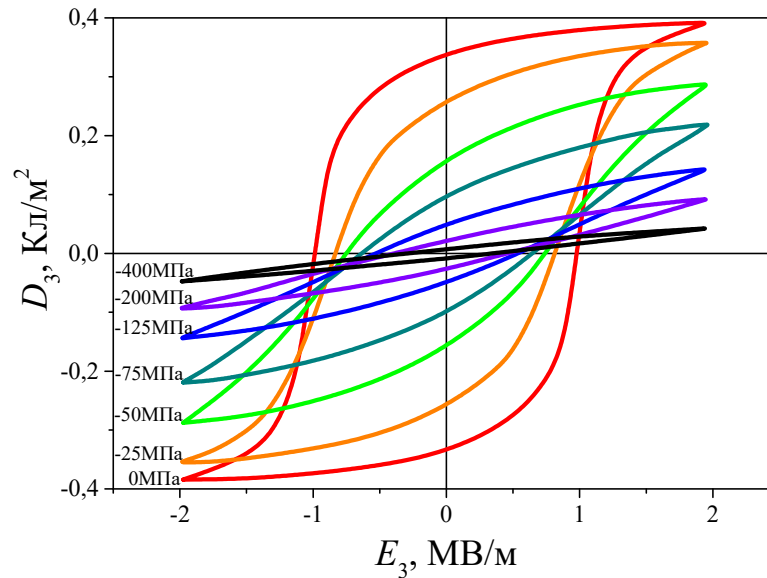


Рисунок 1.35 – Влияние постоянных сжимающих напряжений на кривые диэлектрического гистерезиса [502]

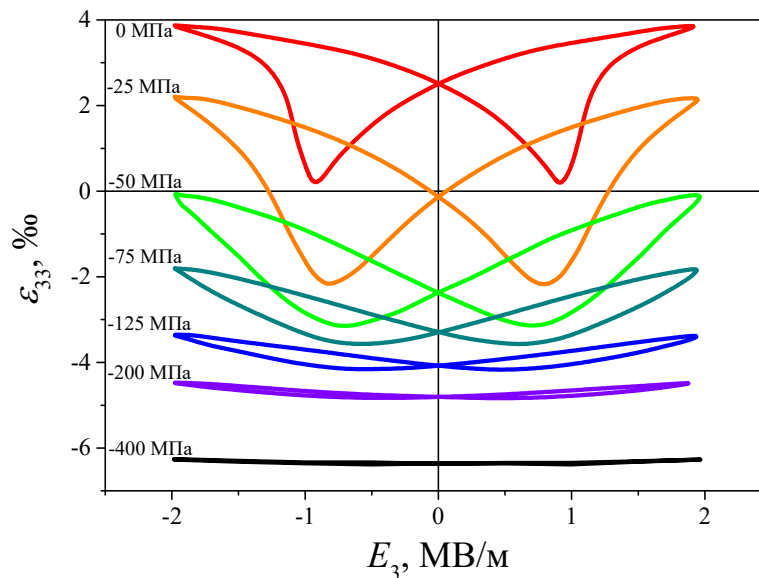


Рисунок 1.36 – Влияние постоянных сжимающих напряжений на кривые электромеханического гистерезиса (петля в форме «бабочки» продольной деформации) [502]

Как видно из Рисунков 1.35 и 1.36, с ростом уровня напряжений уменьшаются:
(i) остаточная поляризация, (ii) деформация и (iii) коэрцитивное поле. Кривые в

форме бабочки демонстрируют также сдвиг в область отрицательных значений деформаций. Форма петли становится более плавной без резких (скачкообразных) изменений благодаря уменьшению доли доменов, способных к не-180°-переключениям вследствие ограничивающей мобильности сжимающего напряжения.

Значения касательной диэлектрической проницаемости $\kappa_{33T} \Big|_{E_3=0} = \partial D_3 / \partial E_3$ и касательного пьезоэлектрического модуля $d_{33T} \Big|_{E_3=0} = \partial \varepsilon_{33} / \partial E_3$, рассматриваемые как функции от преднапряжений, демонстрируют максимум при $\sigma = -25$ МПа [502], что говорит о возможности улучшения характеристик пьезокерамيك при наложении сжимающих напряжений. При дальнейшем увеличении уровня сжимающих напряжений значения вышеперечисленных параметров резко падают.

Эффект влияния сжимающих напряжений на нелинейное электромеханическое поведение пьезокерамик также исследовался в работах [135, 173, 208, 262, 341].

Результаты влияния постоянного электрического поля различной варьируемой величины на кривые деполяризации и механического гистерезиса показаны на Рисунках 1.37 и 1.38 (кривые разгрузки отмечены пунктиром).

Анализ кривых *деполяризации* (Рисунок 1.37) показал, что наблюдается нелинейная зависимость, чувствительная к приложенному постоянному уровню электрического поля. Изменение электрической индукции определяется линейной зависимостью от электрического поля и напряжения, а также остаточной поляризацией, которая также может изменяться (нелинейным образом) в процессе нагружения [276]: $D_3 = \kappa_{33} E_3 + d_{333} \sigma_{33} + P_3'(E_3, \sigma_{33})$. При отсутствии электрического поля при приложении сжимающих напряжений -400 МПа 94% накопленной начальной поляризации теряется (изменяется с -0.33 Кл/м² до -0.019 Кл/м² [502]) (см. черную кривую на Рисунке 1.37). Наличие электрического поля, сонаправленного с начальной поляризацией, способствует сохранению доменного состояния, поэтому для процесса переключения требуется более высокий уровень сжимающих напряжений. Наличие электрического поля приводит к частичному восстановлению начальной поляризации после механической разгрузки. Для экстремального из рассмат-

риваемых электрического поля -2 МВ/м кривая нагружения-разгрузки возвращается практически в исходное состояние (начальная поляризация -0.444 Кл/м², после разгрузки -0.435 Кл/м² [502]).

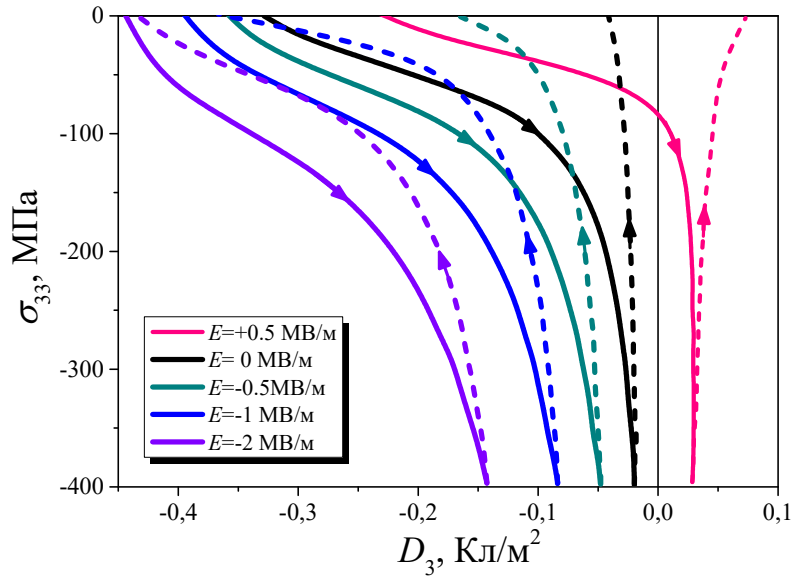


Рисунок 1.37 – Влияние электрического поля на кривые механической деполяризации [502, 510]

Анализ кривых *продольная деформация-сжимающее напряжение* (Рисунок 1.38) показал, что также наблюдается нелинейная гистерезисная зависимость, чувствительная к приложенному постоянному уровню электрического поля. Изменение деформации определяется линейной зависимостью от электрического поля и напряжения, а также остаточной деформацией, которая также может изменяться (нелинейным образом) в процессе нагружения [276]: $\varepsilon_{33} = S_{3333}\sigma_{33} + d_{333}E_3 + \varepsilon_{33}^r(\sigma_{33}, E_3)$. Наличие электрического поля, сонаправленного с начальной поляризацией, способствует восстановлению начальной деформации при разгрузке. Для электрического поля -2 МВ/м кривая нагружения-разгрузки возвращается практически в исходное состояние (начальная деформация 3.98 ‰, после разгрузки 3.08 ‰ [502]). Результаты экспериментов, представленные на Рисунке 1.38, показали также, что при высоких значениях напряжений электрическое поле практически не оказывает влияния на деформации в состоянии насыщения. Единое асимптотическое поведение с ростом напряжений, слабочувствительное к электрическому полю (вклад $d_{333}E_3$ пренебрежимо мал), является основным отличием механических кривых (Рисунок 1.38) от кривых деполяризации (Рисунок 1.37) с различными асимптотами для различных уровней электрического поля.

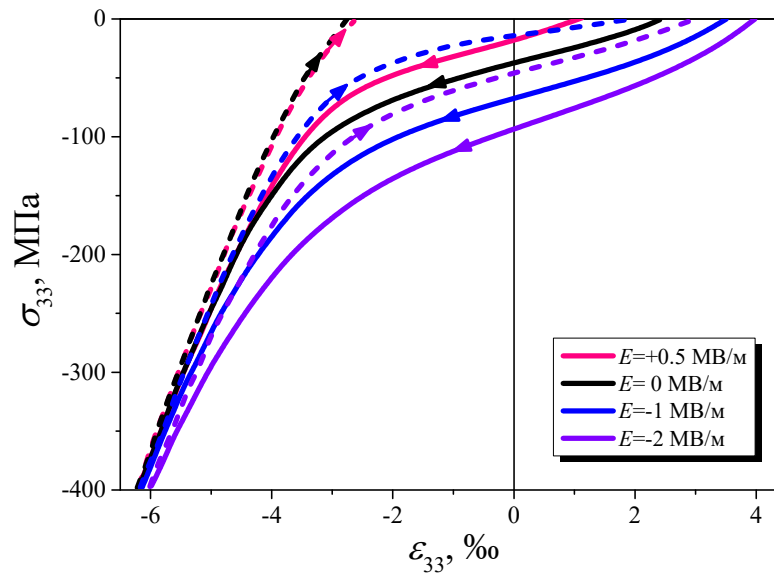


Рисунок 1.38 – Влияние электрического поля на кривые механического гистерезиса [502, 510]

Влияние электрического поля на коэрцитивное напряжение носит линейный характер (Рисунок 1.39) [502, 510]. Коэрцитивное напряжение определялось по минимуму касательной податливости $\partial \epsilon_{33} / \partial \sigma_{33}$ (максимум интенсивности переключений) на кривой деформирования при сжатии.

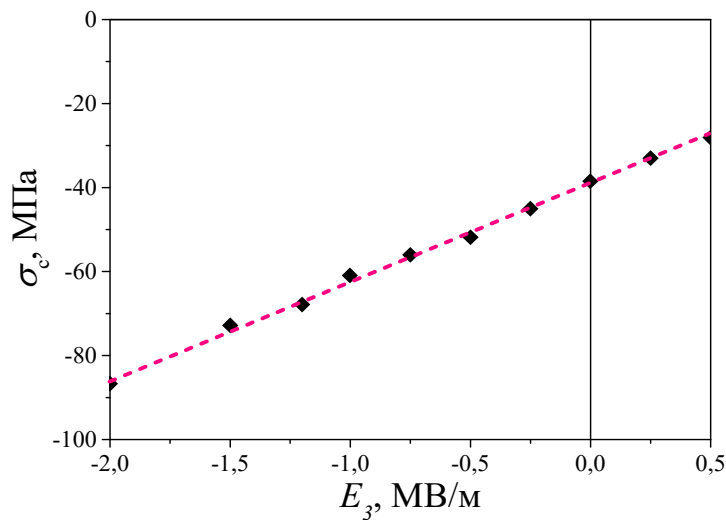


Рисунок 1.39 – Влияние электрического поля на коэрцитивное напряжение [502]

В работе [504] производилось сравнение режимов циклического нагружения при комбинированном воздействии электрического и механического полей в фазе и противофазе. Было установлено, что если механические напряжения действуют в фазе с электрическим полем, то они препятствуют выстраиванию диполей вдоль поля, вынуждая их переключаться в перпендикулярном направлении, что приводит

к уменьшению высоты петли диэлектрического и механического гистерезиса с ростом уровня сжимающих напряжений. При действии в противофазе напряжения наоборот способствуют подобному переключению, что приводит к увеличению высоты петли диэлектрического и механического гистерезиса с ростом уровня сжимающих напряжений.

В [469] изучается влияние механических сжимающих напряжений на повышение электромеханического коэффициента связи.

Результаты экспериментальных исследований формы поверхности переключения при комбинированном электромеханическом нагружении представлены в ряде работ, например, в [433] для PZT-4D, PZT-5H и BaTiO₃, в [511, 513] для PZT PIC151. Эксперименты проводились на неполяризованной керамике. На Рисунке 1.40 представлен фрагмент поверхности переключения при комбинированном электромеханическом нагружении, полученный при пропорциональном увеличении механической (сжимающие напряжения) и электрической (электрическое поле, сонаправленное с направлением механического воздействия) нагрузки для 1%-го допуска на изменение остаточной деформации. Экспериментальные значения располагаются между кривыми, соответствующими обобщению критерия Мизеса $\left(\frac{\sigma_3}{\sigma_c}\right)^2 + \left(\frac{E_3}{E_c}\right)^2 = 1$

и обобщению критерия Треска $\left|\frac{\sigma_3}{\sigma_c} + \frac{E_3}{E_c}\right| = 1$ [513]. Последний совпадает с критерием

Друкера-Прагера в рассматриваемом квадранте нагрузок [511].

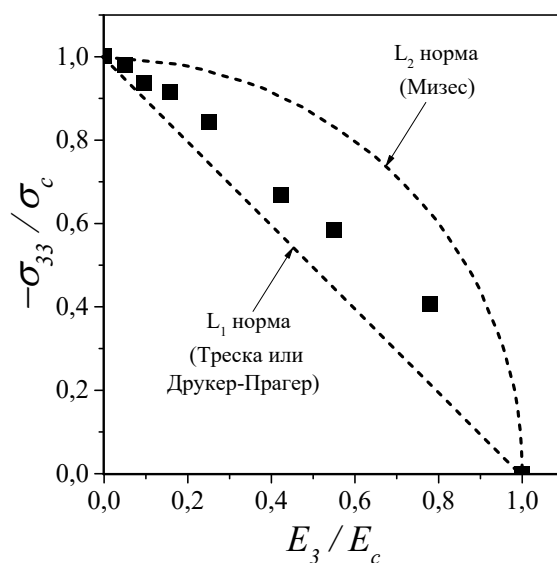


Рисунок 1.40 – Поверхность переключения при комбинированном электромеханическом нагружении [513]

1.3 Обзор математических моделей

Описание процессов необратимого деформирования и поляризации сегнетоэластичных материалов при многоосном комбинированном электромеханическом нагружении в диапазоне температур вдали от точки Кюри в настоящее время основано на использовании как феноменологических ([6, 90, 309, 350, 104, 142, 180, 199, 231, 255, 283, 305] и др.), так и микромеханических ([86, 87, 446, 88, 89, 91, 255, 257, 321, 368, 381] и др.) моделей сплошной среды.

1.3.1 Феноменологические модели

В.Л. Гинзбург в 1945 г. в [18, 20] впервые применил к сегнетоэлектрикам основные положения теории фазовых переходов Л.Д. Ландау [50–52, 54], выбрав в качестве параметра порядка электрическую поляризацию P . А.Ф. Devonschire в 1949 г. [188, 189] произвел более полный учет свойств симметрии в потенциале Ландау шестой степени с многокомпонентным (векторным) параметром порядка, что позволило описать фазовые переходы в сегнетоэлектрике BaTiO_3 .

Для материалов с пространственно однородной поляризацией в соответствии с теорией структурных фазовых переходов Л.Д. Ландау (основанной на предположениях: (i) возможности разложения термодинамического потенциала в окрестности точки перехода *в ряд* по параметру порядка (меры отклонения фазы от состояния с более высокой симметрией), (ii) учете свойств *симметрии* в выражении потенциала) в случае *одноосного сегнетоэлектрика* термодинамический потенциал Гиббса (свободная энергия Гиббса) $G(T, \sigma, E)$ может быть представлен в виде полинома шестого порядка относительно параметра P [19, 20, 54, 79, 80, 109, 190]:

$$G = F - EP = F_0 + \frac{\alpha}{2} P^2 + \frac{\beta}{4} P^4 + \frac{\gamma}{6} P^6 - EP, \quad (1.4)$$

где $F(T, \sigma, P)$ - упругая энергия Гиббса, коэффициенты разложения α, β, γ и F_0 в общем случае зависят от температуры T и тензора напряжения σ , E - напряженность электрического поля. Благодаря свойствам симметрии в параэлектрической (высокотемпературной) фазе в выражении потенциала Гиббса (1.4) отсутствуют слагае-

мые с нечетными степенями P , поскольку для кристаллов с центром инверсии потенциал не зависит от знака параметра порядка (изменение P на $-P$ не должно влиять на его величину).

Равновесное состояние определяется минимумом термодинамического потенциала G и находится из условий [19] $\frac{\partial G}{\partial P} = 0$, $\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} > 0$. Следствием подстановки выражения для потенциала (1.4) в первое условие получается нелинейное определяющее уравнение (связь электрического поля и поляризации) [19, 79, 80, 190]:

$$E = \alpha P + \beta P^3 + \gamma P^5. \quad (1.5)$$

Удовлетворяющие условиям термодинамической устойчивости значения спонтанной поляризации $P = P_s$ определяются на основе уравнения (1.5) при $E = 0$ [112]:

$$P_s = 0 \quad (\text{параэлектрическая фаза}), \quad (1.6)$$

$$\alpha + \beta P_s^2 + \gamma P_s^4 = 0 \quad (\text{сегнетоэлектрическая фаза}). \quad (1.7)$$

Количество вещественных корней P_s и их устойчивость определяется знаками и величинами коэффициентов α, β, γ . При описании поведения сегнетоэлектриков в области фазового перехода зависимость коэффициентов β, γ от температуры не учитывается, а для коэффициента α принимается линейная зависимость [19]:

$$\alpha = \alpha_0 (T - T_0), \quad (1.8)$$

где $\alpha_0 > 0$ - не зависящий от температуры коэффициент, T_0 - температура Кюри-Вейсса. Таким образом, процесс фазового перехода с изменением температуры может быть проанализирован на основе исследования влияния изменений коэффициента α на решение (1.5)-(1.7). Следует отметить, что коэффициент α не является знакоопределенным: $\alpha < 0$ при $T < T_0$ и $\alpha > 0$ при $T > T_0$. Знаки коэффициентов β, γ определяются родом фазового перехода.

Структурные фазовые переходы у сегнетоэлектриков могут быть: *первого рода* (для них характерны скачкообразные изменения параметров элементарной ячейки;

скачки *первых* производных термодинамического потенциала, в частности энтропии, поляризации, объема; происходит поглощение (или выделение) скрытой теплоты фазового перехода; наблюдается температурный гистерезис), как например у BaTiO_3 и некоторых других перовскитов; и *второго рода* (для них характерны непрерывные изменения параметров элементарной ячейки, скачки *вторых* производных термодинамического потенциала, в частности теплоемкости, коэффициентов теплового расширения; не происходит поглощение (или выделение) скрытой теплоты фазового перехода; не наблюдается температурный гистерезис), как например у триглициносульфата. Приведенные определения соответствуют классификации Эренфеста, в которой род фазового перехода определяется минимальным порядком испытывающих разрыв производных термодинамического потенциала.

В модели Ландау-Гинзбурга-Девоншира [18, 19, 54, 188–190] характер фазового перехода (первый или второй род) определяется знаком коэффициента β при четвертой степени параметра порядка. В случае $\beta > 0$ имеем *фазовый переход второго рода*. При этом отпадает необходимость учета слагаемого шестой степени с коэффициентом γ , поскольку устойчивость системы обеспечена условием положительности β . В этом случае допускается упрощенное представление потенциала (1.4) в виде:

$$G = F_0 + \frac{\alpha}{2} P^2 + \frac{\beta}{4} P^4 - EP, \quad (1.9)$$

где $\alpha = \alpha_0(T - T_0)$, $\beta > 0$, $\gamma = 0$.

Зависимость термодинамического потенциала G (1.9) и его производной от поляризации P при $E = 0$ для различных температур показана на Рисунке 1.41.

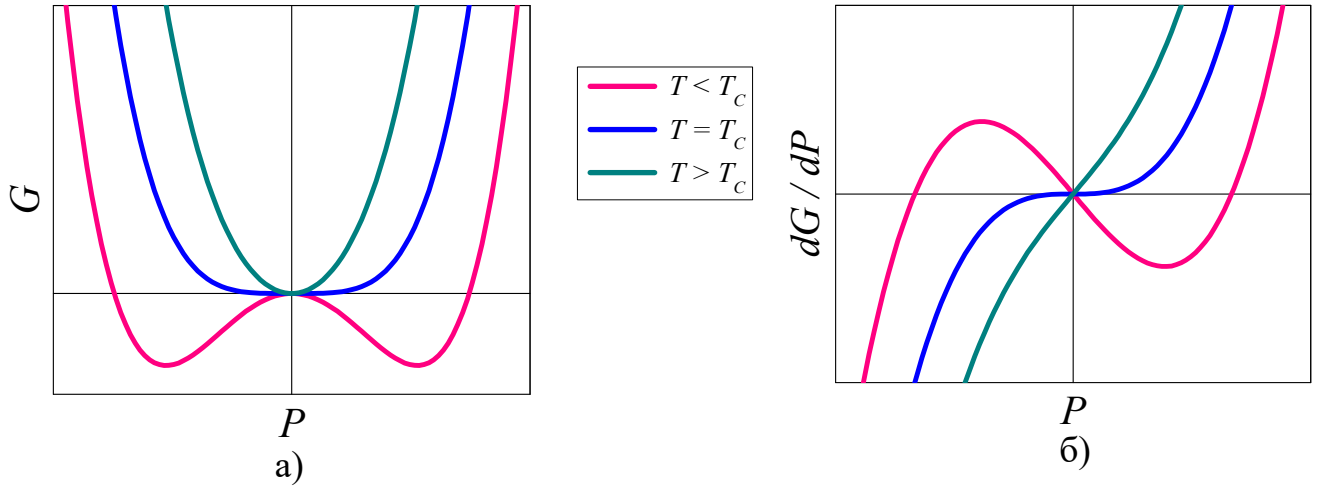


Рисунок 1.41 – Схематическое представление а) термодинамического потенциала $G(P)$ и б) его производной dG/dP при различных температурах для сегнетоэлектриков с фазовым переходом *второго* рода (рассматривается случай $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ и $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$)

Температура фазового перехода (точка Кюри) T_c для перехода второго рода совпадает с температурой Кюри–Вейса T_0 . При $T > T_c = T_0$ в соответствии с (1.8) имеем $\alpha = \alpha_0(T - T_0) > 0$ и единственный вещественный корень $P_s = 0$ уравнения $\frac{\partial G}{\partial P} = \alpha P + \beta P^3 = 0$ обеспечивает устойчивое решение ($\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} = \alpha + 3\beta P^2 = \alpha > 0$). Потенциал при этом имеет единственный минимум (см. Рисунок 1.41а). Очевидно, что решение $P_s = 0$ соответствует *неполярной* (параэлектрической) фазе, возникающей при температуре выше температуры Кюри T_c . При понижении температуры ниже температуры Кюри $T < T_c = T_0$ в соответствии с (1.8) получается $\alpha < 0$. Вследствие этого первый корень $P_s = 0$ уравнения $\frac{\partial G}{\partial P} = \alpha P + \beta P^3 = 0$ неустойчив ($\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} = \alpha < 0$). Два других вещественных корня этого уравнения определяются равенством

$$P_s = \pm \sqrt{\frac{-\alpha}{\beta}}. \quad (1.10)$$

Оба корня (1.10) обеспечивают устойчивое решение ($\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} = -2\alpha > 0$). Им соответствуют два симметричных минимума потенциала (см. Рисунок 1.41а). Решения (1.10) с $P_s \neq 0$ соответствуют *полярной* (сегнетоэлектрической) фазе, возникающей при температуре ниже температуры Кюри. В этом случае на кривой зависимости

$P(E)$, определяемой по (1.5), возникает *диэлектрический гистерезис* (см. Рисунок 1.42а), как следствие появления неустойчивой области (показана на Рисунок 1.42а штриховой линией). Коэрцитивное поле определяется величиной $E_c = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{-\alpha}{3\beta}}$. Его экспериментальное значение много меньше [9] представленного теоретического значения, так как в реальности процесс сегнетоэлектрического переключения включает зародышеобразование и движение доменных стенок, что не учитывается рассматриваемой теорией.

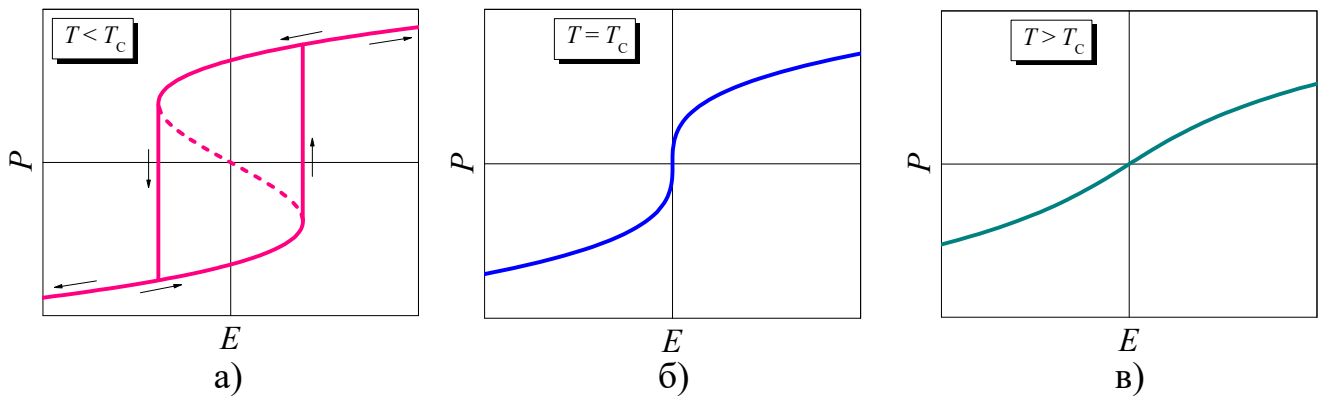


Рисунок 1.42 – Схематическое представление зависимости P от E при различных температурах: а) ниже температуры Кюри $T < T_c$ (в сегнетоэлектрической фазе), б) при температуре Кюри $T = T_c$, в) выше температуры Кюри $T > T_c$ (в параэлектрической фазе) для сегнетоэлектриков с фазовым переходом *второго* рода

Случаю $\beta < 0$ соответствует *фазовый переход первого рода*. Для обеспечения устойчивости системы (стабильности фаз) необходимо выполнение условия $\gamma > 0$. Термодинамический потенциал Гиббса имеет вид полинома шестого порядка:

$$G = F_0 + \frac{\alpha}{2} P^2 + \frac{\beta}{4} P^4 + \frac{\gamma}{6} P^6 - EP, \quad (1.11)$$

где $\alpha = \alpha_0(T - T_0)$, $\beta < 0$, $\gamma > 0$.

Зависимость термодинамического потенциала G (1.11) и его производной от поляризации P в случае $\beta < 0$, $\gamma > 0$ при $E = 0$ для различных температур показана на Рисунок 1.43. Представленные кривые параметризованы с помощью безразмерной относительной температуры $\xi = \frac{\alpha\gamma}{\beta^2} = \frac{\alpha_0\gamma(T - T_0)}{\beta^2}$.

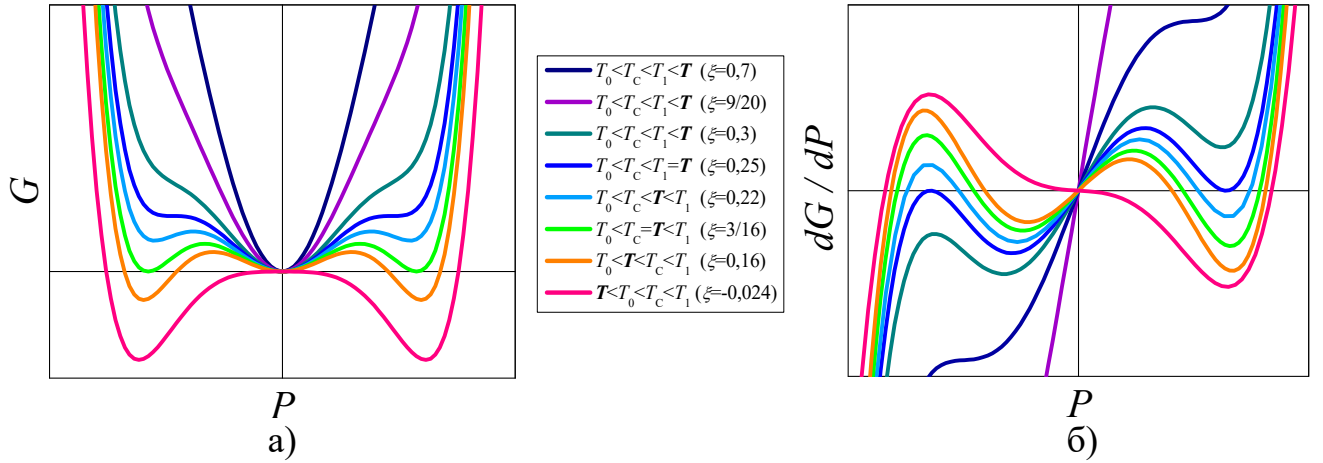


Рисунок 1.43 – Схематическое представление а) термодинамического потенциала $G(P)$ и б) его производной dG/dP при различных температурах для сегнетоэлектриков с фазовым переходом *первого* рода (рассматривается случай $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ и $\sigma = 0$)

Температура фазового перехода (точка Кюри) T_c находится из условия совпадения термодинамических потенциалов полярной и неполярной фаз. Для перехода первого рода температура Кюри $T_c = T_0 + \frac{3}{16} \frac{\beta^2}{\alpha_0 \gamma}$ ($\xi_c = \frac{3}{16} = 0,1875$) превышает температуру Кюри–Вейса T_0 . В окрестности T_c для структурных фазовых переходов первого рода в диапазоне температур $T_0 < T < T_1 = T_0 + \frac{1}{4} \frac{\beta^2}{\alpha_0 \gamma}$ ($0 < \xi < \frac{1}{4}$) наблюдается наличие трех локальных минимумов G (см. Рисунок 1.43а). Очевидно, что минимум с $P_s = 0$ соответствует *неполярной* (параэлектрической) фазе. При температуре $T < T_0$ первый корень $P_s = 0$ уравнения $\frac{\partial G}{\partial P} = \alpha P + \beta P^3 + \gamma P^5 = 0$ неустойчив ($\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} = \alpha < 0$). Два оставшихся вещественных корня этого уравнения определяются равенством

$$P_s = \pm \sqrt{\frac{-\beta}{2\gamma} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha\gamma}{\beta^2}} \right)} = \pm \sqrt{\frac{-\beta}{2\gamma} (1 - \sqrt{1 - 4\xi})}. \quad (1.12)$$

Для вышеприведенных значений P_s реализуются два симметричных минимума потенциала G (см. Рисунок 1.43а). Полученные решения (1.12) с $P_s \neq 0$ соответствуют *полярной* (сегнетоэлектрической) фазе. В этом случае на кривой зависимости $P(E)$ возникает *диэлектрический гистерезис* (см. Рисунок 1.44а), как следствие возникновения неустойчивой области (показана на Рисунке 1.44а штриховой линией).

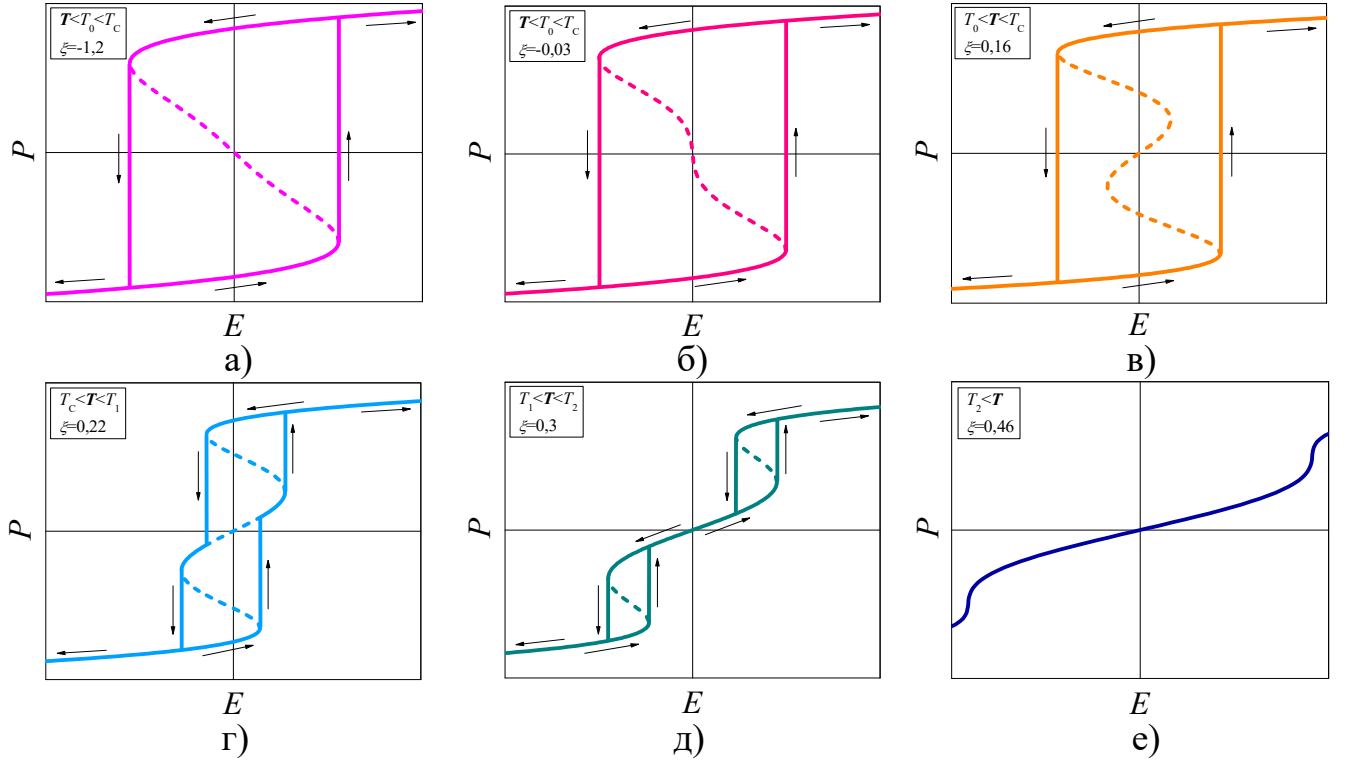


Рисунок 1.44 – Схематическое представление зависимости P от E при различных температурах: а) $T < T_0$ ($\xi = -1,2$), б) $T < T_0$ ($\xi = -0,024$), в) $T_0 < T < T_c$ ($\xi = 0,16$), г) $T_c < T < T_1$ ($\xi = 0,22$), д) $T_1 < T < T_2$ ($\xi = 0,3$), е) $T > T_2$ ($\xi = 0,46$) для сегнетоэлектриков с фазовым переходом *первого* рода

Одиноклая гистерезисная петля классической формы будет наблюдаться в области температур $T < T_c$ ($\xi < 3/16$) (см. Рисунок 1.44а-в). Выше температуры Кюри в диапазоне $T_c < T < T_1$ ($3/16 < \xi < 1/4$) форма петли искажается (наблюдается так называемая перерезанная петля) (см. Рисунок 1.44г). При дальнейшем увеличении температуры в диапазоне $T_1 < T < T_2 = T_0 + \frac{9}{20} \frac{\beta^2}{\alpha_0 \gamma}$ ($1/4 < \xi < 9/20$) появляется двойная петля диэлектрического гистерезиса (см. Рисунок 1.44д). Выше температуры T_2 может существовать только неполярная (параэлектрическая) фаза и гистерезис отсутствует (см. Рисунок 1.44е). Цвет кривых $P(E)$ на Рисунке 1.44 соответствует цвету кривых $G(P)$ на Рисунке 1.43 при одинаковых значениях температур.

Важно отметить, что в полярной фазе (при $T < T_c$) форма петли гистерезиса не зависит от того, какого рода переход испытывает кристалл в точке Кюри (ср. Рисунки 1.42а и 1.44а).

Поведение материала с переходом первого рода в окрестности T_C зависит от предыстории изменения температуры (нагрева или охлаждения при приближении к T_C). Если допустить существование метастабильных состояний, неполярная фаза при переохлаждении может оставаться метастабильной (обладать локальным минимумом потенциала) вплоть до температуры T_0 , а полярная фаза при перегреве может сохраняться (обладать локальным минимумом потенциала) до температуры T_1 . Обе фазы сосуществуют одновременно в интервале температур от T_0 до T_1 . Указанная особенность приводит к возникновению явления температурного гистерезиса (см. Рисунок 1.45а), которое наблюдается в экспериментах у большинства сегнетоэлектриков первого рода, включая BaTiO_3 [270]. Максимальная ширина температурного гистерезиса составляет $T_1 - T_0 = \frac{1}{4} \frac{\beta^2}{\alpha_0 \gamma}$. Вследствие наличия дефектов у реальных кристаллов ширина температурного гистерезиса меньше теоретической [109].

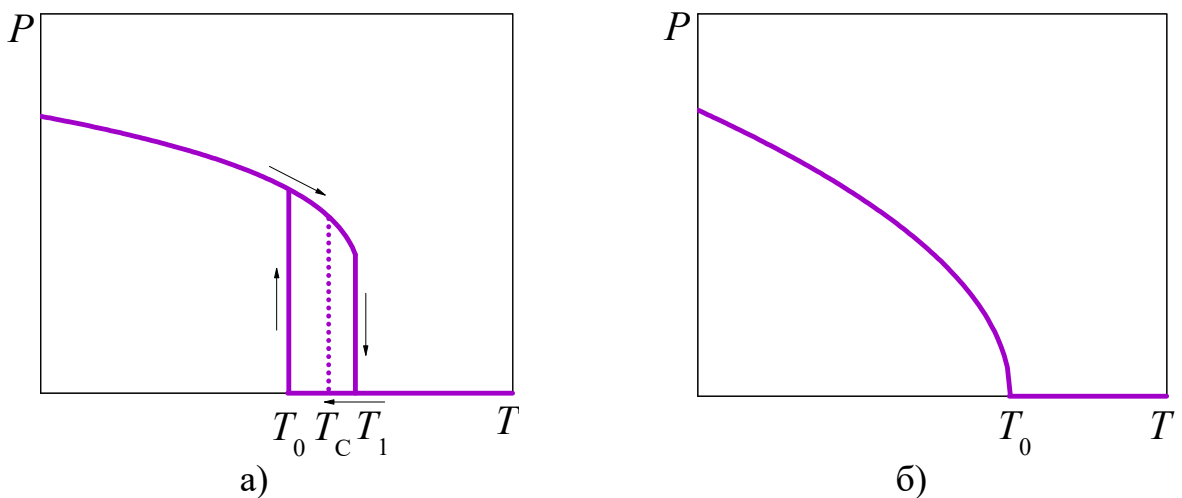


Рисунок 1.45 – Схематическое изображение температурной зависимости поляризации при сегнетоэлектрических фазовых переходах а) I рода и б) II рода

Важной особенностью фазового перехода первого рода является изменение значения поляризации скачком до нуля (см. Рисунок 1.45а). Абсолютная величина скачка при T_C составляет $\Delta P_s = \sqrt{\frac{-3\beta}{4\gamma}}$, при T_0 — $\Delta P_s = \sqrt{\frac{-\beta}{\gamma}}$, при T_1 — $\Delta P_s = \sqrt{\frac{-\beta}{2\gamma}}$. При фазовом переходе второго рода изменение поляризации происходит непрерывно, без скачков и температурного гистерезиса (см. Рисунок 1.45б).

Для описания кинетики собственного (однородного) процесса переключения вблизи точки фазового перехода получило распространение уравнение Ландау-Халатникова [55, 119]:

$$\xi \frac{dP}{dt} = -\frac{dG}{dP} = -\alpha P - \beta P^3 - \gamma P^5 + E, \quad (1.13)$$

где ξ - коэффициент демпфирования (феноменологический параметр, определяющий скорость переключения).

Исследование динамики решетки при фазовых переходах 2-го рода и переходах 1-го рода, близких к трикритической точке, в условиях воздействия переменным электрическим полем позволило В.Л. Гинзбургу обнаружить [19] возникновение «мягкой моды» - эффекта стремления к нулю или резкого понижения частоты поперечных колебаний (мод) решетки при стремлении температуры к T_c . В последствии Cochran [178, 179] на основе развития концепции «мягкой моды» предложил интерпретацию сегнетоэлектрического фазового перехода как потерю динамической устойчивости решетки.

Теория Ландау-Гинзбурга-Девоншира ограничена случаем пространственно однородной поляризации, поскольку является теорией самосогласованного (среднего) поля и не учитывает флуктуации при вычислении поляризации. В теории Ландау-Гинзбурга в предположении малости флуктуаций произведен учет градиента поляризации в выражении для термодинамического потенциала в целях описания пространственной неоднородности поля поляризации [20]:

$$G = F_0 + \frac{\alpha}{2} P^2 + \frac{\beta}{4} P^4 + \frac{\gamma}{6} P^6 + \delta (\nabla P)^2 - EP, \quad (1.14)$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ и F_0 - параметры материала.

Ограниченность теории сегнетоэлектричества Ландау-Гинзбурга-Девоншира связана с неучетом доменной структуры, процессов зародышеобразования и наличия дефектов, что приводит в ряде случаев к отличию прогнозов теории в сравнении с экспериментами. Следует отметить, что влияние доменов и дефектов на параметры фазового перехода не столь значительно в сравнении с влиянием на кине-

тику переключения (диэлектрический гистерезис) [9]. Открытие доменов и установление их влияния на процессы переключения произошло уже после опубликования работы В.Л. Гинзбурга в 1945 г. [18]: для сегнетовой соли, начиная с 1948 г., в серии работ М.В. Классен-Неклюдовой, М.А. Чернышевой, В.Л. Инденбомом [39, 44]; для BaTiO_3 в 1954 г. W.J. Merz [353]; для триглицинсульфата в 1970 г. Юриным и др. В 1971 г [125]. Y. Ishibashi, Y.J. Takagi на основе статистики А.Н. Колмогорова (примененной им первоначально к процессу кристаллизации металлов) разработали теорию доменного (несобственного) переключения (Колмогорова-Аврами-Ишибаши, КАИ) [46, 138, 267, 376]. В последнее время при проведении исследований в наноразмерной области было установлено [119, 192, 470], что в полимерных сегнетоэлектрических пленках толщиной, близкой к критическому размеру зародыша домена (1-10 нм) [416, 434], реализуется собственный однородный механизм переключения, имеющий бездоменный характер, что позволяет использовать подходы теории Ландау-Гинзбурга-Девоншира.

Основное достоинство феноменологической теории сегнетоэлектричества Ландау-Гинзбурга-Девоншира заключается в математической простоте и концептуальной ясности методологии установления связей между измеряемыми в экспериментах макроскопическими величинами. Однако следует помнить, что при получении уравнений теории использовалось разложение термодинамического потенциала в ряд Тэйлора, строго говоря, справедливое только для малых значений параметра порядка, поэтому на удалении от температуры Кюри при описании процессов, не связанных с фазовыми переходами, ее применение требует учета высших членов разложения в ряд, то есть модификации и в каждом случае дополнительной валидации. Примеры использования теории Ландау-Гинзбурга-Девоншира на практике для процессов, не сопровождающихся фазовыми переходами, представлены в работах [238, 366, 394, 443, 476].

Современные *прикладные феноменологические модели* сегнетоэлектростриктивных материалов, ориентированные преимущественно на использование при моделировании поведения элементов конструкций, для описания процессов переключения и накопления остаточных деформаций и поляризации вводят дополнительные

внутренние степени свободы - *внутренние переменные* состояния. Классификация феноменологических моделей основана на рассмотрении различных базовых принципов введения внутренних переменных и уравнений эволюции для их описания.

Одна из первых прикладных феноменологических моделей была предложена в 1979 г. в работах Chen P.J. и его коллег [166, 168–172], в которых для описания необратимых процессов в качестве внутренних переменных были введены дипольный момент μ и количество диполей на единицу объема N , ориентированных вдоль вектора электрической индукции. В [170] уравнения эволюции для введенных внутренних переменных представляли собой линейные дифференциальные уравнения (фактически соответствующие обобщенному линейному вязкоупругому материалу). В более поздних версиях теории [168, 169] коэффициенты уравнений эволюции допускали нелинейную зависимость от электрического поля, и при этом количество диполей N разбивалось на две группы, связанные с мгновенным (склеротическим) и перманентным (реотическим) откликами. Бесспорным достижением предложенного подхода явилась возможность достаточно точного описания кривых диэлектрического и электромеханического гистерезиса для поликристаллической керамики PZT 65/35 [171, 172]. К недостаткам данного подхода можно отнести: отсутствие физического обоснования формулировок предложенных уравнений эволюции, одномерность модели переключения, ограниченность случаем чисто электрического нагружения.

Для описания эволюции формы петли гистерезиса при сложных программах одноосного электрического нагружения получили распространение модификации [34, 115, 116, 396] модели Preisach [391] 1935 года, разработанной первоначально для системы ферромагнитных частиц, внедренных в парамагнитную матрицу. Поведение частицы (гистерона или элементарного магнитного домена) описывается идеализированной прямоугольной петлей P - E гистерезиса, ширина и местоположение центра которой вводятся как независимые параметры. В рамках данного подхода материальная точка сегнетоэлектрорупругого материала рассматривается как параллельное соединение бесконечного числа неидеальных реле (бесконечного ан-

самбля гистеронов). Отклик материала (поляризация) определяется интегрированием по двумерной области введенных параметров с различными весами (плотностью вероятности распределения гистеронов по коэрцитивным полям и полям смещения). Модель обладает свойством учета влияния предыстории нагружения на текущее состояние, однако при превышении значения входного параметра (электрического поля) максимума или минимума происходит забвение (стирание) истории о предыдущих экстремальных значениях. Все минорные петли, полученные при одном и том же изменении входного параметра, являются геометрически подобными (свойство конгруэнтности). В работах М.А. Красносельского [47] произведен строгий математический анализ модели и предложена общая теория операторов систем с гистерезисом.

В работах Белоконь А.В. и Скалиух А.С. [5, 6, 104], основанных на обобщении модели магнитного гистерезиса Jiles–Atherton [273], рассматриваются процессы однородной поляризации с учетом вероятностного характера преодоления энергетических барьеров при движении доменных стенок. Для оценки энергии преодоления запирающего барьера используется статистика Больцмана. Остаточная поляризация определяется на основе неоднородного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, правая часть которого не является аналитической функцией.

В работах Bassiouny, Maugin [142–145, 345, 346] впервые предлагается использовать *термодинамически* обоснованные формулировки определяющих уравнений сегнетоэластичных материалов. Предложенная феноменологическая модель основана на концепциях *теории пластичности* и феноменологической теории *ферромагнетизма*. В рамках парадигмы рациональной термодинамики [31, 113, 462] вводятся внутренние переменные, соответствующие остаточной поляризации и пластической деформации, для которых на основе диссипативного потенциала вводятся уравнения эволюции для внутренних переменных. Модель априори удовлетворяет диссипативному неравенству (Clausius-Duhem). В работе предлагается использовать аддитивное разложение тензора деформации ϵ и вектора электрической

индукции $\mathbf{D}$ на обратимые (линейные) и необратимые (пластические) составляющие [145]:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^l + \boldsymbol{\varepsilon}^r, \quad (1.15)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^l + \mathbf{P}^r. \quad (1.16)$$

Составляющие $\boldsymbol{\varepsilon}^l$ и $\mathbf{D}^l$ названы обратимыми, поскольку они стремятся к 0 при исчезновении внешнего воздействия (механических напряжений и электрических полей). Однако, как показано в работах [85, 335], это корректно только при независимости упругих, диэлектрических и пьезоэлектрических параметров от внутренних переменных, что в общем случае не верно для сегнетоэлектрических материалов. Также, аналогично подходу, используемому в теории пластичности, в [142–145] вводится аддитивное разложение свободной энергии ψ в виде:

$$\psi = \psi^l(\boldsymbol{\varepsilon}^l, \mathbf{D}^l) + \psi^{\text{int}}(\mathbf{P}^{\text{int}}), \quad (1.17)$$

где $\mathbf{P}^{\text{int}}$ - внутренняя переменная, характеризующая поляризацию.

Также в работах Bassiouny, Maugin [142–145] вводится понятие функции нагружения (поверхности переключений) и рассматривается изотропное и кинематическое упрочнение. В качестве одного из примеров функции нагружения при кинематическом упрочнении приводится выражение [142]:

$$f = \left\| (\mathbf{E} - {}^3\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \mathbf{E}^{\text{int}} \right\|^2 - E_c^2, \quad (1.18)$$

где ${}^3\mathbf{g}$ - тензор пьезоэлектрических коэффициентов, E_c - коэрцитивное поле (аналог предела текучести), $\mathbf{E}^{\text{int}} = \partial \psi^r / \partial \mathbf{P}^{\text{int}}$ - характеризует местоположение центра поверхности, $\|\tilde{\mathbf{E}}\| = \sqrt{\tilde{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{A} \cdot \tilde{\mathbf{E}}}$, $\mathbf{A}$ - положительно определенный симметричный тензор, позволяющий учесть анизотропию свойств переключения.

Недостатками предложенного Bassiouny, Maugin [142–145, 345, 346] подхода являются: неучет зависимости упругих, диэлектрических и пьезоэлектрических модулей материала от истории нагружения, отсутствие рецептов и примеров применения теории для описания конкретных классов материалов, отсутствие анализа возможности описания петель электромеханического гистерезиса в форме бабочки,

отсутствие примеров применения теории при многоосном нагружении. Однако, несмотря на перечисленные недостатки, следует отметить, что в указанных фундаментальных работах были сформулированы основные концепции и указаны направления дальнейших исследований.

В работах Kamla и его коллег [155, 276–281, 283, 310] предложена оригинальная феноменологическая модель, развивающая термодинамический подход Bassiouny, Maugin [142–145]. Используется аддитивное разложение (1.15)-(1.16) и, кроме того, предполагается, что тензор пластической деформации имеет две составляющие [276]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = \boldsymbol{\varepsilon}^{rE} + \boldsymbol{\varepsilon}^{r\sigma}, \quad (1.19)$$

где деформация $\boldsymbol{\varepsilon}^{rE}$ определяется *сегнетоэлектрическими* переключениями, вызванными изменением электрического поля. Следствием этого $\boldsymbol{\varepsilon}^{rE}$ является функцией только вектора поляризации $\mathbf{P}^r$ [276]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{rE} = \frac{3}{2} \varepsilon_{sat} \frac{|\mathbf{P}^r|}{P_{sat}} \left(\frac{\mathbf{P}^r \otimes \mathbf{P}^r}{|\mathbf{P}^r|^2} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \right), \quad (1.20)$$

где ε_{sat} и P_{sat} - константы материала, определяющие максимальную остаточную поляризацию и максимальную остаточную деформацию при насыщении, $\mathbf{1}$ - единичный тензор, $\otimes$ - символ диадного умножения. $\boldsymbol{\varepsilon}^{rE}$ представляет собой девиатор, что подтверждается данными опытов [158].

Второе слагаемое $\boldsymbol{\varepsilon}^{r\sigma}$ в разложении пластической деформации (1.19) связано с *сегнетоупругими* переключениями, вызванными действием механической нагрузки. Уравнения эволюции для $\mathbf{P}^r$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^{rE}$ определяются на основе ассоциированного закона с использованием четырех поверхностей нагружения [276]:

$$\begin{aligned} f^E(\mathbf{E}, \mathbf{P}^r) &= |\mathbf{E} - c^P \mathbf{P}^r| - E_c, \\ h^E(\mathbf{E}, \mathbf{P}^r, \boldsymbol{\sigma}) &= |\mathbf{P}^r| - \hat{P}_{sat}(\mathbf{E}, \mathbf{P}^r, \boldsymbol{\sigma}), \\ f^\sigma(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}^{r\sigma}, \mathbf{E}, \mathbf{P}^r) &= \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| dev(\boldsymbol{\sigma} - c^\sigma \boldsymbol{\varepsilon}^{r\sigma}) \right\| - \hat{\sigma}_c(\mathbf{E}, \mathbf{P}^r), \\ h^\sigma(\boldsymbol{\varepsilon}^{r\sigma}, \mathbf{P}^r) &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{r\sigma} \right\| - \left(\varepsilon_{sat} - \sqrt{\frac{2}{3}} \left\| \boldsymbol{\varepsilon}^{rP} \right\| \right). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Фактически вводится в рассмотрение аналог многоповерхностной теории пластичности. Кроме поверхностей переключения f^E и f^σ используются поверхности насыщения h^E и h^σ , определяющие предельно допустимые значения $\mathbf{P}^r$ и ε^{rp} . В рамках рассматриваемого подхода представлены как одноосные [278, 283], так и многоосные [276, 279] формулировки определяющих уравнений. Сравнение результатов модели с экспериментальными данными при циклическом электрическом нагружении показало удовлетворительное совпадение [276–279] для кривых диэлектрического и электромеханического гистерезиса. Произведено сравнение с результатами экспериментов при наложении сжимающих напряжений на циклическое электрическое воздействие [155], а также при сложном непропорциональном электрическом нагружении (изменении направления поляризации) [276].

В феноменологической модели Elhadrouz и др. [198–200], так же как и в модели Kamlah [276, 282], рассматриваются независимо сегнетоэлектрический $f^E = 0$ и сегнетоупругий $f^\sigma = 0$ критерии переключения. Отличие заключается в отказе от рассмотрения поверхностей насыщения и разложении остаточной поляризации по аналогии с (1.19) на две составляющие $\mathbf{P}^r = \mathbf{P}^{rE} + \mathbf{P}^{r\sigma}$, определяемые независимо сегнетоэлектрическими и сегнетоупругими переключениями. $\mathbf{P}^{r\sigma}$ определяется однозначно сегнетоупругой деформацией $\varepsilon^{r\sigma}$, а $\mathbf{P}^{rE}$ рассматривается как независимая внутренняя переменная, для определения которой вводится уравнение эволюции. Аналогичные разложения $\varepsilon^r = \varepsilon^{rE} + \varepsilon^{r\sigma}$ и $\mathbf{P}^r = \mathbf{P}^{rE} + \mathbf{P}^{r\sigma}$ использовались впоследствии в работе [185].

Cocks, McMeeking [180] предложили термодинамически согласованную *одномерную* модель, основанную на последовательном обобщении теории пластического течения с кинематическим упрочнением. Они ввели следующее уравнение для функции нагружения, ограничившись случаем одноосного нагружения

$$f = \sqrt{(E - E^B)^2 + \alpha(\sigma - \sigma^B)^2} - E_c = 0, \quad (1.22)$$

где $E^B = \partial\psi^r / \partial P^r$ и $\sigma^B = \partial\psi^r / \partial \varepsilon^r$ - обобщенные термодинамические силы, соответствующие внутренним переменным и характеризующие местоположение центра поверхности переключения, α, E_c - константы материала. Введенные величины явля-

ются обобщением понятия тензора микронапряжений в теории пластичности. Простота и прозрачность используемых концепций и отсутствие немотивированного усложнения модели выгодно отличает данную модель от всех выше рассмотренных.

Многоосная феноменологическая полностью связанная электромеханическая модель Landis [305], предложенная им в 2002 г., является обобщением одноосной модели Cocks, McMeeking [180]. В качестве внутренних переменных состояния, характеризующих термодинамическое состояние материала, выбираются вектор поляризации $\mathbf{P}^r$ и тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}^r$. Свободная энергия ψ допускает разложение на обратимую (запасаемую) энергию ψ^l и необратимую (связанную с накоплением остаточных деформаций и поляризации, упрочнением и насыщением) ψ^r [305]:

$$\psi = \psi^l(\boldsymbol{\varepsilon}^l, \mathbf{D}^l, \boldsymbol{\varepsilon}^r, \mathbf{P}^r) + \psi^r(\boldsymbol{\varepsilon}^r, \mathbf{P}^r). \quad (1.23)$$

Зависимость ψ^l от внутренних переменных (ср. с (1.17)) позволяет учесть чувствительность упругих, диэлектрических и пьезоэлектрических модулей материала к предыстории нагружения. При выполнении конкретных расчетов, так же как и в [255, 283], постулируется, что от поляризации зависят только пьезоэлектрические модули. Тензоры упругих и диэлектрических модулей от внутренних переменных не зависят, а их вид соответствует изотропному случаю. В качестве поверхности переключения рассматривается выражение [305]:

$$f = \frac{3\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}{2\sigma_c^2} + \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}}}{E_c^2} + \beta \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{P}^r}{E_c \sigma_c P_0} - 1 = 0, \quad (1.24)$$

где E_c и σ_c - коэрцитивное электрическое поле и напряжение, P_0 - максимальная остаточная поляризация при насыщении, $\hat{\mathbf{s}} = \text{dev} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \partial \psi / \partial \boldsymbol{\varepsilon}^r = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^B + \bar{\boldsymbol{\sigma}}$ и $\hat{\mathbf{E}} = \partial \psi / \partial \mathbf{P}^r = \mathbf{E} - \mathbf{E}^B + \bar{\mathbf{E}}$ - обобщенные термодинамические силы, соответствующие внутренним переменным $\boldsymbol{\varepsilon}^r$ и $\mathbf{P}^r$, $\boldsymbol{\sigma}^B = \partial \psi^r / \partial \boldsymbol{\varepsilon}^r$ и $\mathbf{E}^B = \partial \psi^r / \partial \mathbf{P}^r$ характеризуют местоположение центра поверхности переключения, $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ и $\bar{\mathbf{E}}$ учитывают зависимость модулей материала от внутренних переменных. В отличие от (1.21) в модели используется единое условие для сегнетоэлектрических и сегнетоупругих переключений.

Следствием условия максимума диссипации при наличии ограничения (1.24) получается ассоциированный закон [305]:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{E}}}, \quad \dot{\mathbf{P}}^r = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \hat{\mathbf{E}}}, \quad (1.25)$$

где $\dot{\lambda} \geq 0$ аналог пластического множителя. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными, полученными Lynch [341] на PLZT при циклическом электрическом нагружении, показало удовлетворительное совпадение для кривых диэлектрического D - E и электромеханического ε - E гистерезиса как при отсутствии, так и при наложении постоянных сжимающих напряжений, а также для кривых деполяризации σ - D и механического гистерезиса σ - ε . Кроме этого, произведено сравнение с результатами экспериментов Huber, Fleck [255] на PZT-5H при сложном непропорциональном электрическом нагружении (изменении направления поляризации).

В [307, 309] Landis представил модификацию феноменологической модели [305], отказавшись от выражения свободной энергии через главные значения тензора остаточной деформации и введя зависимость через его инварианты. Для идентификации параметров функции насыщения, требующей экспериментальных данных при различных видах деформированного состояния, было предложено использовать результаты гомогенизации (в рамках самосогласованной модели [257]) отклика поликристалла, применяя для каждого монокристалла микромеханическую модель [257].

В работе Huber, Fleck [255] предложена феноменологическая модель материала, не чувствительного к скорости нагружения, весьма близкая к модели Landis [305] с совпадающими функцией нагружения (1.24) и степенной функцией упрочнения/насыщения для поляризации. Отличие заключается только в представлении функции упрочнения/насыщения для остаточной деформации.

McMeeking и Landis [350] предложили упрощенную версию модели Landis [305]. Вместо 9 скалярных внутренних переменных (компоненты $\mathbf{P}^r$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^r$), исполь-

зуемых в [305], McMeeking и Landis [350] ограничились 3 скалярными внутренними переменными (компоненты $\mathbf{P}^r$), выразив тензор остаточных деформаций непосредственно через вектор поляризации при помощи соотношения [350]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{sat}}{P_{sat}^2} \left(\mathbf{P}^r \otimes \mathbf{P}^r - \frac{1}{3} \mathbf{1} |\mathbf{P}^r|^2 \right). \quad (1.26)$$

Условие переключения (1.24) при этом значительно упрощается [350]:

$$f = \hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}} - E_c^2 = 0. \quad (1.27)$$

Несмотря на простоту модели, она позволяет адекватно описать кривые диэлектрического и электромеханического гистерезиса. Однако эффект накопления остаточной деформации при действии только сжимающих напряжений в условиях отсутствия предварительной поляризации данная модель описать не может.

Naug, Knoblauch, McMeeking [241] рассмотрели модель с *изотропно-кинематическим* упрочнением, введенным в целях уточненного описания кривой первичной поляризации и последующего циклического нагружения в рамках единой модели. Вследствие насыщения изотропное упрочнение оказывает влияние только на этапе первичной поляризации. В [241] отмечается, что для моделирования поведения поляризованной керамики при циклическом нагружении достаточно модели кинематического упрочнения.

Guillion и др. [231–234] ввели в рассмотрение аналог вязкопластической модели с *нелинейным кинематическим упрочнением* [40], [220], [11], [161–163], [71], [12], [8]. При сравнении результатов расчетов с экспериментом при нерегулярных циклах нагружения в условиях наличия выдержек наблюдается удовлетворительное соответствие. Однако в своем исследовании авторы [231–234] ограничились рассмотрением одноосной формулировки и случаем чисто механического нагружения.

Альтернативные рассмотренным выше способам введения внутренних переменных были предложены Kamlah и Wang [284] (две внутренние переменные, характеризующие микроструктуру, учитывали долю доменов определенной ориентации и относительный уровень поляризации в выбранном направлении), Mehling и др. [351] (в качестве внутренней переменной рассматривался тензор второго порядка, характеризующий текстуру материала), Klinkel [294] (в качестве внутренних

переменных рассматривалась необратимая часть электрического поля и остаточная деформация).

В работах Meindlhumer, Pechstein и Humer [352, 383] рассматривается получение определяющих уравнений простейших феноменологических моделей на основе вариационных неравенств.

Большинство прикладных феноменологических связанных электромеханических моделей ориентировано преимущественно на описание склерономного поведения. Учет чувствительности поведения сегнетоэластичного материала к скорости нагружения произведен в ряде работ [99, 136, 207, 231–234, 266, 289, 291, 324, 326, 137, 327, 357, 364, 402, 404, 418, 429, 442, 479, 485, 141, 146, 147, 150, 176, 187, 193]. Линейные вязкие эффекты были включены в определяющие уравнения в работах [143, 170, 281, 492]. Степенной закон ползучести использовался Guillion и др. [231–234] для описания эволюции остаточной деформации и поляризации. При этом рассматривалось достаточно большое значение показателя степени (15,8 в [233]) для моделирования реакции на механическое воздействие и единичное значение для моделирования реакции на электрическое поле. Liu, Huber [326] экспериментально установили высокое значение показателя степени в законе ползучести (равное 22) при электрическом воздействии и предложили оригинальную модель для описания процесса ползучести. Реологические (структурные) модели сегнетоэластичного материала рассматривались в работах [57, 58, 98, 207]. Определяющие уравнения с использованием производных по времени дробного порядка рассматривались в [236]. Muliana и др. [289, 364, 442] использовали интегральные формулировки определяющих уравнений наследственного типа [387, 407]. Основой для верификации реономных феноменологических моделей являлись экспериментальные работы [21, 183, 325, 326, 454, 468, 485, 486, 490, 491, 493, 505, 205, 506, 508, 216, 218, 234, 244, 252, 290, 312]. Среди которых можно выделить:

- Эксперименты, связанные с анализом влияния частоты циклического нагружения на форму и величину диэлектрического и электромеханического гистерезиса [183, 252, 312, 468, 485, 486, 490, 491, 493, 508]. Наблюдаются качественно различные зависимости площади петли гистерезиса $\langle A \rangle$ от частоты f и амплитуды E_0 при низких и высоких частотах [490]: $\langle A \rangle \propto f^{1/3} E_0^{2/3}$ при $f \rightarrow 0$ и $\langle A \rangle \propto f^{-1} E_0^2$ при $f \rightarrow \infty$.

- Эксперименты на ползучесть при постоянном уровне механической или электрической нагрузки во времени [216, 218, 506, 234, 244, 290, 325, 326, 454, 485, 505].
- Эксперименты по релаксации напряжения и электрического поля [21, 205].
- Эксперименты по прямому измерению времени переключения [353, 354, 417].
- Эксперименты со ступенчато изменяющимся сжимающим напряжением [24].

Эволюция доменной структуры с учетом многоэтапности процесса переключения доменов при воздействии внешнего поля может быть эффективно описана статистической теорией Колмогорова-Аврами-Ишибаши (КАИ) [46, 138, 267, 376]. Развитие этого подхода на основе теории зарождения-роста с учетом многоосности и многостадийности процессов переключения выполнено в работах А.С. Кукушкина [32, 48]. На основе различных экспериментальных исследований, в частности путем анализа времени переключения, в BaTiO_3 в работах [211, 322, 354, 481] установлено наличие двух механизмов переключения. Первый механизм связан с образованием новых доменов при изменении направления электрического поля. Второй механизм определяется движением доменной стенки в процессе роста нового домена. Основываясь на своих опытах Merz [354] утверждает, что в процессе переключения доменов в основном доминирует время зарождения домена под действием внешнего механического или электрического поля. В работе Weiland, Lynch [479] утверждается, что вопрос о доминирующем механизме переключения является дискуссионным и до конца не решенным, однако для области применения пьезокерамики в качестве актуаторов доминирующим является механизм движения доменных стенок.

1.3.2 Микроструктурные модели

Микроструктурные (микромеханические) модели учитывают (с различной степенью детализации) особенности процессов деформирования и поляризации, происходящих на микроуровне, специфику эволюции микроструктуры (строение и тип кристаллической решетки, дискретность направления переключений, особенности процессов переключения и насыщения, полидоменную структуру, анизотропию микроэлектромеханических свойств кристаллитов, наличие и диссипативный характер движения доменных стенок, взаимное влияние кристаллитов (доменов) друг на друга и др.). Рассматриваемый класс моделей может применяться как для

монокристаллов, так и для поликристаллов. При описании поведения поликристаллических агрегатов производится осреднение откликов случайным образом ориентированных кристаллитов.

С позиции современного состояния исследований в этой области наиболее важным классификационным признаком, на основе которого все микромеханические модели можно разделить на две группы, является учет [73, 91, 369, 381, 459, 147, 148, 255, 257–259, 321, 368] или неучет [5, 164, 173, 174, 261, 262, 318, 332, 333, 356] мультимонодоменной структуры кристалла, ее кинематики и диссипативного характера движения доменных стенок.

Первая микромеханическая модель была предложена в работе Chan и Nagoor [164] в 1994 году. В ней для описания поведения поликристалла рассматривалось простое осреднение в пределах телесного угла по дискретному набору кристаллитов (300 направлений), каждый из которых представлял собой монодоменную ячейку, без учета их взаимодействия друг с другом [164]:

$$\langle \mathbf{P}^r \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \right) \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{R}(\theta, \phi, \psi) \cdot \mathbf{P}^r \sin \phi d\psi d\phi d\theta, \quad (1.28)$$

где $\mathbf{R}(\theta, \phi, \psi)$ - тензор поворота из локальной (связанной с кристаллитом) в глобальную (связанную с поликристаллом) систему координат, $\langle \mathbf{P}^r \rangle$ и $\mathbf{P}^r$ - векторы поляризации поликристалла и монокристалла.

Наиболее цитируемой работой раннего периода является статья Hwang, Lynch, McMeeking [262] 1995 г., в которой для описания процесса переключения предложен энергетический критерий и производится сравнение результатов моделирования с использованием ориентированных случайным образом 10 000 монодоменных кристаллитов с данными экспериментов на поликристаллической мягкой пьезокерамике 8/65/35 PLZT. Показано, что с помощью этой достаточно простой модели удастся описать поведение пьезокерамики при одноосном нагружении, такое как электрический и электромеханический гистерезис (кривая в форме бабочки) и механическую деполяризацию.

В вышеупомянутой и других простейших микромеханических моделях [5, 146–149, 318, 333, 356, 365] *не учитывается взаимное влияние* кристаллитов друг на друга и производится простое осреднение откликов в предположении равенства напряжений и электрических полей во всех монокристаллах. В работе Michelitsch, Kreher [356] на основе замены в модели тетрагональной анизотропии монокристаллита на трансверсальную изотропию в рамках подхода [262] удастся произвести осреднение аналитически. Вместо дискретного моделирования зерен, предложенного в работах [164] и [262], Lu, Fang, Li, Hwang [333] вводят функцию распределения ориентации для описания направлений собственных диполей в керамике.

На важность учета взаимного влияния соседних гранул друг на друга впервые обратил внимание Arlt [131]. Упрощенно это влияние учитывается при применении *самосогласованных моделей* [151, 173, 174, 255, 257, 261, 308, 319, 332, 398], основанных на использовании теории Эшелби [206], путем рассмотрения эллипсоидального включения с заданными остаточной поляризацией и деформацией. В работе Huber, Fleck, Landis, McMeeking [257] непосредственно используется самосогласованная схема гомогенизации физически нелинейно деформируемых материалов, предложенная Hill [246, 247] и разработанная Hutchinson [260] для упругопластических материалов.

Детальное описание взаимного влияния отдельных кристаллитов друг на друга достигается при использовании моделей, основанных на применении методов *конечно-элементной гомогенизации* представительного объема поликристалла [73, 91, 369, 381, 452, 103, 240, 263–265, 282, 321, 368]. Учет взаимного влияния и возникающих вследствие его наличия микронапряжений важен при анализе поведения при сложном непропорциональном и циклическом нагружении. В данной работе использован последний подход, как наиболее адекватный.

Эволюция доменной структуры в пределах кристаллита в большинстве ранних работ [5, 164, 173, 174, 261, 262, 318, 332, 333, 356] не рассматривалась. Гранула интерпретировалась как единый домен, обладающий спонтанной поляризацией в одном из дискретных направлений, определяемых типом кристаллической решетки. Впервые учет эволюции доменной структуры выполнен в работах Huo, Jiang

[258, 259]. Они указали на важность выполнения диссипативного неравенства, однако для определения концентраций доменов в кристаллите ограничились использованием условия минимума потенциальной энергии.

Учет эволюции доменной структуры и диссипативного характера движения доменных стенок предложен в работе Huber, Fleck, Landis, McMeeking [257] на основе методов *теории пластичности кристаллов* [248]. Используется аналогия при вычислении остаточной поляризации и деформации как суммы вкладов отдельных (активных) систем переключения (в пластичности кристаллов это системы скольжения). Изменение направления при переключении, так же как и в теории пластичности кристаллов скорость пластических деформаций при скольжении, определяется исключительно геометрией кристаллической решетки, информация о которой вводится в модель тензором Шмида (для деформаций) и вектором Шмида (для поляризации). Рассматривается склерономная (не чувствительная к скорости нагружения) модель материала. Уравнение для движущей силы доменной стенки определяется на основе диссипативного неравенства. Авторы используют в модели малое линейное упрочнение для регуляризации математической постановки задачи. Для каждой системы переключения вводится пороговое значение критической движущей силы. Моделирование эволюции концентрации доменов основано на подходе, используемом в трансформационной теории пластичности для описания материалов с памятью формы и процессов двойникования [253, 301, 382, 456].

Аналогия кинематики переключения сегнетоэлектрических доменов с мартенситными фазовыми превращениями (фазовых превращений типа «тело-тело») использовалась также в работах Huo, Jiang [258, 259].

Дальнейшее развитие модели [257], основанной на аналогии с теорией пластичности, получило в работах Huber, Fleck [255] и Pathak, McMeeking [381], в которых во избежание сложностей алгоритма определения активных систем переключения вводится в рассмотрение реономное (нелинейное вязкоупругое) приближение. При этом предполагается, что все системы переключения являются активными. Функция переключения аппроксимируется степенной зависимостью, которая при больших значениях показателя степени обеспечивает предельный переход

к склерономной модели. Различные модификации модели [255] рассматривались также в работах [91, 282, 321, 368].

За исключением работ Chen, Lynch [173, 174], Huber, Fleck [256] и Neumeister, Balke [368] предлагаемые микромеханические модели ограничены рассмотрением только *тетрагональных* кристаллических структур. Однако для описания морфотропной керамики PZT требуется учет смеси тетрагональной и ромбоэдрической фаз. Результаты исследований, представленные в работах Li, Soh [318] и Neumeister, Balke [368], указывают на существенное влияние фазового состава на макроскопическое сегнетоэлектрическое поведение. Следует отметить, что кроме тетрагональной и ромбоэдрической фаз может наблюдаться еще и орторомбическая фаза, учет которой в микромеханических моделях не производился.

Предложенные Stark и др. [446, 447] *гибридные* модели, сочетающие в себе возможности микромеханических и феноменологических моделей, являются одним из эффективных способов моделирования процессов необратимого деформирования и поляризации сегнетоэлектродупругих материалов.

Формулировка *критерия переключения* играет центральную роль в разработке модели сегнетоэлектродупругого материала. Прогресс в описании нелинейного поведения рассматриваемого класса материалов на основе микромеханических моделей в конце 1990х связан с использованием критерия переключения на основе энергетических принципов, введенного в работе Hwang, Lynch, McMeeking [262] для домена кристалла тетрагональной структуры в виде:

$$\mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{P}^r + \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^r \geq 2E_c P^S, \quad (1.29)$$

где $\Delta \mathbf{P}^r$ и $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^r$ - изменения вектора остаточной поляризации и тензора остаточной деформации в процессе переключения, P^S и E_c - спонтанная поляризация и критическое (коэрцитивное) электрическое поле для переключения. Энергетический барьер, который необходимо преодолеть для выполнения переключения, равен $2E_c P^S$. Он соответствует электрической работе при переключении на 180° от P^S до $-P^S$. Механическая работа при 180° переключении равна нулю по причине отсутствия изменения деформаций в этом случае.

На рациональность введения различных порогов в (1.2) для 90° и 180° переключений $2E_c^{180}P^S$ и $\sqrt{2}E_c^{90}P^S$ указывается в публикациях [432, 455, 498].

В работах McMeeking, Hwang [261, 349] и Chen, Lynch [173] на основе методов теории Эшелби произведена модификация критерия (1.29) в целях учета механического и электрического влияния соседних кристаллитов, что привело к необходимости введения в критерий микронапряжений и электрических микрополей [433]:

$$\alpha \left(\mathbf{E} + \frac{1}{3\bar{\kappa}} \mathbf{P}^{rm} \right) \cdot \Delta \mathbf{P}^r + \left(\boldsymbol{\sigma} + \frac{2\bar{Y}}{5} \boldsymbol{\varepsilon}^{rm} \right) \cdot \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^r \geq 2\bar{E}_c P^S, \quad (1.30)$$

где $\mathbf{P}^{rm}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^{rm}$ - текущие значения остаточной поляризации и остаточной деформации матрицы с диэлектрической проницаемостью $\bar{\kappa}$ и модулем Юнга $\bar{Y}$, $\Delta \mathbf{P}^r$ и $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^r$ - изменения остаточной поляризации и остаточной деформации в процессе переключения сферического включения, α - параметр модели, учитывающий вклады электрического и механического полей на процесс переключения, $\bar{E}_c$ - эффективное коэрцитивное поле.

Kessler, Balke [287] предложили критерий переключения, основанный на достижении критического значения изменения свободной энергии. Анализируя условие изменения глобальной энергии системы, они получили следующее локальное условие:

$$\frac{\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2}{2} \cdot \Delta \mathbf{P}^r + \frac{\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2}{2} \cdot \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^r + \frac{1}{2} \mathbf{E}_1 \cdot \Delta \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}_2 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \Delta \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + \frac{1}{2} (\mathbf{E}_1 \cdot \Delta \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + \mathbf{E}_2 \cdot \Delta \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma}_1) \geq G_c, \quad (1.31)$$

где $\mathbf{E}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\mathbf{E}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_2$ - векторы электрического поля и тензоры напряжения соответственно до и после переключения, $\Delta \boldsymbol{\kappa}, \Delta \mathbf{S}, \Delta \mathbf{d}$ - конечные приращения (скачки) тензора диэлектрической проницаемости, тензора упругой податливости и тензора пьезоэлектрических коэффициентов при переключении, G_c является константой материала, представляющей энергетический барьер. Следует отметить, что ранее соотношения, аналогичные (1.31), были получены для случая без учета влияния электрических полей в работе Abeyaratne, Knowles [127] и в случае присутствия электромагнитных полей в статье Jiang [272].

Huo, Jiang [258, 259] и Lu, Fang, Li, Hwang [333] ввели в рассмотрение критерии, основанные на использовании свободной энергии Гиббса:

$$g = -(\mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^r + \boldsymbol{\sigma} \cdots \boldsymbol{\varepsilon}^r + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{d} \cdots \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdots \mathbf{S} \cdots \boldsymbol{\sigma}). \quad (1.32)$$

Следует отметить, что критерий вида $-\Delta g \geq G_c$ может быть получен следствием (1.31) в предположении равенства напряжений и электрических полей до и после переключения. Ряд модификаций энергетических критериев рассмотрен в статьях [219, 432, 455, 498].

В работах Huber, Fleck и др. [255, 257] на основе анализа выражения диссипативной функции предложен следующий критерий переключения (начала движения доменной стенки):

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha^r \\ \Delta \mathbf{P}_\alpha^r \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{S}_\alpha & \Delta \mathbf{d}_\alpha \\ \Delta \mathbf{d}_\alpha & \Delta \boldsymbol{\kappa}_\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{E} \end{bmatrix} \geq G_c^\alpha, \quad (1.33)$$

где индекс α соответствует номеру потенциально активной системы переключения, G_c^α - константа материала, соответствующая критическому значению движущей силы, допускающая зависимость от номера системы переключения, и, тем самым, обеспечивающая отличие значений для 90° и 180° переключений. Заметим, что для используемого в работах [255, 257] подхода Рейсса гомогенизации в пределах кристалла, постулирующего равенство напряжений и электрического поля во всех доменах кристалла и соответственно их совпадение до и после переключения вследствие движения доменной стенки, наблюдается совпадение критерия (1.33) с критериями (1.31) и (1.32). В предположении изотропии электромеханических свойств доменов критерий (1.33) переходит в (1.29).

Возникновение нового направления *доменной инженерии* [186, 201, 380, 472], которая ставит своей целью улучшение сегнетоэлектрических свойств на основе целенаправленного дизайна доменной структуры, а также стремление к более точному описанию нелинейного поведения мультидоменных сегнетоэлектродупругих материалов, привели к разработке уточненных микромеханических моделей, учитывающих реальную доменную структуру и ее эволюцию. Рассматриваемый класс моделей основан на анализе характерных *конфигураций доменов* в виде слоистых композитных структур (Li и Liu [320], Rödel и Kreher [397–400], Tsou и Huber [363, 390, 463]) и/или использует условия совместности деформаций и поляризации доменов для описания эволюции доменной структуры (Loge и Suo [330], Yen [489], Weng и Wong [480]).

Возможностью описания эволюции доменных стенок обладает *теория фазового поля* (Chen L.-Q. и др. [165, 177], Schrader и Müller [410–413], Landis и др. [296, 453, 484], Kamlah и др. [212]), учитывающая градиент поляризации в выражении для свободной энергии и позволяющая определить границы домена и локальную ориентацию поляризации. В работе Zhang и др. [497] для описания поведения доменов было предложено использование метода конечных элементов на атомарном уровне. Перечисленные в двух последних абзацах подходы обеспечивают более глубокое понимание основных механизмов переключения доменов, но, как правило, ограничены анализом двумерных конфигураций и требуют больших вычислительных ресурсов.

Учет эффекта чувствительности поведения материала к скорости нагружения (rate dependence, темпозависимости) в рамках микромеханических моделей выполнен в работах [146, 147, 176, 187, 292, 418, 479]. Модель Cheng и др. [176] фокусирует внимание на зарождении доменов как на ведущем механизме переключения и не рассматривает процесс движения доменных стенок. Учет влияния скорости воздействия производится на основе применения статистики Больцмана для определения вероятности образования нового домена. В работах Weiland, Lynch [479] и Delibas, Arockiarajan, Seemann [187] рассматриваются реономные модели материала и учитывается наличие характерного времени переключения, зависящего от свободной энергии [479] или электрического поля [187]. Это позволяет учесть особенности процесса зарождения доменов в процессе переключения. Коэффициент мобильности доменов в рассматриваемых моделях отличается от постоянного параметра вязкости, вводимого в большинстве реономных моделей (см., например, [146, 147, 292]), ограниченных описанием только процесса движения доменных стенок без учета процесса зарождения. В работе [292] указывается на возможность введения различных энергетических барьеров для описания процессов зарождения доменов и движения доменных стенок, однако в выполненных в [292] расчетах различий между ними не делается и сравнения с результатами эксперимента не проводится.

1.4 Краевая задача механики связанных полей

На макро- и мезо-уровнях рационально отказаться от учета дискретности строения реальных тел и использовать идеализацию в виде сплошной среды (континуума), что открывает возможности использования математического аппарата дифференциального и интегрального исчисления при решении краевых задач.

1.4.1 Уравнения механостатики

Интегральные уравнения динамики деформируемых тел (уравнения динамики Эйлера [123]), записанные для произвольного объема сплошной среды, имеют вид [75], [31]:

уравнение баланса количества движения

$$\frac{d}{dt} \int_v \mathbf{v} \rho dv = \int_v \mathbf{f}_v dv + \int_s \mathbf{f}_s ds, \quad (1.34)$$

уравнение баланса момента количества движения

$$\frac{d}{dt} \int_v \mathbf{r} \times \mathbf{v} \rho dv = \int_v \mathbf{r} \times \mathbf{f}_v dv + \int_s \mathbf{r} \times \mathbf{f}_s ds, \quad (1.35)$$

где $\mathbf{v}$ - вектор скорости движения материальной частицы, ρ - плотность, $\mathbf{f}_v$ - вектор объемной силы ($\mathbf{f}_v = \rho \mathbf{f}_m$, где $\mathbf{f}_m$ - вектор массовой силы), $\mathbf{f}_s$ - вектор поверхностной силы. В левой части равенства (1.34) стоит производная по времени от количества движения системы, а в правой - главный вектор внешних сил. В левой части равенства (1.35) стоит производная по времени от момента количества движения (кинетического момента по [31]) системы, а в правой - главный момент внешних сил. Формулировки (1.34) и (1.35) основаны на пространственном (Эйлеровом) описании движения сплошной среды.

Введенные для описания движения сплошной среды уравнения (1.34) и (1.35) рассматриваются независимыми. Формулировки (1.34) и (1.35) соответствуют случаю закрытых тел, в противном случае в них следует добавить скорость подвода количества движения и кинетического момента [31].

Дифференциальные уравнения динамики деформируемых тел получаются следствием уравнений (1.34) и (1.35):

уравнение баланса количества движения

$$\dot{\rho} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_v, \quad (1.36)$$

уравнение баланса момента количества движения

$$\boldsymbol{\sigma}^T - \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (1.37)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ - тензор напряжений Коши, ∇ - набла оператор, $(\dots)^T$ - операция транспонирования. Уравнения (1.36)-(1.37) справедливы для каждой точки объема.

В рассматриваемом всюду ниже случае *квазистатики* уравнение (1.36) принимает вид:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_v = \mathbf{0}. \quad (1.38)$$

В общем случае в рамках неинфинитезимальной механики (при анализе конечных деформаций) для описания кинематики сплошной среды могут быть введены различные равноправные варианты мер и соответственно тензоров деформаций. Примерами наиболее распространенных вариантов тензоров деформаций являются [75]:

тензор деформации Коши-Грина

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2} \left[\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \mathbf{u} \overset{0}{\nabla} + \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right) \cdot \left(\mathbf{u} \overset{0}{\nabla} \right) \right], \quad (1.39)$$

тензор деформации Фингера

$$\mathbf{A}' = \frac{1}{2} \left[\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} + \mathbf{u} \overset{0}{\nabla} + \left(\mathbf{u} \overset{0}{\nabla} \right) \cdot \left(\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} \right) \right], \quad (1.40)$$

тензор деформации Альманси

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla + (\nabla \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u} \nabla) \right], \quad (1.41)$$

тензор деформации Пиола

$$\mathbf{C}' = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla + (\mathbf{u} \nabla) \cdot (\nabla \mathbf{u}) \right], \quad (1.42)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{R}$ - вектор перемещения, $\mathbf{R}$ - начальное положение материальной частицы, $\mathbf{r}$ - текущее положение, $\overset{0}{\nabla} \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}}$, $\nabla \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}}$.

В случае *малых деформаций* (данный случай представляет наибольший интерес при исследовании процессов переключения в пьезокерамике, см. (1.1)) с точностью до малых второго порядка все предложенные варианты (1.39)-(1.42) сводятся к тензору малой деформации

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) = (\nabla \mathbf{u})^S. \quad (1.43)$$

При решении краевых задач наряду с уравнениями в объеме (1.38) и (1.43) необходимо располагать *граничными условиями* на внешней поверхности, которые могут кинематическими

$$\mathbf{u}|_{s_u} = \mathbf{u}_s \quad (1.44)$$

или силовыми

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{s_\sigma} = \mathbf{f}_s, \quad (1.45)$$

где $\mathbf{n}$ - вектор внешней нормали к поверхности, $\mathbf{u}_s$ и $\mathbf{f}_s$ - заданные векторы перемещения и поверхностной силы. При этом предполагается, что ограничивающая объем v поверхность s состоит из двух частей $s = s_u \cup s_\sigma$, $s_u \cap s_\sigma = \emptyset$.

1.4.2 Уравнения электростатики

Интегральные уравнения электромагнитного поля [3, 68, 82, 111] включают в себя четыре закона:

Закон Гаусса

$$\oint_s \mathbf{D} \cdot d\mathbf{s} = q, \quad (1.46)$$

Закон Гаусса для магнитного поля

$$\oint_s \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = 0, \quad (1.47)$$

Закон индукции Фарадея

$$\oint_l \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt} \int_{s_1} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s}, \quad (1.48)$$

Закон Ампера (о циркуляции магнитного поля)

$$\oint_l \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = I + \frac{d}{dt} \int_{s_1} \mathbf{D} \cdot d\mathbf{s}, \quad (1.49)$$

где $\mathbf{D}$ - вектор электрической индукции (электрического смещения), $\mathbf{B}$ - вектор магнитной индукции, $\mathbf{E}$ - вектор напряженности электрического поля, $\mathbf{H}$ - вектор напряженности магнитного поля, $q = \int_V \rho dv$ - свободный электрический заряд в объеме V , ограниченном замкнутой поверхностью S , ρ - объемная плотность стороннего электрического заряда, $I = \int_{S_1} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{s}$ - электрический ток через поверхность S_1 , $\mathbf{j}$ - плотность электрического тока, $d\mathbf{s} = \mathbf{n}ds$. Уравнение (1.46) определяет равенство потока электрической индукции через замкнутую поверхность S величине свободного заряда в объеме, ограниченном поверхностью S . Поток магнитной индукции через замкнутую поверхность S равен нулю (1.47) (отсутствие магнитных зарядов). Уравнение (1.48) определяет равенство (со знаком минус) циркуляции электрического поля на замкнутом контуре l изменению потока магнитной индукции через поверхность S_1 . Циркуляция магнитного поля на замкнутом контуре l равна сумме электрического тока свободных зарядов и изменения потока электрической индукции через поверхность S_1 (1.49). Направление нормали $\mathbf{n}$ к поверхности S_1 выбрано так, чтобы направление обхода при интегрировании по контуру l и направление $\mathbf{n}$ образовывали праввинтовую систему.

Уравнения Максвелла в дифференциальной форме получаются следствием уравнений (1.46)-(1.49) [64, 68, 82, 111, 348]:

Закон Гаусса

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1.50)$$

Закон Гаусса для магнитного поля

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.51)$$

Закон индукции Фарадея

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.52)$$

Закон Ампера (о циркуляции магнитного поля)

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (1.53)$$

Уравнения (1.50)-(1.53) справедливы для каждой точки объема. При формулировке уравнений Максвелла в интегральной (1.46)-(1.49) и дифференциальной

(1.50)-(1.53) формах используется Международная система единиц измерения физических величин (СИ).

Джеймсом Клерком Максвеллом был введен в рассмотрение ток смещения [65, 347] - последнее слагаемое в (1.49) или (1.53), вносящее симметрию в структуру уравнений для электрического и магнитного полей (ср. (1.52) и (1.53)). С учетом этого дополнения предложенные им уравнения электродинамики используются в настоящее время. Следует отметить, что современная форма записи уравнений Максвелла (1.50)-(1.53) предложена Хевисайдом и Герцем, переформулировавших уравнения в векторном виде и отказавшихся от использования электрического и магнитного потенциалов.

Восемь скалярных уравнений Максвелла (1.50)-(1.53) совместно с шестью определяющими уравнениями связи $\mathbf{E}$ с $\mathbf{D}$ и $\mathbf{H}$ с $\mathbf{B}$ представляют 14 уравнений для определения 12 неизвестных $\mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{H}, \mathbf{B}$. Однако рассматриваемая система уравнений не является противоречивой. Это связано с тем, что соотношение (1.51) является следствием (1.52) $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) \equiv 0 = -\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{B})}{\partial t}$ при наличии соответствующего начального условия [82] $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, а уравнение (1.50) следствием (1.53) при выполнении уравнения неразрывности для зарядов (условие сохранения заряда)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (1.54)$$

В рассматриваемом ниже случае *электростатики диэлектриков* при условии отсутствия сторонних зарядов ($\rho = 0$) уравнения (1.50) и (1.52) принимают вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (1.55)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}. \quad (1.56)$$

Уравнение (1.56), представляющее собой условие безвихревого электрического поля, может быть автоматически удовлетворено при введении электрического скалярного потенциала φ :

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (1.57)$$

Вместо вектора электрической индукции $\mathbf{D}$ на практике часто используют вектор диэлектрической поляризации $\mathbf{P}$, который связан с вектором $\mathbf{D}$ соотношением:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (1.58)$$

где $\varepsilon_0 = 8,8541878 \text{ Ф/м}$ - электрическая постоянная. Для сегнетопъезокерамики, у которой значение диэлектрической проницаемости ε составляет тысячи ε_0 , влиянием первого слагаемого в правой части (1.58) пренебрегают и $\mathbf{P} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon} \mathbf{D} \approx \mathbf{D}$. Вектор поляризации $\mathbf{P}$ представляет собой дипольный момент единицы объема диэлектрика [53, 77, 82].

При решении краевых задач наряду с уравнениями в объеме (1.55) и (1.57) необходимо располагать *граничными условиями* двух типов на внешней поверхности:

$$\varphi|_{s_E} = \varphi_s \quad (1.59)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{s_D} = q_s, \quad (1.60)$$

где $\mathbf{n}$ - вектор внешней нормали к поверхности, φ_s - заданное значение потенциала, q_s - заданное значение плотности поверхностного заряда. При этом предполагается, что ограничивающая объем v поверхность s состоит из двух частей $s = s_E \cup s_D$, $s_E \cap s_D = \emptyset$.

1.4.3 Уравнения связанной квазистатической задачи электромеханики деформируемых диэлектрических сред

Формулировка общей связанной задачи электромагнитной динамики и нелинейной механики даже в пренебрежении релятивистскими эффектами является очень сложной [68, 82, 204]. Поэтому далее, ограничиваясь рассмотрением сегнетопъезокерамических материалов, используется ряд допущений, приводящих к существенному упрощению теории [6, 68, 77, 276]:

- геометрически линейная постановка задачи (деформации сегнетопъезо-керамик не превосходят 3% (см. также (1.1)); электроактивные полимеры и гели исключаются из рассмотрения в данном исследовании);
- пренебрежение намагниченностью (рассматриваемые материалы являются диэлектриками, и в них отсутствуют магнитные поля, $\mathbf{H} = \mathbf{0}$, $\mathbf{B} = \mathbf{0}$);
- пренебрежение проводимостью (в пьезокерамиках отсутствуют свободные заряды $q = 0$, способные проводить сторонние токи $\mathbf{j} = \mathbf{0}$);
- квазистатическое приближение (используются (1.55) и (1.56)).

Перечисленные предположения используются в большинстве современных исследований по прикладной электромеханике при разработке современных технических приложений [276].

При формулировке общей связанной задачи электромеханики используются электростатические уравнения (1.55) и (1.56) без внесения в них изменений, а в уравнения для описания механических полей (1.38) и (1.37) добавляются дополнительные слагаемые, обусловленные влиянием электрического поля [68, 82, 276]:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_v + \boxed{\mathbf{f}_v^e} = \mathbf{0}, \quad (1.61)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^T - \boldsymbol{\sigma} = \boxed{\mathbf{M}^e}. \quad (1.62)$$

Пондеромоторные силы $\mathbf{f}_v^e$, действующие со стороны электрического поля на частицы среды, являются объемными силами, и их, так же как и традиционные механические объемные силы, необходимо учитывать в уравнении баланса импульсов. Индуцированная в объеме тела пондеромоторная сила определяется прямым влиянием электрического поля на заряд $\mathbf{f}_v^{Lorentz} = q\mathbf{E}$ и результирующей силой, действующей на диполь в неоднородном электрическом поле [82, 276]:

$$\mathbf{f}_v^e = q\mathbf{E} + (\nabla \mathbf{E}) \cdot \mathbf{P}. \quad (1.63)$$

Пондеромоторную силу можно $\mathbf{f}_v^e$ представить как дивергенцию тензора электростатического напряжения

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^e = \mathbf{f}^e, \quad (1.64)$$

где одним из возможных вариантов представления $\boldsymbol{\sigma}^e$ является выражение [68, 276]:

$$\boldsymbol{\sigma}^e = \mathbf{E}\mathbf{P} + \varepsilon_0 \left(\mathbf{E}\mathbf{E} - \frac{1}{2}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E})\mathbf{1} \right), \quad (1.65)$$

где $\mathbf{1}$ - единичный тензор (второго ранга).

На электрические диполи (характеризуемые вектором поляризации $\mathbf{P}$), находящиеся в электрическом поле $\mathbf{E}$, действует крутящий момент $\mathbf{P} \times \mathbf{E}$ [82, 276]. Учет данного момента в интегральной формулировке баланса момента импульса приводит к следующему виду моментных напряжений в локальной формулировке (1.62) [276]:

$$\mathbf{M}^e = \mathbf{P}\mathbf{E} - \mathbf{E}\mathbf{P}. \quad (1.66)$$

Полученное выражение с учетом (1.62) указывает на то, что тензор напряжений σ в данной формулировке *не является симметричным*.

Таким образом, влияние электрического поля на механическое поведение диэлектрического деформируемого тела приводит к возникновению пондеромоторной силы $\mathbf{f}_v^e$ и антисимметричного тензора $\mathbf{M}^e$. Учет указанных факторов приводит к существенным отличиям структуры уравнений и методов решения, используемых в общей электромеханической теории (1.61), (1.62), в сравнении с уравнениями и методами решения, применяемыми в чистой механике (1.38), (1.37). Однако оценка порядка величин σ^e и $\mathbf{M}^e$ для характерных значений параметров керамики PZT ($E_c = 1 \text{ МВ/м}$, $P_{sat} = 0,5 \text{ Кл/м}^2$) приводит к следующему результату [276]:

$$\max(\|\sigma^e\|, \frac{1}{2}\|\mathbf{M}^e\|) \approx 2P_{sat}E_c \approx 1 \text{ МПа} . \quad (1.67)$$

Полученное значение мало по сравнению с характерными величинами компонент тензора напряжений σ , реализующимися на практике при эксплуатации элементов из пьезоэлектрической керамики. Поэтому, следуя общепринятому подходу [6, 68, 276], при описании поведения пьезоэлектрической керамики будем пренебрегать электрически индуцированными вкладами в уравнения механического поля и использовать симметричный тензор напряжения, что приводит следствием (1.61), (1.62) и (1.55) с учетом (1.43) и (1.57) к локальной форме уравнений квазистатической задачи электромеханики пьезокерамических сред [53, с. 105]:

$$\nabla \cdot \sigma + \mathbf{f}_v = 0, \quad \sigma^T - \sigma = 0, \quad (1.68)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (1.69)$$

$$\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^S, \quad (1.70)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (1.71)$$

1.4.4 Уравнения термодинамики

Первый закон термодинамики в интегральной форме с учетом предположений, введенных в предыдущем разделе для сегнетопьезокерамических материалов, имеет вид [68], [77], [75]:

$$\frac{d}{dt}(K + U) = P + Q + W, \quad (1.72)$$

где K – кинетическая энергия материального тела

$$K = \int_v \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rho dv, \quad (1.73)$$

U – внутренняя энергия

$$U = \int_v u \rho dv, \quad (1.74)$$

P – мощность внешних сил, приложенных к этому телу

$$P = \int_v \mathbf{f}_v \cdot \mathbf{v} dv + \int_s \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v} ds, \quad (1.75)$$

Q – скорость подвода тепла к телу извне

$$Q = \int_v b dv - \int_s \mathbf{n} \cdot \mathbf{h} ds, \quad (1.76)$$

W – скорость подвода внешней электромагнитной энергии к телу извне

$$W = \int_v w dv, \quad (1.77)$$

где v – произвольная область тела; s – поверхность, ограничивающая область v ; $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к поверхности s ; ρ – массовая плотность вещества (сегнетокерамики); $\mathbf{v}$ – скорость частицы; u – плотность внутренней энергии (предполагается, что внутренняя энтропия материального тела является аддитивной функцией массы); $\mathbf{f}_v$ – плотность объемных внешних сил; b – плотность внутренних источников тепла; $\mathbf{h}$ – вектор потока тепла (уходящего из тела через поверхность); $w = \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}}$ – мощность притока энергии электромагнитной природы (в электростатическом приближении), который в [53] определяется через работу, совершаемую над диэлектриком при изменении электрического поля.

Условие баланса энергии электромагнитного поля в объеме v определяется уравнением Умова-Пойтинга [82], [38], [26], [68], получаемым прямым следствием уравнений Максвелла (1.52), (1.53) в виде:

$$\int_v \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) dv = - \int_v \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} dv - \int_s \mathbf{n} \cdot \mathbf{S} ds, \quad (1.78)$$

где $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ – вектор потока электромагнитной энергии Умова-Пойтинга.

Для рассматриваемого в данной работе случая диэлектриков (непроводящих $\mathbf{j} = \mathbf{0}$ и с $\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} = -\nabla \times (-\nabla \varphi) \equiv \mathbf{0}$) уравнение (1.78) упрощается:

$$\int_v \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} dv = - \int_s \mathbf{n} \cdot \mathbf{S} ds, \quad (1.79)$$

что позволяет использовать в (1.77) вместо объемного поверхностный интеграл (1.79).

Второй закон термодинамики в интегральной форме (формулировка Клаузиуса-Дюгема), утверждающий, что скорость изменения внутренней энтропии материального тела не меньше, чем скорость подвода энтропии извне к этому телу [75], имеет вид [68], [77], [75]:

$$\frac{d}{dt} \int_v \eta \rho dv \geq \int_v \frac{b}{T} dv - \int_s \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{h}}{T} ds, \quad (1.80)$$

где η – плотность внутренней энтропии на единицу массы (предполагается, что внутренняя энтропия материального тела является аддитивной функцией массы), T – абсолютная температура.

Дифференциальная форма *первого закона термодинамики* для ненамагничиваемых непроводящих сред в инфинитезимальной квазистатической постановке получается следствием (1.72)-(1.77) с использованием формулы Остроградского-Гаусса и в предположении произвольности объема интегрирования [68], [77], [276, с. 231], [6], [75]:

$$\rho \dot{u} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} + b - \nabla \cdot \mathbf{h}. \quad (1.81)$$

Таким образом, влияние электрических полей на диэлектрические деформируемые материалы при малых деформациях в условиях квазистатического воздействия свелось к появлению дополнительного слагаемого $\mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}}$ в правой части (1.81), характеризующего мощность электростатического воздействия, которая наряду с мощностью механического воздействия $\boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ и скоростью подвода тепла $b - \nabla \cdot \mathbf{h}$ определяет изменение внутренней энергии.

Дифференциальная форма *второго закона термодинамики* получается следствием (1.80) на основе использования формулы Остроградского-Гаусса и в предположении произвольности объема интегрирования [77], [6], [75]:

$$\rho \dot{\eta} \geq \frac{1}{T} (b - \nabla \cdot \mathbf{h}) - \mathbf{h} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right). \quad (1.82)$$

Исключение комбинации $b - \nabla \cdot \mathbf{h}$ в (1.82) при помощи первого закона термодинамики (1.81) приводит к универсальному *диссипативному неравенству*:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} + T \rho \dot{\eta} - \rho \dot{u} - \frac{1}{T} \mathbf{h} \cdot \nabla T \geq 0. \quad (1.83)$$

Величины $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}, T$ выступают в роли обобщенных термодинамических сил, а $\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, \eta$ - обобщенных термодинамических перемещений.

Использование вместо внутренней энергии $u(\eta, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D})$ другого термодинамического потенциала - свободной энергии Гельмгольца $\psi(T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D})$:

$$\psi = u - T\eta \quad (1.84)$$

приводит к альтернативной формулировке диссипативного неравенства, получившей широкое распространение на практике:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} - \rho(\dot{\psi} + \eta \dot{T}) - \frac{1}{T} \mathbf{h} \cdot \nabla T \geq 0. \quad (1.85)$$

В изотермическом случае диссипативное неравенство имеет вид:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} - \rho \dot{\psi} \geq 0, \quad (1.86)$$

где стоящее в левой части неравенства выражение называется диссипативной функцией. Так как в диссипативное неравенство (1.86) не входят ни внешние механические воздействия, ни подвод тепла от внешнего источника, это неравенство накладывает ограничения на вид определяющих уравнений среды.

Наряду с введенными термодинамическими потенциалами: внутренней энергией u и свободной энергией Гельмгольца ψ получил распространение также ряд других вариантов потенциалов (см. Таблицу 1.1 [49, 190]), отличающихся списком аргументов. Из трех пар сопряженных переменных (η, T) , $(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ и $(\mathbf{D}, \mathbf{E})$, характеризующих тепловое, механическое и диэлектрическое состояние, три независимые переменные можно выбрать $8=2^3$ различными способами, что указывает на возможность введения 8 таких потенциалов. При рассмотрении n связанных полей возможное число термодинамических потенциалов 2^n .

Связь между термодинамическими потенциалами определяется на основе преобразования Лежандра (осуществляющего замену переменных в аргументах потенциала, при которой старая производная принимается за новую переменную, а старая переменная за новую производную). В общем случае преобразование Лежандра-Фенхеля функции f определяется равенством [81, 85, 439]:

$$f^*(\mathbf{x}^*) = \sup_{\mathbf{x} \in X} \{ \mathbf{x}^* \cdot \mathbf{x} - f(\mathbf{x}) \}, \quad \mathbf{x}^* \in X^*, \quad (1.87)$$

где f^* – сопряженная с f функция. Если функция f является собственной, выпуклой и полунепрерывной снизу, то функция f^* также будет обладать этими свойствами и, кроме того, тогда $(f^*)^* \equiv f^{**} = f$. В термодинамике обычно в качестве потенциала рассматривают сопряженную функцию со знаком минус.

Таблица 1.1 – Термодинамические потенциалы в термоэлектромеханике [49, 190]

1	Внутренняя энергия	$u(\eta, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D})$	u
2	Свободная энергия Гельмгольца	$\psi(T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D})$	$\psi = u - T\eta$
3	Энтальпия	$H(\eta, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E})$	$H = u - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}$
4	Упругая энтальпия	$H_1(\eta, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{D})$	$H_1 = u - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$
5	Электрическая энтальпия	$H_2(\eta, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E})$	$H_2 = u - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}$
6	Свободная энергия Гиббса	$g(T, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E})$	$g = u - T\eta - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}$
7	Упругая энергия Гиббса	$g_1(T, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{D})$	$g_1 = u - T\eta - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$
8	Электрическая энергия Гиббса	$g_2(T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E})$	$g_2 = u - T\eta - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}$

1.4.5 Определяющие уравнения

Рассмотренных выше, в разделах 1.4.1 и 1.4.2, уравнений баланса импульса и момента импульса, сохранения массы, заряда и энергии, уравнений связи между перемещениями и деформациями, между скалярным потенциалом и интенсивностью электрического поля недостаточно для полного описания поведения реальных тел. Своеобразие поведения конкретного материала учитывается *определяющими уравнениями* (физическими уравнениями, уравнениями состояния), необходимыми для замыкания полной системы уравнений, описывающей поведение сплошной среды. Традиционно в качестве определяющих уравнений выступают связи между независимыми и энергетически сопряженными с ними параметрами термодинамической системы, т. е. между тензором напряжений $\boldsymbol{\sigma}$, вектором напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ и температурой T с одной стороны, и тензором деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$, вектором электрической индукции $\mathbf{D}$ и энтропией η с другой.

Общая теория определяющих соотношений устанавливает обязательные ограничения, которым должны удовлетворять эти соотношения в рамках феноменологического подхода, чтобы они могли служить адекватным математическим описанием поведения реальных материалов. Ниже приводится ряд базовых положений теории определяющих соотношений, детально рассмотренных в монографиях К. Трусделла [113], А.И. Лурье [63], А.А. Ильюшина [37], В.А. Пальмова [74, 75], П.В. Трусова [78, 114], А.В. Белоконов, А.С. Скалиух [6], Дж. Астарита, Дж. Марруччи [2] и др.:

- **Тензорность соотношений.** Определяющие соотношения, как и все остальные уравнения электромеханики, должны быть инвариантны по отношению к выбору системы координат наблюдателя. Математическое описание инвариантных объектов производится при помощи тензоров различных рангов. В настоящей работе используются "прямые" (безындексные) обозначения.
- **Принцип детерминизма.** Отклик материала, описываемый в термоэлектромеханике параметрами σ , E , η , однозначно определяется *историей* термоэлектромеханического процесса, описываемого ε , D , T . Данное положение отражает *принцип причинности* поведения материала. Текущее состояние материала определяется изменением термомеханических параметров в прошлом, их историей. Будущие изменения не влияют на текущее состояние и исключаются из рассмотрения.
- **Принцип локального действия.** Термоэлектромеханическое состояние, характеризуемое σ , E , η , в *данной частице* однозначно определяется историей термоэлектромеханического процесса ε , D , T в некоторой ее *малой окрестности*.
- **Принцип материальной независимости от системы отсчета.** Определяющие уравнения остаются неизменными при изменении системы отсчета наблюдателя. Принцип материальной независимости (индифферентности, объективности) формализует свойство изотропии и однородности пространства.
- **Принцип термодинамической допустимости.** Следствием второго закона термодинамики в форме Клаузиуса-Дюгема является диссипативное неравенство (1.83), наиболее часто используемое в практических приложениях и утверждающее положительность диссипативной функции.

- **Принцип затухающей памяти.** Влияние прошлых значений параметров термоэлектромеханического процесса ϵ , $\mathbf{D}$, T на текущее состояние материала, характеризуемое σ , E , η тем слабее, чем больший промежуток времени их разделяет.

При построении определяющих уравнений для конкретизации результирующих уравнений обычно используются дополнительные предположения, справедливые только для некоторого класса материалов. Многие из них не являются общепринятыми и служат предметом дискуссий. Ниже перечислены лишь некоторые из них, без указания области применения и степени апробированности:

- принцип симметрии материала (условия анизотропии);
- принцип склерономности [83];
- концепция предельных поверхностей;
- постулат устойчивости Друккера [29];
- постулат изотропии Ильюшина [36];
- принцип Онзагера [120, 230];
- принцип запаздывания векторных и скалярных свойств [37];
- концепция микронапряжений [71];
- принцип макродетерминизма [45].

В рамках термодинамического подхода при описании необратимых процессов деформирования и поляризации наибольшее распространение получили два направления. Первое связано с использованием функционалов для описания истории деформирования, а второе с рассмотрением эволюционных уравнений внутренних переменных состояния.

Как отмечается в [334], функциональный подход был введен Б.Д. Колеманом [181], обобщившим предложенные В. Вольтерра [471] приемы описания явления наследственности в вязко-упругости. Определяющие уравнения в случае малых деформаций и изменений температуры могут быть получены следствием соотношений, представленных в [181].

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(t) = \boldsymbol{\sigma}\{\boldsymbol{\varepsilon}(\tau), \mathbf{D}(\tau), T(\tau)\}_{\tau=t_0}^{\tau=t}, \\ \mathbf{E}(t) = \mathbf{E}\{\boldsymbol{\varepsilon}(\tau), \mathbf{D}(\tau), T(\tau)\}_{\tau=t_0}^{\tau=t}, \\ \mathbf{h}(t) = \mathbf{h}\{\boldsymbol{\varepsilon}(\tau), \mathbf{D}(\tau), T(\tau)\}_{\tau=t_0}^{\tau=t}, \\ \eta(t) = \eta\{\boldsymbol{\varepsilon}(\tau), \mathbf{D}(\tau), T(\tau)\}_{\tau=t_0}^{\tau=t}, \\ \psi(t) = \psi\{\boldsymbol{\varepsilon}(\tau), \mathbf{D}(\tau), T(\tau)\}_{\tau=t_0}^{\tau=t}. \end{cases} \quad (1.88)$$

В правой части определяющих уравнений (1.88) применены функциональные операторы над историей изменения тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$, вектора электрической индукции $\mathbf{D}$ и абсолютной температуры T . Соотношения (1.88) являются математическим выражением принципа термодинамически согласованного детерминизма [113], согласно которому история термоэлектромеханического процесса $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\mathbf{D}$, T определяет реакцию материала в текущий момент времени t . На вид определяющих операторов накладывается требование, чтобы они удовлетворяли приведенному неравенству диссипации (1.83).

Альтернативным способом учета истории термодинамического процесса является введение в определяющие уравнения неинтегрального типа дополнительных независимых «термодинамических координат» - внутренних переменных состояния. Данный подход был независимо предложен А.А. Вакуленко [14], Г. Циглером [514], Р.А. Шейпери [406], К. Валанисом [465], Б.Д. Колеманом и М.Е. Гуртиным [182]. В соответствии с формализмом подхода, использующего внутренние переменные, предполагается [334], что термодинамическое состояние каждого элементарного объема описывается наблюдаемыми или *внешними* переменными, такими как деформация, диэлектрическое смещение, температура и скрытыми или *внутренними* переменными. Определяющие уравнения в этом случае могут быть записаны в виде [182]:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, T, {}^r\boldsymbol{\chi}^{(k)}), \\ \mathbf{E} = \mathbf{E}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, T, {}^r\boldsymbol{\chi}^{(k)}), \\ \mathbf{h} = \mathbf{h}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, T, {}^r\boldsymbol{\chi}^{(k)}), \\ \eta = \eta(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, T, {}^r\boldsymbol{\chi}^{(k)}), \\ \psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, T, {}^r\boldsymbol{\chi}^{(k)}), \end{cases} \quad (1.89)$$

где в список аргументов включен набор ($k = 1, \dots, N$) внутренних переменных ${}^r\boldsymbol{\chi}^{(k)}$, представляющих собой тензора r -го ранга. Для сегнетоэлектрорупругих материалов

в качестве внутренних переменных могут быть выбраны остаточная деформация ${}^2\chi^{(1)} = \epsilon^r$ и остаточная поляризация ${}^1\chi^{(2)} = \mathbf{P}^r$ [305]. В правых частях приведенных уравнений в отличие от (1.88) использованы не функционалы, а функции. Этим предполагается, что эффекты истории актуального состояния можно раскрыть путем анализа структурного состояния системы в текущий момент времени.

Внутренние переменные состояния в общем случае могут быть представлены как функционалы внешних переменных и других внутренних переменных

$${}^r\chi^{(k)}(t) = {}^r\chi^{(k)}\left\{\epsilon(\tau), \mathbf{D}(\tau), T(\tau), {}^r\chi^{(l)}(\tau)\right\}_{\tau=t_0}^{\tau=t}. \quad (1.90)$$

Однако в подавляющем большинстве работ эти функционалы вводятся неявным образом как решения системы дифференциальных уравнений (уравнений эволюции) [152, 182, 334, 384]:

$${}^r\dot{\chi}^{(k)}(t) = {}^r\Phi^{(k)}\left(\epsilon, \mathbf{D}, T, \dot{\epsilon}, \dot{\mathbf{D}}, \dot{T}, {}^r\chi^{(l)}\right). \quad (1.91)$$

Рассмотрим получение простейшего определяющего уравнения, описывающее обратимое поведение линейного пьезоэлектрика и не содержащего внутренних переменных. Для простоты ограничимся изотермическим случаем. Диссипативное неравенство (1.86) для $\psi = \psi(\epsilon, \mathbf{D})$ в случае обратимых термодинамических процессов примет вид:

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi}{\partial \epsilon}\right) \cdots \dot{\epsilon} + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi}{\partial \mathbf{D}}\right) \cdot \dot{\mathbf{D}} = 0, \quad (1.92)$$

Так как это условие обязано выполняться при любых значениях $\dot{\epsilon}$ и $\dot{\mathbf{D}}$, то должны быть справедливы следующие определяющие соотношения:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \rho\psi}{\partial \epsilon}, \quad \mathbf{E} = \frac{\partial \rho\psi}{\partial \mathbf{D}}. \quad (1.93)$$

В предположении малости изменения ϵ и $\mathbf{D}$ ограничимся в разложении свободной энергии Гельмгольца $\psi = \psi(\epsilon, \mathbf{D})$ в ряд членами не выше второго порядка малости:

$$\rho\psi = \rho_0\psi_0 + \boldsymbol{\sigma}_0 \cdots \epsilon + \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{D} + \frac{1}{2}\epsilon \cdots {}^4\mathbf{C}^D \cdots \epsilon - \mathbf{D} \cdot {}^3\mathbf{h} \cdots \epsilon + \frac{1}{2}\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\beta}^\epsilon \cdot \mathbf{D}, \quad (1.94)$$

где ${}^4C^D$ – тензор упругих модулей при постоянной индукции (4го ранга), ${}^3h$ – тензор пьезоэлектрических модулей (3го ранга) и β^ε – тензор модулей обратной диэлектрической проницаемости при постоянной деформации (2го ранга). Для простоты значения σ_0 и E_0 принимаются равными нулю (гипотеза натурального состояния), исключая из рассмотрения результаты процесса поляризации. Подстановка (1.94) в (1.93) приводит к определяющим уравнениям линейного пьезоэлектрика:

$$\begin{cases} \sigma = {}^4C^D \cdot \varepsilon - {}^3h^T \cdot D \\ E = -{}^3h \cdot \varepsilon + \beta^\varepsilon \cdot D \end{cases} \quad (1.95)$$

где введено обозначение ${}^3h^T \cdot D = D \cdot {}^3h = D_k h_{kij} e_i e_j$.

Система (1.95) может быть обращена или разрешена относительно любых двух переменных из набора $\sigma, E, \varepsilon, D$. Это может быть произведено как чисто математически на основе методов блочной инверсии систем линейных алгебраических уравнений, так и путем рассмотрения различных термодинамических потенциалов (Таблица 1.1), получаемых из (1.94) на основе преобразований Лежандра. Альтернативные формы определяющего уравнения для линейных пьезоэлектриков и формулы пересчета коэффициентов уравнений представлены в Таблице 1.2.

Широкое распространение на практике получила обращенная форма (1.95):

$$\begin{cases} \varepsilon = {}^4S^E \cdot \sigma + {}^3d^T \cdot E \\ D = {}^3d \cdot \sigma + \kappa^\sigma \cdot E \end{cases} \quad (1.96)$$

где ${}^4S^E$ – тензор модулей упругой податливости при постоянном эл. поле (4го ранга), ${}^3d$ – тензор пьезоэлектрических модулей (3го ранга) и κ^σ – тензор модулей диэлектрической проницаемости при постоянных напряжениях (2го ранга).

Численные методы решения основаны на следующей форме:

$$\begin{cases} \sigma = {}^4C^E \cdot \varepsilon - {}^3e^T \cdot E \\ D = {}^3e \cdot \varepsilon + \kappa^\varepsilon \cdot E \end{cases} \quad (1.97)$$

где ${}^4C^E$ – тензор упругих модулей при постоянном эл. поле (4го ранга), ${}^3e$ – тензор пьезоэлектрических коэффициентов (3го ранга) и κ^ε – тензор модулей диэлектрической проницаемости при постоянных деформациях (2го ранга).

Все возможные связи между 4 механическими и электрическими переменными и соответствующие 8 тензоров коэффициентов связи показаны на Рисунке 1.46.

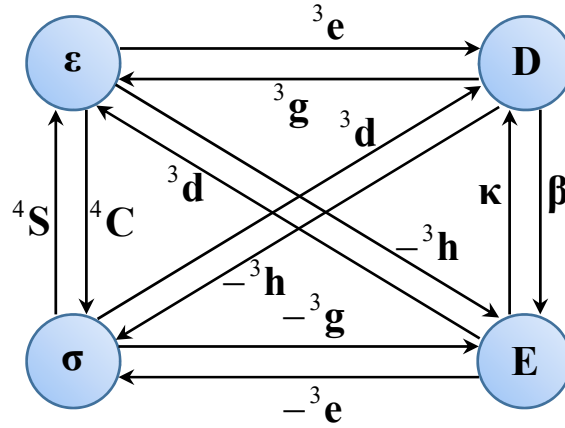


Рисунок 1.46 – Коэффициенты связей между механическими и электрическими переменными

Таблица 1.2 – Различные формы определяющих уравнения линейного пьезоэлектрического материала при изотермических условиях

Форма	Цель	Потенциал	Определяющее уравнение	Модули	Связь между модулями ↓	Связь между модулями ↑
I	ε D	$g(\sigma, E)$	$\begin{cases} \varepsilon = {}^4S^E \cdot \sigma + E \cdot {}^3d \\ D = {}^3d \cdot \sigma + k^\sigma \cdot E \end{cases}$	$\begin{matrix} {}^4S^E \\ {}^3d \\ k^\sigma \end{matrix}$	$\begin{cases} k^\sigma = \beta^{\sigma-1} \\ {}^3d = k^\sigma \cdot {}^3g \\ {}^4S^E = {}^4S^D + {}^3g^T \cdot {}^3d \end{cases}$	$\begin{cases} k^\sigma = k^\varepsilon + {}^3e \cdot {}^3d^T \\ {}^3d = {}^3e \cdot {}^4S^E \\ {}^4S^E = {}^4C^{E-1} \end{cases}$
II	σ D	$g_2(\varepsilon, E)$	$\begin{cases} \sigma = {}^4C^E \cdot \varepsilon - E \cdot {}^3e \\ D = {}^3e \cdot \varepsilon + k^\varepsilon \cdot E \end{cases}$	$\begin{matrix} {}^4C^E \\ {}^3e \\ k^\varepsilon \end{matrix}$	$\begin{cases} {}^4C^E = {}^4S^{E-1} \\ {}^3e = {}^3d \cdot {}^4C^E \\ k^\varepsilon = k^\sigma - {}^3d \cdot {}^3e^T \end{cases}$	$\begin{cases} {}^4C^E = {}^4C^D - {}^3h^T \cdot {}^3e \\ {}^3e = k^\varepsilon \cdot {}^3h \\ k^\varepsilon = \beta^{\varepsilon-1} \end{cases}$
III	σ E	$\psi(\varepsilon, D)$	$\begin{cases} \sigma = {}^4C^D \cdot \varepsilon - D \cdot {}^3h \\ E = -{}^3h \cdot \varepsilon + \beta^\varepsilon \cdot D \end{cases}$	$\begin{matrix} {}^4C^D \\ {}^3h \\ \beta^\varepsilon \end{matrix}$	$\begin{cases} \beta^\varepsilon = k^{\varepsilon-1} \\ {}^3h = \beta^\varepsilon \cdot {}^3e \\ {}^4C^D = {}^4C^E + {}^3e^T \cdot {}^3h \end{cases}$	$\begin{cases} \beta^\varepsilon = \beta^\sigma + {}^3g \cdot {}^3h^T \\ {}^3h = {}^3g \cdot {}^4C^D \\ {}^4C^D = {}^4S^{D-1} \end{cases}$
IV	ε E	$g_1(\sigma, D)$	$\begin{cases} \varepsilon = {}^4S^D \cdot \sigma + D \cdot {}^3g \\ E = -{}^3g \cdot \sigma + \beta^\sigma \cdot D \end{cases}$	$\begin{matrix} {}^4S^D \\ {}^3g \\ \beta^\sigma \end{matrix}$	$\begin{cases} {}^4S^D = {}^4C^{D-1} \\ {}^3g = {}^3h \cdot {}^4S^D \\ \beta^\sigma = \beta^\varepsilon - {}^3h \cdot {}^3g^T \end{cases}$	$\begin{cases} {}^4S^D = {}^4S^E - {}^3d^T \cdot {}^3g \\ {}^3g = \beta^\sigma \cdot {}^3d \\ \beta^\sigma = k^{\sigma-1} \end{cases}$

В общем случае для определения ${}^4S^E$, ${}^3d$, k^σ или ${}^4C^D$, ${}^3h$, β^ε необходимо задать 45 независимых компонент. Для различных случаев симметрии это число может быть понижено (см. Таблицу 1.3). Например, для монокристаллического BaTiO₃ соответ-

ствующей 4mm (выделен в таблице синей рамкой) и поликристаллической пьезокерамики (выделен в таблице красной рамкой) достаточно задать 10 констант: 6 модулей упругости, 3 пьезоэлектрических модуля и 2 коэффициента диэлектрической проницаемости. Изотропный материал не обладает пьезоэлектрическими свойствами.

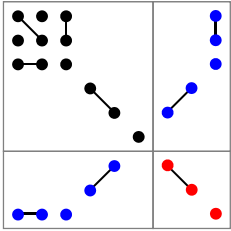
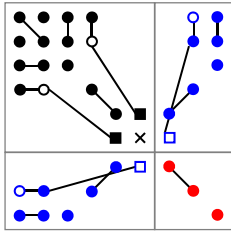
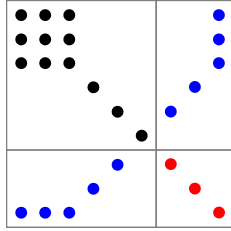
Таблица 1.3 – Число компонент тензоров свойств материала в пьезоэлектрических классах кристаллов и поликристаллической пьезокерамике [79]

Симметрия кристалла	Кристаллографическая система (сингония)	Тензор упругих модулей ${}^4C^D$		Тензор пьезоэлектрических модулей ${}^3d$		Тензор диэлектрической проницаемости κ^σ	
		Число ненулевых компонент	Число независимых компонент	Число ненулевых компонент	Число независимых компонент	Число ненулевых компонент	Число независимых компонент
1	Триклинная	36	21	18	18	9	6
2	Моноклинная	20	13	8	8	5	4
m		20	13	10	10	5	4
222	Ромбическая (орторомбическая)	12	9	3	3	3	3
mm2		12	9	5	5	3	3
4	Тетрагональная	16	7	7	4	3	2
$\overline{4}22$		12	6	2	1	3	2
4		16	7	7	4	3	2
$\overline{4}mm$		12	6	5	3	3	2
42m		12	6	3	2	3	2
3	Тригональная (ромбоэдрическая)	24	7	13	6	3	2
32		18	6	5	2	3	2
3m		18	6	8	4	3	2
$\overline{6}$	Гексагональная	12	5	7	4	3	2
6		12	5	6	2	3	2
622		12	5	2	1	3	2
$\overline{6}mm$		12	5	5	3	3	2
6m2		12	5	3	1	3	2
$\overline{2}3$	Кубическая	12	3	3	1	3	1
43m		12	3	3	1	3	1
$\infty \cdot m$	Пьезокерам. текстура	12	6	5	3	3	2
	Изотропный материал	12	2	0	0	3	1

Структура тензоров ${}^4S^E$, ${}^3d$, κ^σ для кристаллографических систем, используемых в данной работе при рассмотрении микромеханических моделей (орторомбическая система класс mm2, тетрагональная система класс 4mm, ромбоэдрическая

система класс 3m) показана в Таблице 1.4 [70, 156]. Использованы обозначения, принятые в IRE Standards on Piezoelectric Crystals [156].

Таблица 1.4 – Примеры матриц упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических модулей кристаллов тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической систем

Тетрагональная система класс 4mm	Ромбоэдрическая система класс 3m	Орторомбическая система класс mm2
		

• равные модули; ◯ противоположный знак; ▢ удвоение; ▣ удвоение с минусом; × равен $1/2(c_{11}-c_{12})$.

1.5 Краткие выводы к главе 1

Обзор экспериментальных и теоретических работ по исследованию процессов переключения в сегнетоэлектроруупругих материалах позволяет сделать следующие выводы:

1. Накоплен обширный экспериментальный материал по исследованию процессов переключения в сегнетоэлектроруупругих материалах при *одноосном* механическом, электрическом и комбинированном нагружении.
2. При *многоосном* непропорциональном нагружении экспериментальные результаты практически отсутствуют, за исключением работ двухлучевого электрического нагружения (вращение начальной поляризации).
3. Учет микроструктуры особенно важен при многоосном непропорциональном нагружении.
4. Наиболее трудным для моделирования опытом является предсказание эволюции поверхности переключения.
5. Отсутствует общепринятое объяснение экстремальных свойств вблизи морфотропной фазовой границы.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГОГО МАТЕРИАЛА

2.1 Микроструктурные модели

Микроструктурные (микромеханические) модели позволяют учесть процессы изменения структуры и особенности механизмов деформирования и поляризации на разных структурных уровнях. Для описания поведения поликристаллического сегнетоэлектрорукого материала на макроуровне используется метод многоуровневой гомогенизации, применяемый для систем, позволяющих выделить несколько характерных масштабных уровней (элементарная ячейка кристаллической решетки, домен, кристалл, поликристалл). На Рисунке 2.1 представлена иллюстрация иерархии рассматриваемых масштабных уровней для сегнетопъезокерамики с характерными размерами: элементарной ячейки периодичности $\sim 10^{-10}$ м, домена $\sim 10^{-7}$ - 10^{-5} м, кристаллита $\sim 10^{-5}$ - 10^{-4} м и размером элемента устройства $\sim 10^{-3}$ - 10^{-1} м.

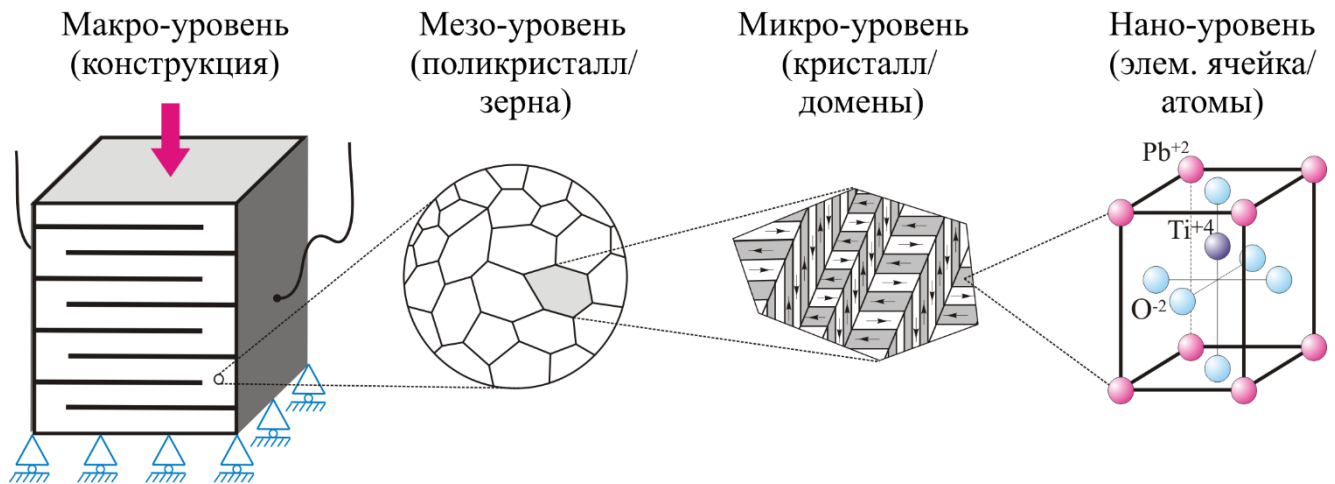


Рисунок 2.1 – Масштабные уровни поликристаллической сегнетопъезокерамики

На макро- и мезо-уровнях для описания процессов деформирования и поляризации используются методы механики сплошной среды (1.68)-(1.71). На микроуровне для описания формирования и эволюции доменных стенок применяется теория фазового поля [165, 177, 212, 296, 410–413, 453], учитывающая градиент поляризации в выражении для свободной энергии и позволяющая определить границы домена и локальную ориентацию поляризации. На нано-уровне необходимо

использовать методы квантовой механики (*ab initio*) [80] и молекулярной динамики.

В данной работе, посвященной исследованию поведения поликристаллического сегнетоэлектроругого материала на макроуровне и расчету соответствующих элементов конструкций, вводится в рассмотрение микроструктурно мотивированная и термодинамически согласованная многоуровневая модель материала, не учитывающая непосредственно динамику процессов переключения на наноуровне и упрощенно учитывающая наличие доменной структуры и особенности движения доменных стенок. Предлагаемая микроструктурная модель является ключевым элементом многоуровневой модели и описывает нелинейное связанное электромеханическое поведение *кристаллита* как мультидоменной эволюционирующей структуры с учетом возможности многофазного состава, соответствующей многовариантности направлений переключений, анизотропии электромеханических свойств доменов, диссипативного движения доменных стенок и наличия дефектов. Использование данной модели для расчетов на макроуровне требует двухуровневой гомогенизации (при переходе с микро- на мезо-уровень и при последующем переходе с мезо- на макро-уровень). Также микроструктурная модель используется для определения функциональных зависимостей свободной энергии и функции переключения феноменологической модели и идентификации их параметров (см. раздел 2.2).

Сепарабельность масштабов неоднородностей позволяет ввести в рассмотрение элементарные представительные объемы (ЭПО) на микро- и на мезо-уровнях. Гомогенизация при *переходе от мезоуровня кристаллитов на макроуровень поликристалла* в предположении возможности использования концепции безмоментной сплошной среды осуществляется в данной работе на основе метода конечных элементов. Ориентация отдельных кристаллитов в ЭПО поликристалла генерируется случайным образом. Следует отметить, что использование альтернативных упрощенных схем гомогенизации (метода самосогласования [257], статистических моделей (оценки Фойгта, Рейсса и др.)) не позволяет адекватно описать эффект взаимного влияния кристаллитов.

Связь между *макроскопическими* (для поликристалла) механическими и электрическими переменными $\{ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \bar{\boldsymbol{\sigma}}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{E}}, \bar{\psi} \}$ и переменными на *мезоуровне* (для кристаллита) $\{ \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{D}, \mathbf{E}, \psi \}$ определяется уравнениями:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{V_{\text{ЭПОП}}} \boldsymbol{\varepsilon} dV = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{\partial V_{\text{ЭПОП}}} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{n})^S dS, \quad (2.1)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{V_{\text{ЭПОП}}} \boldsymbol{\sigma} dV = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{\partial V_{\text{ЭПОП}}} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{r})^S dS, \quad (2.2)$$

$$\bar{\mathbf{D}} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{V_{\text{ЭПОП}}} \mathbf{D} dV = -\frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{\partial V_{\text{ЭПОП}}} q_s \mathbf{r} dS, \quad (2.3)$$

$$\bar{\mathbf{E}} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{V_{\text{ЭПОП}}} \mathbf{E} dV = -\frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{\partial V_{\text{ЭПОП}}} \varphi \mathbf{n} dS, \quad (2.4)$$

$$\bar{\rho} \bar{\psi} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОП}}} \int_{V_{\text{ЭПОП}}} \rho \psi dV, \quad (2.5)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\sigma}$ – тензоры деформации и напряжений, $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ – векторы электрической индукции (электрического смещения) и напряженности электрического поля, ψ – плотность свободной энергии (термодинамический потенциал Гельмгольца). В уравнениях (2.1)-(2.5) $V_{\text{ЭПОП}}$ – ЭПО поликристалла, ограниченный замкнутой поверхностью $\partial V_{\text{ЭПОП}}$ с внешней нормалью $\mathbf{n}$; $\mathbf{u}$ – вектор перемещений; $\mathbf{r}$ – радиус вектор, q_s – плотность поверхностных зарядов, φ – электрический скалярный потенциал, $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$; $\otimes$ – операция диадного умножения; $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})^S = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{a})$ – симметричная часть диады.

Гомогенизация при *переходе с уровня домена на уровень монокристалла* осуществляется аналитически в рамках осреднения Рейсса (в предположении однородности полей напряжений и напряженности электрического поля в кристалле). Введение второго уровня гомогенизации производится в упрощенной форме с целью учета полидоменной структуры кристаллита на микроуровне при описании процессов поляризации без значительного усложнения модели.

Связь между переменными на *мезоуровне* (для кристаллита) $\{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{D}, \mathbf{E}, \psi\}$ и на *микроуровне* (для домена) $\{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \tilde{\mathbf{D}}, \tilde{\mathbf{E}}, \tilde{\psi}\}$ определяется в рамках подхода Рейсса уравнениями:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} dV = \sum_{I=1}^N c_I \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I, \quad (2.6)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} dV \equiv \tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\mathbf{D}} dV = \sum_{I=1}^N c_I \tilde{\mathbf{D}}_I, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\mathbf{E}} dV \equiv \tilde{\mathbf{E}}, \quad (2.9)$$

$$\rho\psi = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\rho}\tilde{\psi} dV = \sum_{I=1}^N c_I \tilde{\rho}\tilde{\psi}_I, \quad (2.10)$$

где $V_{\text{ЭПОК}}$ – объем ЭПО кристаллита (зерна); $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I$ – тензор деформации I -го домена; $\tilde{\mathbf{D}}_I$ – вектор электрического смещения I -го домена; $\tilde{\psi}_I$ – плотность свободной энергии I -го домена, N – количество доменов в кристаллите, c_I – концентрация (объемная доля) I -го домена в монокристалле, удовлетворяющая ограничениям:

$$0 \leq c_I \leq 1, \quad \sum_{I=1}^N c_I = 1. \quad (2.11)$$

Переменные c_I могут рассматриваться в качестве скалярных внутренних переменных состояния. Математическая формулировка используемых в данной работе микромеханических моделей для описания поведения кристалла соответствует структуре уравнений (1.89), (1.91).

Реальная пространственная структура доменов в данном подходе не рассматривается. Учитывается лишь совокупный вклад доменов сонаправленной ориентации в поляризацию и деформацию кристаллита.

2.1.1 Модель монокристалла без учета дефектов

Склерономная микромеханическая модель с учетом диссипативного характера движения доменных стенок для монокристалла предложена в [257] в 1999 г и получила дальнейшее развитие в работах [91, 147, 255, 308, 321, 368, 381]. Модель имеет строгое термодинамическое обоснование и экспериментальное подтверждение [91, 257, 308, 321, 368, 381] для различных программ электромеханического воздействия.

2.1.1.1 Определяющие уравнения

При формулировке определяющих уравнений для сегнетопъезокерамики предполагается, что деформации являются малыми (см. (1.1)) и выполняются условия изотермического нагружения. Принимается, что тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ и вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ допускают декомпозицию в виде суммы линейных (обратимых) $\boldsymbol{\varepsilon}^l$, $\mathbf{D}^l$ и остаточных (аналог пластических) $\boldsymbol{\varepsilon}^r$, $\mathbf{P}^r$ составляющих:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^l + \boldsymbol{\varepsilon}^r, \quad (2.12)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^l + \mathbf{P}^r. \quad (2.13)$$

Для обратимых составляющих справедливы линейные соотношения, соответствующие линейному пьезоэлектрическому материалу (1.96):

$$\begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}^l = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r = {}^4\mathbf{S}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} + {}^3\mathbf{d}^T \cdot \mathbf{E}, \\ \mathbf{D}^l = \mathbf{D} - \mathbf{P}^r = {}^3\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\kappa}^\sigma \cdot \mathbf{E}, \end{cases} \quad (2.14)$$

которые допускают следующую обращенную форму

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = {}^4\mathbf{C}^D \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r) - {}^3\mathbf{h}^T \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r), \\ \mathbf{E} = -{}^3\mathbf{h} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r) + \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r), \end{cases} \quad (2.15)$$

где ${}^4\mathbf{S}^E$ – тензор модулей упругой податливости кристаллита при постоянном электрическом поле (4го ранга), ${}^3\mathbf{d}$ – тензор пьезоэлектрических модулей кристаллита (3го ранга) и $\boldsymbol{\kappa}^\sigma$ – тензор модулей диэлектрической проницаемости кристаллита при постоянных напряжениях (2го ранга). Тензоры ${}^4\mathbf{C}^D$, ${}^3\mathbf{h}^T$, $\boldsymbol{\beta}^\varepsilon$ определяются на основе тензоров ${}^4\mathbf{S}^E$, ${}^3\mathbf{d}^T$, $\boldsymbol{\kappa}^\sigma$ путем инверсии блочной матрицы (см. Таблицу 1.2).

Процессы необратимого деформирования и спонтанной поляризации пьезоке-
рамики связаны с возможностью скачкообразного перемещения нецентральносим-
метричных атомов кристаллической решетки. В *тетрагональном* монокристалле
реализуется $N = 6$ ориентаций спонтанной поляризации $\langle 001 \rangle$ (вдоль положитель-
ных и отрицательных направлений трех кристаллографических осей) (см. Рису-
нок 1.3), соответствующих 6 возможным вариантам доменов и $M = N \cdot (N - 1) = 30$
системам переключения. В *ромбоэдрическом* монокристалле реализуется $N = 8$
ориентаций спонтанной поляризации $\langle 111 \rangle$ (вдоль направлений четырех главных
диагоналей элементарной ячейки кристаллической решетки) (см. Рисунок 1.3), со-
ответствующих 8 возможным вариантам доменов и 56 системам переключения. В
орторомбическом монокристалле реализуется $N = 12$ ориентаций спонтанной по-
ляризации $\langle 011 \rangle$ (вдоль диагоналей граней элементарной ячейки) (см. Рисунок 1.3),
соответствующих 12 возможным вариантам доменов и 132 системам переключе-
ния. Тензор остаточной деформации и вектор остаточной поляризации кристаллита
могут быть записаны в этом случае как сумма вкладов отдельных доменов:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = \sum_{I=1}^N c_I \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r, \quad (2.16)$$

$$\mathbf{P}^r = \sum_{I=1}^N c_I \tilde{\mathbf{P}}_I^r, \quad (2.17)$$

где c_I – объемная доля (концентрация) I -го домена в монокристалле. Тильды исполь-
зуются для переменных, определяемых на уровне домена. Тензор $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r$ и вектор $\tilde{\mathbf{P}}_I^r$ яв-
ляются постоянными и определяются значениями спонтанной деформации и поля-
ризации: $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r = \boldsymbol{\varepsilon}_I^S$ и $\tilde{\mathbf{P}}_I^r = \mathbf{P}_I^S$. Конкретные значения $\boldsymbol{\varepsilon}_I^S$ и $\mathbf{P}_I^S$ для различных типов кри-
сталлической решетки представлены в Приложении А соотношениями (А.1)-(А.8).

Модули монокристалла ${}^4\mathbf{S}^E$, ${}^3\mathbf{d}$ и $\boldsymbol{\kappa}^\sigma$ определяются на основе модулей отдель-
ных доменов ${}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E$, ${}^3\tilde{\mathbf{d}}_I$ и $\tilde{\boldsymbol{\kappa}}_I^\sigma$ соотношениями, аналогичными (2.16) и (2.17):

$${}^4\mathbf{S}^E = \sum_{I=1}^N c_I {}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E, \quad {}^3\mathbf{d} = \sum_{I=1}^N c_I {}^3\tilde{\mathbf{d}}_I, \quad \boldsymbol{\kappa}^\sigma = \sum_{I=1}^N c_I \tilde{\boldsymbol{\kappa}}_I^\sigma. \quad (2.18)$$

Структура тензоров ${}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E$, ${}^3\tilde{\mathbf{d}}_I$ и $\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma$ определяется типом кристаллической решетки в зависимости от фазы (см. Таблицу 1.4).

В рамках получившего широкое распространение на практике упрощенного подхода [255, 257, 368] с использованием *изотропного* приближения для тензора упругой податливости ${}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E$ и тензора модулей диэлектрической проницаемости $\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma$ тензоры, характеризующие линейное поведение домена пьезоэлектрического материала, могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} {}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E &= \tilde{s}_1 \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \tilde{s}_2 (\mathbf{1} \bar{\otimes} \mathbf{1} + \mathbf{1} \underline{\otimes} \mathbf{1}), \\ {}^3\tilde{\mathbf{d}}_I &= \tilde{d}_{31} (\mathbf{p} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}) + \tilde{d}_{33} \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + \frac{1}{2} \tilde{d}_{15} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{p} + \mathbf{1} \bar{\otimes} \mathbf{p} - 2\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}), \\ {}^2\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma &= \tilde{\kappa} \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

где использованы символы прямого и непрямого диадного умножения $(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{ijkl} = A_{ij} B_{kl}$, $(\mathbf{A} \bar{\otimes} \mathbf{B})_{ijkl} = A_{ik} B_{jl}$, $(\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B})_{ijkl} = A_{il} B_{jk}$, $(\mathbf{A} \bar{\otimes} \mathbf{x})_{ijk} = A_{ik} x_j$, направление поляризации обозначено вектором $\mathbf{p} = \tilde{\mathbf{P}}_I^r / |\tilde{\mathbf{P}}_I^r|$. Идентификация ${}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E$, ${}^3\tilde{\mathbf{d}}_I$ и $\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma$ по (2.19) потребует определения 6 констант материала: $\tilde{s}_1 = -\tilde{\nu} / \tilde{E}$, $\tilde{s}_2 = (1 + \tilde{\nu}) / \tilde{E}$, $\tilde{d}_{31}, \tilde{d}_{33}, \tilde{d}_{15}, \tilde{\kappa}$.

В рамках модели *трансверсально-изотропного* материала [381] с нормалью к плоскости изотропии, определяемой направлением поляризации $\mathbf{p} = \tilde{\mathbf{P}}_I^r / |\tilde{\mathbf{P}}_I^r|$, выражения для линейных модулей ${}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E$, ${}^3\tilde{\mathbf{d}}_I$ и $\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma$ могут быть записаны в виде [100]:

$$\begin{aligned} {}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E &= \tilde{s}_1 \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \tilde{s}_2 (\mathbf{1} \bar{\otimes} \mathbf{1} + \mathbf{1} \underline{\otimes} \mathbf{1}) + \\ &+ \tilde{s}_3 (\mathbf{1} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{1}) + \tilde{s}_4 (\mathbf{1} \underline{\otimes} \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \underline{\otimes} \mathbf{1}) + \tilde{s}_5 (\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}), \\ {}^3\tilde{\mathbf{d}}_I &= \tilde{d}_{31} (\mathbf{p} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}) + \tilde{d}_{33} \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + \frac{1}{2} \tilde{d}_{15} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{p} + \mathbf{1} \bar{\otimes} \mathbf{p} - 2\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}), \\ {}^2\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma &= \tilde{\kappa}_{11} (\mathbf{1} - \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}) + \tilde{\kappa}_{33} \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

Для задания ${}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E$, ${}^3\tilde{\mathbf{d}}_I$ и $\tilde{\mathbf{\kappa}}_I^\sigma$ по (2.20) требуется знание 10 констант материала: $\tilde{s}_1, \tilde{s}_2, \tilde{s}_3, \tilde{s}_4, \tilde{s}_5, \tilde{d}_{31}, \tilde{d}_{33}, \tilde{d}_{15}, \tilde{\kappa}_{11}, \tilde{\kappa}_{33}$.

Скорость изменения объемной доли I -го домена монокристалла выражается через суммирование по всем системам переключения изменений концентрации I -го домена вследствие притока $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ при переключении доменов из J в I и вследствие оттока $\dot{c}^{I \rightarrow J}$ при переключении из I в J :

$$\dot{c}_I = \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N (\dot{c}^{J \rightarrow I} - \dot{c}^{I \rightarrow J}). \quad (2.21)$$

Следствием соотношений (2.16) и (2.21) скорости остаточных деформаций могут быть представлены в виде:

$$\dot{\mathbf{e}}^r = \sum_{I=1}^N \dot{c}_I \tilde{\mathbf{e}}_I^r = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N (\dot{c}^{J \rightarrow I} - \dot{c}^{I \rightarrow J}) \tilde{\mathbf{e}}_I^r = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \tilde{\mathbf{e}}_I^r - \sum_{J=1}^N \sum_{\substack{I=1 \\ I \neq J}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \tilde{\mathbf{e}}_J^r = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} (\tilde{\mathbf{e}}_I^r - \tilde{\mathbf{e}}_J^r), \quad (2.22)$$

откуда следует представление для тензора скорости остаточной деформации и аналогично получаемое выражение для вектора скорости поляризации:

$$\dot{\mathbf{e}}^r = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta \tilde{\mathbf{e}}_{J \rightarrow I}^r, \quad (2.23)$$

$$\dot{\mathbf{P}}^r = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r, \quad (2.24)$$

где $\Delta \tilde{\mathbf{e}}_{J \rightarrow I}^r = \tilde{\mathbf{e}}_I^r - \tilde{\mathbf{e}}_J^r = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{J \rightarrow I} \tilde{\varepsilon}_0^r$ и $\Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r = \tilde{\mathbf{P}}_I^r - \tilde{\mathbf{P}}_J^r = \tilde{\boldsymbol{\beta}}_{J \rightarrow I} \tilde{P}_0^r$ определяются константами, характеризующими кристаллическую решетку. $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{J \rightarrow I}$ и $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_{J \rightarrow I}$ – тензор и вектор Шмида, $\tilde{\varepsilon}_0^r$ и $\tilde{P}_0^r$ – скаляры, определяемые спонтанной деформацией и поляризацией.

Аналогичным образом на основе уравнений (2.18) и (2.21) определяются упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические модули:

$${}^4\dot{\mathbf{S}}^E = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta {}^4\tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E, \quad {}^3\dot{\mathbf{d}} = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta {}^3\tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I}, \quad \dot{\mathbf{k}}^\sigma = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta \tilde{\mathbf{k}}_{J \rightarrow I}^\sigma, \quad (2.25)$$

где $\Delta {}^4\tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E = {}^4\tilde{\mathbf{S}}_I^E - {}^4\tilde{\mathbf{S}}_J^E$, $\Delta {}^3\tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I} = {}^3\tilde{\mathbf{d}}_I - {}^3\tilde{\mathbf{d}}_J$ и $\Delta \tilde{\mathbf{k}}_{J \rightarrow I}^\sigma = \tilde{\mathbf{k}}_I^\sigma - \tilde{\mathbf{k}}_J^\sigma$ – константы материала.

Уравнения для вычисления кинематических переменных $\dot{c}^{J \rightarrow I}$, определяющих накопление остаточных деформаций (2.23) и поляризации (2.24), и играющих фундаментальную роль при описании процессов переключения, вводятся из условия априорного удовлетворения термодинамическим ограничениям.

2.1.1.2 Кинетика переключения. Движущая сила $G^{J \rightarrow I}$

Введем в рассмотрение свободную энергию (термодинамический потенциал Гельмгольца) в виде квадратичной формы (1.94) по обратимым составляющим тензора деформации и вектора индукции:

$$\rho\psi = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^I \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}^D \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^I - \mathbf{D}^I \cdot {}^3\mathbf{h} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^I + \frac{1}{2} \mathbf{D}^I \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \mathbf{D}^I. \quad (2.26)$$

Свободная энергия является функцией тензора обратимых деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}^I$ (2.14), вектора обратимого электрического смещения $\mathbf{D}^I$ (2.14), а также ряда внутренних переменных c_I : $\psi(\boldsymbol{\varepsilon}^I, \mathbf{D}^I, c_I)$. Изменение внутренних переменных c_I определяет изменение величин ${}^4\mathbf{C}^D$, ${}^3\mathbf{h}$, $\boldsymbol{\beta}^\varepsilon$, что может быть показано на основе преобразований уравнений (2.18).

Выражение свободной энергии может быть с учетом (2.14) также представлено в виде:

$$\rho\psi = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r) \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}^D \cdot \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r) - (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r) \cdot {}^3\mathbf{h} \cdot \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r) + \frac{1}{2} (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r) \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r), \quad (2.27)$$

позволяющем сделать вывод о возможности рассмотрения свободной энергии функцией тензора полных деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}$, вектора электрического смещения $\mathbf{D}$, а также ряда внутренних переменных c_I : $\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}, c_I)$. Изменение внутренних переменных c_I определяет изменение величин $\boldsymbol{\varepsilon}^r$, $\mathbf{P}^r$, ${}^4\mathbf{C}^D$, ${}^3\mathbf{h}$, $\boldsymbol{\beta}^\varepsilon$ (см. (2.16)-(2.18)).

Подстановка в диссипативное неравенство (1.86) выражения (2.27) приводит к:

$$\delta = \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} - \rho\dot{\psi} = \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right) \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi}{\partial \mathbf{D}} \right) \cdot \dot{\mathbf{D}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{P}}^r - \sum_{I=1}^N \frac{\partial \rho\psi}{\partial c_I} \dot{c}_I \geq 0. \quad (2.28)$$

Так как это условие обязано выполняться при любых значениях $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ и $\dot{\mathbf{D}}$, то должны быть справедливы следующие соотношения:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \rho\psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (2.29)$$

$$\mathbf{E} = \frac{\partial \rho\psi}{\partial \mathbf{D}}, \quad (2.30)$$

$$\delta = \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{P}}^r - \sum_{I=1}^N \frac{\partial \rho\psi}{\partial c_I} \dot{c}_I \geq 0. \quad (2.31)$$

Равенства (2.29) и (2.30) приводят к определяющим уравнениям (2.15). Неравенство (2.33) позволяет выразить мощность диссипации δ через скорости изменения остаточных деформаций и поляризации, а также скорости изменения упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических модулей при переключении:

$$\delta = \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{P}}^r + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{S}}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}^\sigma \cdot \mathbf{E}. \quad (2.32)$$

Доказательство справедливости (2.32) является достаточно громоздким и будет представлено ниже (см. (2.59)-(2.61)) с использованием компактных обозначений.

Подстановка (2.23)-(2.25) в (2.32) приводит к выражению

$$\delta = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N G^{J \rightarrow I} \dot{c}^{J \rightarrow I} \geq 0, \quad (2.33)$$

где движущая сила $G^{J \rightarrow I}$, сопряженная с $c^{J \rightarrow I}$, определяется равенством:

$$G^{J \rightarrow I} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r + \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\kappa}}_{J \rightarrow I}^\sigma \cdot \mathbf{E}. \quad (2.34)$$

Физический смысл движущей силы $G^{J \rightarrow I}$, скрывающийся за громоздкостью выражения (2.34), может быть установлен непосредственно из анализа выражения диссипации (2.31) после преобразования с учетом (2.21):

$$\delta = \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{P}}^r - \sum_{I=1}^N \frac{\partial \rho \psi}{\partial c_I} \dot{c}_I = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \left(\frac{\partial \rho \psi}{\partial c_J} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_J^r - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{P}}_J^r - \frac{\partial \rho \psi}{\partial c_I} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r + \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{P}}_I^r \right) \dot{c}^{J \rightarrow I}, \quad (2.35)$$

откуда из сравнения с (2.33) следует достаточно простое выражение

$$G^{J \rightarrow I} = \frac{\partial \rho g}{\partial c_J} - \frac{\partial \rho g}{\partial c_I}, \quad (2.36)$$

позволяющее интерпретировать $G^{J \rightarrow I}$ как величину скачка производной свободной энергии Гиббса $\rho g = \rho \psi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r - \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^r$ по концентрации при переходе через границу между доменами.

2.1.1.3 Кинематика переключения. Уравнения эволюции для $c^{J \rightarrow I}$

При формулировке уравнений эволюции наиболее простой способ обеспечить неотрицательность диссипации δ заключается в выборе линейной зависимости:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \sum_{L=1}^N \sum_{K=1}^N A^{J \rightarrow I, L \rightarrow K} G^{L \rightarrow K}, \quad (2.37)$$

где $A^{J \rightarrow I, L \rightarrow K}$ — *положительно определенная постоянная* матрица. Однако использование линейной зависимости не позволяет учесть наблюдаемое в экспериментах наличие коэрцитивного поля, резкий рост поляризации после его превышения и эффект насыщения.

В механике неупругого деформирования один из общих подходов построения термодинамически согласованных нелинейных уравнений эволюции связан с введением выпуклого потенциала (обобщенная стандартная модель материала [8, 370]). Диссипация будет неотрицательной, если ввести потенциал $\Omega(\mathbf{G})$, зависящий от движущих сил $\mathbf{G} = \{..., G^{L \rightarrow K}, ...\}$ [8, 85]:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \frac{\partial \Omega}{\partial G^{J \rightarrow I}}, \quad (2.38)$$

такой, что он является гладкой *выпуклой* функцией, положительно определенной и содержащей начало координат $\Omega(\mathbf{0}) = 0$. Дифференцируя условие выпуклости потенциала $\Omega(t\mathbf{F} + (1-t)\mathbf{G}) \leq t\Omega(\mathbf{F}) + (1-t)\Omega(\mathbf{G})$ по параметру t , получаем при $t=0$ неравенство $\left. \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{G}} \right|_{\mathbf{G}} \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{G}) \leq \Omega(\mathbf{F}) - \Omega(\mathbf{G})$, откуда при $\mathbf{F} = \mathbf{0}$ и $\Omega(\mathbf{G}) \geq \Omega(\mathbf{0})$ следует

$$\delta = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{G}} \cdot \mathbf{G} = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \frac{\partial \Omega}{\partial G^{J \rightarrow I}} G^{J \rightarrow I} \geq 0. \text{ Обобщением (2.38) на случай склерономных процес-}$$

сов является [8, 85]:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \dot{\lambda}^{J \rightarrow I} \frac{\partial \Omega}{\partial G^{J \rightarrow I}}, \quad (2.39)$$

где $\dot{\lambda}^{J \rightarrow I}$ удовлетворяет условиям Куна-Таккера $\dot{\lambda}^{J \rightarrow I} \geq 0, \Omega(\mathbf{G}) \leq 0, \dot{\lambda}^{J \rightarrow I} \Omega(\mathbf{G}) = 0$.

В зависимости от условий нагружения и методов решения задачи могут быть использованы различные форматы формулировки уравнений эволюции для $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ (реономные (2.38) и склерономные (2.39), с порогом переключения и без).

В данной работе рассматриваются 3 варианта *уравнений эволюции* для $\dot{c}^{J \rightarrow I}$, удовлетворяющие условию неотрицательности диссипации $\delta \geq 0$ и представляющие собой конкретизацию уравнений (2.38)-(2.39):

- для **реономной** модели **с порогом переключения**, представляющей собой аналог **вязкопластической** модели

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} - 1 \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq G_c^{J \rightarrow I}; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < G_c^{J \rightarrow I}; \end{cases} \quad (2.40)$$

- для **реономной** модели **без порога переключения**, представляющей собой аналог нелинейной **вязкоупругой** модели

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq 0; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < 0; \end{cases} \quad (2.41)$$

- для **склерономной** модели **с порогом переключения**, представляющей собой аналог **упругопластической** модели

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} \frac{1}{H^{J \rightarrow I}} \dot{G}^{J \rightarrow I} \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} = G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{G}^{J \rightarrow I} = \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } c_J > 0; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } G^{J \rightarrow I} = G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{G}^{J \rightarrow I} < \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } c_J = 0. \end{cases} \quad (2.42)$$

В уравнениях (2.40)-(2.42) индексы пробегает значения: $I = 1, \dots, N$, $J = 1, \dots, N$, $G_c^{J \rightarrow I} > 0$, $B^{J \rightarrow I} > 0$, $H^{J \rightarrow I} > 0$, $n > 0$, $m > 0$, $C_0 > 0$ — константы материала, определяющие форму гистерезисных кривых, $G_{c \max}^{J \rightarrow I} = G_c^{J \rightarrow I}$ — максимальное за всю предысторию нагружения неубывающее значение предела переключения. Введение последнего сомножителя $\left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m$ в (2.40)-(2.42) позволяет описать эффект насыщения и удовлетворить ограничениям (2.11), так как при исчерпании концентрации донора $c^J \rightarrow 0$ скорость переключения падает $\dot{c}^{J \rightarrow I} \rightarrow 0$, чем обеспечивается выполнение условия $c^J \geq 0$. В реономных моделях (2.40)-(2.41) параметр $B^{J \rightarrow I}$ характеризует вязкость материала (в общем случае для каждой системы переключения свою). В склерономной модели параметр $H^{J \rightarrow I}$ определяет упрочнение материала.

При $G^{J \rightarrow I} > 0$ J -ый домен выступает потенциальным донором, а I -ый домен – потенциальным акцептором. Из выражения (2.34) и равенств $\Delta \tilde{\epsilon}_{J \rightarrow I}^r = \tilde{\epsilon}_I^r - \tilde{\epsilon}_J^r = -\Delta \tilde{\epsilon}_{I \rightarrow J}^r$ и $\Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r = -\Delta \tilde{\mathbf{P}}_{I \rightarrow J}^r$, $\Delta^4 \tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E = -\Delta^4 \tilde{\mathbf{S}}_{I \rightarrow J}^E$, $\Delta^3 \tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I} = -\Delta^3 \tilde{\mathbf{d}}_{I \rightarrow J}$, $\Delta \tilde{\mathbf{k}}_{J \rightarrow I}^\sigma = -\Delta \tilde{\mathbf{k}}_{I \rightarrow J}^\sigma$ следует $G^{J \rightarrow I} = -G^{I \rightarrow J}$. При отрицательных значениях движущей силы $G^{J \rightarrow I} < 0$ для всех рассмотренных уравнений эволюции (2.40)-(2.42) имеем $\dot{c}^{J \rightarrow I} = 0$. Поэтому в паре $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ и $\dot{c}^{I \rightarrow J}$ (как минимум) одна из величин будет нулевой. Установленное свойство уменьшает число независимых переменных, характеризующих процессы переключения, $c^{J \rightarrow I}$ с N^2 до $M = N \cdot (N - 1)$, что позволяет сократить число слагаемых в выражениях (2.23)-(2.25), используя $\dot{\epsilon}^r = \sum_{I=1}^N \sum_{J=1}^{I-1} \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta \tilde{\epsilon}_{J \rightarrow I}^r$, где J – номера доменов выступающих донорами, а I – номера доменов выступающих акцепторам. Все $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ в введенной сумме неотрицательны. Аналогичные правила суммирования вводятся для $\dot{\mathbf{P}}^r$, ${}^4\dot{\mathbf{S}}^E$, ${}^3\dot{\mathbf{d}}$, $\dot{\mathbf{k}}^\sigma$.

Областью применения *склерономной модели* (2.42) являются медленные квазистатические режимы нагружения. Как показано в экспериментальных работах [502, 512] при скоростях нагружения $0,01 \div 1 E_c/s$ и $0,01 \div 1 \sigma_c/s$ наблюдается нечувствительное к скорости нагружения поведение материала. Для моделирования поведения сегнетоэлектродупругих материалов при подобных режимах нагружения, получивших широкое распространение на практике, может также применяться и *реономная модель без порога переключения* (2.41) при $n \rightarrow \infty$. В [381] при моделировании используется значение $n = 50$, в [282] $n = 40$, в [91] $n = 15$, в [255] $n = 8$. *Реономная модель с порогом переключения* (2.40) позволяет описать процессы квазистатического нагружения при $B^{J \rightarrow I} \rightarrow \infty$. При практической реализации данного класса моделей для описания квазистатического нагружения важно, чтобы характерное время реакции материала на изменение нагрузки было много меньше времени действия нагрузки [368].

Модель с порогом переключения и линейной зависимостью скорости движения доменной стенки от разности $E - E_c$ ($n = 1$ в (2.40)) рассматривалась в [217].

Уравнение эволюции (2.41) эквивалентно предложенному в [255], допускающем формулировку при произвольных (как положительных, так и отрицательных) $G^{J \rightarrow I}$:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \hat{B}^{J \rightarrow I} \frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} \left| \frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} \right|^{n-1} \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m. \quad (2.43)$$

Для обеспечения совпадения результатов при использовании (2.43) и (2.41) необходимо принять $\hat{B}^{J \rightarrow I} = B^{J \rightarrow I} / 2$.

Уравнения эволюции (2.40)-(2.42) допускают компактные представления:

- для **реономной** модели **с порогом переключения**, представляющей собой аналог **вязкопластической** модели

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = B^{J \rightarrow I} \left\langle \frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} - 1 \right\rangle^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, \quad (2.44)$$

- для **реономной** модели **без порога переключения**, представляющей собой аналог нелинейной **вязкоупругой** модели

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = B^{J \rightarrow I} \left\langle \frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} \right\rangle^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, \quad (2.45)$$

- для **склерономной** модели **с порогом переключения**, представляющей собой аналог **упругопластической** модели

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \frac{1}{H^{J \rightarrow I}} \left\langle \dot{G}^{J \rightarrow I} \right\rangle \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m H^+ (G^{J \rightarrow I} - G_{c \max}^{J \rightarrow I}) H^+ (\dot{G}^{J \rightarrow I} - \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I}) H^- (c_J), \quad (2.46)$$

где введены следующие обозначения для скобок Макойли

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2} (x + |x|) = x H^+(x) = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}, \quad (2.47)$$

и $H^-(x)$ и $H^+(x)$ для функций Хэвисайда

$$H^-(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}, \quad H^+(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}. \quad (2.48)$$

2.1.1.4 Компактная форма представления определяющих уравнений

Использование вектор-столбцов, комбинирующих в единый объект компоненты тензора, характеризующего механическое состояние, и компоненты вектора, характеризующего электрическое состояние:

$$\Sigma = \begin{Bmatrix} \sigma \\ \mathbf{E} \end{Bmatrix}, \quad \Gamma = \begin{Bmatrix} \varepsilon \\ \mathbf{D} \end{Bmatrix}, \quad \Gamma^l = \begin{Bmatrix} \varepsilon^l \\ \mathbf{P}^l \end{Bmatrix}, \quad \Gamma^r = \begin{Bmatrix} \varepsilon^r \\ \mathbf{P}^r \end{Bmatrix} \quad (2.49)$$

позволяет получить компактную форму определяющих уравнений (2.14) и (2.15):

$$\Gamma^l = \mathbb{G}^{-1} \circ \Sigma, \quad (2.50)$$

$$\Sigma = \mathbb{G} \circ \Gamma^l, \quad (2.51)$$

где $\mathbb{G}$ - матрица 9×9 линейного пьезоэлектрического отклика, а $\mathbb{G}^{-1}$ ее инверсия

$$\mathbb{G} = \begin{bmatrix} {}^4\mathbf{C}^D & -{}^3\mathbf{h}^T \\ -{}^3\mathbf{h} & \boldsymbol{\beta}^E \end{bmatrix}, \quad \mathbb{G}^{-1} = \begin{bmatrix} {}^4\mathbf{S}^E & {}^3\mathbf{d}^T \\ {}^3\mathbf{d} & \boldsymbol{\kappa}^\sigma \end{bmatrix}. \quad (2.52)$$

Условия декомпозиции обобщенных термодинамических перемещений в виде суммы линейных (обратимых) Γ^l и остаточных (аналог пластических) Γ^r составляющих (2.12) и (2.13) принимают вид:

$$\Gamma = \Gamma^l + \Gamma^r. \quad (2.53)$$

Тензор спонтанной деформации (2.16) и вектор спонтанной поляризации (2.17) могут быть записаны в этом случае как сумма вкладов доменов:

$$\Gamma^r = \sum_{I=1}^N c_I \Gamma_I^r. \quad (2.54)$$

Модули обобщенной податливости монокристалла $\mathbb{G}^{-1}$ (2.18) определяются на основе модулей отдельных доменов $\mathbb{G}_I^{-1}$ соотношениями:

$$\mathbb{G}^{-1} = \sum_{I=1}^N c_I \mathbb{G}_I^{-1}. \quad (2.55)$$

Свободная энергия (2.26) допускает представления

$$\rho\psi = \frac{1}{2} \Gamma^l \circ \mathbb{G} \circ \Gamma^l = \frac{1}{2} \Sigma \circ \Gamma^l = \frac{1}{2} \Sigma \circ \mathbb{G}^{-1} \circ \Sigma. \quad (2.56)$$

Мощность диссипации (2.32)

$$\delta = \Sigma \circ \dot{\Gamma} - \rho \dot{\psi} \quad (2.57)$$

определяется через производные по времени от величин, зависящих от внутренних переменных:

$$\delta = \Sigma \circ \dot{\Gamma}^r + \frac{1}{2} \Sigma \circ (\mathbb{G}^{-1})^{\cdot} \circ \Sigma. \quad (2.58)$$

Компактная форма определяющих уравнений помогает анализировать математическую структуру и исследовать общие свойства модели, а также избежать громоздких форм записи при формулировке дискретной модели. С использованием компактной формы значительно упрощается ряд доказательств, например (2.58).

Доказательство (2.58):

Дифференцируя (2.56)₃ по времени, приходим к соотношению:

$$\rho \dot{\psi} = \Sigma \circ \mathbb{G}^{-1} \circ \dot{\Sigma} + \frac{1}{2} \Sigma \circ (\mathbb{G}^{-1})^{\cdot} \circ \Sigma. \quad (2.59)$$

Дифференцируя (2.50) по времени и умножая на Σ , получаем:

$$\Sigma \circ \dot{\Gamma}^l = \Sigma \circ \mathbb{G}^{-1} \circ \dot{\Sigma} + \Sigma \circ (\mathbb{G}^{-1})^{\cdot} \circ \Sigma. \quad (2.60)$$

Вычитая (2.60) из (2.59), приходим к выражению:

$$\rho \dot{\psi} = \Sigma \circ \dot{\Gamma}^l - \frac{1}{2} \Sigma \circ (\mathbb{G}^{-1})^{\cdot} \circ \Sigma. \quad (2.61)$$

После подстановки (2.61) в диссипативное неравенство (2.57) приходим к искомому выражению для диссипации (2.58).

□

Подстановка (2.54) и (2.55) в (2.58) и сравнение с (2.33) позволяет определить компактную форму для выражения движущей силы $G^{J \rightarrow I}$, сопряженной с $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ (ср. также с выражением (2.34)):

$$G^{J \rightarrow I} = \Sigma \circ \Delta \Gamma_{J \rightarrow I}^r + \frac{1}{2} \Sigma \circ \Delta \mathbb{G}_{J \rightarrow I}^{-1} \circ \Sigma. \quad (2.62)$$

2.1.2 Модель монокристалла с учетом дефектов

Дефекты кристаллической решетки оказывают значительное влияние на процессы формирования и движения доменных границ и, как следствие этого, на коэрцитивное поле, время переключения и форму гистерезисных кривых, что подтверждается результатами экспериментов, выполненных на BaTiO_3 [132, 275, 342, 367, 460, 477, 495], PZT [139, 140, 160, 338, 436], PLZT [386], PMS-PZT [191], PMN-PZT [375, 496], PIN-PMN-PT [501], PNZST [487], BNT–BT [337], KNN [286, 475], KNbO_3 [213], TGS [49, 108, 288].

Точечные дефекты также оказывают существенное влияние на процессы деградации электромеханических свойств [223], возникающие либо в результате циклического электрического и/или механического воздействия (*усталость* [59, 122, 140, 223, 337–339]), либо с течением времени при отсутствии внешней механической и электрической нагрузки (*старение* [132, 160, 213, 223, 303, 361, 367, 460, 495]). Основные механизмы усталости и старения имеют аналогичный характер и непосредственно связаны с наличием и эволюцией точечных дефектов.

Многообразие потенциально возможных типов дефектов в сегнетоэлектродупругих материалах (акцепторные или донорные легирующие примеси, подвижные вакансии, электроны или дырки [49, 223]; точечные (нульмерные), линейные (одномерные), двух- и трех-мерные; заряженные и нейтральные [22, 49]; полярные и неполярные [49]; пространственно упорядоченные и разориентированные [401]; обладающие легкообращаемой и труднообращаемой поляризацией (замороженные) [121, 401]; дефекты типа «случайное локальное поле», «случайная локальная температура перехода», «случайная локальная анизотропия»; дефекты вследствие электромиграции кислородных вакансий и др.) осложняет получение единых зависимостей. Теоретическое описание фазовых переходов при наличии дефектов рассмотрено в [109, 316]. Анализ взаимодействия доменных границ с дефектами на основе аналитических методов представлен в [102, 109], на основе МКЭ в [365], на основе исследований из первых принципов в [80]. Модели, описывающие поведение сегнетоэлектродупругого материала на макроуровне, непосредственно учитывающие наличие дефектов и их эволюцию, отсутствуют.

В рамках данной работы, базирующейся на микромеханически мотивированном феноменологическом описании, предполагается, что для описания электромеханического состояния реального кристаллита дополнительно вводятся две внутренние переменные: вектор поляризации $\mathbf{P}^d$ и тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}^d$, учитывающие наличие дефектов в кристаллической решетке. Они являются дополнительными аргументами свободной энергии и уравнений эволюции других внутренних переменных. Предполагается, что возникающие вследствие появления точечных дефектов поляризация кристаллита $\mathbf{P}^d$ и его деформация $\boldsymbol{\varepsilon}^d$ определяются соотношениями:

$$\mathbf{P}^d = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\mathbf{P}}^d dV, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^d = \frac{1}{V_{\text{ЭПОК}}} \int_{V_{\text{ЭПОК}}} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^d dV. \quad (2.63)$$

Оценка подынтегральных величин в (2.63) может быть произведена на основе следующих рассуждений. Изменение дипольного момента $\tilde{\mathbf{p}}^d$ при образовании дефекта определяется выражением [49]: $\tilde{\mathbf{p}}^d = \tilde{\mathbf{p}}^s + \sum_i \tilde{q}_i \Delta \tilde{\mathbf{r}}_i$, где $\tilde{\mathbf{p}}^s$ – собственный дипольный момент дефекта в положении, отличном от центра инверсии, $\Delta \tilde{\mathbf{r}}_i$ – смещение зарядов $\tilde{q}_i$ в окружающей решетке вследствие появления дефекта. Распределение полей электрического потенциала и вектора поляризации неподвижного диполя определяются равенствами:

$$\tilde{\varphi}^d = -\tilde{\mathbf{p}}^d \cdot \nabla r^{-1} / 4\pi\varepsilon_0 = \tilde{\mathbf{p}}^d \cdot \mathbf{r} \mathbf{r}^{-3} / 4\pi\varepsilon_0, \quad (2.64)$$

$$\tilde{\mathbf{P}}^d = \tilde{\mathbf{p}}^d \cdot \nabla \nabla r^{-1} (\varepsilon - \varepsilon_0) / 4\pi\varepsilon_0 = -\tilde{\mathbf{p}}^d \cdot (\mathbf{1} - 3\mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r}^{-2}) r^{-3} (\varepsilon - \varepsilon_0) / 4\pi\varepsilon_0, \quad (2.65)$$

где $\mathbf{r}$ – радиус вектор, берущий начало из точки расположения дефекта, r – его длина, $\mathbf{1}$ – единичный тензор. В случае, если в кристалле имеется система одинаковым образом ориентированных полярных дефектов, они создают объемную поляризацию $\mathbf{P}^d = n \tilde{\mathbf{P}}^d$, где n – количество дефектов в единице объема.

В соответствии с континуальной теорией точечных дефектов [124] перемещения в неограниченном теле вследствие образования точечного дефекта (вставки/удаления несоизмерного шара в сферическую полость) и соответствующие им деформации имеют вид:

$$\tilde{\mathbf{u}}^d = -c\nabla r^{-1} = c\mathbf{r}r^{-3}, \quad (2.66)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^d = -c\nabla\nabla r^{-1} = c(\mathbf{1} - 3\mathbf{r}\mathbf{r}r^{-2})r^{-3}, \quad (2.67)$$

где $c = \Delta V / 4\pi$ – мощность дефекта, ΔV – изменение объема при вставке/удалении.

При формулировке определяющих уравнений предполагается, что $\mathbf{P}^d$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^d$, описывающие влияние дефектов, так же как и $\mathbf{P}^r, \boldsymbol{\varepsilon}^r$, учитывающие процессы переключения, представляют собой вклад в общую спонтанную поляризацию и деформацию, и поэтому вместо (2.12) и (2.13) в общем случае используются разложения:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^l + \boldsymbol{\varepsilon}^r + \boldsymbol{\varepsilon}^d, \quad (2.68)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^l + \mathbf{P}^r + \mathbf{P}^d. \quad (2.69)$$

Предполагается, что свободная энергия реального (дефектосодержащего) кристаллита допускает разложение:

$$\psi = \psi_{ideal} + \psi_{defect}, \quad (2.70)$$

где $\psi_{ideal} = \psi_{ideal}(\mathbf{D}^l, \boldsymbol{\varepsilon}^l, c_l)$ – обратимая часть свободной энергии, определяемая квадратичной формой обратимых составляющих тензора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}^l$ и вектора электрической индукции $\mathbf{D}^l$:

$$\rho\psi_{ideal} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}^l \cdot \mathbf{C}^D \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^l + \mathbf{D}^l \cdot \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^l + \frac{1}{2}\mathbf{D}^l \cdot \boldsymbol{\beta}^{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}^l, \quad (2.71)$$

$\psi_{defect} = \psi_{defect}(\mathbf{P}^d, \boldsymbol{\varepsilon}^d, \mathbf{P}^r, \boldsymbol{\varepsilon}^r)$ – свободная энергия, вызванная появлением дефектов. Аргументы $\mathbf{P}^r, \boldsymbol{\varepsilon}^r$ в функции $\psi_{defect} = \psi_{defect}(\mathbf{P}^d, \boldsymbol{\varepsilon}^d, \mathbf{P}^r, \boldsymbol{\varepsilon}^r)$ введены для учета взаимного влияния дефектов и доменных стенок. Ограничиваясь рассмотрением *линейной теории* дефектов в сегнетоэлектродупругих материалах, в рассмотрение вводится наиболее общее выражение свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы:

$$\begin{aligned} \rho\psi_{defect} = & \frac{1}{2}\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{Q}_P \cdot \mathbf{P}^d + \mathbf{P}^d \cdot {}^3\mathbf{Q}_{P\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d + \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot {}^4\mathbf{Q}_{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d + \\ & + \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{L}_P \cdot \mathbf{P}^r + \mathbf{P}^d \cdot {}^3\mathbf{L}_{P\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r + \mathbf{P}^r \cdot {}^3\mathbf{L}_{\varepsilon P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d + \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot {}^4\mathbf{L}_{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r, \end{aligned} \quad (2.72)$$

где $\mathbf{Q}_P, {}^3\mathbf{Q}_{P\varepsilon}, {}^4\mathbf{Q}_{\varepsilon}, \mathbf{L}_P, {}^3\mathbf{L}_{P\varepsilon}, {}^3\mathbf{L}_{\varepsilon P}, {}^4\mathbf{L}_{\varepsilon}$ – тензоры 2-го, 3-го и 4-го рангов, характеризующие чувствительность материала к влиянию дефектов. Q-тензоры ($\mathbf{Q}_P, {}^3\mathbf{Q}_{P\varepsilon}, {}^4\mathbf{Q}_{\varepsilon}$) используются в квадратичных членах по отношению к величинам, характеризующим дефектное состояние $\mathbf{P}^d$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^d$, L-тензоры ($\mathbf{L}_P, {}^3\mathbf{L}_{P\varepsilon}, {}^3\mathbf{L}_{\varepsilon P}, {}^4\mathbf{L}_{\varepsilon}$) – в линейных.

В силу симметрии тензоров ε^r и ε^d , $\varepsilon_{ij}^r = \varepsilon_{ji}^r$, $\varepsilon_{ij}^d = \varepsilon_{ji}^d$ ($i, j = \overline{1,3}$), тензоры ${}^3Q_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{\varepsilon P}$, ${}^4L_\varepsilon$, ${}^4Q_\varepsilon$ обладают симметрией $Q_{kij}^{P\varepsilon} = Q_{kji}^{P\varepsilon}$, $L_{kij}^{P\varepsilon} = L_{kji}^{P\varepsilon}$, $L_{kij}^{\varepsilon P} = L_{kji}^{\varepsilon P}$, $L_{ijkl}^\varepsilon = L_{jikl}^\varepsilon = L_{ijlk}^\varepsilon$, $Q_{ijkl}^\varepsilon = Q_{jikl}^\varepsilon = Q_{ijlk}^\varepsilon$. Кроме этого, тензоры Q_P и ${}^4Q_\varepsilon$ обладают симметрией $Q_{ik}^P = Q_{ki}^P$, $Q_{ijkl}^\varepsilon = Q_{klij}^\varepsilon$ вследствие идентичности левого и правого сомножителей в выражении (34). В общем случае тензоры L_P и ${}^4L_\varepsilon$ подобной симметрией не обладают. Только в случае точечных дефектов, стремящихся при переключении поляризации восстановить симметрию [213, 393, 494, 495] так, чтобы P^d стал сонаправлен с P^r , а ε^d соосен с ε^r , тензоры L_P и ${}^4L_\varepsilon$ обладают симметрией $L_{ik}^P = L_{ki}^P$, $L_{ijkl}^\varepsilon = L_{klij}^\varepsilon$. Вышеприведенные условия симметрии позволяют сократить число независимых компонент рассматриваемых тензоров, характеризующих свойства материала.

В рамках модели *трансверсально-изотропного* материала тензоры Q_P , L_P , ${}^3Q_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{\varepsilon P}$, ${}^4Q_\varepsilon$, ${}^4L_\varepsilon$, фигурирующие в выражении свободной энергии дефектов (2.72), выражаются как

$$\begin{aligned} Q_P &= Q_{11}^P (1 - p \otimes p) + Q_{33}^P p \otimes p, \\ L_P &= L_{11}^P (1 - p \otimes p) + L_{33}^P p \otimes p, \\ {}^3Q_{P\varepsilon} &= Q_{31}^{P\varepsilon} (p \otimes 1 - p \otimes p \otimes p) + Q_{33}^{P\varepsilon} p \otimes p \otimes p + \frac{1}{2} Q_{15}^{P\varepsilon} (1 \otimes p + 1 \otimes \bar{p} - 2p \otimes p \otimes p), \\ {}^3L_{P\varepsilon} &= L_{31}^{P\varepsilon} (p \otimes 1 - p \otimes p \otimes p) + L_{33}^{P\varepsilon} p \otimes p \otimes p + \frac{1}{2} L_{15}^{P\varepsilon} (1 \otimes p + 1 \otimes \bar{p} - 2p \otimes p \otimes p), \\ {}^3L_{\varepsilon P} &= L_{31}^{\varepsilon P} (p \otimes 1 - p \otimes p \otimes p) + L_{33}^{\varepsilon P} p \otimes p \otimes p + \frac{1}{2} L_{15}^{\varepsilon P} (1 \otimes p + 1 \otimes \bar{p} - 2p \otimes p \otimes p), \\ {}^4Q_\varepsilon &= Q_1^\varepsilon 1 \otimes 1 + Q_2^\varepsilon (1 \otimes \bar{1} + 1 \otimes 1) + \\ &\quad + Q_3^\varepsilon (1 \otimes p \otimes p + p \otimes p \otimes 1) + Q_4^\varepsilon (1 \otimes p \otimes p + p \otimes p \otimes 1) + Q_5^\varepsilon p \otimes p \otimes p \otimes p, \\ {}^4L_\varepsilon &= L_1^\varepsilon 1 \otimes 1 + L_2^\varepsilon (1 \otimes \bar{1} + 1 \otimes 1) + \\ &\quad + L_3^\varepsilon (1 \otimes p \otimes p + p \otimes p \otimes 1) + L_4^\varepsilon (1 \otimes p \otimes p + p \otimes p \otimes 1) + L_5^\varepsilon p \otimes p \otimes p \otimes p, \end{aligned} \quad (2.73)$$

где $p = P^r / |P^r|$ – вектор единичной нормали к плоскости изотропии, определяемой направлением поляризации P^r . Для задания тензоров Q_P , L_P , ${}^3Q_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{\varepsilon P}$, ${}^4Q_\varepsilon$, ${}^4L_\varepsilon$, в соответствии с выражениями (2.73), требуется знание 23 констант материала:

$$Q_{11}^P, Q_{33}^P, L_{11}^P, L_{33}^P, Q_{31}^{P\varepsilon}, Q_{33}^{P\varepsilon}, Q_{15}^{P\varepsilon}, L_{31}^{P\varepsilon}, L_{33}^{P\varepsilon}, L_{15}^{P\varepsilon}, L_{31}^{\varepsilon P}, L_{33}^{\varepsilon P}, L_{15}^{\varepsilon P}, Q_1^\varepsilon, Q_2^\varepsilon, Q_3^\varepsilon, Q_4^\varepsilon, Q_5^\varepsilon, L_1^\varepsilon, L_2^\varepsilon, L_3^\varepsilon, L_4^\varepsilon, L_5^\varepsilon.$$

В *изотропном* случае тензоры Q_P , L_P , ${}^3Q_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{P\varepsilon}$, ${}^3L_{\varepsilon P}$, ${}^4Q_\varepsilon$, ${}^4L_\varepsilon$ допускают следующее представление:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Q}_P &= Q^P \mathbf{1}, \\
 \mathbf{L}_P &= L^P \mathbf{1}, \\
 {}^3\mathbf{Q}_{P\varepsilon} &= {}^3\mathbf{L}_{P\varepsilon} = {}^3\mathbf{L}_{\varepsilon P} = {}^3\mathbf{0}, \\
 {}^4\mathbf{Q}_\varepsilon &= Q_1^\varepsilon \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + Q_2^\varepsilon (\mathbf{1} \bar{\otimes} \mathbf{1} + \mathbf{1} \underline{\otimes} \mathbf{1}), \\
 {}^4\mathbf{L}_\varepsilon &= L_1^\varepsilon \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + L_2^\varepsilon (\mathbf{1} \bar{\otimes} \mathbf{1} + \mathbf{1} \underline{\otimes} \mathbf{1}).
 \end{aligned} \tag{2.74}$$

Разработка *нелинейной* теории дефектов в сегнетоэлектроруких материалах связана с отказом от квадратичного представления выражения свободной энергии дефектов (2.72). Выражение для $\psi_{defect}(\mathbf{P}^d, \boldsymbol{\varepsilon}^d, \mathbf{P}^r, \boldsymbol{\varepsilon}^r)$ в общем случае допускает зависимость от 41 инварианта (структура инвариантов вводится по аналогии с подходом, используемым в [473]):

$$\begin{aligned}
 &\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{P}^r, \\
 &\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^d), & \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d, & \det(\boldsymbol{\varepsilon}^d), \\
 &\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^r), & \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r, & \det(\boldsymbol{\varepsilon}^r), \\
 &\boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r, & \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2}, & \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2}, & \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2}, \\
 &\mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^d, \\
 &\mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^r, \\
 &\mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^r, \\
 &\mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^d, \\
 &\mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^r, \\
 &\mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^r, & \mathbf{P}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^r, \\
 &\mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^d, & \mathbf{P}^r \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{d^2} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{r^2} \cdot \mathbf{P}^d.
 \end{aligned} \tag{2.75}$$

Дальнейшая конкретизация вида свободной энергии $\psi_{defect}(\mathbf{P}^d, \boldsymbol{\varepsilon}^d, \mathbf{P}^r, \boldsymbol{\varepsilon}^r)$ в рамках нелинейной теории дефектов с использованием инвариантов (2.75) требует значительного объема экспериментальных исследований при комбинированном многоосном электрическом и механическом нагружении.

Линейная теория дефектов для изотропного материала (2.74) получается частным случаем вышеописанного подхода с использованием в качестве свободной энергии дефектов линейной функции только от 6 из 41 инвариантов (2.75): $\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{P}^d$,

$\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{P}^r$, $\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^d)$, $\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^r)$, $\boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d$, $\boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r$. В этом случае свободная энергия дефектов определяется линейной комбинацией инвариантов:

$$\rho\psi_{defect} = \frac{1}{2}Q^P \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{P}^d + L^P \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{P}^r + \frac{1}{2}Q_1^\varepsilon \text{tr}^2(\boldsymbol{\varepsilon}^d) + L_1^\varepsilon \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^d) \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^r) + Q_2^\varepsilon \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d + 2L_2^\varepsilon \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r, \quad (2.76)$$

где $Q^P, L^P, Q_1^\varepsilon, Q_2^\varepsilon, L_1^\varepsilon, L_2^\varepsilon$ – константы материала, которые можно определить, например, по смещению петель гистерезиса при возникновении дефектов.

Подстановка выражений (2.70)-(2.72) в определение диссипации (2.28)₁ приводит к искомому выражению для диссипативной функции, учитывающей движение доменных стенок, их взаимодействие с дефектами и процессы дефектообразования:

$$\begin{aligned} \delta = & \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi_{ideal}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^l} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^l + \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^r} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d + \\ & + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi_{ideal}}{\partial \mathbf{D}^l} \right) \cdot \dot{\mathbf{D}}^l + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^r} \right) \cdot \dot{\mathbf{P}}^r + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d} \right) \cdot \dot{\mathbf{P}}^d - \\ & - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{S}}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{k}}^\sigma \cdot \mathbf{E} \geq 0. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Диссипация при изменении линейных обратимых деформаций и электрической индукции отсутствует, поэтому разности $\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi_{ideal}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^l}$ и $\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi_{ideal}}{\partial \mathbf{D}^l}$ должны обратиться в нуль. Отсюда следует, что тензор напряжений и вектор напряженности электрического поля, удовлетворяющие условию неотрицательности диссипации, определяются соотношениями:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \rho\psi_{ideal}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^l} = {}^4\mathbf{C}^D \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r - \boldsymbol{\varepsilon}^d) - {}^3\mathbf{h}^T \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r - \mathbf{P}^d), \\ \mathbf{E} = \frac{\partial \rho\psi_{ideal}}{\partial \mathbf{D}^l} = -{}^3\mathbf{h} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r - \boldsymbol{\varepsilon}^d) + \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}^r - \mathbf{P}^d). \end{cases} \quad (2.78)$$

Следует отметить, что в подавляющем большинстве актуальных для практики случаев последним слагаемым в круглых скобках в (2.78) можно пренебречь в силу предполагаемой малой концентрации дефектов.

Учет соотношений (2.78) в выражении (2.77) приводит к следующему выражению для диссипативной функции:

$$\begin{aligned} \delta = & \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^r} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^r} \right) \cdot \dot{\mathbf{P}}^r + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho\psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d} \right) \cdot \dot{\mathbf{P}}^d - \\ & - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{S}}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{k}}^\sigma \cdot \mathbf{E} \geq 0. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Ниже представлены конкретные выражения уравнений эволюции для случаев неизменяющихся (замороженных) и изменяющихся (переориентируемых) дефектов, полученные на основе априорного удовлетворения условию неотрицательности диссипации (2.79) для произвольных программ нагружения.

2.1.2.1 Неизменяющиеся дефекты

В случае неизменяющихся (замороженных, труднопереключаемых) дефектов, когда $\mathbf{P}^d = \text{const}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^d = \text{const}$, уравнение (2.79) упрощается:

$$\delta = \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho \psi_{\text{defect}}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^r} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho \psi_{\text{defect}}}{\partial \mathbf{P}^r} \right) \cdot \dot{\mathbf{P}}^r - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{S}}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{k}}^\sigma \cdot \mathbf{E} \geq 0. \quad (2.80)$$

Подстановка выражений $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r, \dot{\mathbf{P}}^r, \dot{\mathbf{S}}^E, \dot{\mathbf{d}}, \dot{\mathbf{k}}^\sigma$ через $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ (2.23)-(2.25) в (2.80) приводит к представлению

$$\delta = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N \left(G_{\text{ideal}}^{J \rightarrow I} - G_{\text{defect}}^{J \rightarrow I} \right) \dot{c}^{J \rightarrow I} \geq 0, \quad (2.81)$$

где движущая сила бездефектного материала $G_{\text{ideal}}^{J \rightarrow I}$ вычисляется на основе (2.34):

$$G_{\text{ideal}}^{J \rightarrow I} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r + \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{k}}_{J \rightarrow I}^\sigma \cdot \mathbf{E}. \quad (2.34)$$

Движущая сила вследствие появления дефектов $G_{\text{defect}}^{J \rightarrow I}$ определяется равенством:

$$G_{\text{defect}}^{J \rightarrow I} = \frac{\partial \rho \psi_{\text{defect}}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^r} \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r + \frac{\partial \rho \psi_{\text{defect}}}{\partial \mathbf{P}^r} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r. \quad (2.82)$$

В случае представления свободной энергии дефектов ψ_{defect} в виде квадратичной формы (2.72) с учетом анизотропии и взаимного влияния электрических и механических процессов дефектообразования выражение для $G_{\text{defect}}^{J \rightarrow I}$ (2.82) принимает вид:

$$G_{\text{defect}}^{J \rightarrow I} = \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{L}_P \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r + \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{L}_{Pe} \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r + \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r \cdot \mathbf{L}_{eP} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^d + \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \mathbf{L}_e \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r. \quad (2.83)$$

В простейшем случае представления свободной энергии ψ_{defect} в изотропном приближении (2.74) выражение (2.83) упрощается до трех слагаемых, содержащих только три скалярных параметра материала:

$$G_{\text{defect}}^{J \rightarrow I} = L^P \mathbf{P}^d \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r + L_1^e \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^d \text{tr} \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r + 2L_2^e \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^r. \quad (2.84)$$

Уравнение эволюции для $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ при наличии дефектов, безусловно удовлетворяющее условию неотрицательности диссипации $\delta \geq 0$ (см. (2.81)), принимаем в виде:

- для **реономной** модели **с порогом переключения**, представляющей собой аналог **вязкопластической** модели:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} - 1 \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} \geq G_c^{J \rightarrow I}; \\ 0, & G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} < G_c^{J \rightarrow I}; \end{cases} \quad (2.85)$$

- для **реономной** модели **без порога переключения**, представляющей собой аналог нелинейной **вязкоупругой** модели:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} \geq 0; \\ 0, & G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} < 0; \end{cases} \quad (2.86)$$

- для **склерономной** модели **с порогом переключения**, представляющей собой аналог **упругопластической** модели:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} \frac{1}{H^{J \rightarrow I}} \dot{G}_{ideal}^{J \rightarrow I} \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} = G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{G}_{ideal}^{J \rightarrow I} = \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } c_J > 0; \\ 0, & G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} < G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } G_{ideal}^{J \rightarrow I} - G_{defect}^{J \rightarrow I} = G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{G}_{ideal}^{J \rightarrow I} < \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I} \end{cases} \quad (2.87)$$

Структура уравнений (2.85)-(2.87) соответствует модели кинематического упрочнения, используемой в теории пластичности. $G_{defect}^{J \rightarrow I}$ определяет вклад системы переключения из J в I в смещение петли гистерезиса вдоль осей компонент тензора напряжений и вектора электрического поля. Наличие точечных дефектов приводит к возникновению внутренних полей смещения напряжений σ_d и электрических полей E_d , непосредственно определяющих величину сдвига центров петель гистерезисов. Как следует из выражений (2.83) и (2.34) в общем случае представления свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы (2.72) внутренние поля смещения линейно связаны с деформацией и поляризацией дефектов:

$$\begin{aligned} \sigma_d &= {}^4L_\varepsilon^T \cdot \varepsilon^d + {}^3L_{P\varepsilon}^T \cdot P^d, \\ E_d &= {}^3L_{\varepsilon P}^T \cdot \varepsilon^d + L_P^T \cdot P^d. \end{aligned} \quad (2.88)$$

Математическая структура полученных выражений (2.88) для внутренних полей смещения аналогична структуре определяющих уравнений для пьезоэлектриков (1.95). В рассматриваемом случае неизменяющихся дефектов внутренние поля смещения σ_d и E_d остаются постоянными.

Упрощенная формулировка (2.88) в изотропном приближении (2.74) приводит к отсутствию влияния перекрестных слагаемых:

$$\begin{aligned} \text{tr} \boldsymbol{\sigma}_d &= L_{tr}^\varepsilon \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^d, \\ \text{dev} \boldsymbol{\sigma}_d &= L_{dev}^\varepsilon \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^d, \\ \mathbf{E}_d &= L^P \mathbf{P}^d, \end{aligned} \quad (2.89)$$

где $L_{tr}^\varepsilon = 3L_1^\varepsilon + 2L_2^\varepsilon$, $L_{dev}^\varepsilon = 2L_2^\varepsilon$.

Использование микроструктурной модели сегнетоэластичного материала (2.82)-(2.87) с неизменяющимися дефектами $\mathbf{P}^d = \text{const}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}^d = \text{const}$ позволяют описать горизонтальное смещение петель гистерезиса (см. Раздел 6).

Альтернативным и/или дополняющим подходом учета наличия дефектов в модели может рассматриваться зависимость критического значения движущей силы $G_c^{J \rightarrow I}$ в уравнениях эволюции (2.85)-(2.87) от ориентации вектора поляризации дефектов $\mathbf{P}^d$ по отношению к действующему электрическому полю, отражающая экспериментально наблюдаемый эффект торможения движения доменных стенок при движении в направлении, противоположном начальной поляризации [184], сопровождающейся образованием фиксированных дефектов. Простейшим вариантом учета рассматриваемой зависимости является линейная аппроксимация

$$G_c^{J \rightarrow I} = G_{c0}^{J \rightarrow I} + G_{c1}^{J \rightarrow I} \cos \theta, \quad (2.90)$$

где $\cos \theta = \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{E} / (|\mathbf{P}^d| |\mathbf{E}|)$, $G_{c0}^{J \rightarrow I}$ и $G_{c1}^{J \rightarrow I}$ - константы материала, которые могут быть найдены на основе значений коэрцитивного поля при нагружении вдоль и против направления начальной поляризации. Более точного описания формы поверхности переключения можно добиться с использованием обобщения (2.90) в виде

$$G_c^{J \rightarrow I} = \sum_{k=0}^N G_{ck}^{J \rightarrow I} \cos k\theta. \quad (2.91)$$

2.1.2.2 Изменяющиеся дефекты

Дефекты под действием внешнего электрического/механического воздействия или внутренних локальных неоднородных полей могут эволюционировать, что приводит к изменению их характеристик (концентрации, направлению поляризации, дипольного момента, инвариантов). Кинетические модели изменения внутреннего поля смещения на основе переключения ориентации дипольных дефектов рассматривались в [132, 203, 331, 367], а также на основе диффузионного механизма

миграции заряженных частиц в [223, 224]. Ниже рассматривается введение уравнений эволюции в рамках микроструктурного и феноменологического подходов на основе использования законов термодинамики.

2.1.2.2.1 Микроструктурная модель эволюции дефектов

Полярные дефекты в сегнетоэлектродупругих материалах, как правило, возникают [197, 342, 494, 496, 501] при замене центрального катиона B^{4+} перовскитной структуры ABO_3 (см. Рисунок 6.1) легирующей примесью различной валентности, несовпадающей с B^{4+} . Несовпадение заряда акцепторной легирующей добавки и замещаемого иона компенсируется близлежащими кислородными вакансиями. В этом случае ориентация полярного дефекта имеет дискретный характер и направлена параллельно, антипараллельно или ортогонально вектору поляризации (см. Рисунок 2.2). Процессы миграции дефектов определяются термоактивационными процессами [132, 367, 374].

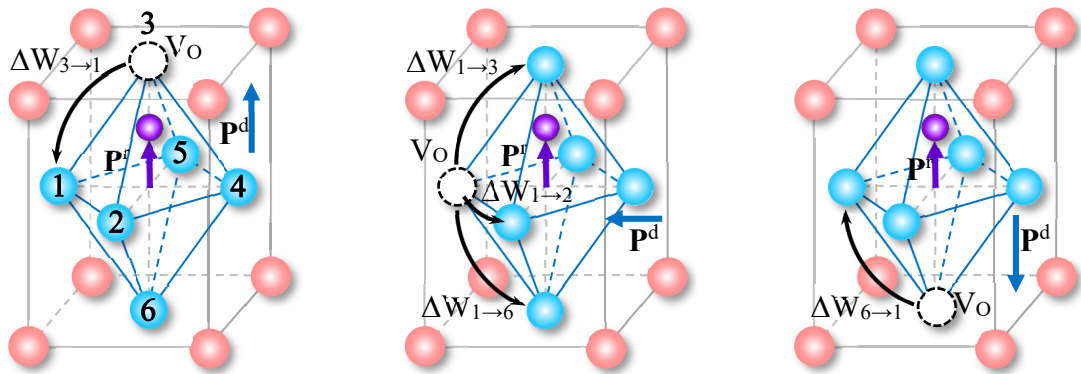


Рисунок 2.2 – Положения дефекта (кислородная вакансия V_o размещается в одной из вершин кислородного октаэдра) в титанате свинца [401] легированном акцептором. Схематически показаны пути миграции и указаны соответствующие миграционные барьеры

В микроструктурной модели эволюции дефектов учитывается дискретный характер возможных ориентаций дипольного дефекта в соответствии с расположением кислородных вакансий в элементарной кристаллической ячейке (см. Рисунок 2.2). В этом случае, по аналогии с выражениями для ϵ^r и P^r (2.16) и (2.17), деформация и поляризация дефектов определяются как сумма вкладов отдельных направлений:

$$\epsilon^d = \sum_{l=1}^L n_l \tilde{\epsilon}_l^d, \quad (2.92)$$

$$P^d = \sum_{l=1}^L n_l \tilde{P}_l^d, \quad (2.93)$$

где L – число возможных направлений ориентаций дефекта (для перовскитов тетрагональной симметрии в поляризованном состоянии $L = N = 6$), n_I – плотность дипольных дефектов определенного направления (для перовскитов тетрагональной симметрии в поляризованном состоянии совпадает с ориентацией поляризации I -го домена).

В случае принятия предположения о неизменности суммарной плотности дефектов n_0 плотность n_I удовлетворяет ограничениям:

$$0 \leq n_I \leq n_0, \quad \sum_{I=1}^L n_I = n_0. \quad (2.94)$$

Скорость изменения плотности I -го варианта дефектов выражается на основе равенства, аналогичного (2.21):

$$\dot{n}_I = \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^L (\dot{n}^{J \rightarrow I} - \dot{n}^{I \rightarrow J}). \quad (2.95)$$

Подстановка выражений: (2.16) для ϵ^r , (2.17) для $\mathbf{P}^r$, (2.92) для ϵ^d , (2.93) для $\mathbf{P}^d$ в неравенство (2.79) с учетом (2.21) и (2.95) приводит к соотношению:

$$\delta = \sum_{I=1}^N \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N G^{J \rightarrow I} \dot{c}^{J \rightarrow I} + \sum_{I=1}^L \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^L H^{J \rightarrow I} \dot{n}^{J \rightarrow I} \geq 0, \quad (2.96)$$

где движущая сила $G^{J \rightarrow I}$, сопряженная с $c^{J \rightarrow I}$, определяется равенством:

$$G^{J \rightarrow I} = \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^r} \right) \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{J \rightarrow I}^r + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^r} \right) \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r + \\ + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta^4 \tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \Delta^3 \tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{K}}_{J \rightarrow I}^\sigma \cdot \mathbf{E}, \quad (2.97)$$

а движущая сила $H^{J \rightarrow I}$, сопряженная с $n^{J \rightarrow I}$, определяется выражением:

$$H^{J \rightarrow I} = \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^d} \right) \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{J \rightarrow I}^d + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d} \right) \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^d, \quad (2.98)$$

где $\Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{J \rightarrow I}^r = \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_I^r - \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_J^r$ и $\Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r = \tilde{\mathbf{P}}_I^r - \tilde{\mathbf{P}}_J^r$ определяются константами, характеризующими изменение кристаллической решетки при переключении (см. Рисунок 1.4), $\Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{J \rightarrow I}^d = \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_I^d - \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_J^d$ и $\Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^d = \tilde{\mathbf{P}}_I^d - \tilde{\mathbf{P}}_J^d$ – константы материала, характеризующие изменение параметров дипольного дефекта при изменении местоположения кислородной вакансии в кристаллической решетке (см. Рисунок 2.2).

В простейшем случае представления свободной энергии ψ_{defect} в *изотропном* приближении (2.74) равенства (2.97)-(2.98) упрощаются:

$$G^{J \rightarrow I} = \left(\boldsymbol{\sigma} - L_1^E \text{tr} \boldsymbol{\epsilon}^d - 2L_2^E \boldsymbol{\epsilon}^d \right) \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_{J \rightarrow I}^r + \left(\mathbf{E} - L^P \mathbf{P}^d \right) \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^r + \\ + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta^4 \tilde{\mathbf{S}}_{J \rightarrow I}^E \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \Delta^3 \tilde{\mathbf{d}}_{J \rightarrow I} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{K}}_{J \rightarrow I}^\sigma \cdot \mathbf{E}, \quad (2.99)$$

$$H^{J \rightarrow I} = (\sigma - Q_1^\varepsilon \mathbf{1} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^d - 2Q_2^\varepsilon \boldsymbol{\varepsilon}^d - L_1^\varepsilon \mathbf{1} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^r - 2L_2^\varepsilon \boldsymbol{\varepsilon}^r) \cdot \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{J \rightarrow I}^d + (\mathbf{E} - Q^P \mathbf{P}^d - L^P \mathbf{P}^r) \cdot \Delta \tilde{\mathbf{P}}_{J \rightarrow I}^d. \quad (2.100)$$

Одним из возможных способов удовлетворить условие неотрицательности диссипации (2.96) является выбор уравнений эволюции для $c^{J \rightarrow I}$ и $n^{J \rightarrow I}$ в виде:

- для **реономной модели с порогом переключения** (представляющей собой аналог **вязкопластической** модели):

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} - 1 \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq G_c^{J \rightarrow I}; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < G_c^{J \rightarrow I}; \end{cases} \quad (2.101)$$

$$\dot{n}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} A^{J \rightarrow I} \left(\frac{H^{J \rightarrow I}}{H_c^{J \rightarrow I}} - 1 \right)^l \left(\frac{n_J}{N_0} \right)^q, & H^{J \rightarrow I} \geq H_c^{J \rightarrow I}; \\ 0, & H^{J \rightarrow I} < H_c^{J \rightarrow I}; \end{cases} \quad (2.102)$$

- для **реономной модели без порога переключения** (представляющей собой аналог нелинейной **вязкоупругой** модели):

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq 0; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < 0; \end{cases} \quad (2.103)$$

$$\dot{n}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} A^{J \rightarrow I} \left(\frac{H^{J \rightarrow I}}{H_c^{J \rightarrow I}} \right)^l \left(\frac{n_J}{N_0} \right)^q, & H^{J \rightarrow I} \geq 0; \\ 0, & H^{J \rightarrow I} < 0; \end{cases} \quad (2.104)$$

- для **склерономной модели с порогом переключения** (представляющей собой аналог **упругопластической** модели):

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} \frac{1}{D^{J \rightarrow I}} \dot{G}^{J \rightarrow I} \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} = G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{G}^{J \rightarrow I} = \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } c_J > 0; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } G^{J \rightarrow I} = G_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{G}^{J \rightarrow I} < \dot{G}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } c_J = 0; \end{cases} \quad (2.105)$$

$$\dot{n}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} \frac{1}{C^{J \rightarrow I}} \dot{H}^{J \rightarrow I} \left(\frac{n_J}{N_0} \right)^q, & H^{J \rightarrow I} = H_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{H}^{J \rightarrow I} = \dot{H}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } n_J > 0; \\ 0, & H^{J \rightarrow I} < H_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } H^{J \rightarrow I} = H_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ и } \dot{H}^{J \rightarrow I} < \dot{H}_{c \max}^{J \rightarrow I} \text{ или } n_J = 0, \end{cases} \quad (2.106)$$

где $G_c^{J \rightarrow I} > 0, B^{J \rightarrow I} > 0, D^{J \rightarrow I} > 0, n > 0, m > 0, C_0 > 0$ – константы материала, определяющие форму гистерезисных кривых; $H_c^{J \rightarrow I} > 0, A^{J \rightarrow I} > 0, C^{J \rightarrow I} > 0, l > 0, q > 0, N_0 > 0$ – константы, характеризующие изменение дипольного дефекта. В реономных моделях (2.101)-(2.104) параметр $B^{J \rightarrow I}$ характеризует скорость процесса переключения (вяз-

кость), а $A^{J \rightarrow I}$ – скорость переориентации дипольного дефекта (вероятность перехода). В склерономной модели (2.105)-(2.106) параметры $D^{J \rightarrow I}$ и $C^{J \rightarrow I}$ определяют упрочнение материала.

Степенная зависимость $\dot{n}^{J \rightarrow I}$ от $H^{J \rightarrow I}$ в (2.104) (так же как и $\dot{c}^{J \rightarrow I}$ от $G^{J \rightarrow I}$ в (2.103)) может быть также получена исходя из предположения о термоактивационном механизме процесса миграции кислородных вакансий, описываемого уравнением Аррениуса. В работах [15, 17, 38] предложена термоактивационная модель переориентации дефектов, в соответствии с которой кинетика дефектов описывается системой линейных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\dot{n}_I = - \sum_{J=1}^L a_0 \exp\left(-\frac{\Delta W^{J \rightarrow I}}{kT}\right) n_J = - \sum_{J=1}^L a^{J \rightarrow I} n_J, \quad (2.107)$$

где $\Delta W^{J \rightarrow I}$ – энергия активации при переходе из I -го местоположения дефекта в J -е; $a^{J \rightarrow I}$ – вероятность переориентации диполя из I в J в единицу времени; T – температура; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Степенную зависимость $\dot{n}^{J \rightarrow I}$ от $H^{J \rightarrow I}$ в уравнении (2.104) можно получить следствием (2.107), введя предположение [147, 295]:

$$\Delta W^{J \rightarrow I} = \Delta W_0^{J \rightarrow I} \left[1 - \left(\frac{H^{J \rightarrow I}}{H_c^{J \rightarrow I}} \right)^p \right], \quad (2.108)$$

и используя условие близости $H^{J \rightarrow I}$ к $H_c^{J \rightarrow I}$, а также приняв $q = 1$:

$$\dot{n}^{J \rightarrow I} = a_0 \exp\left\{-\frac{\Delta W_0^{J \rightarrow I}}{kT} \left[1 - \left(\frac{H^{J \rightarrow I}}{H_c^{J \rightarrow I}} \right)^p \right]\right\} n_J = a_0 \exp\left[\left(\frac{H^{J \rightarrow I}}{H_c^{J \rightarrow I}}\right)^p - 1\right]^{\frac{\Delta W_0^{J \rightarrow I}}{kT}} n_J \approx a_0 \left(\frac{H^{J \rightarrow I}}{H_c^{J \rightarrow I}}\right)^{\frac{p \Delta W_0^{J \rightarrow I}}{kT}} n_J. \quad (2.109)$$

Примеры величин энергетических барьеров $\Delta W_0^{J \rightarrow I}$ на пути миграции кислородных вакансий для кристаллических решеток для чистого и содержащего примесные атомы (Cu-допинг) титаната бария, полученные в [203] на основе теории функционала плотности (DFT), показаны на Рисунке 2.3. Меньшая величина энергетического барьера, реализуемая в случае $\Delta W_0^{1 \rightarrow 3}$ (нумерация местоположений вакансий показана на Рисунке 2.2), обеспечивает наибольшую скорость миграции кислородных вакансий.

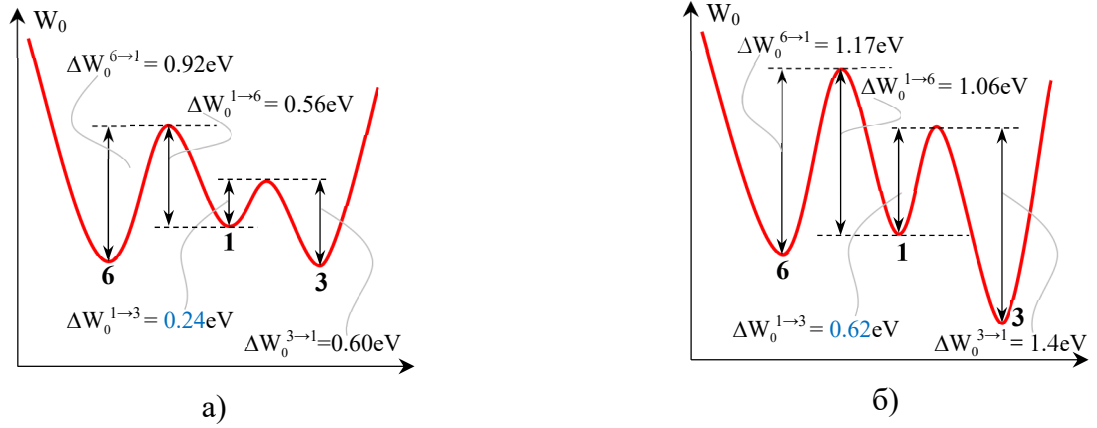


Рисунок 2.3 – Схематическое представление уровней энергетических барьеров при миграции дефекта (кислородной вакансии) в пределах элементарной ячейки в а) беспримесном и б) легированном акцептором (примесь Cu замещает Ti) титанате свинца на основе данных [203]

Наличие точечных дефектов приводит к возникновению внутренних полей смещения напряжений σ_d и электрических полей E_d , непосредственно определяющих сдвиг центров петель гистерезисов. Они, наряду с σ и E , характеризуют величины $G^{J \rightarrow I}$ (2.97) для всех систем переключения. Как следует из выражения (2.99), в случае представления свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы (2.72) внутренние поля смещения линейно связаны с деформацией и поляризацией дефектов:

$$\begin{cases} \sigma_d = \frac{\partial \psi_{defect}}{\partial \epsilon^r} = {}^4 L_{\epsilon}^T \cdot \epsilon^d + {}^3 L_{P_{\epsilon}}^T \cdot P^d, \\ E_d = \frac{\partial \psi_{defect}}{\partial P^r} = {}^3 L_{\epsilon P} \cdot \epsilon^d + L_P^T \cdot P^d. \end{cases} \quad (2.110)$$

С учетом введенных обозначений выражение (2.99) допускает формулировку:

$$G^{J \rightarrow I} = (\sigma - \sigma_d) \cdot \Delta \tilde{\epsilon}_{J \rightarrow I}^r + (E - E_d) \cdot \Delta \tilde{P}_{J \rightarrow I}^r + \frac{1}{2} \sigma \cdot \Delta {}^4 \tilde{S}_{J \rightarrow I}^E \cdot \sigma + E \cdot \Delta {}^3 \tilde{d}_{J \rightarrow I} \cdot \sigma + \frac{1}{2} E \cdot \Delta \tilde{\kappa}_{J \rightarrow I}^{\sigma} \cdot E, \quad (2.111)$$

явно показывающую смещающий эффект внутренних полей σ_d и E_d . Аналогичная форма записи используется в теории пластичности с линейным кинематическим упрочнением для описания эффекта Баушингера.

2.1.2.2.2 Феноменологическая модель эволюции дефектов

Одним из простейших способов удовлетворить условие неотрицательности диссипации (2.79) является введение уравнений эволюции, в которых скорости изменения переменных, характеризующих дефектное состояние, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d$ и $\dot{\mathbf{P}}^d$ пропорциональны соответствующим движущим силам:

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d &= {}^4\mathbf{B}_\varepsilon \cdot \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} \right), \\ \dot{\mathbf{P}}^d &= \mathbf{B}_P \cdot \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d} \right),\end{aligned}\quad (2.112)$$

где ${}^4\mathbf{B}_\varepsilon$ и $\mathbf{B}_P$ – постоянные тензоры, характеризующие свойства материала. Для обеспечения неотрицательности диссипации необходимо потребовать выполнения условий положительной определенности тензоров ${}^4\mathbf{B}_\varepsilon$ и $\mathbf{B}_P$ ($\mathbf{x} \cdot {}^4\mathbf{B}_\varepsilon \cdot \mathbf{x} \geq 0$ и $\mathbf{y} \cdot \mathbf{B}_P \cdot \mathbf{y} \geq 0$ для любых тензоров второго ранга $\mathbf{x}$ и векторов $\mathbf{y}$). Тогда диссипация, вызванная изменением дефектного состояния, будет представлять собой положительно определенную квадратичную форму:

$$\delta_d = \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} \right) \cdot {}^4\mathbf{B}_\varepsilon \cdot \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} \right) + \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d} \right) \cdot \mathbf{B}_P \cdot \left(\mathbf{E} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d} \right). \quad (2.113)$$

Важно отметить, что в качестве компонент выражений движущих сил эволюции дефектов для микроструктурной модели (2.98) и для феноменологической модели (2.112) выступают выражения для внутренних сил, сопряженных с $\boldsymbol{\varepsilon}^d$ и $\mathbf{P}^d$:

$$\frac{\partial \rho \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^d} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \rho \psi}{\partial \mathbf{P}^d} = \mathbf{E} - \frac{\partial \rho \psi_{defect}}{\partial \mathbf{P}^d}.$$

В общем случае представления свободной энергии дефектов ψ_{defect} в виде квадратичной формы (2.72) уравнения эволюции (2.112) приобретают вид линейных неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{P}}^d &= \mathbf{B}_P \cdot \left(\mathbf{E} - \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot {}^3\mathbf{Q}_{P\varepsilon}^T - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{Q}_P - \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot {}^4\mathbf{L}_{P\varepsilon}^T - \mathbf{P}^r \cdot \mathbf{L}_P^T \right), \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d &= {}^4\mathbf{B}_\varepsilon \cdot \left(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\varepsilon}^d \cdot {}^4\mathbf{Q}_\varepsilon - \mathbf{P}^d \cdot {}^3\mathbf{Q}_{P\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot {}^4\mathbf{L}_\varepsilon^T - \mathbf{P}^r \cdot {}^3\mathbf{L}_{\varepsilon P} \right).\end{aligned}\quad (2.114)$$

Для упрощения дальнейшего анализа полученных уравнений ограничимся случаем изотропного приближения:

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_P &= B^P \mathbf{1}, \\ {}^4\mathbf{B}_\varepsilon &= B_1^\varepsilon \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + B_2^\varepsilon (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}),\end{aligned}\quad (2.115)$$

где $B^P > 0$, $B_1^\varepsilon > 0$, $B_2^\varepsilon > 0$. Подстановка (2.115) в уравнения эволюции (2.114) с учетом (2.74) приводит к несвязанной системе линейных неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными скалярными коэффициентами:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{P}}^d &= B^P (\mathbf{E} - Q^P \mathbf{P}^d - L^P \mathbf{P}^r), \\ \text{tr} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d &= B_{tr}^\varepsilon (\text{tr} \boldsymbol{\sigma} - Q_{tr}^\varepsilon \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^d - L_{tr}^\varepsilon \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^r), \\ \text{dev} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d &= B_{dev}^\varepsilon (\text{dev} \boldsymbol{\sigma} - Q_{dev}^\varepsilon \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^d - L_{dev}^\varepsilon \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^r),\end{aligned}\quad (2.116)$$

где $B_{tr}^\varepsilon = 3B_1^\varepsilon + 2B_2^\varepsilon$, $Q_{tr}^\varepsilon = 3Q_1^\varepsilon + 2Q_2^\varepsilon$, $L_{tr}^\varepsilon = 3L_1^\varepsilon + 2L_2^\varepsilon$, $B_{dev}^\varepsilon = 2B_2^\varepsilon$, $Q_{dev}^\varepsilon = 2Q_2^\varepsilon$, $L_{dev}^\varepsilon = 2L_2^\varepsilon$ — константы материала. Уравнения (2.116) не учитывают перекрестное влияние механических и электрических полей и содержат те же 6 скалярных параметров материала $Q_1^\varepsilon, Q_2^\varepsilon, L_1^\varepsilon, L_2^\varepsilon, Q^P, L^P$, входящих в уравнения микроструктурной модели (2.100).

При произвольных заданных $\boldsymbol{\sigma}(t), \boldsymbol{\varepsilon}^r(t), \mathbf{E}(t), \mathbf{P}^r(t)$ общее решение уравнений (2.116) при начальных условиях $\boldsymbol{\varepsilon}^d(0) = \boldsymbol{\varepsilon}_0^d$ и $\mathbf{P}^d(0) = \mathbf{P}_0^d$ имеет вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^d &= e^{-\frac{t}{\tau_P}} \mathbf{P}_0^d + B^P \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau_P}} (\mathbf{E}(t') - L^P \mathbf{P}^r(t')) dt', \\ \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^d &= e^{-\frac{t}{\tau_\varepsilon^{tr}}} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_0^d + B_{tr}^\varepsilon \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau_\varepsilon^{tr}}} (\text{tr} \boldsymbol{\sigma}(t') - L_{tr}^\varepsilon \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^r(t')) dt', \\ \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^d &= e^{-\frac{t}{\tau_\varepsilon^{dev}}} \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_0^d + B_{dev}^\varepsilon \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau_\varepsilon^{dev}}} (\text{dev} \boldsymbol{\sigma}(t') - L_{dev}^\varepsilon \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^r(t')) dt',\end{aligned}\quad (2.117)$$

где постоянные $\tau_\varepsilon^{tr}, \tau_\varepsilon^{dev}$ и τ_P , определяющие время релаксации, задаются выражениями:

$$\tau_P = \frac{1}{B^P Q^P}, \quad \tau_\varepsilon^{tr} = \frac{1}{B_{tr}^\varepsilon Q_{tr}^\varepsilon}, \quad \tau_\varepsilon^{dev} = \frac{1}{B_{dev}^\varepsilon Q_{dev}^\varepsilon}. \quad (2.118)$$

При постоянных $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}^r, \mathbf{E}, \mathbf{P}^r$ (при старении) решение (2.117) упрощается:

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^d &= e^{-\frac{t}{\tau_P}} \mathbf{P}_0^d + \frac{1}{Q^P} (\mathbf{E} - L^P \mathbf{P}^r) (1 - e^{-\frac{t}{\tau_P}}), \\ \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^d &= e^{-\frac{t}{\tau_\varepsilon^{tr}}} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}_0^d + \frac{1}{Q_{tr}^\varepsilon} (\text{tr} \boldsymbol{\sigma} - L_{tr}^\varepsilon \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}^r) (1 - e^{-\frac{t}{\tau_\varepsilon^{tr}}}), \\ \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^d &= e^{-\frac{t}{\tau_\varepsilon^{dev}}} \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}_0^d + \frac{1}{Q_{dev}^\varepsilon} (\text{dev} \boldsymbol{\sigma} - L_{dev}^\varepsilon \text{dev} \boldsymbol{\varepsilon}^r) (1 - e^{-\frac{t}{\tau_\varepsilon^{dev}}}).\end{aligned}\quad (2.119)$$

Таким образом, внутренние поля смещения $\boldsymbol{\sigma}_d$ и $\mathbf{E}_d$ (2.88), пропорциональные вычисленным $\boldsymbol{\varepsilon}^d$ и $\mathbf{P}^d$, в соответствии с (2.119) при старении в условиях наличия

первичной поляризации будут увеличиваться во времени по закону $1 - e^{-\frac{t}{\tau}}$, что подтверждается многочисленными экспериментальными данными [132, 222, 223, 303, 367] и теоретическими исследованиями на основе альтернативных подходов [132, 203, 222–224, 331, 367].

При гармонически изменяющихся $\mathbf{E} = E_0 \sin \omega t$ и/или $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_0 \sin \omega t$ решение (2.117) содержит слагаемое вида $e^{-\frac{t}{\tau}}$, что указывает на возможность описать эффект уменьшения внутреннего поля смещения при интенсивном высокочастотном гармоническом воздействии, наблюдаемом в экспериментах [302, 331, 367].

Следует отметить, что в рамках предложенной модели вычисление остаточной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}^r$ и поляризации $\mathbf{P}^r$ осуществляется так же, как и в случае неизменяющихся дефектов на основе уравнений (2.23)–(2.24) и (2.83)–(2.87).

Использование уравнений эволюции для $\boldsymbol{\varepsilon}^d$ и $\dot{\mathbf{P}}^d$ в форме (2.112) позволяет описать горизонтальное смещение петли гистерезиса в зависимости от времени старения (см. Раздел 6).

Обе рассмотренные выше модели эволюции дефектов: микроструктурная (2.92)–(2.102) (с учетом дискретного характера возможных ориентаций дипольного дефекта в элементарной ячейке) и феноменологическая (2.112)–(2.116) (без учета особенностей ориентаций дипольного дефекта) – это модели релаксационного типа, отражающие стремление системы к равновесию при изменении внешнего воздействия; они удовлетворяют условию неотрицательности диссипации при произвольном многоосном нагружении.

2.1.2.2.3 Феноменологическая модель эволюции дефектов с мгновенной переполаризацией

Уравнения эволюции рассмотренной выше в разделе 2.1.2.2.2 феноменологической модели (2.112) позволяют учесть влияние истории изменения внешнего электрического поля (оказывающего влияние также и на концентрацию дефектов) и историю изменения вектора поляризации (непосредственно влияющего на ориентацию дефектов) на переменные $\boldsymbol{\varepsilon}^d$ и $\mathbf{P}^d$, характеризующие дефектное состояние. В рамках модели (2.112) текущая ориентация дефектов может значительно отличаться от текущей ориентации поляризации. Интегральная связь $\boldsymbol{\varepsilon}^d$ и $\mathbf{P}^d$ с $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^r$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{P}^r$ в соответствии с (2.112) приводит к неизбежному эффекту запаздывания отклика. Поэтому рассматриваемые уравнения эволюции могут быть отнесены к классу *моделей с запаздыванием переполаризации дефектов*.

Альтернативный подход связан с рассмотрением математических *моделей с мгновенной переполаризацией дефектов*. Основанием для подобной идеализации являются результаты экспериментальных и теоретических исследований [213, 393, 494, 495], показывающих, что в пределах элементарной ячейки точечные дефекты стремятся расположиться так, чтобы обеспечить симметрию ячейки. Бездиффузионные процессы переключения поляризации в пределах ячейки относятся к наиболее быстропротекающим.

Наиболее простой способ описания процесса мгновенной переполаризации дефектов определяется равенством

$$\mathbf{P}^d = q \frac{\mathbf{P}^r}{|\mathbf{P}^r|}, \quad (2.120)$$

где константа q характеризует абсолютное значение вектора поляризации дефектов. Очевидно, что $\mathbf{P}^d$ всегда сонаправлен с $\mathbf{P}^r$. Равенство (2.120) определено за исключением особой точки $\mathbf{P}^r = \mathbf{0}$ (точки разрыва первого рода). При рассмотрении гистерезисных явлений состояние $\mathbf{P}^r = \mathbf{0}$ может дважды достигаться в пределах цикла. Для исключения неопределенности в вычислении $\mathbf{P}^d$ на основе (2.120) вводится непрерывная аппроксимация в малой окрестности точки $\mathbf{P}^r = \mathbf{0}$. Будем предполагать, что в ее пределах направление $\mathbf{P}^r$ не меняется. В предположении $s \rightarrow 0$ вводится следующая кусочно-линейная аппроксимация для проекции $P_l^d = \mathbf{l} \cdot \mathbf{P}^d$:

$$P_l^d = \begin{cases} q, & P_l^r \geq s; \\ \frac{q}{s} P_l^r, & -s \leq P_l^r \leq s; \\ -q, & -s \geq P_l^r; \end{cases} \quad (2.121)$$

где $\mathbf{l} = \mathbf{P}^r(s) / |\mathbf{P}^r(s)|$ единичный вектор, соответствующий направлению $\mathbf{P}^r$ в момент входа в s -окрестность $\mathbf{0}$, $P_l^r = \mathbf{l} \cdot \mathbf{P}^r = \pm |\mathbf{P}^r|$.

В предположении, что при переходе через $\mathbf{0}$ направление $\mathbf{P}^r$ остается неизменным и равным $\mathbf{l}$, справедливо равенство $\dot{\mathbf{P}}^d = \dot{P}_l^d \mathbf{l}$, где $\dot{P}_l^d$ определяется кусочно-постоянной аппроксимацией, получаемой следствием (2.121):

$$\dot{P}_l^d = \begin{cases} 0, & P_l^r \geq s; \\ \frac{q}{s} \dot{P}_l^r, & -s \leq P_l^r \leq s; \\ 0, & -s \geq P_l^r. \end{cases} \quad (2.122)$$

Введенное уравнение для вычисления $\mathbf{P}^d$ (2.120) должно также удовлетворить условию неотрицательности диссипации (2.79). Произведем проверку диссипатив-

ного неравенства путем подстановки в него выражения для $\dot{\mathbf{P}}^d$, получаемого следствием (2.120) и (2.122). При доказательстве для простоты ограничимся квадратичным представлением свободной энергии дефектов для изотропного материала (2.76) и только процессами изменения поляризации и ориентации дефектов. В этом случае диссипация определяется выражением, включающим только два слагаемых:

$$\delta = (\mathbf{E} - L^P \mathbf{P}^d) \cdot \dot{\mathbf{P}}^r + (\mathbf{E} - Q^P \mathbf{P}^d - L^P \mathbf{P}^r) \cdot \dot{\mathbf{P}}^d = \delta^r + \delta^d. \quad (2.123)$$

Будем предполагать, что диссипация вследствие изменения поляризации $\delta^r = (\mathbf{E} - L^P \mathbf{P}^d) \cdot \dot{\mathbf{P}}^r$ удовлетворяет условию $\delta^r \geq 0$ путем выбора уравнений эволюции (2.85)-(2.87). В силу (2.122) скорость изменения вектора поляризации дефектов $\dot{\mathbf{P}}^d$ и соответственно диссипация вследствие изменения поляризации дефектов δ^d будут отличными от нуля только при $-s \leq P_l^r \leq s$. Для указанного интервала δ^d может быть представлена с учетом (2.122) в виде суммы двух слагаемых

$$\begin{aligned} \delta^d &= (\mathbf{E} - L^P \mathbf{P}^d) \cdot \dot{\mathbf{P}}^d + [(L^P - Q^P) \mathbf{P}^d - L^P \mathbf{P}^r] \cdot \dot{\mathbf{P}}^d = \\ &= (\mathbf{E} - L^P \mathbf{P}^d) \cdot \mathbf{1} \frac{q}{s} \dot{P}_l^r + \left[(L^P - Q^P) \frac{q}{s} P_l^r \mathbf{1} - L^P P_l^r \mathbf{1} \right] \cdot \mathbf{1} \frac{q}{s} \dot{P}_l^r = \\ &= \delta^r \frac{q}{s} + \left[(L^P - Q^P) - L^P \frac{s}{q} \right] \frac{q^2}{s^2} \mathbf{P}^r \cdot \dot{\mathbf{P}}^r. \end{aligned} \quad (2.124)$$

Первое слагаемое $\delta^r \frac{q}{s}$ в (2.124) всегда положительно, а второе может принимать как положительные, так и отрицательные значения в зависимости от знака $\mathbf{P}^r \cdot \dot{\mathbf{P}}^r = |\mathbf{P}^r| \cdot |\dot{\mathbf{P}}^r|$ и выражения в квадратных скобках. Единственным способом обеспечить безусловную положительность диссипации для любых процессов переключения является требование обращения выражения в квадратных скобках в ноль $Q^P = L^P \left(1 - \frac{s}{q} \right)$, представляющее дополнительное ограничение на константы материала. В случае $s \rightarrow 0$ для обеспечения положительности диссипации необходимо потребовать выполнения условия:

$$Q^P = L^P. \quad (2.125)$$

Использование уравнения (2.120) для вычисления $\mathbf{P}^d$, учитывающее мгновенную переполаризацию дефектов, позволяет описать двойную петлю гистерезиса (см. Раздел 6).

2.2 Феноменологические модели

2.2.1 Модель поликристалла без учета дефектов

Применение микромеханических моделей на практике для расчетов неоднородных полей в элементах конструкций требует значительных затрат вычислительных ресурсов (определяемых необходимостью использования процедур гомогенизации, приводящих к длительным временам счета, кроме этого, внушительных объемов памяти для хранения большого количества внутренних переменных), а также выполнения трудоемких экспериментов по определению микроструктурных констант материала для отдельных компонент. В связи с этим получили развитие феноменологические модели, не обладающие указанными недостатками.

Одна из наиболее общих формулировок склерономной *феноменологической* модели предложена Landis [305] в 2002 г и получила дальнейшее развитие в работах [307, 309]. Модель имеет строгое термодинамическое обоснование и экспериментальное подтверждение [305, 307, 309, 314] для различных случаев электромеханического воздействия, описанных в Разделе 1.2.

2.2.1.1 Определяющие уравнения

Для описания гистерезисного поведения сегнетоэлектростатических материалов при сложном многоосном комбинированном электрическом и/или механическом нагружении рассматриваются определяющие уравнения, ограниченные случаем инфинитезимальных (см. (1.1)) изотермических процессов. Предполагается, что температура значительно ниже температуры Кюри и необходимость описания фазовых переходов отсутствует. Формулировка определяющих уравнений производится с использованием аналогий с феноменологической *теорией пластичности* (теорией пластического течения с кинематическим упрочнением).

Зависимость от истории нагружения в этой модели учитывается на основе введения двух внутренних переменных состояния: тензора остаточных (аналог пластических) деформаций $\bar{\epsilon}^r$ и вектора поляризации $\bar{P}^r$.

В соответствии с используемой парадигмой *стандартного материала с диссипацией* [370] для задания определяющих уравнений (уравнений состояния) вводятся два выпуклых потенциала: плотность свободной энергии (термодинамический потенциал Гельмгольца) $\bar{\psi}(\bar{\epsilon}, \bar{D}, \bar{\epsilon}^r, \bar{P}^r)$ и потенциал диссипации $\bar{\delta}^r(\dot{\bar{\epsilon}}^r, \dot{\bar{P}}^r)$. Ис-

пользование концепции стандартного материала обеспечивает получение термодинамически согласованных формулировок, возможность введения экстремальных принципов, выполнение условий существования и единственности решения начально-краевой задачи.

В изотермическом случае диссипативное неравенство (1.83) принимает вид:

$$\bar{\delta} = \bar{\sigma} \cdot \dot{\bar{\epsilon}} + \bar{\mathbf{E}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{D}}} - \bar{\rho} \dot{\bar{\psi}} \geq 0. \quad (2.126)$$

Подстановка в диссипативное неравенство (2.126) выражения свободной энергии $\bar{\psi}(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ приводит к соотношению:

$$\bar{\delta} = \left(\bar{\sigma} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}} \right) \cdot \dot{\bar{\epsilon}} + \left(\bar{\mathbf{E}} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{D}}} \right) \cdot \dot{\bar{\mathbf{D}}} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}^r} \cdot \dot{\bar{\epsilon}}^r - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r} \cdot \dot{\bar{\mathbf{P}}}^r \geq 0. \quad (2.127)$$

Так как условие (2.127) должно выполняться для всех возможных термодинамических процессов, то есть при любых значениях $\dot{\bar{\epsilon}}$ и $\dot{\bar{\mathbf{D}}}$, то выражения в круглых скобках должны обратиться в 0, что приводит к следующим определяющим уравнениям:

$$\bar{\sigma} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}}, \quad \bar{\mathbf{E}} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{D}}}. \quad (2.128)$$

Обобщенные термодинамические силы, энергетически сопряженные с внутренними переменными $\bar{\epsilon}^r$ и $\bar{\mathbf{P}}^r$, определяются равенствами:

$$\hat{\sigma} = - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}^r}, \quad \hat{\mathbf{E}} = - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r}, \quad (2.129)$$

с использованием которых получается компактная формулировка диссипативного неравенства (2.127) - неравенство Кельвина:

$$\bar{\delta} = \hat{\sigma} \cdot \dot{\bar{\epsilon}}^r + \hat{\mathbf{E}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{P}}}^r \geq 0. \quad (2.130)$$

Таким образом, внутренняя диссипация $\bar{\delta}$ допускает представление в виде суммы произведений диссипативных сил $\hat{\sigma}$ и $\hat{\mathbf{E}}$ на соответствующие потоки $\dot{\bar{\epsilon}}^r$ и $\dot{\bar{\mathbf{P}}}^r$.

Уравнения эволюции для внутренних сил могут быть получены на основе потенциала диссипации $\bar{\delta}^r(\dot{\bar{\epsilon}}^r, \dot{\bar{\mathbf{P}}}^r)$, представляющего непрерывную скалярную выпуклую функцию переменных $\dot{\bar{\epsilon}}^r$ и $\dot{\bar{\mathbf{P}}}^r$. Применение преобразования Лежандра-Фенхеля к потенциалу $\bar{\delta}^r(\dot{\bar{\epsilon}}^r, \dot{\bar{\mathbf{P}}}^r)$ приводит к соответствующему сопряженному потен-

циалу $\bar{\delta}^{r*}(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}}) = \sup_{\dot{\bar{\mathbf{e}}}, \dot{\bar{\mathbf{P}}}} \left\{ \hat{\mathbf{g}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}} + \hat{\mathbf{E}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{P}}} - \bar{\delta}^r(\dot{\bar{\mathbf{e}}}, \dot{\bar{\mathbf{P}}}) \right\}$, который представляет собой индикаторную функцию для выпуклого множества допустимой области изменения внутренних сил, определяемой функцией переключения (нагружения):

$$\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}}) \leq 0. \quad (2.131)$$

Уравнения эволюции внутренних переменных для склерономного сегнетоэлектроругого материала могут быть получены следствием *принципа максимума диссипации* при наличии ограничения (2.131) на основе поиска минимума лагранжиана

$$L(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}}, \bar{\lambda}) = -\bar{\delta}(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}}) + \bar{\lambda} \bar{\Phi}(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}}), \quad (2.132)$$

где $\bar{\lambda} \geq 0$ - множитель Лагранжа. Условия экстремальности лагранжиана [336]:

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{\mathbf{g}}} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \hat{\mathbf{E}}} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \bar{\lambda}} = 0 \quad (2.133)$$

приводят к ассоциированному закону переключения для внутренних переменных

$$\dot{\bar{\mathbf{e}}}^r = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \hat{\mathbf{g}}}, \quad \dot{\bar{\mathbf{P}}}^r = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \hat{\mathbf{E}}} \quad (2.134)$$

и условиям нагружения/разгрузки

$$\bar{\lambda} \geq 0, \quad \bar{\Phi} \leq 0, \quad \bar{\lambda} \bar{\Phi} = 0. \quad (2.135)$$

В рамках общей формулировки определяющих уравнений сегнетоэлектроругого материала, определяемых равенствами (2.128) и (2.134), конкретные варианты теории могут быть получены на основе конкретизации функций $\bar{\psi}(\bar{\mathbf{e}}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{e}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ и $\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}})$.

В дальнейшем принимается, что тензор деформации $\bar{\mathbf{e}}$ и вектор электрической индукции $\bar{\mathbf{D}}$ допускают декомпозицию в виде суммы линейных (обратимых) $\bar{\mathbf{e}}^l$, $\bar{\mathbf{D}}^l$ и остаточных (аналог пластических) $\bar{\mathbf{e}}^r$, $\bar{\mathbf{P}}^r$ составляющих [145, 305]:

$$\bar{\mathbf{e}} = \bar{\mathbf{e}}^l + \bar{\mathbf{e}}^r, \quad (2.136)$$

$$\bar{\mathbf{D}} = \bar{\mathbf{D}}^l + \bar{\mathbf{P}}^r. \quad (2.137)$$

Предполагается, что свободная энергия $\bar{\psi}$ допускает разложение на обратимую (запасаемую в теле и вводимую для описания линейного пьезоэлектрического

эффекта) энергию $\bar{\psi}^l$ и необратимую (связанную с изменением внутренних переменных и вводимую для описания эффектов насыщения и упрочнения) $\bar{\psi}^r$ [305]:

$$\bar{\psi} = \bar{\psi}^l(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r) + \bar{\psi}^r(\bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r). \quad (2.138)$$

2.2.1.1.1 Варианты задания обратимой части свободной энергии $\bar{\psi}^l$

Зависимость $\bar{\psi}^l$ от внутренних переменных позволяет учесть чувствительность упругих, диэлектрических и пьезоэлектрических модулей материала к предыстории нагружения, наблюдаемую в экспериментах. Для описания линейного пьезоэлектрического отклика обратимая часть свободной энергии $\bar{\psi}^l$ (первое слагаемое в (2.138)) вводится в виде квадратичной формы по обратимым составляющим тензора деформации $\bar{\epsilon}^l = \bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r$ и вектора электрической индукции $\bar{\mathbf{D}}^l = \bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{P}}^r$:

$$\bar{\rho}\bar{\psi}^l = \frac{1}{2}(\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) \cdot {}^4\bar{\mathbf{C}}^D \cdot (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) - (\bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{P}}^r) \cdot {}^3\bar{\mathbf{h}} \cdot (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) + \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{P}}^r) \cdot \bar{\boldsymbol{\beta}}^\epsilon \cdot (\bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{P}}^r), \quad (2.139)$$

где тензоры, характеризующие линейные электромеханические свойства материала ${}^4\bar{\mathbf{C}}^D$, ${}^3\bar{\mathbf{h}}$, $\bar{\boldsymbol{\beta}}^\epsilon$, допускают зависимость от внутренних переменных состояния $\bar{\epsilon}^r$ и $\bar{\mathbf{P}}^r$.

Подстановка (2.138) и (2.139) в (2.128) позволяет записать определяющие уравнения в виде

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \partial_{\bar{\epsilon}} \bar{\rho}\bar{\psi} = {}^4\bar{\mathbf{C}}^D \cdot (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) - {}^3\bar{\mathbf{h}}^T \cdot (\bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{P}}^r), \\ \bar{\mathbf{E}} = \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \bar{\rho}\bar{\psi} = -{}^3\bar{\mathbf{h}} \cdot (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) + \bar{\boldsymbol{\beta}}^\epsilon \cdot (\bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{P}}^r), \end{cases} \quad (2.140)$$

аналогичном (1.95) для линейного пьезоэлектрика. Основное отличие связано с наличием изменяющихся остаточных деформаций $\bar{\epsilon}^r$ и поляризации $\bar{\mathbf{P}}^r$, для вычисления которых необходимо конкретизировать вид функций $\bar{\psi}^r(\bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ и $\bar{\Phi}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\mathbf{E}})$.

Альтернативная (2.140) форма определяющих уравнений может быть получена на основе электрической энтальпии $\bar{\rho}\bar{H}(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{E}}, \bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r) = \bar{\rho}\bar{\psi}(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r) - \bar{\mathbf{E}} \cdot \bar{\mathbf{D}}$, приводящей к определяющим соотношениям:

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \partial_{\bar{\epsilon}} \bar{\rho}\bar{H} = {}^4\bar{\mathbf{C}}^E \cdot (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) - \bar{\mathbf{E}} \cdot {}^3\bar{\mathbf{e}}, \\ \bar{\mathbf{D}} = -\partial_{\bar{\mathbf{E}}} \bar{\rho}\bar{H} = {}^3\bar{\mathbf{e}} \cdot (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^r) + \bar{\boldsymbol{\kappa}}^\epsilon \cdot \bar{\mathbf{E}} + \bar{\mathbf{P}}^r, \end{cases} \quad (2.141)$$

где тензоры ${}^4\bar{\mathbf{C}}^E$, ${}^3\bar{\mathbf{e}}$, $\bar{\boldsymbol{\kappa}}^\epsilon$, связаны с ${}^4\bar{\mathbf{C}}^D$, ${}^3\bar{\mathbf{h}}$, $\bar{\boldsymbol{\beta}}^\epsilon$ при помощи соотношений из Табл. 1.2.

Еще одна альтернативная формулировка может быть получена на основе потенциала Гиббса $\bar{\rho}\bar{g}(\bar{\mathbf{e}}, \bar{\mathbf{E}}, \bar{\mathbf{e}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r) = \bar{\rho}\bar{\psi}(\bar{\mathbf{e}}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{e}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r) - \bar{\mathbf{E}} \cdot \bar{\mathbf{D}} - \bar{\mathbf{e}} \cdot \bar{\mathbf{e}}^r$:

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{e}} = -\partial_{\bar{\mathbf{e}}} \bar{\rho}\bar{g} = {}^4\bar{\mathbf{S}}^E \cdot \bar{\mathbf{e}} + \bar{\mathbf{E}} \cdot {}^3\bar{\mathbf{d}} + \bar{\mathbf{e}}^r, \\ \bar{\mathbf{D}} = -\partial_{\bar{\mathbf{E}}} \bar{\rho}\bar{g} = {}^3\bar{\mathbf{d}} \cdot \bar{\mathbf{e}} + \bar{\mathbf{K}}^\sigma \cdot \bar{\mathbf{E}} + \bar{\mathbf{P}}^r, \end{cases} \quad (2.142)$$

где тензоры ${}^4\bar{\mathbf{S}}^E$, ${}^3\bar{\mathbf{d}}$, $\bar{\mathbf{K}}^\sigma$ связаны с ${}^4\bar{\mathbf{C}}^D$, ${}^3\bar{\mathbf{h}}$, $\bar{\mathbf{f}}^\varepsilon$ при помощи соотношений из Табл. 1.2.

В *изотропном приближении* функции тензорного и векторного аргументов $\bar{\psi}^l(\bar{\mathbf{e}}^l, \bar{\mathbf{D}}^l)$, $\bar{\psi}^r(\bar{\mathbf{e}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ и $\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{e}}, \hat{\mathbf{E}})$ удовлетворяют условиям $\bar{\psi}^l(\mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{e}}^l \cdot \mathbf{Q}^T, \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{D}}^l) = \bar{\psi}^l(\bar{\mathbf{e}}^l, \bar{\mathbf{D}}^l)$, $\bar{\psi}^r(\mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{e}}^r \cdot \mathbf{Q}^T, \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{P}}^r) = \bar{\psi}^r(\bar{\mathbf{e}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$, $\bar{\Phi}(\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{Q}^T, \mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{E}}) = \bar{\Phi}(\hat{\mathbf{e}}, \hat{\mathbf{E}})$ для любых тензоров поворота $\mathbf{Q}$ в отсчетной конфигурации, то есть группа равноправности изотропного материала в любой неискаженной конфигурации содержит группу всех ортогональных преобразований. Это приводит к возможности представить указанные скалярнозначные функции вида $f(\bar{\mathbf{e}}, \bar{\mathbf{D}})$, как функции 6 инвариантов:

$$\begin{aligned} \bar{I}_1 &= \text{tr}(\bar{\mathbf{e}}), & \bar{I}_2 &= \bar{\mathbf{e}} \cdot \bar{\mathbf{e}}, & \bar{I}_3 &= \det(\bar{\mathbf{e}}), \\ \bar{J}_1 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\mathbf{D}}, \\ \bar{K}_1 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\mathbf{e}} \cdot \bar{\mathbf{D}}, & \bar{K}_2 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\mathbf{e}}^2 \cdot \bar{\mathbf{D}}. \end{aligned} \quad (2.143)$$

Таким образом, в общем случае для *изотропного* материала справедливо представление:

$$f(\bar{\mathbf{e}}, \bar{\mathbf{D}}) = f(\bar{I}_1, \bar{I}_2, \bar{I}_3, \bar{J}_1, \bar{K}_1, \bar{K}_2). \quad (2.144)$$

Для свободной энергии $\bar{\psi}^l(\bar{\mathbf{e}}^l, \bar{\mathbf{D}}^l)$ актуален случай *квадратичной* зависимости от компонент аргументов, для которого допустимо упрощенное представление:

$$\bar{\rho}\bar{\psi}^l(\bar{\mathbf{e}}^l, \bar{\mathbf{D}}^l) = \frac{1}{2}\bar{\lambda}\bar{I}_1^2 + \bar{\mu}\bar{I}_2 + \bar{\gamma}_1\bar{J}_1. \quad (2.145)$$

Инварианты $\bar{K}_1$ и $\bar{K}_2$ приводят к нелинейным зависимостям между механическими и электрическими параметрами, соответствующим электрострикционным явлениям, не имеющим отношения к пьезоэлектрическому поведению материала, поэтому были исключены из рассмотрения в (2.149). Инвариант $\bar{I}_3$ также не учитывался в (2.149), поскольку содержит третьей степени компонент деформации.

Следствием подстановки (2.145) в (2.128) получаем несвязанные механический и электрический отклики материала:

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{e}} = \bar{\lambda} \text{tr}(\bar{\mathbf{e}}^l) + 2\bar{\mu}\bar{\mathbf{e}}^l, \\ \bar{\mathbf{E}} = \bar{\beta}_1\bar{\mathbf{D}}^l, \end{cases} \quad (2.146)$$

которые могут наблюдаться, например, у начально неполяризованной керамики. Для описания пьезоэлектрических эффектов принципиально необходим учет анизотропии, вносимой поляризацией материала.

Для *трансверсально-изотропного* материала функции вида $f(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}})$ удовлетворяют условию $f(\mathbf{Q} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \mathbf{Q}^T, \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{D}}) = f(\bar{\epsilon}, D)$ только для тензоров поворота $\mathbf{Q}$ вокруг оси трансверсальной анизотропии $\mathbf{p}$. Группа симметрии включает только повороты, переводящие ось $\mathbf{p}$ саму в себя $\mathcal{G} = \{\mathbf{Q} \in O(3), \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{p}}\}$. В соответствии с теорией инвариантов [154, 323, 414] в список аргументов функции добавляется структурный вектор $\bar{\mathbf{p}}$, позволяющий расширить условие инвариантности функции $f(\mathbf{Q} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \mathbf{Q}^T, \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{D}}, \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{p}}) = f(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{p}})$ для всевозможных ортогональных преобразований $\forall \mathbf{Q} \in O(3)$. Функция $f(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{p}})$ является изотропной тензорной функцией, для которой возможно представление через всевозможные смешанные инварианты трех аргументов. Для $f(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{p}})$ таких инвариантов 11:

$$\begin{aligned} \bar{I}_1 &= \text{tr}(\bar{\epsilon}), & \bar{I}_2 &= \bar{\epsilon} \cdot \bar{\epsilon}, & \bar{I}_3 &= \det(\bar{\epsilon}), \\ \bar{I}_4 &= \bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \bar{\mathbf{p}}, & \bar{I}_5 &= \bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\epsilon}^2 \cdot \bar{\mathbf{p}}, \\ \bar{J}_1 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\mathbf{D}}, & \bar{J}_2 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\mathbf{p}}, \\ \bar{K}_1 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \bar{\mathbf{D}}, & \bar{K}_2 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\epsilon}^2 \cdot \bar{\mathbf{D}}, & \bar{K}_3 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \bar{\mathbf{p}}, & \bar{K}_4 &= \bar{\mathbf{D}} \cdot \bar{\epsilon}^2 \cdot \bar{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (2.147)$$

Таким образом, для *трансверсально-изотропного* материала справедливо представление:

$$f(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{p}}) = f(\bar{I}_1, \bar{I}_2, \bar{I}_3, \bar{I}_4, \bar{I}_5, \bar{J}_1, \bar{J}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_2, \bar{K}_3, \bar{K}_4). \quad (2.148)$$

Для свободной энергии $\bar{\psi}'(\bar{\epsilon}', \bar{\mathbf{D}}', \bar{\mathbf{p}})$ актуален случай квадратичной зависимости от компонент аргументов $\bar{\epsilon}'$ и $\bar{\mathbf{D}}'$, для которого допустимо представление:

$$\bar{\rho} \bar{\psi}'(\bar{\epsilon}', \bar{\mathbf{D}}', \bar{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2} \bar{\lambda} \bar{I}_1^2 + \bar{\mu} \bar{I}_2 + \bar{\alpha}_1 \bar{I}_4^2 + \bar{\alpha}_2 \bar{I}_5 + \bar{\alpha}_3 \bar{I}_1 \bar{I}_4 + \bar{\beta}_1 \bar{J}_1 + \bar{\beta}_2 \bar{J}_2^2 + \bar{\gamma}_1 \bar{I}_1 \bar{J}_2 + \bar{\gamma}_2 \bar{I}_4 \bar{J}_2 + \bar{\gamma}_3 \bar{K}_3. \quad (2.149)$$

Следствием подстановки (2.149) в (2.128) получаем определяющие уравнения:

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{\sigma}} = (\bar{\lambda} \bar{I}_1 + \bar{\alpha}_3 \bar{I}_4 + \bar{\gamma}_1 \bar{J}_2) \mathbf{1} + 2\bar{\mu} \bar{\epsilon}' + (2\bar{\alpha}_1 \bar{I}_4 + \bar{\alpha}_3 \bar{I}_1 + \bar{\gamma}_2 \bar{J}_2) \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} + \bar{\alpha}_2 (\bar{\mathbf{p}} \bar{\epsilon}' \cdot \bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\epsilon}' \bar{\mathbf{p}}) + \bar{\gamma}_3 \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{D}} \bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{D}}) \\ \bar{\mathbf{E}} = 2\bar{\beta}_1 \bar{\mathbf{D}}' + (2\bar{\beta}_2 \bar{J}_2 + \bar{\gamma}_1 \bar{I}_1 + \bar{\gamma}_2 \bar{I}_4) \bar{\mathbf{p}} + \bar{\gamma}_3 \bar{\epsilon}' \cdot \bar{\mathbf{p}}, \end{cases} \quad (2.150)$$

которые могут быть представлены в виде (2.140) с использованием следующих обозначений для модулей ${}^4\bar{\mathbf{C}}^D$, ${}^3\bar{\mathbf{h}}$ и $\bar{\boldsymbol{\beta}}^\epsilon$:

$$\begin{aligned} {}^4\bar{\mathbf{C}}^D &= \bar{\lambda} \mathbf{1} \mathbf{1} + \bar{\mu} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) + 2\bar{\alpha}_1 (\bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}}) + \bar{\alpha}_2 (\mathbf{1} \otimes \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} \otimes \mathbf{1}) + \bar{\alpha}_3 (\mathbf{1} \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} \mathbf{1}), \\ {}^3\bar{\mathbf{h}} &= \bar{\gamma}_1 \bar{\mathbf{p}} \mathbf{1} + \bar{\gamma}_2 \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \bar{\gamma}_3 (\mathbf{1} \bar{\mathbf{p}} + \mathbf{1} \otimes \bar{\mathbf{p}}), \\ \bar{\boldsymbol{\beta}}^\epsilon &= 2\bar{\beta}_1 \mathbf{1} + 2\bar{\beta}_2 \bar{\mathbf{p}} \bar{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (2.151)$$

Для задания ${}^4\bar{\mathbf{C}}^D$, ${}^3\bar{\mathbf{h}}$ и $\bar{\boldsymbol{\beta}}^\varepsilon$ из (2.151) требуется знание 10 констант материала: $\bar{\lambda}, \bar{\mu}, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \bar{\alpha}_3, \bar{\gamma}_1, \bar{\gamma}_2, \bar{\gamma}_3, \bar{\beta}_1, \bar{\beta}_2$. Альтернативным способом является задание 10 независимых компонент тензоров ${}^4\bar{\mathbf{C}}^D$, ${}^3\bar{\mathbf{h}}$ и $\bar{\boldsymbol{\beta}}^\varepsilon$ в системе координат с ориентацией оси 3 вдоль направления $\bar{\mathbf{p}}$:

$$\begin{aligned}\bar{C}_{11}^D &= \bar{\lambda} + 2\bar{\mu}, \quad \bar{C}_{33}^D = \bar{\lambda} + 2\bar{\mu} + 2\bar{\alpha}_1 + 2\bar{\alpha}_2 + 2\bar{\alpha}_3, \quad \bar{C}_{12}^D = \bar{\lambda}, \quad \bar{C}_{13}^D = \bar{\lambda} + 2\bar{\alpha}_3, \quad \bar{C}_{44}^D = \bar{\mu} + \frac{1}{2}\bar{\alpha}_2, \\ \bar{h}_{33} &= \bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2 + \bar{\gamma}_3, \quad \bar{h}_{31} = \bar{\gamma}_1, \quad \bar{h}_{15} = \frac{1}{2}\bar{\gamma}_3, \\ \bar{\beta}_{11}^\varepsilon &= 2\bar{\beta}_1, \quad \bar{\beta}_{33}^\varepsilon = 2\bar{\beta}_1 + 2\bar{\beta}_2.\end{aligned}\quad (2.152)$$

В случае необходимости учета зависимости модулей материала от внутренних переменных, например как в случае наблюдаемой в экспериментах (см. Рисунки 1.20г) линейной зависимости тензора пьезоэлектрических модулей от поляризации, допускается зависимость параметров от инвариантов внутренних переменных:

$$\begin{aligned}{}^4\bar{\mathbf{S}}^E &= \bar{s}_1 \mathbf{1}\mathbf{1} + \bar{s}_2 (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) + \bar{s}_3 \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}} + \bar{s}_4 (\mathbf{1} \otimes \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}} \otimes \mathbf{1}) + \bar{s}_5 (\mathbf{1}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}\mathbf{1}), \\ {}^3\bar{\mathbf{d}} &= |\bar{\mathbf{P}}^r| / \bar{P}_{sat} \left[\bar{d}_{31} (\mathbf{p}\mathbf{1} - \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}) + \bar{d}_{33} \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\bar{d}_{15} (\mathbf{1}\bar{\mathbf{p}} + \mathbf{1} \otimes \bar{\mathbf{p}} - 2\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}) \right], \\ \bar{\mathbf{k}}^\sigma &= \bar{\kappa}_{11} (\mathbf{1} - \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}) + \bar{\kappa}_{33} \bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}.\end{aligned}\quad (2.153)$$

Для задания ${}^4\bar{\mathbf{S}}^E$, ${}^3\bar{\mathbf{d}}$ и $\bar{\mathbf{k}}^\sigma$ требуется знание 10 констант: $\bar{s}_1, \bar{s}_2, \bar{s}_3, \bar{s}_4, \bar{s}_5, \bar{d}_{31}, \bar{d}_{33}, \bar{d}_{15}, \bar{\kappa}_{11}, \bar{\kappa}_{33}$ и поляризации насыщения $\bar{P}_{sat}$ (2.161).

2.2.1.1.2 Варианты задания необратимой части свободной энергии ψ^r

Предполагается, что необратимая часть свободной энергии ψ^r допускает разложение на электрическую, механическую и смешанную составляющие [305, 307]:

$$\bar{\psi}^r = \bar{\psi}^e(\bar{\mathbf{P}}^r) + \bar{\psi}^m(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r) + \bar{\psi}^{em}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r). \quad (2.154)$$

Для описания эффекта *насыщения* вторые производные введенных функций (определяющие наклон диаграмм необратимого деформирования и поляризации) должны обращаться в бесконечность. Примером подобной функциональной зависимости является степенная функция вида:

$$\bar{\rho}\bar{\psi}^e(|\bar{\mathbf{P}}^r|) = \begin{cases} \frac{H_0^e P_0^2}{m^e - 1} \left\{ \frac{1}{m^e - 2} \left[\left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right)^{2-m^e} - 1 \right] - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right\}, & \forall m^e : m^e \neq 2, m^e \neq 1, \\ -H_0^e P_0^2 \left[\ln \left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right) + \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right], & m^e = 2, \\ H_0^e P_0^2 \left\{ \left[\ln \left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right) - 1 \right] \left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right) - 1 \right\}, & m^e = 1, \end{cases} \quad (2.155)$$

где H_0^e, P_0, m^e - константы материала.

Следствием (2.155) получается выражение для смещения центра поверхности переключения вследствие кинематического упрочнения:

$$|\bar{\mathbf{E}}^B| = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}^e(|\bar{\mathbf{P}}^r|)}{\partial |\bar{\mathbf{P}}^r|} = \begin{cases} \frac{H_0^e P_0}{m^e - 1} \left[\left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right)^{1-m^e} - 1 \right], & \forall m^e : m^e \neq 1, \\ -H_0^e P_0 \ln \left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right), & m^e = 1. \end{cases} \quad (2.156)$$

Модуль упрочнения находится вычислением производной от (2.156):

$$\bar{H}^e = \frac{\partial^2 \bar{\rho} \bar{\psi}^e(|\bar{\mathbf{P}}^r|)}{\partial |\bar{\mathbf{P}}^r|^2} = H_0^e \left(1 - \frac{|\bar{\mathbf{P}}^r|}{P_0} \right)^{-m^e}. \quad (2.157)$$

При стремлении $|\bar{\mathbf{P}}^r|$ к P_0 модуль упрочнения $\bar{H}^e$ стремится к бесконечности, блокируя дальнейший рост поляризации.

В работах С. Landis [307, 309] на основе анализа микромеханической модели показано, что предельная поляризация при насыщении не является константой P_0 , а зависит от остаточной деформации $\bar{P}_{sat} = \bar{P}_{sat}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r)$. Аналогично остаточная деформация при насыщении определяется видом деформированного состояния $\bar{\varepsilon}_{sat} = \bar{\varepsilon}_{sat}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r)$. Поэтому вместо (2.154) используется разложение [309]:

$$\bar{\psi}^r = \bar{\psi}^e(\bar{\mathbf{P}}^r, \bar{P}_{sat}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r)) + \bar{\psi}^m(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r, \bar{\varepsilon}_{sat}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r)). \quad (2.158)$$

Поскольку аргументом $\bar{\psi}^r(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ является вектор $\bar{\mathbf{P}}^r$, направленный вдоль оси трансверсальной анизотропии $\bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{P}}^r / |\bar{\mathbf{P}}^r|$, то число инвариантов, определяющих зависимость $\bar{\psi}^r(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ и в изотропном, и в трансверсально-изотропном случаях, совпадает и равняется 6 (см. (2.143)). Исключая из рассмотрения $\bar{I}_1^r = \text{tr}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r) \equiv 0$ и $\bar{K}_2^r = \bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{r^2} \cdot \bar{\mathbf{p}}$, разложение (2.158) допускает представление через инварианты:

$$\bar{\psi}^r = \bar{\psi}^e(\bar{J}_1^r, \bar{K}_1^r) + \bar{\psi}^m(\bar{I}_2^r, \bar{I}_3^r), \quad (2.159)$$

где $\bar{J}_1^r = \sqrt{\bar{\mathbf{P}}^r \cdot \bar{\mathbf{P}}^r} = |\bar{\mathbf{P}}^r|$, $\bar{I}_2^r = (\frac{2}{3} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r)^{1/2}$, $\bar{I}_3^r = [\frac{4}{3} \det(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r)]^{1/3}$, $\bar{K}_1^r = \bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r \cdot \bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{P}}^r \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r \cdot \bar{\mathbf{P}}^r / \bar{\mathbf{P}}^r \cdot \bar{\mathbf{P}}^r$.

Для функции $\bar{\psi}^e$ предлагается следующее выражение, обобщающее (2.155) (для краткости ограничимся случаем $m^e \neq 2, m^e \neq 1$):

$$\bar{\rho} \bar{\psi}^e = \frac{H_0^e \bar{P}_{sat}^2(\bar{K}_1^r)}{m^e - 1} \left\{ \frac{1}{m^e - 2} \left[\left(1 - \frac{\bar{J}_1^r}{\bar{P}_{sat}(\bar{K}_1^r)} \right)^{2-m^e} - 1 \right] - \frac{\bar{J}_1^r}{\bar{P}_{sat}(\bar{K}_1^r)} \right\}, \quad (2.160)$$

где для поляризации насыщения вводится линейная аппроксимация [309]:

$$\bar{P}_{sat} = \frac{\bar{P}_{\max} - \bar{P}_{\min}}{\bar{\varepsilon}_l + \bar{\varepsilon}_c} (\bar{K}_1^r + \bar{\varepsilon}_c) + \bar{P}_{\min}. \quad (2.161)$$

В выражении (2.161) $\bar{P}_{\min} \approx 0,21\tilde{P}_0$ и $\bar{P}_{\max} \approx 0,83\tilde{P}_0$ - минимальная (при сжатии) и максимальная (при растяжении) поляризации насыщения поликристалла, $\bar{\varepsilon}_c \approx 0,40\tilde{\varepsilon}_0$ и $\bar{\varepsilon}_t \approx 0,55\tilde{\varepsilon}_0$ - остаточные деформации насыщения поликристалла при сжатии и растяжении, $\tilde{P}_0$ и $\tilde{\varepsilon}_0$ - поляризация и остаточная деформация насыщения монокристалла.

Для функции $\bar{\psi}^m$ предлагается следующее выражение, обобщающее (2.155) (ограничимся случаем $m^m \neq 2, m^m \neq 1$):

$$\bar{\psi}^m = \frac{H_0^m \bar{\varepsilon}_{sat}^2 (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)}{m^m - 1} \left\{ \frac{1}{m^m - 2} \left[\left(1 - \frac{\bar{I}_2^r}{\bar{\varepsilon}_{sat} (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)} \right)^{2-m^m} - 1 \right] - \frac{\bar{I}_2^r}{\bar{\varepsilon}_{sat} (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)} \right\}, \quad (2.162)$$

где для остаточной деформации насыщения вводится аппроксимация по 3м точкам:

$$\bar{\varepsilon}_{sat} = \frac{\bar{\varepsilon}_t - \bar{\varepsilon}_c}{2} (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)^3 + \left(\frac{\bar{\varepsilon}_t + \bar{\varepsilon}_c}{2} - \bar{\varepsilon}_s \right) (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)^2 + \bar{\varepsilon}_s, \quad (2.163)$$

$\bar{\varepsilon}_c$, $\bar{\varepsilon}_t$ и $\bar{\varepsilon}_s$ - остаточные деформации насыщения поликристалла при сжатии, растяжении и сдвиге. Альтернативные аппроксимации вида $\bar{\varepsilon}_{sat} = \bar{\varepsilon}_c / \sum_{k=1}^N A_k (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)^{n_k}$ использовались в [307, 309, 392]. В работе [392] коэффициенты A_k определялись на основе КЭ гомогенизации.

Введенные в (2.160) и (2.162) для аппроксимации $\bar{\psi}^e$ и $\bar{\psi}^m$ степенные зависимости (с учетом переменных пределов параметров насыщения) не являются единственно возможными. В работе [309] использованы выражения:

$$\bar{\psi}^e = H_0^e \bar{P}_{\max} \left[\ln \left(\frac{1}{1 - \bar{J}_1^r / \bar{P}_{sat} (\bar{K}_1^r)} \right) - \frac{\bar{J}_1^r}{\bar{P}_{sat} (\bar{K}_1^r)} \right], \quad \bar{\psi}^m = \frac{H_0^m \bar{\varepsilon}_c}{2} \left[\frac{\bar{I}_2^r}{\bar{\varepsilon}_c} \exp \left(\frac{m^m}{1 - \bar{I}_2^r / \bar{\varepsilon}_{sat} (\bar{I}_3^r / \bar{I}_2^r)} \right) \right]^2 \quad (2.164)$$

Следует также упомянуть о варианте, основанном на результатах статистической физики, используемом в работах [30, 56, 340, 426]:

$$\bar{\psi}^e = H_0 P_0^2 \left[\frac{\bar{P}^r}{P_0} \operatorname{arctanh} \left(\frac{\bar{P}^r}{P_0} \right) + \frac{1}{2} \ln \left(1 - \left(\frac{\bar{P}^r}{P_0} \right)^2 \right) \right]. \quad (2.165)$$

Как показано в работе Ле-Захарова и Семенова [56] модуль упрочнения, полученный для (2.165), так же как и (2.157), обладает сингулярными свойствами при $|\bar{\mathbf{P}}^r| \rightarrow P_0$: $\bar{H}^e = H_0^e \left[1 - (|\bar{\mathbf{P}}^r| / P_0)^2 \right]^{-1}$ и его обобщение на случай $\bar{H}^e = H_0^e \left[1 - (|\bar{\mathbf{P}}^r| / P_0)^{n^e} \right]^{-1}$, где n^e - дополнительный параметр модели, аналогичный m^e , приводит к семейству потенциалов, вычисляемых на основе гипергеометрических функций. Однако ха-

рактер нелинейной функциональной зависимости потенциала не является принципиальным - все рассмотренные варианты (2.155), (2.160), (2.164), (2.165) обладают достаточными аппроксимирующими возможностями для описания поведения реальных материалов при одноосном нагружении. При комбинированном многоосном электромеханическом нагружении существенным является учет зависимости параметров насыщения $\bar{P}_{sat}$ и $\bar{\varepsilon}_{sat}$ от накопленной остаточной деформации и поляризации, выполненный только в моделях (2.160) и (2.164).

2.2.1.1.3 Варианты задания функции переключения $\bar{\Phi}$

Экспериментальные данные показывают, что пластические и поляризационные свойства сегнетопъезокерамических материалов не зависят от действия гидростатического давления. Поэтому в математической формулировке функции переключения Φ вместо тензора напряжений следует использовать его девиатор.

С учетом этого в *изотропном приближении* функция $\bar{\Phi}(\hat{s}, \hat{E})$ тензорного и векторного аргументов является функцией 5 инвариантов (см. (2.143)):

$$\bar{\Phi}(\hat{s}, \hat{E}) = f(\bar{I}_2^{\hat{s}}, \bar{I}_3^{\hat{s}}, \bar{J}_1^{\hat{E}}, \bar{K}_1^{\hat{E}\hat{s}}, \bar{K}_2^{\hat{E}\hat{s}}), \quad (2.166)$$

где $\bar{I}_2^{\hat{s}} = \hat{s} \cdot \hat{s}$, $\bar{I}_3^{\hat{s}} = \det(\hat{s})$, $\bar{J}_1^{\hat{E}} = \hat{E} \cdot \hat{E}$, $\bar{K}_1^{\hat{E}\hat{s}} = \hat{E} \cdot \hat{s} \cdot \hat{E}$, $\bar{K}_2^{\hat{E}\hat{s}} = \hat{E} \cdot \hat{s}^2 \cdot \hat{E}$.

В случае использования аналога критерия Мизеса (не учитывающего $\bar{I}_3^{\hat{s}}$) и рассмотрения линейной комбинации введенных инвариантов приходим к выражению:

$$\bar{\Phi}(\hat{s}, \hat{E}) = \frac{3\hat{s} \cdot \hat{s}}{2\bar{\sigma}_c^2} + \frac{\hat{E} \cdot \hat{E}}{\bar{E}_c^2} + \beta \frac{\hat{E} \cdot \hat{s} \cdot \hat{E}}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c \bar{E}_c} + \gamma \frac{\hat{E} \cdot \hat{s}^2 \cdot \hat{E}}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c^2 \bar{E}_c} - 1, \quad (2.167)$$

где $\bar{\sigma}_c$ и $\bar{E}_c$ - коэрцитивные значения напряжений и электрического поля, β и γ - константы материала, на область допустимых значений которых накладывает ограничение условие выпуклости $\bar{\Phi}(\hat{s}, \hat{E})$. В случае неучета разнсопротивляемости при растяжении и сжатии (инвариантности при замене $\hat{s}$ на $-\hat{s}$) $\beta = 0$.

Для *трансверсально-изотропного* материала с осью трансверсальной анизотропии $\bar{p}$ функция $\bar{\Phi}(\hat{s}, \hat{E}, \bar{p})$ является функцией 10 инвариантов (см. (2.147)):

$$\bar{\Phi}(\hat{s}, \hat{E}, \bar{p}) = f(\bar{I}_2^{\hat{s}}, \bar{I}_3^{\hat{s}}, \bar{I}_4^{\hat{p}\hat{s}}, \bar{I}_5^{\hat{p}\hat{s}}, \bar{J}_1^{\hat{E}}, \bar{J}_2^{\hat{E}\hat{p}}, \bar{K}_1^{\hat{E}\hat{s}}, \bar{K}_2^{\hat{E}\hat{s}}, \bar{K}_3^{\hat{E}\hat{s}\hat{p}}, \bar{K}_4^{\hat{E}\hat{s}\hat{p}}), \quad (2.168)$$

где $\bar{I}_4^{\hat{p}\hat{s}} = \bar{p} \cdot \hat{s} \cdot \bar{p}$, $\bar{I}_5^{\hat{p}\hat{s}} = \bar{p} \cdot \hat{s}^2 \cdot \bar{p}$, $\bar{J}_2^{\hat{E}\hat{p}} = \hat{E} \cdot \bar{p}$, $\bar{K}_3^{\hat{E}\hat{s}\hat{p}} = \hat{E} \cdot \hat{s} \cdot \bar{p}$, $\bar{K}_4^{\hat{E}\hat{s}\hat{p}} = \hat{E} \cdot \hat{s}^2 \cdot \bar{p}$.

В случае использования аналога критерия Мизеса и рассмотрения линейной комбинации введенных инвариантов приходим к соотношению:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{E}}, \bar{\mathbf{p}}) = & \frac{3\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}{2\bar{\sigma}_c^2} + \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}}}{\bar{E}_c^2} + \alpha \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \bar{\mathbf{p}}}{\bar{E}_c} + \beta \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{E}}}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c \bar{E}_c} + \gamma \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}}^2 \cdot \hat{\mathbf{E}}}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c^2 \bar{E}_c} + \\ & + \delta \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{p}}}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c} + \varepsilon \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}}^2 \cdot \bar{\mathbf{p}}}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c^2} + \varsigma \frac{\bar{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{p}}}{\bar{\sigma}_c} + \iota \frac{\bar{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{s}}^2 \cdot \bar{\mathbf{p}}}{\bar{\sigma}_c^2} - 1, \end{aligned} \quad (2.169)$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon, \varsigma$ и ι - функции инвариантов или константы материала, на область допустимых значений которых накладывает ограничение условие выпуклости $\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{E}})$.

При использовании неклассических вариантов функции переключения, формулируемых не только в пространстве внутренних сил, но и в пространстве внутренних переменных $\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{g}}, \hat{\mathbf{E}}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$, общее выражение требует учета 40 инвариантов двух тензоров и двух векторов (см. (2.75)).

На практике в качестве критерия переключения рассматривается выражение [255, 305]:

$$\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{E}}, \bar{\mathbf{P}}^r) = \frac{3\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}{2\bar{\sigma}_c^2} + \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}}}{\bar{E}_c^2} + \bar{\beta} \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{P}}^r}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c \bar{P}_{\max}^r} - 1 = 0. \quad (2.170)$$

Третье слагаемое в (2.170) вводится для учета перекрестного влияния электрических полей на накопление остаточных деформаций и влияния механического воздействия на поляризацию в соответствии с ассоциированным законом (2.134).

Выражение (2.170) может быть получено частным случаем (2.169) при $\alpha = \beta = \gamma = \varepsilon = \varsigma = \iota = 0$, $\delta = \bar{\beta} |\mathbf{P}^r| / P_{\max}$. Близкий к (2.170) вариант, допускающий строгое обоснование для трансверсально изотропного материала с постоянным коэффициентом δ , имеет вид:

$$\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{E}}, \bar{\mathbf{P}}^r) = \frac{3\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}{2\bar{\sigma}_c^2} + \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}}}{\bar{E}_c^2} + \delta \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{P}}^r}{\bar{E}_c \bar{\sigma}_c |\bar{\mathbf{P}}^r|} - 1 = 0. \quad (2.171)$$

2.2.1.2 Скоростная форма определяющих уравнений

Исключение внутренних переменных позволяет свести дифференциально-алгебраическую систему к дифференциальной и найти квазилинейную связь между скоростями тензоров напряжений и деформаций, скоростями векторов напряженности электрического поля и электрической индукции.

Процедура получения скоростной формы определяющих уравнений аналогична используемой в теории пластичности. Дифференцирование по времени (2.142) и замена скорости внутренних переменных с помощью ассоциированного

закона (2.134) с учетом вычисления $\bar{\lambda}$ на основе уравнения $\dot{\Phi}(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{E}}, \bar{\mathbf{P}}^r) = 0$ приводит к скоростной форме определяющих уравнений (2.142):

$$\begin{cases} \dot{\hat{\mathbf{e}}} = \left({}^4\bar{\mathbf{S}}^E + \frac{1}{D}\hat{\mathbf{e}}\hat{\mathbf{e}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{\sigma}}} + \dot{\hat{\mathbf{E}}} \cdot \left({}^3\bar{\mathbf{d}} + \frac{1}{D}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{e}} \right), \\ \dot{\bar{\mathbf{D}}} = \left({}^3\bar{\mathbf{d}} + \frac{1}{D}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{e}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{\sigma}}} + \left(\bar{\mathbf{\kappa}}^\sigma + \frac{1}{D}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{P}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{E}}}, \end{cases} \quad (2.172)$$

с ненулевым знаменателем

$$D = \partial_{\hat{\mathbf{e}}} \bar{\Phi} \cdot \left({}^4\bar{\mathbf{H}}^m - {}^4\bar{\mathbf{U}}^m \right) \cdot \partial_{\hat{\mathbf{\sigma}}} \bar{\Phi} + 2\partial_{\hat{\mathbf{E}}} \bar{\Phi} \cdot \left({}^3\bar{\mathbf{H}}^{em} - {}^3\bar{\mathbf{U}}^{em} \right) \cdot \partial_{\hat{\mathbf{\sigma}}} \bar{\Phi} + \partial_{\hat{\mathbf{E}}} \bar{\Phi} \cdot \left(\bar{\mathbf{H}}^e - \bar{\mathbf{U}}^e \right) \cdot \partial_{\hat{\mathbf{E}}} \bar{\Phi} - \partial_{\bar{\mathbf{e}}^r} \bar{\Phi} \cdot \partial_{\hat{\mathbf{\sigma}}} \bar{\Phi} - \partial_{\bar{\mathbf{P}}^r} \bar{\Phi} \cdot \partial_{\hat{\mathbf{E}}} \bar{\Phi}, \quad (2.173)$$

тензорами, зависящими от нормали к поверхности переключения

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}} &= \left({}^4\mathbf{I} + {}^4\bar{\mathbf{A}}^{\varepsilon\varepsilon} \right) \cdot \partial_{\hat{\mathbf{\sigma}}} \bar{\Phi} + \partial_{\hat{\mathbf{E}}} \bar{\Phi} \cdot {}^3\bar{\mathbf{A}}^{\varepsilon P}, \\ \hat{\mathbf{P}} &= {}^3\bar{\mathbf{A}}^{P\varepsilon} \cdot \partial_{\hat{\mathbf{\sigma}}} \bar{\Phi} + \left(\mathbf{1} + \bar{\mathbf{A}}^{PP} \right) \cdot \partial_{\hat{\mathbf{E}}} \bar{\Phi}, \end{aligned} \quad (2.174)$$

тензорами упрочнения

$$\begin{aligned} {}^4\bar{\mathbf{H}}^m &= \partial_{\bar{\mathbf{e}}^r \bar{\mathbf{e}}^r}^2 \bar{\rho} \bar{\psi}^r, \\ {}^3\bar{\mathbf{H}}^{em} &= \partial_{\bar{\mathbf{P}}^r \bar{\mathbf{e}}^r}^2 \bar{\rho} \bar{\psi}^r, \\ \bar{\mathbf{H}}^e &= \partial_{\bar{\mathbf{P}}^r \bar{\mathbf{P}}^r}^2 \bar{\rho} \bar{\psi}^r, \end{aligned} \quad (2.175)$$

тензорами, характеризующими зависимость модулей от внутренних переменных

$$\begin{aligned} \bar{U}_{ijkl}^m &= \frac{1}{2} \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r \bar{\mathbf{e}}_j^r}^2 \bar{s}_{pqrs}^E \bar{\sigma}_{pq} \bar{\sigma}_{rs} + \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r \bar{\mathbf{e}}_j^r}^2 \bar{d}_{qrs} \bar{E}_q \bar{\sigma}_{rs} + \frac{1}{2} \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r \bar{\mathbf{e}}_j^r}^2 \bar{\kappa}_{pq}^\sigma \bar{E}_p \bar{E}_q, \\ \bar{U}_{kij}^{em} &= \frac{1}{2} \partial_{\bar{\mathbf{P}}_k^r \bar{\mathbf{e}}_i^r}^2 \bar{s}_{pqrs}^E \bar{\sigma}_{pq} \bar{\sigma}_{rs} + \partial_{\bar{\mathbf{P}}_k^r \bar{\mathbf{e}}_i^r}^2 \bar{d}_{qrs} \bar{E}_q \bar{\sigma}_{rs} + \frac{1}{2} \partial_{\bar{\mathbf{P}}_k^r \bar{\mathbf{e}}_i^r}^2 \bar{\kappa}_{pq}^\sigma \bar{E}_p \bar{E}_q, \\ \bar{U}_{ij}^e &= \frac{1}{2} \partial_{\bar{\mathbf{P}}_i^r \bar{\mathbf{P}}_j^r}^2 \bar{s}_{pqrs}^E \bar{\sigma}_{pq} \bar{\sigma}_{rs} + \partial_{\bar{\mathbf{P}}_i^r \bar{\mathbf{P}}_j^r}^2 \bar{d}_{qrs} \bar{E}_q \bar{\sigma}_{rs} + \frac{1}{2} \partial_{\bar{\mathbf{P}}_i^r \bar{\mathbf{P}}_j^r}^2 \bar{\kappa}_{pq}^\sigma \bar{E}_p \bar{E}_q \end{aligned} \quad (2.176)$$

и

$$\begin{aligned} \bar{A}_{ijkl}^{\varepsilon\varepsilon} &= \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r} \bar{s}_{pqij}^E \bar{\sigma}_{pq} + \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r} \bar{d}_{qij} \bar{E}_q, \\ \bar{A}_{kij}^{\varepsilon P} &= \partial_{\bar{\mathbf{P}}_k^r} \bar{s}_{pqij}^E \bar{\sigma}_{pq} + \partial_{\bar{\mathbf{P}}_k^r} \bar{d}_{qij} \bar{E}_q, \\ \bar{A}_{kij}^{P\varepsilon} &= \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r} \bar{d}_{krs} \bar{\sigma}_{rs} + \partial_{\bar{\mathbf{e}}_i^r} \bar{\kappa}_{kq}^\sigma \bar{E}_q, \\ \bar{A}_{ij}^{PP} &= \partial_{\bar{\mathbf{P}}_j^r} \bar{d}_{irs} \bar{\sigma}_{rs} + \partial_{\bar{\mathbf{P}}_j^r} \bar{\kappa}_{iq}^\sigma \bar{E}_q. \end{aligned} \quad (2.177)$$

Применение векторно-потенциальной формулировки требует обращения скоростной формы определяющих уравнений (2.172) [424]:

$$\begin{cases} \dot{\hat{\mathbf{\sigma}}} = \left({}^4\bar{\mathbf{C}}^D - \frac{1}{F}\hat{\mathbf{\sigma}}\hat{\mathbf{\sigma}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{e}}} - \dot{\bar{\mathbf{D}}} \cdot \left({}^3\bar{\mathbf{h}} + \frac{1}{F}\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{\sigma}} \right), \\ \dot{\hat{\mathbf{E}}} = - \left({}^3\bar{\mathbf{h}} + \frac{1}{F}\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{\sigma}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{e}}} + \left(\bar{\mathbf{\beta}}^\varepsilon - \frac{1}{F}\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{E}} \right) \cdot \dot{\bar{\mathbf{D}}}, \end{cases} \quad (2.178)$$

где введены следующие обозначения:

$$\hat{\mathbf{\sigma}} = {}^4\bar{\mathbf{C}}^D \cdot \hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{P}} \cdot {}^3\bar{\mathbf{h}}, \quad \hat{\mathbf{E}} = - {}^3\bar{\mathbf{h}} \cdot \hat{\mathbf{e}} + \bar{\mathbf{\beta}}^\varepsilon \cdot \hat{\mathbf{P}}, \quad F = D + \hat{\mathbf{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{P}}. \quad (2.179)$$

Для процессов, контролируемых деформацией и электрическим полем, в которых $\bar{\mathbf{e}}$ и $\bar{\mathbf{E}}$ являются основными независимыми переменными, приводящих к

применению скалярно-потенциальной формулировки, требуется частично обращенная форма определяющих уравнений (2.172) [424]:

$$\begin{cases} \dot{\hat{\mathbf{e}}} = \left({}^4\bar{\mathbf{C}}^E - \frac{1}{G} \hat{\mathbf{e}} \hat{\mathbf{e}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{e}}} - \dot{\hat{\mathbf{E}}} \cdot \left({}^3\bar{\mathbf{e}} + \frac{1}{G} \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{e}} \right), \\ \dot{\hat{\mathbf{D}}} = \left({}^3\bar{\mathbf{e}} + \frac{1}{G} \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{e}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{e}}} + \left(\bar{\mathbf{K}}^E + \frac{1}{G} \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{P}} \right) \cdot \dot{\hat{\mathbf{E}}}, \end{cases} \quad (2.180)$$

где использованы обозначения

$$\hat{\mathbf{e}} = {}^4\bar{\mathbf{C}}^E \cdot \hat{\mathbf{e}}, \quad \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{P}} - {}^3\bar{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}}, \quad G = D + \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}}. \quad (2.181)$$

2.2.1.3 Компактная форма определяющих уравнений

Введем следующие компактные обозначения (аналогичные используемым в разделе 2.1.1.4), объединяющие тензор второго ранга (характеризующий механическое состояние) и вектор (характеризующий электрическое состояние) как компоненты одного символического вектора-столбца:

$$\bar{\Sigma} = \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{e}} \\ \bar{\mathbf{E}} \end{Bmatrix}, \quad \bar{\Gamma} = \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{e}} \\ \bar{\mathbf{D}} \end{Bmatrix}, \quad \bar{\Gamma}^r = \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{e}}^r \\ \bar{\mathbf{P}}^r \end{Bmatrix}, \quad \partial_{\bar{\Sigma}} \bar{\Phi} = \begin{Bmatrix} \partial_{\bar{\mathbf{e}}} \bar{\Phi} \\ \partial_{\bar{\mathbf{E}}} \bar{\Phi} \end{Bmatrix}, \quad \partial_{\bar{\Gamma}^r} \bar{\Phi} = \begin{Bmatrix} \partial_{\bar{\mathbf{e}}^r} \bar{\Phi} \\ \partial_{\bar{\mathbf{P}}^r} \bar{\Phi} \end{Bmatrix}. \quad (2.182)$$

С учетом введенных обозначений свободная энергия Гельмгольца (2.138), (2.139) допускает представление:

$$\bar{\rho} \bar{\psi} = \bar{\rho} \bar{\psi}^l(\bar{\Gamma}, \bar{\Gamma}^r) + \bar{\rho} \bar{\psi}^r(\bar{\Gamma}^r) = \frac{1}{2} (\bar{\Gamma} - \bar{\Gamma}^r) \circ \bar{\mathbb{G}}(\bar{\Gamma}^r) \circ (\bar{\Gamma} - \bar{\Gamma}^r) + \bar{\rho} \bar{\psi}^r(\bar{\Gamma}^r), \quad (2.183)$$

где $\bar{\mathbb{G}}(\bar{\Gamma}^r)$ - матрица линейного пьезоэлектрического отклика, определяемая выражением:

$$\bar{\mathbb{G}} = \left[\begin{array}{c|c} {}^4\bar{\mathbf{C}}^D & -{}^3\bar{\mathbf{h}}^T \\ \hline -{}^3\bar{\mathbf{h}} & \bar{\mathbf{p}}^E \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} \partial_{\bar{\mathbf{e}}\bar{\mathbf{e}}}^2 \bar{\rho} \bar{\psi} & \partial_{\bar{\mathbf{e}}\bar{\mathbf{D}}}^2 \bar{\rho} \bar{\psi} \\ \hline \partial_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{e}}}^2 \bar{\rho} \bar{\psi} & \partial_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{D}}}^2 \bar{\rho} \bar{\psi} \end{array} \right] = \partial_{\bar{\Gamma}\bar{\Gamma}}^2 \bar{\rho} \bar{\psi}. \quad (2.184)$$

Предположим, что матрица $\bar{\mathbb{G}}$ положительно определена:

$$\bar{\Gamma} \circ \bar{\mathbb{G}} \circ \bar{\Gamma} > 0, \quad \text{for } \forall \bar{\Gamma} \neq \mathbf{0}. \quad (2.185)$$

Это эквивалентно постулированию выпуклости $\bar{\psi}(\bar{\Gamma})$. Инверсия $\bar{\mathbb{G}}$ определяется соотношением:

$$\bar{\mathbb{G}}^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} {}^4\bar{\mathbf{S}}^E & {}^3\bar{\mathbf{d}}^T \\ \hline {}^3\bar{\mathbf{d}} & \bar{\mathbf{K}}^E \end{array} \right]. \quad (2.186)$$

С учетом введенных обозначений диссипативное неравенство (2.126) без учета тепловых эффектов определяется выражением

$$\bar{\delta} = \bar{\Sigma} \circ \dot{\bar{\Gamma}} - \bar{\rho} \dot{\bar{\psi}} \geq 0. \quad (2.187)$$

Рассматривая в качестве независимых аргументов потенциала $\bar{\psi}$ переменные $\bar{\Gamma}$ и $\bar{\Gamma}^r$ следствием неравенства (2.187) получаем

$$\bar{\delta} = (\bar{\Sigma} - \partial_{\bar{\Gamma}} \bar{\rho} \bar{\psi}) \circ \dot{\bar{\Gamma}} - \partial_{\bar{\Gamma}^r} \bar{\rho} \bar{\psi} \circ \dot{\bar{\Gamma}}^r \geq 0. \quad (2.188)$$

Это неравенство должно выполняться для всех возможных термодинамических процессов, поэтому мы получаем следующее определяющее уравнение:

$$\bar{\Sigma} = \partial_{\bar{\Gamma}} \bar{\rho} \bar{\psi} = \bar{\mathbb{G}} \circ (\bar{\Gamma} - \bar{\Gamma}^r), \quad (2.189)$$

совпадающее с (2.140). Введение внутренних термодинамических сил, сопряженных с внутренними переменными

$$\hat{\Sigma} = -\partial_{\bar{\Gamma}^r} \bar{\rho} \bar{\psi} \quad (2.190)$$

приводит к компактной форме диссипативного неравенства

$$\delta = \hat{\Sigma} \circ \dot{\bar{\Gamma}}^r \geq 0. \quad (2.191)$$

Подстановка выражения для свободной энергии (2.183) в (2.190) приводит к разложению

$$\hat{\Sigma} = \bar{\Sigma} - \bar{\Sigma}^B + \bar{\Sigma}^G, \quad (2.192)$$

где

$$\bar{\Sigma} + \bar{\Sigma}^G = -\partial_{\bar{\Gamma}^r} \bar{\rho} \bar{\psi}^l, \quad \bar{\Sigma}^B = \partial_{\bar{\Gamma}^r} \bar{\rho} \bar{\psi}^r, \quad \bar{\Sigma}^G = -\frac{1}{2} \bar{\Sigma} \bar{\Sigma} \circ \partial_{\bar{\Gamma}^r} \bar{\mathbb{G}}^{-1}. \quad (2.193)$$

Вектор $\bar{\Sigma}^G$ характеризует влияние изменения пьезоэлектрических модулей на внутренние термодинамические силы. Выражение (2.193)₃ получено на основе (2.183), (2.191), (2.190). Появление свертки $\circ$ в (2.193)₃ следует понимать как $\bar{\Sigma}_i^G = -\frac{1}{2} \bar{\Sigma}_k \bar{\Sigma}_j \partial_{\bar{\Gamma}_i^r} \bar{\mathbb{G}}_{jk}^{-1}$.

Поверхность переключения определяется гладкой выпуклой функцией

$$\bar{\Phi}(\hat{\Sigma}) = 0. \quad (2.194)$$

Равенство в (2.194) имеет место только для необратимых процессов, связанных с переключением доменов, в то время как для обратимых процессов с линейным откликом материала выполняется $\bar{\Phi} < 0$. Состояние $\bar{\Phi} > 0$ не допускается.

Применение принципа максимума диссипации при наличии ограничений (2.194) приводит к анализу экстремальных свойств функционала Лагранжа

$$L(\hat{\Sigma}, \bar{\lambda}) = -\bar{\delta}(\hat{\Sigma}) + \bar{\lambda} \bar{\Phi}(\hat{\Sigma}) \quad (2.195)$$

с множителем Лагранжа $\bar{\lambda} \geq 0$. Условия оптимизации $\partial_{\hat{\Sigma}} L = 0$, $\partial_{\bar{\lambda}} L = 0$ приводят к ассоциированному закону переключения (условию нормальности) для внутренних переменных (см. также (2.134)):

$$\dot{\bar{\Gamma}}^r = \lambda \partial_{\hat{\Sigma}} \bar{\Phi} \quad (2.196)$$

и условиям нагружения / разгрузки (Куна-Таккера) (2.135).

Для получения касательных модулей $\bar{\mathbb{G}}_t$ сегнетоэлектроругого материала воспользуемся стандартной процедурой, основанной на исключении множителя $\bar{\lambda}$ с помощью условия переключения (2.194), записанного в дифференциальной форме:

$$\dot{\bar{\Phi}} = \partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi} \circ \dot{\Sigma} + \partial_{\dot{\Gamma}^r} \bar{\Phi} \circ \dot{\Gamma}^r = 0. \quad (2.197)$$

Дифференцирование (2.192) приводит к выражению

$$\dot{\Sigma} = (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}^T) \circ \dot{\Sigma} - (\bar{\mathbb{H}} - \bar{\mathbb{U}}) \circ \dot{\Gamma}^r, \quad (2.198)$$

где введены обозначения

$$\bar{\mathbb{H}} = \partial_{\dot{\Gamma}^r \dot{\Gamma}^r}^2 \bar{\rho} \bar{\psi}^r = \begin{bmatrix} {}^4 \bar{\mathbf{H}}^m & {}^3 \bar{\mathbf{H}}^{emT} \\ {}^3 \bar{\mathbf{H}}^{em} & \bar{\mathbf{H}}^e \end{bmatrix}, \quad \bar{\mathbb{H}}^T = \bar{\mathbb{H}}, \quad (2.199)$$

$$\bar{\mathbb{U}} = -\frac{1}{2} \bar{\Sigma} \bar{\Sigma} \circ \partial_{\dot{\Gamma}^r \dot{\Gamma}^r}^2 \bar{\mathbb{G}}^{-1} = \begin{bmatrix} {}^4 \bar{\mathbf{U}}^m & {}^3 \bar{\mathbf{U}}^{emT} \\ {}^3 \bar{\mathbf{U}}^{em} & \bar{\mathbf{U}}^e \end{bmatrix}, \quad \bar{\mathbb{U}}^T = \bar{\mathbb{U}}, \quad (2.200)$$

$$\bar{\mathbf{A}} = -\bar{\Sigma} \circ \partial_{\dot{\Gamma}^r} \bar{\mathbb{G}}^{-1} = \begin{bmatrix} {}^4 \bar{\mathbf{A}}^{\varepsilon\varepsilon} & {}^3 \bar{\mathbf{A}}^{\varepsilon PT} \\ {}^3 \bar{\mathbf{A}}^{P\varepsilon} & \bar{\mathbf{A}}^{PP} \end{bmatrix}, \quad \bar{\mathbf{A}}^T \neq \bar{\mathbf{A}}. \quad (2.201)$$

$\mathbb{I}$ - единичная матрица, обладающая свойством $\mathbb{I} \circ \dot{\Sigma} = \dot{\Sigma}$. Матрица $\bar{\mathbf{A}}$ несимметрична. Все остальные введенные матрицы симметричны. Тензоры ${}^4 \bar{\mathbf{H}}^m$, ${}^3 \bar{\mathbf{H}}^{em}$, $\bar{\mathbf{H}}^e$, ${}^4 \bar{\mathbf{U}}^m$, ${}^3 \bar{\mathbf{U}}^{em}$, $\bar{\mathbf{U}}^e$, ${}^4 \bar{\mathbf{A}}^{\varepsilon\varepsilon}$, ${}^3 \bar{\mathbf{A}}^{P\varepsilon}$, ${}^3 \bar{\mathbf{A}}^{\varepsilon P}$, $\bar{\mathbf{A}}^{PP}$ определяются формулами (2.175)-(2.177).

Дифференцирование (2.189) с учетом зависимости $\bar{\mathbb{G}}$ от $\bar{\Gamma}^r$ приводит к

$$\dot{\Sigma} = \bar{\mathbb{G}} \circ \dot{\Gamma} - \bar{\mathbb{G}} \circ (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}) \circ \dot{\Gamma}^r. \quad (2.202)$$

Следствием (2.197), (2.198), (2.202) и (2.196) получаем выражение для пластического множителя

$$\bar{\lambda} = \frac{\partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi} \circ (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}^T) \circ \bar{\mathbb{G}} \circ \dot{\Gamma}}{(\partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi} \circ \bar{\mathbb{B}} - \partial_{\dot{\Gamma}^r} \bar{\Phi}) \circ \partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi}}, \quad (2.203)$$

где

$$\bar{\mathbb{B}} = (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}^T) \circ \bar{\mathbb{G}} \circ (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}) + \bar{\mathbb{H}} - \bar{\mathbb{U}}, \quad \bar{\mathbb{B}}^T = \bar{\mathbb{B}}. \quad (2.204)$$

Окончательно подстановка выражения для $\bar{\lambda}$ (2.203) в ассоциированный закон (2.196), а затем в (2.202) позволяет получить квазилинейную связь между скоростью изменения $\bar{\Sigma}$ и скоростью изменения $\bar{\Gamma}$:

$$\dot{\Sigma} = \bar{\mathbb{G}}_t \circ \dot{\Gamma}, \quad (2.205)$$

где $\bar{\mathbb{G}}_t$ - матрица касательных сегнетоэлектрoупругих модулей:

$$\bar{\mathbb{G}}_t = \bar{\mathbb{G}} - \frac{[\bar{\mathbb{G}} \circ (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}) \circ \partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi}] [\partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi} \circ (\mathbb{I} + \bar{\mathbf{A}}^T) \circ \bar{\mathbb{G}}]}{(\partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi} \circ \bar{\mathbb{B}} - \partial_{\dot{\Gamma}^r} \bar{\Phi}) \circ \partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi}}. \quad (2.206)$$

Следует отметить, что $\bar{\mathbb{G}}_t$ является симметричной матрицей, благодаря использованию ассоциированного закона (2.196). Положительная определенность $\bar{\mathbb{G}}_t$ обеспечивается требованиями положительной определенности матрицы пьезоэлектрических модулей $\bar{\mathbb{G}}$, матрицы упрочнения $\bar{\mathbb{H}} - \bar{\mathbb{U}}$ и $\partial_{\dot{\Gamma}^r} \bar{\Phi} \circ \partial_{\dot{\Sigma}} \bar{\Phi} \geq 0$.

2.2.2 Модель поликристалла с учетом дефектов

В рамках термодинамического подхода в соответствии с концепцией стандартного материала с диссипацией [370] рассматривается склерономная феноменологическая модель сегнетоэлектрорукого материала с учетом дефектов. В предположении малости концентрации дефектов ограничимся рассмотрением линейной теории дефектов на основе использования свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы (аналогично подходу, введенному в разделе 2.1.2 для микромеханической модели).

Для описания поведения материала с дефектами на макроуровне дополнительно к двум внутренним переменным состояния $\bar{\epsilon}^r$ и $\bar{\mathbf{P}}^r$ вводятся еще две внутренние переменные: вектор поляризации $\bar{\mathbf{P}}^d$ и тензор деформации $\bar{\epsilon}^d$, учитывающие наличие дефектов в кристаллической решетке. Они являются дополнительными аргументами свободной энергии и уравнений эволюции внутренних переменных.

Предполагается, что свободная энергия дефектосодержащего материала допускает разложение:

$$\bar{\psi} = \bar{\psi}_{ideal} + \bar{\psi}_{defect}, \quad (2.207)$$

где $\bar{\psi}_{ideal} = \bar{\psi}_{ideal}(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r)$ – свободная энергии Гельмгольца (2.139) идеального (бездефектного) материала, $\bar{\psi}_{defect} = \bar{\psi}_{defect}(\bar{\mathbf{P}}^d, \bar{\epsilon}^d, \bar{\mathbf{P}}^r, \bar{\epsilon}^r)$ – свободная энергия вследствие появления дефектов. Аргументы $\bar{\mathbf{P}}^r, \bar{\epsilon}^r$ в функции $\bar{\psi}_{defect} = \bar{\psi}_{defect}(\bar{\mathbf{P}}^d, \bar{\epsilon}^d, \bar{\mathbf{P}}^r, \bar{\epsilon}^r)$ введены для учета взаимного влияния дефектов и процессов переключения. Ограничиваясь рассмотрением *линейной теории* дефектов в сегнетоэлектроруких материалах, в рассмотрение вводится наиболее общее выражение свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \bar{\psi}_{defect} = & \frac{1}{2} \bar{\mathbf{P}}^d \cdot \bar{\mathbf{Q}}_P \cdot \bar{\mathbf{P}}^d + \bar{\mathbf{P}}^d \cdot {}^3 \bar{\mathbf{Q}}_{P\epsilon} \cdots \bar{\epsilon}^d + \frac{1}{2} \bar{\epsilon}^d \cdots {}^4 \bar{\mathbf{Q}}_{\epsilon} \cdots \bar{\epsilon}^d + \\ & + \bar{\mathbf{P}}^d \cdot \bar{\mathbf{L}}_P \cdot \bar{\mathbf{P}}^r + \bar{\mathbf{P}}^d \cdot {}^3 \bar{\mathbf{L}}_{P\epsilon} \cdots \bar{\epsilon}^r + \bar{\mathbf{P}}^r \cdot {}^3 \bar{\mathbf{L}}_{\epsilon P} \cdots \bar{\epsilon}^d + \bar{\epsilon}^d \cdots {}^4 \bar{\mathbf{L}}_{\epsilon} \cdots \bar{\epsilon}^r, \end{aligned} \quad (2.208)$$

где $\bar{\mathbf{Q}}_P, {}^3 \bar{\mathbf{Q}}_{P\epsilon}, {}^4 \bar{\mathbf{Q}}_{\epsilon}, \bar{\mathbf{L}}_P, {}^3 \bar{\mathbf{L}}_{P\epsilon}, {}^3 \bar{\mathbf{L}}_{\epsilon P}, {}^4 \bar{\mathbf{L}}_{\epsilon}$ – тензоры 2-го, 3-го и 4-го рангов, характеризующие чувствительность материала к влиянию дефектов. $\bar{\mathbf{Q}}$ -тензоры ($\bar{\mathbf{Q}}_P, {}^3 \bar{\mathbf{Q}}_{P\epsilon}, {}^4 \bar{\mathbf{Q}}_{\epsilon}$) используются в *квадратичных* членах по отношению к величинам, характеризующим дефектное состояние $\bar{\mathbf{P}}^d$ и $\bar{\epsilon}^d$, $\bar{\mathbf{L}}$ -тензоры ($\bar{\mathbf{L}}_P, {}^3 \bar{\mathbf{L}}_{P\epsilon}, {}^3 \bar{\mathbf{L}}_{\epsilon P}, {}^4 \bar{\mathbf{L}}_{\epsilon}$) – в *линейных*.

Подстановка в диссипативное неравенство (2.126) выражения свободной энергии $\bar{\psi}(\bar{\epsilon}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\epsilon}^r, \bar{\mathbf{P}}^r, \bar{\epsilon}^d, \bar{\mathbf{P}}^d)$ приводит к соотношению:

$$\bar{\delta} = \left(\bar{\sigma} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}} \right) \cdots \dot{\bar{\epsilon}} + \left(\bar{\mathbf{E}} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{D}}} \right) \cdot \dot{\bar{\mathbf{D}}} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}^r} \cdots \dot{\bar{\epsilon}}^r - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r} \cdot \dot{\bar{\mathbf{P}}}^r - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}^d} \cdots \dot{\bar{\epsilon}}^d - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^d} \cdot \dot{\bar{\mathbf{P}}}^d \geq 0. \quad (2.209)$$

Так как условие (2.209) должно выполняться для всех возможных термодинамических процессов, то есть при любых значениях $\dot{\bar{\epsilon}}$ и $\dot{\bar{D}}$, то выражения в круглых скобках должны обратиться в 0, что приводит к следующим определяющим уравнениям:

$$\bar{\sigma} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}}, \quad \bar{E} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{D}}. \quad (2.210)$$

Обобщенные термодинамические силы, энергетически сопряженные с внутренними переменными $\bar{\epsilon}^r$, $\bar{P}^r$, $\bar{\epsilon}^d$ и $\bar{P}^d$ определяются равенствами:

$$\hat{\sigma}^r = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}^r}, \quad \hat{E}^r = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{P}^r}, \quad \hat{\sigma}^d = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{\epsilon}^d}, \quad \hat{E}^d = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}}{\partial \bar{P}^d}, \quad (2.211)$$

с использованием которых получается компактная формулировка диссипативного неравенства (2.209):

$$\bar{\delta} = \hat{\sigma}^r \cdot \dot{\bar{\epsilon}}^r + \hat{E}^r \cdot \dot{\bar{P}}^r + \hat{\sigma}^d \cdot \dot{\bar{\epsilon}}^d + \hat{E}^d \cdot \dot{\bar{P}}^d \geq 0. \quad (2.212)$$

Области изменения внутренних сил определяются функцией переключения:

$$\bar{\Phi}(\hat{\sigma}^r, \hat{E}^r, \hat{\sigma}^d, \hat{E}^d) \leq 0. \quad (2.213)$$

Уравнения эволюции внутренних переменных для склерономного сегнетоэлектроруупругого материала могут быть получены следствием *принципа максимума диссипации* при наличии ограничения (2.213) на основе поиска минимума лагранжиана

$$L(\hat{\sigma}^r, \hat{E}^r, \hat{\sigma}^d, \hat{E}^d, \bar{\lambda}) = -\delta(\hat{\sigma}^r, \hat{E}^r, \hat{\sigma}^d, \hat{E}^d) + \bar{\lambda} \bar{\Phi}(\hat{\sigma}^r, \hat{E}^r, \hat{\sigma}^d, \hat{E}^d), \quad (2.214)$$

где $\bar{\lambda} \geq 0$ - множитель Лагранжа. Условия экстремальности лагранжиана приводят к ассоциированным законам для внутренних переменных:

$$\dot{\bar{\epsilon}}^r = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \hat{\sigma}^r}, \quad \dot{\bar{P}}^r = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \hat{E}^r}, \quad \dot{\bar{\epsilon}}^d = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \hat{\sigma}^d}, \quad \dot{\bar{P}}^d = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \hat{E}^d} \quad (2.215)$$

и условиям нагружения / разгрузки (Куна-Таккера) (2.135).

В рамках общей формулировки определяющих уравнений сегнетоэлектроруупругого материала, определяемых равенствами (2.210) и (2.215), конкретные варианты теории могут быть получены на основе конкретизации функций $\bar{\psi}(\bar{\epsilon}, \bar{D}, \bar{\epsilon}^r, \bar{P}^r, \bar{\epsilon}^d, \bar{P}^d)$ и $\bar{\Phi}(\hat{\sigma}^r, \hat{E}^r, \hat{\sigma}^d, \hat{E}^d)$.

При формулировке определяющих уравнений предполагается, что $\bar{P}^d$ и $\bar{\epsilon}^d$, описывающие влияние дефектов, так же, как и $\bar{P}^r$, $\bar{\epsilon}^r$, учитывающие процессы переключения, представляют собой вклад в общую спонтанные поляризацию и деформацию, и поэтому вместо (2.136) и (2.137) в общем случае используются разложения:

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}^l + \bar{\epsilon}^r + \bar{\epsilon}^d, \quad (2.216)$$

$$\bar{\mathbf{D}} = \bar{\mathbf{D}}^l + \bar{\mathbf{P}}^r + \bar{\mathbf{P}}^d. \quad (2.217)$$

2.2.2.1 Неизменяющиеся дефекты

В случае неизменяющихся (замороженных, труднопереключаемых) дефектов, когда $\bar{\mathbf{P}}^d = \text{const}$ и $\bar{\epsilon}^d = \text{const}$, следствием (2.215)_{3,4} приходим к независимости $\bar{\Phi}$ от $\hat{\sigma}^d$ и $\hat{\mathbf{E}}^d$: $\bar{\Phi} = \bar{\Phi}(\hat{\sigma}^r, \hat{\mathbf{E}}^r)$. В этом случае дефекты влияют на процессы переключения только через появление дополнительных слагаемых в $\hat{\sigma}^r$ и $\hat{\mathbf{E}}^r$, связанных с $\bar{\psi}_{defect}$:

$$\hat{\sigma}^r = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{ideal}}{\partial \bar{\epsilon}^r} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{defect}}{\partial \bar{\epsilon}^r} = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{ideal}}{\partial \bar{\epsilon}^r} - \left({}^4\bar{\mathbf{L}}_{\epsilon}^T \cdots \bar{\epsilon}^d + {}^3\bar{\mathbf{L}}_{P_{\epsilon}}^T \cdot \bar{\mathbf{P}}^d \right), \quad (2.218)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^r = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{ideal}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r} - \frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{defect}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r} = -\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{ideal}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r} - \left({}^3\bar{\mathbf{L}}_{\epsilon P} \cdots \bar{\epsilon}^d + \bar{\mathbf{L}}_P^T \cdot \bar{\mathbf{P}}^d \right). \quad (2.219)$$

При получении выражений (2.218) и (2.219) на основе определения термодинамических сил (2.211) было использовано аддитивное разложение (2.207) и представление свободной энергии дефектов $\bar{\psi}_{defect}$ в виде квадратичной формы (2.208). Выражения $\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{ideal}}{\partial \bar{\epsilon}^r}$ и $\frac{\partial \bar{\rho} \bar{\psi}_{ideal}}{\partial \bar{\mathbf{P}}^r}$ для бездефектного материала рассматривались ранее в разделе 2.2.1 (см. (2.192) и (2.193)).

Структура уравнений (2.218) и (2.219) соответствует модели дополнительного линейного кинематического упрочнения. Наличие точечных дефектов приводит к возникновению внутренних полей смещения напряжений $\bar{\sigma}_d = {}^4\bar{\mathbf{L}}_{\epsilon}^T \cdots \bar{\epsilon}^d + {}^3\bar{\mathbf{L}}_{P_{\epsilon}}^T \cdot \bar{\mathbf{P}}^d$ и электрических полей $\bar{\mathbf{E}}_d = {}^3\bar{\mathbf{L}}_{\epsilon P} \cdots \bar{\epsilon}^d + \bar{\mathbf{L}}_P^T \cdot \bar{\mathbf{P}}^d$, непосредственно определяющих величину смещения петель гистерезиса вдоль осей компонент тензора напряжений и вектора электрического поля.

2.2.2.2 Изменяющиеся дефекты

При введении предположения о возможности представления функции переключения (2.213) в виде $\bar{\Phi}(\hat{\sigma}^r, \hat{\mathbf{E}}^r, \hat{\sigma}^d, \hat{\mathbf{E}}^d) = \bar{\Phi}(\hat{\sigma}^r + \xi \hat{\sigma}^d, \hat{\mathbf{E}}^r + \zeta \hat{\mathbf{E}}^d)$, где ξ и ζ - параметры модели, с использованием результирующих термодинамических сил

$$\hat{\sigma} = \hat{\sigma}^r + \xi \hat{\sigma}^d, \quad \hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{E}}^r + \zeta \hat{\mathbf{E}}^d, \quad (2.220)$$

уравнения эволюции для необратимых деформаций и поляризации (2.215) примут вид

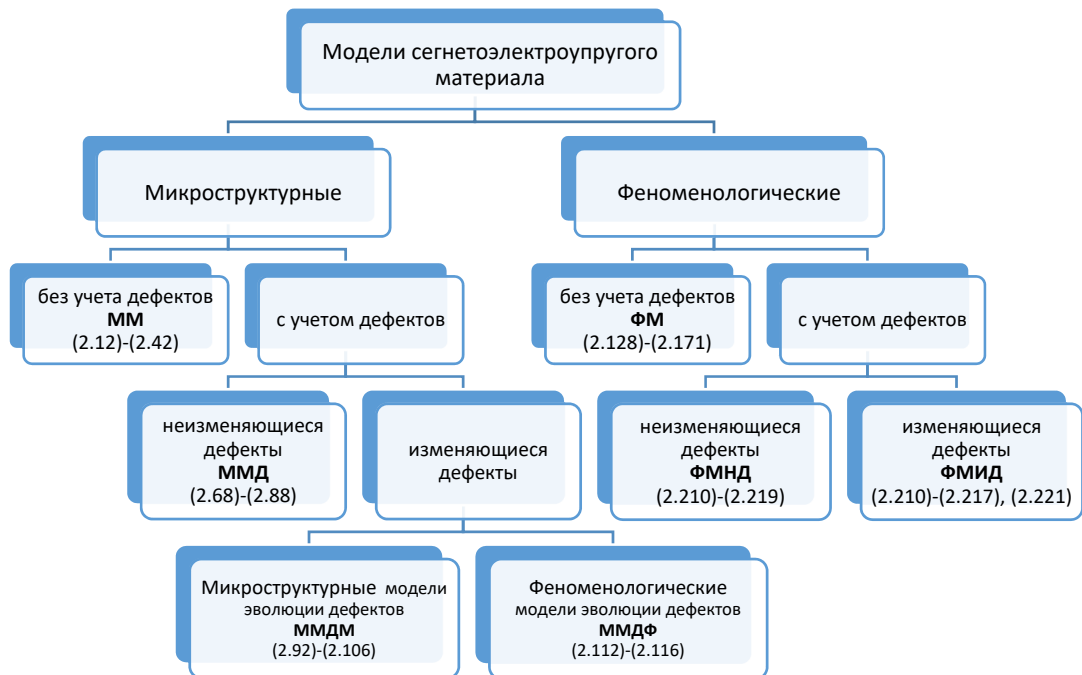
$$\dot{\epsilon}^i = \dot{\epsilon}^r + \dot{\epsilon}^d = \lambda(1 + \xi) \frac{\partial \Phi}{\partial \hat{\sigma}}, \quad \dot{\mathbf{P}}^i = \dot{\mathbf{P}}^r + \dot{\mathbf{P}}^d = \lambda(1 + \zeta) \frac{\partial \Phi}{\partial \hat{\mathbf{E}}}. \quad (2.221)$$

Введенное предположение позволяет получить результирующую математическую структуру определяющих уравнений, аналогичную бездефектному материалу (ср. (2.210) с (2.128), (2.221) с (2.134)). Отказ от предположения приводит к существенному усложнению модели. В этом случае более предпочтительным является использование микроструктурных моделей.

2.3 Краткие выводы к главе 2

1. Для описания гистерезисного поведения сегнетоэлектриков/сегнетоэластиков в условиях сложного многоосного комбинированного электрического и/или механического нагружения предложена термодинамически согласованная *микроструктурная модель* сегнетоэлектростатического материала с учетом наличия и эволюции полярных точечных дефектов. Модель учитывает многофазный состав (тетрагональные, ромбоэдрические и орторомбические фазы и их смеси), анизотропию свойств, доменную структуру и диссипативный характер движения доменных стенок.
2. Предложена линейная теория эволюции заряженных точечных дефектов на основе выбора свободной энергии дефектов в виде квадратичной формы вектора поляризации и тензора деформации дефектов, уравнения эволюции которых получены на основе диссипативного неравенства.
3. Рассмотрены случаи изменяющихся и неизменяющихся дефектов. Исследовано влияние полярных точечных дефектов на процессы переключения. Показана зависимость величины смещения петель гистерезиса от параметров свободной энергии дефектов. Учет взаимного влияния кристаллитов в поликристалле произведен на основе использования в расчетах метода *двухуровневой* конечно-элементной *гомогенизации*.
4. В соответствии с концепцией стандартного материала с диссипацией рассматривается *феноменологическая модель* склерономного сегнетоэлектростатического материала. Уравнения эволюции внутренних переменных получены следствием *принципа максимума диссипации* при наличии ограничения в виде функции переключения.

5. Выполнена конкретизация выражений для свободной энергии и функции переключения для *изотропного* и *трансверсально-изотропного* приближений в рамках теории инвариантов. Используется микромеханически мотивированная формулировка необратимой части свободной энергии, учитывающая влияние внутренних переменных на *условия насыщения*.
6. Получены *скоростная* и *компактная* формулировки определяющих уравнений, востребованные при анализе единственности решения, устойчивости поведения материала и численной реализации.
7. Для наглядности полная иерархически упорядоченная последовательность рассмотренных моделей материала представлена на диаграмме ниже.



ГЛАВА 3. РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ СВЯЗАННЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГОСТИ

Стандартные методы конечно-элементного (КЭ) решения нелинейных связанных краевых задач сегнетоэлектродупругости для материалов с характерными невыпуклыми диаграммами, основанные на скалярно-потенциальных формулировках [129], демонстрируют отсутствие сходимости или крайне низкую скорость сходимости итерационных процедур и предъявляют весьма жесткие ограничения на величину шага нагружения. Снижение точности решения краевой задачи также может быть вызвано погрешностью интегрирования определяющих уравнений сегнетоэлектродупругого материала, представляющих собой систему нелинейных жестких дифференциально-алгебраических уравнений.

Для преодоления указанных недостатков предложена (i) альтернативная вариационная векторно-потенциальная формулировка, используется (ii) метод возвратного отображения, представляющий собой неявный метод интегрирования определяющих уравнений в форме «предиктор-корректор», и применяется (iii) согласованная матрица жесткости для обеспечения квадратичной скорости сходимости итерационных процедур метода Ньютона-Рафсона.

Векторно-потенциальная формулировка для решения нелинейных электромеханических краевых задач в трехмерном случае предложена в 2006 г. автором в работе [422] как результат обобщения подхода Landis [306], ограниченного двумерным случаем. Метод возвратных отображений и согласованная матрица жесткости для сегнетоэлектродупругого материала впервые представлены автором в статье [426] в 2010 г. Дальнейшее развитие предложенных методов и их применение при решении связанных краевых задач сегнетоэлектродупругости произведено в работах [61, 73, 362, 369, 383, 388, 403, 405, 415, 423–425, 86, 427, 428, 448, 449, 88, 91, 98, 269, 329, 358, 359].

3.1 Векторно-потенциальная формулировка

3.1.1 Скалярный и векторный потенциалы

Уравнения Максвелла в задачах электростатики или статической электромеханики при условии отсутствия свободных зарядов в объеме имеют вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}. \quad (3.2)$$

Мотивацией введения потенциалов является стремление автоматически удовлетворить одно из представленных выше уравнений (3.1) или (3.2) и ограничиться анализом оставшегося уравнения. В соответствии с указанной стратегией можно ввести две формулировки с различным выбором первичных электрических переменных (потенциалов):

1. Вектор напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ выражается через *электрический скалярный потенциал* φ :

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (3.3)$$

так, что закон Фарадея (3.2) $\nabla \times \mathbf{E} = -\nabla \times \nabla \varphi \equiv \mathbf{0}$ выполняется автоматически. Уравнения (3.1) и (3.2) для линейного однородного изотропного материала сводятся к одному скалярному уравнению:

$$\Delta \varphi = 0. \quad (3.4)$$

2. Вектор электрического смещения $\mathbf{D}$ выражается через *электрический векторный потенциал* $\boldsymbol{\psi}$:

$$\mathbf{D} = -\nabla \times \boldsymbol{\psi}, \quad (3.5)$$

так, что закон Гаусса (3.1) $\nabla \cdot \mathbf{D} = -\nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) \equiv \mathbf{0}$ выполняется автоматически. Уравнения (3.1) и (3.2) для линейного однородного изотропного материала сводятся к одному векторному уравнению:

$$\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) = \mathbf{0}. \quad (3.6)$$

3.1.2 Мотивация использования векторно-потенциальной формулировки

Возможность использования как скалярного, так и векторного потенциалов при решении краевых задач сегнетоэлектрорупругости предопределяет существование двух альтернативных вариационных формулировок и, соответственно, двух КЭ формулировок. Стандартная скалярно-потенциальная формулировка предложена

Allik и Hughes [129] в 1970 г. Векторно-потенциальная формулировка для двумерного случая предложена Landis [306] в 2002 г. Ее обобщение на трехмерный случай, связанное с необходимостью использования кулоновской калибровки, произведено в работе автора [422] в 2006 г.

Стандартная *скалярно-потенциальная* вариационная формулировка для пьезоэлектрических материалов имеет вид [129]:

$$\int_V (\boldsymbol{\sigma} \cdots \delta \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{D} \cdot \delta \mathbf{E}) dV = \int_V \mathbf{f}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_S (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \mathbf{u} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \delta \varphi) dS. \quad (3.7)$$

В этом случае вектор перемещения $\mathbf{u}$ и скалярный потенциал φ являются варьируемыми переменными, $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \delta \mathbf{u})^S$ и $\delta \mathbf{E} = -\nabla \delta \varphi$. Скалярно-потенциальная вариационная формулировка для пьезоэлектрического материала требует использования определяющих уравнений, в которых тензор напряжения $\boldsymbol{\sigma}$ и вектор электрического смещения $\mathbf{D}$ выражаются через деформацию $\boldsymbol{\varepsilon}$ и вектор напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ (см., например, (1.97)).

Альтернативная *векторно-потенциальная* вариационная формулировка для пьезоэлектрических материалов соответствует *принципу виртуальной работы* и имеет вид [306, 422]:

$$\int_V (\boldsymbol{\sigma} \cdots \delta \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{D}) dV = \int_V \mathbf{f}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_S (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \mathbf{u} + \mathbf{n} \times \mathbf{E} \cdot \delta \boldsymbol{\psi}) dS, \quad (3.8)$$

где вектор перемещения $\mathbf{u}$ и векторный потенциал $\boldsymbol{\psi}$ являются варьируемыми переменными, $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \delta \mathbf{u})^S$ и $\delta \mathbf{D} = -\nabla \times \delta \boldsymbol{\psi}$. Векторно-потенциальная вариационная формулировка для пьезоэлектрического материала требует использования определяющих уравнений, выражающих тензор напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ и вектор электрического поля $\mathbf{E}$ через тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ и вектор электрического смещения $\mathbf{D}$ (см., например, (1.95)).

С термодинамической точки зрения вектор электрического смещения $\mathbf{D}$ (и векторный потенциал $\boldsymbol{\psi}$ соответственно), а также тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ (и вектор перемещения $\mathbf{u}$ соответственно) представляют собой обобщенные термодинамические перемещения, в то время как вектор напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ (и φ соответственно) и тензор напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ представляют собой обобщенные термодинамические силы. Следовательно, вариационная формулировка связанных электромеханических задач с использованием *скалярного потенциала* φ основана

на вариации *смешанного термодинамического потенциала* - энергии в механическом смысле, но энтальпии в электрическом. Поэтому в контексте метода КЭ использование скалярного потенциала приводит к *знако-неопределенной* матрице жесткости, и решение краевой задачи соответствует *седловой* точке в пространстве независимых аргументов $\mathbf{u}$ и φ (см. Рисунок 3.1а).

В противоположность этому вариационная формулировка, использующая **векторный потенциал** $\boldsymbol{\psi}$, основана на балансе вариации электромеханической энергии и вариации работы внешних воздействий. Следовательно, в контексте метода КЭ использование векторного потенциала приводит к *положительно определенной* матрице жесткости, и решение краевой задачи соответствует *минимуму* в пространстве узловых степеней свободы $\mathbf{u}$ и $\boldsymbol{\psi}$ (см. Рисунок 3.1б).

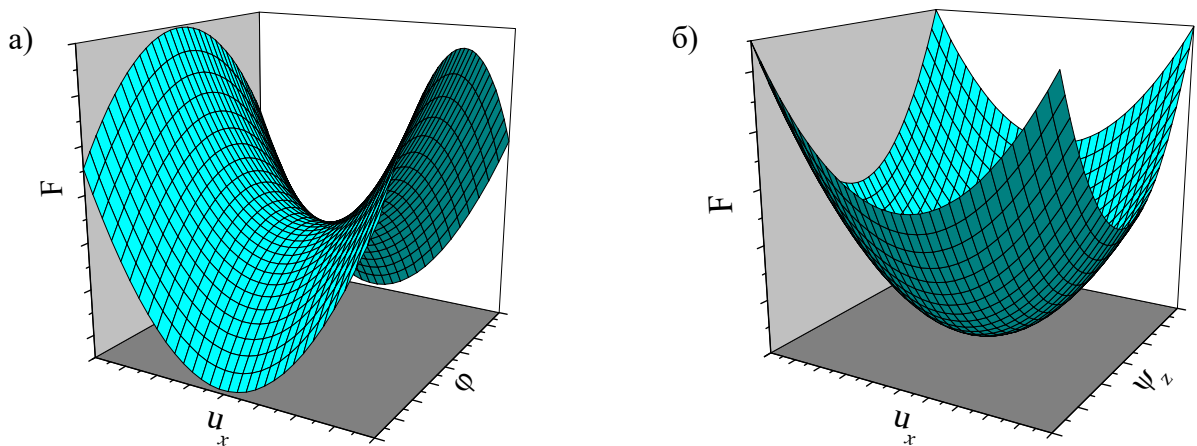


Рисунок 3.1 – Решение краевой задачи соответствует: а) седловой точке для скалярно-потенциальной формулировки, б) минимуму для векторно-потенциальной формулировки

Еще одно преимущество векторно-потенциальной формулировки состоит в менее жестких условиях сходимости глобального метода Ньютона-Рафсона, определяемых формой кривой «нагрузка-отклик» для сегнетоэлектростатического материала. На Рисунке 3.2а показан пример отсутствия сходимости (зацикливания) на этапе начальной поляризации для скалярно-потенциальной формулировки, в то время как для идентичной кривой поляризации с равными параметрами материала наблюдается сходимость для векторно-потенциальной формулировки (см. Рисунок 3.2б). Аналогично наблюдается расхождение итерационного процесса при моделировании гистерезисного поведения с использованием скалярно-потенциальной формулировки при смене знака кривизны гистерезисной кривой в процессе итерирования (см. Рисунок 3.3а).

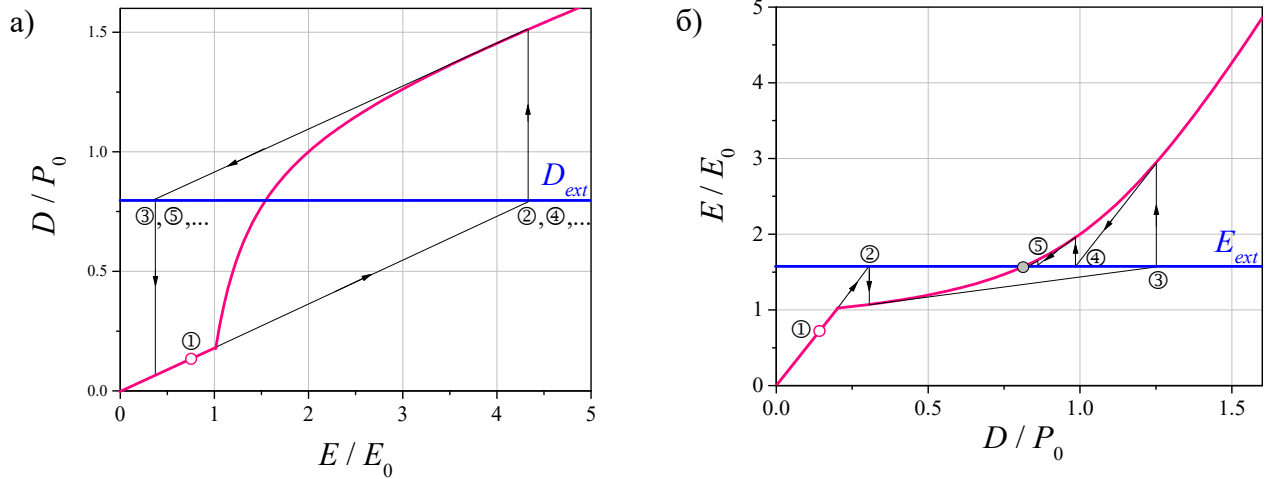


Рисунок 3.2 – Пример отсутствия сходимости итераций метода Ньютона-Рафсона для скалярно-потенциальной формулировки (а), сходимости для векторно-потенциальной формулировки (б) на этапе начальной поляризации

Одним из условий сходимости метода Ньютона-Рафсона нахождения корня функции $f(x)$ по теореме Канторовича [41] является условие $c = \max |f''| \cdot \max |1/f'| \cdot \max |f/f'| < 1/2$. Рассматривая $f_{SP}(E) = D(E) - D^{ext}$ для скалярно-потенциальной формулировки и $f_{VP}(D) = E(D) - E^{ext}$ для векторно-потенциальной формулировки с использованием типичных параметров материала, получаем $c_{VP} \ll c_{SP}$ (более чем в 200 раз для типичного PZT [427]). Это приводит к существенному ограничению на размер шага нагрузки для скалярно-потенциальной формулировки и значительной длительности расчета.

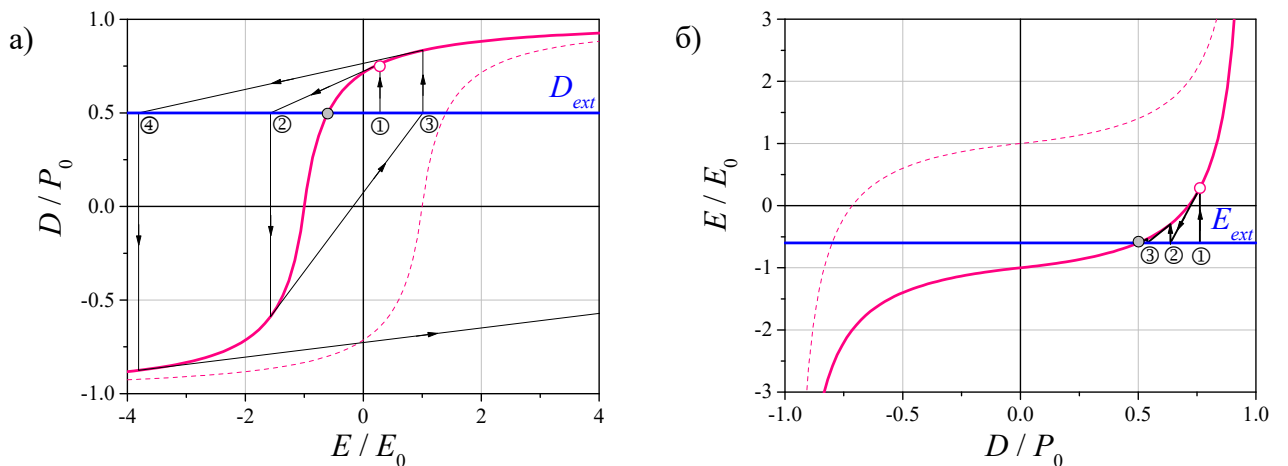


Рисунок 3.3 – Пример отсутствия сходимости итераций метода Ньютона-Рафсона для скалярно-потенциальной формулировки (а), сходимости для векторно-потенциальной формулировки (б) на этапе разгрузки гистерезисной кривой

Недостатком векторно-потенциальной формулировки является увеличение числа степеней свободы для трехмерных задач (шесть по сравнению с четырьмя для скалярно-потенциальной формулировки). Однако это увеличение может быть компенсировано более высокой скоростью сходимости итерационных процедур для нелинейного анализа методом КЭ.

3.1.3 Формулировки краевых задач электростатики

Рассматривается область $V \in \mathbb{R}^3$ трехмерного евклидова пространства, включающая сегнетоэлектроупругое тело и окружающее свободное пространство, ограниченное поверхностью $S = \partial V$. В общем случае область V может быть многосвязной, то есть допускать наличие в ней замкнутых контуров l^h , которые нельзя стянуть в точку, оставаясь внутри V (примером является тор) или допускать наличие в ней замкнутых поверхностей S^c , обладающих аналогичным свойством (примером является полость или включение).

Уравнения, описывающие несвязанную краевую задачу электростатики в области V , включают уравнения Максвелла $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, $\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$ (3.1)-(3.2) и определяющее уравнение $\mathbf{D} = \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}$.

Для обеспечения единственности решения краевой задачи дифференциальные уравнения в объеме V необходимо дополнить граничными условиями на внешней поверхности S , ограничивающей объем V . Возможной основой для определения граничных условий могут служить условия скачка [344] на границе раздела сред, которые следуют из интегральной формы уравнений Максвелла:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_1|_{S_{12}} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_2|_{S_{12}} - \bar{q}_s, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E}_1|_{S_{12}} = \mathbf{n} \times \mathbf{E}_2|_{S_{12}}, \quad (3.10)$$

где $\mathbf{n}$ представляет собой единичный вектор нормали к поверхности раздела S_{12} , направленный от среды 1 к среде 2, $\bar{q}_s$ - поверхностная плотность свободных зарядов на границе раздела.

Два типа граничных условий следуют из (3.9)-(3.10) путем введения некоторых предположений относительно $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_2$ и $\mathbf{n} \times \mathbf{E}_2$. Граничные условия, задаваемые на двух частях внешней поверхности S_D и S_E ($S = S_D \cup S_E$, $S_D \cap S_E = \emptyset$), имеют вид:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = \bar{D}_n, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E}|_{S_E} = \bar{\mathbf{E}}_S, \quad (3.12)$$

где $\mathbf{n}$ представляет собой единичный вектор внешней нормали на границе S ; $\bar{D}_n$ - заданный скаляр, который равен нулю для условий симметрии и для удаленных внешних границ (в случае $\bar{q}_S = 0$) или может быть определен на основе (3.9) в случаях, когда известно $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_2$, например, из упрощенного аналитического решения; $\bar{\mathbf{E}}_S$ - заданный вектор, лежащий в плоскости касательной к S_E , который может быть выражен на основе заданного скалярного потенциала $\bar{\varphi}_S$ как $\bar{\mathbf{E}}_S = -\mathbf{n} \times \nabla \bar{\varphi}_S$. В этом случае граничное условие (3.12) можно заменить на $\varphi|_{S_E} = \bar{\varphi}_S$.

Электростатическая краевая задача (3.1)-(3.2), (3.11)-(3.12) может быть сформулирована в терминах *скалярного* потенциала φ , определяемого формулой (3.3):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla \varphi)] &= 0, \\ \mathbf{n} \cdot [\boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla \varphi)]|_{S_D} &= -\bar{D}_n, \\ \varphi|_{S_E} &= \bar{\varphi}_S. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Альтернативная формулировка электростатической краевой задачи с использованием *векторного* потенциала $\boldsymbol{\psi}$, определяемого формулой (3.5), имеет вид:

$$\begin{aligned} \nabla \times [\boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})] &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})|_{S_D} &= -\bar{D}_n, \\ \mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})|_{S_E} &= -\bar{\mathbf{E}}_S, \end{aligned} \quad (3.14)$$

где $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\kappa}^{-1}$ - тензор обратной диэлектрической проницаемости.

3.1.4 Кулоновская калибровка электрического векторного потенциала

Решение краевой задачи (3.14), использующей «curl-curl» оператор, неединственно, поскольку все уравнения (3.14) инвариантны относительно преобразования $\boldsymbol{\psi} \rightarrow \boldsymbol{\psi}' = \boldsymbol{\psi} + \nabla \chi$, где $\chi(\mathbf{r})$ - произвольная непрерывно дифференцируемая функция. Векторный потенциал $\boldsymbol{\psi}$ является произвольным, поскольку к нему может быть добавлен градиент, и это не окажет влияние на $\mathbf{D} = -\nabla \times \boldsymbol{\psi}$ и $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})$, так как ротор градиента тождественно равен нулю. Единственность решения краевой задачи (3.14) может быть обеспечена путем наложения дополнительных условий на $\boldsymbol{\psi}$.

В данной работе для обеспечения однозначности электрического векторного потенциала используется кулоновская калибровка [422]. Согласно теореме Гельмгольца [245] векторное поле однозначно определяется заданием его ротора и дивергенции, дополненных соответствующими граничными условиями. Согласно (3.1) электрическая индукция $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ определяет только ротор $\boldsymbol{\psi}$. Следовательно, может быть дополнительно наложено также ограничение и на дивергенцию $\boldsymbol{\psi}$ без изменения $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Воспользуемся свободой определения $\boldsymbol{\psi}$, чтобы упростить уравнение (3.14)₁ путем выбора $\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}$. Уравнение (3.14)₁ может быть переписано в случае изотропных однородных материалов в виде:

$$\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) = \nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) - \Delta \boldsymbol{\psi} = \mathbf{0}. \quad (3.15)$$

Условие кулоновской калибровки

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\psi} = 0 \quad (3.16)$$

приводит (3.15) к уравнению Лапласа

$$\Delta \boldsymbol{\psi} = \mathbf{0}. \quad (3.17)$$

Это упрощение справедливо только для изотропных однородных материалов. В общем случае для анизотропных и неоднородных материалов получаются более сложные уравнения, но условие кулоновской калибровки (3.16) обеспечивает единственность $\boldsymbol{\psi}$ во всех случаях.

Решение краевой задачи в ограниченной области требует также дополнительных граничных условий для обеспечения единственности векторного потенциала. Возможный набор условий для односвязной области приведен в [422] как ограничение для тангенциальных или нормальных компонент векторного потенциала:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} &= \bar{\boldsymbol{\psi}}_S, \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_{S_E} &= \bar{\psi}_n, \end{aligned} \quad (3.18)$$

где $\bar{\boldsymbol{\psi}}_S$ - произвольная векторнозначная функция, удовлетворяющая условию $\mathbf{n} \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}}_S = 0$, $\bar{\psi}_n$ - произвольная скалярнозначная функция. Следует отметить, что условие $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} = \bar{\psi}_n$ может быть получено как условие скачка для (3.16). Это условие мо-

жет использоваться без ограничения общности в виде $\bar{\psi}_n = 0$, поскольку данное граничное условие не влияет на поля $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$. Случай нескольких связанных регионов требует дополнительных ограничений, которые будут рассмотрены в разделе 3.1.5.

Условие калибровки требуется только для решения трехмерных задач. В двумерном случае с одной ненулевой компонентой векторного потенциала $\psi(x,y)$ условие кулоновской калибровки (3.16) выполняется автоматически. Калибровка не требуется для получения решения полевой задачи (3.1)-(3.2), (3.11)-(3.12). Однако она необходима для обеспечения единственности решения задачи (3.14), в частности, для анализа сходимости итерационного решения нелинейных задач.

3.1.5 Векторно-потенциальная формулировка краевой задачи электростатики

Формулировка краевой задачи электростатики с использованием векторного потенциала для *односвязных* областей объединяет уравнения (3.14) и калибровочные условия (3.16), (3.18) следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \nabla \times [\boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})] &= \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} &= 0 \end{aligned} \right\} \\ \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} = \bar{\boldsymbol{\psi}}_S \\ \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})|_{S_E} &= -\bar{\mathbf{E}}_S \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_{S_E} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.19)$$

Граничное условие (3.14)₂ $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})|_{S_D} = -\bar{D}_n$ было заменено в (3.19) условием Дирихле [153, 422] $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} = \bar{\boldsymbol{\psi}}_S$. Вектор $\bar{\boldsymbol{\psi}}_S$ находится из условия $\tilde{\nabla} \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}}_S = \bar{D}_n$ на S_D , где $\tilde{\nabla}$ обозначает поверхностную часть набла-оператора $\nabla = \tilde{\nabla} + \mathbf{n}\partial_n$. Доказательство эквивалентности замены исходного граничного условия (3.14)₂ на $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} = \bar{\boldsymbol{\psi}}_S$ с учетом $\tilde{\nabla} \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}}_S = \bar{D}_n$ производится с использованием уравнения Вейнгартена $\tilde{\nabla} \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$ [445]:

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) = \mathbf{n} \cdot (\tilde{\nabla} \times \boldsymbol{\psi}) = \mathbf{n} \cdot (\tilde{\nabla} \times \boldsymbol{\psi}) - \boldsymbol{\psi} \cdot (\tilde{\nabla} \times \mathbf{n}) = -\tilde{\nabla} \cdot (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}) = -\tilde{\nabla} \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}}_S = -\bar{D}_n. \quad (3.20)$$

Вектор $\bar{\boldsymbol{\psi}}_S$ может быть найден как $\bar{\boldsymbol{\psi}}_S = \tilde{\nabla} B$, где скалярная функция B определяется на основе решения уравнения Лапласа-Бельтрами $\tilde{\Delta} B = \bar{D}_n$ на S_D [249]. В случае $\bar{D}_n = 0$ (условие симметрии) простейшим решением является $\bar{\boldsymbol{\psi}}_S = \text{const}$.

Для изотропного однородного материала уравнения (3.19)_{1,2} преобразуются в одно уравнение Лапласа (3.17). В общем случае требуются специальные процедуры одновременного учета уравнений (3.19)₁ и (3.19)₂ в каждой точке объема. Существуют различные методы, обеспечивающие точное или приближенное выполнение ограничений (3.19)₂, такие как, например, метод множителей Лагранжа или метод штрафных функций. В отличие от метода множителей Лагранжа, метод штрафных функций не вводит дополнительных неизвестных. Однако выбор подходящих значений штрафа является нетривиальной задачей. Применение метода штрафных функций для обеспечения выполнения условия кулоновской калибровки приводит к модифицированной версии уравнений (3.19)_{1,2}:

$$\nabla \times [\beta \cdot (\nabla \times \psi)] - \nabla (\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi) = 0, \quad (3.21)$$

где $\bar{\alpha}$ - эмпирически подбираемый штрафной коэффициент. Для изотропного материала с $\beta = 1\beta$ выбор $\bar{\alpha} = \beta$ приводит (3.21) к уравнению Лапласа (3.17), что может рассматриваться в качестве ориентира для выбора параметра штрафа в общем случае.

Применение оператора дивергенции к векторному уравнению (3.21) приводит к уравнению Лапласа для $\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi$:

$$\Delta (\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi) = 0. \quad (3.22)$$

Тривиальное решение уравнения (3.22) $\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi \equiv 0$ обеспечивает выполнение условия калибровки (3.19)₂ и исходного уравнения для векторного потенциала (3.19)₁. Для получения решения $\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi \equiv 0$ достаточно задать однородные граничные условия Дирихле или Неймана для $\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi$ на S . На S_E уравнение (3.19)₄ заменяет граничное условие Неймана для $\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi$ [153]. Это можно показать прямым анализом нормальной составляющей (3.21) на S_E $\mathbf{n} \cdot \left\{ \nabla \times [\beta \cdot (\nabla \times \psi)] \right\} - \frac{\partial}{\partial n} (\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi) = 0$, где первое слагаемое исчезает вследствие (3.19)₄ $\mathbf{n} \cdot \left\{ \nabla \times [\beta \cdot (\nabla \times \psi)] \right\} = -\nabla \cdot \left\{ \mathbf{n} \times [\beta \cdot (\nabla \times \psi)] \right\} = \nabla \cdot \bar{\mathbf{E}}_s = -\nabla \cdot (\mathbf{n} \times \nabla \bar{\varphi}_s) = \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \nabla \bar{\varphi}_s) \equiv 0$, и в результате мы приходим к $\frac{\partial}{\partial n} (\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi) \Big|_{S_E} = 0$. Поэтому граничное условие Дирихле $\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi = 0$ должно быть задано только на S_D , чтобы удовлетворить условию кулоновской калибровки. Таким образом, необходимо решить следующую краевую задачу со штрафной кулоновской калибровкой:

$$\begin{aligned}
 & \nabla \times [\boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})] - \nabla (\bar{\alpha} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) = \mathbf{0} \\
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} &= \bar{\boldsymbol{\psi}}_S \\ \bar{\alpha} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi}|_{S_D} &= 0 \end{aligned} \right\} \\
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})|_{S_E} &= -\bar{\mathbf{E}}_S \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} &= 0|_{S_E} \end{aligned} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

Для *многосвязных* областей обобщением результатов работы [13] в статье [449] предложены два варианта калибровки:

Вариант 1

$$\begin{aligned}
 & \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} = 0, \\
 & \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_S = 0, \\
 & \oint_{l^h} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\psi} dl = 0.
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Вариант 2

$$\begin{aligned}
 & \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} = 0, \\
 & \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_{S_E} = 0, \\
 & \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} = \bar{\boldsymbol{\psi}}_S + \mathbf{n} \times \sum_{r=1}^{N_R} \gamma_r \nabla \bar{g}_r, \\
 & \oint_{l^h} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\psi} dl = 0.
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

В уравнениях (3.24) и (3.25) $l^h \in V$ ($h = 1 \dots N_H$) представляют собой замкнутые контура, не стягиваемые в пределах пространственно многосвязной области V в точку. Вектор $\mathbf{t}$ направлен по касательной к контуру l^h . Уравнения (3.25) являются обобщением (3.16), (3.18) на случай многосвязных областей.

В случае наличия нескольких ($N_D \geq 2$) поверхностей S_D требуется выполнение дополнительных условий [449] $\int_{S_{D_k}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} dS = 0$, $k = 2 \dots N_D$.

В случае многосвязности поверхности S_D (когда существуют топологически различные замкнутые кривые $m^r \in S_D$ ($r = 1 \dots N_R$), не стягиваемые в пределах этой поверхности в точку) в уравнении (3.25) вводятся дополнительные слагаемые вида $\gamma_r \nabla \bar{g}_r$ [449], где $\bar{g}_r$ - скалярные потенциалы, которые могут быть определены как функции длины дуги вдоль контура m^r , для определения констант γ_r используется условие [449]:

$$\oint_{m^r} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\psi} dl = \int_{\Sigma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) dS + \int_{S_{\varphi}^r} \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) dS = - \int_{\Sigma} \bar{D}_n dS - \int_{S_{\varphi}^r} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} dS = Q_r, \tag{3.26}$$

где Q_r суммарный свободный заряд на охватываемой контуром m^r поверхности S_{φ}^r .

Таким образом, для многосвязных областей формулировка краевой задачи электростатики с использованием векторного потенциала, обобщающая уравнения (3.23), для варианта калибровки (3.25) имеет вид:

$$\begin{aligned} \nabla \times [\beta \cdot (\nabla \times \psi)] - \nabla (\bar{\alpha} \nabla \cdot \psi) &= 0 \\ \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \psi|_{S_D} &= \bar{\psi}_S + \mathbf{n} \times \sum_{r=1}^{N_R} \gamma_r \nabla \bar{g}_r \\ \bar{\alpha} \nabla \cdot \psi|_{S_D} &= 0 \end{aligned} \right\} \\ \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \beta \cdot (\nabla \times \psi)|_{S_E} &= -\bar{\mathbf{E}}_S \\ \mathbf{n} \cdot \psi|_{S_E} &= 0 \end{aligned} \right\} \\ \oint_{l^h} \mathbf{t} \cdot \psi \, dl &= 0. \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.1.6 Формулировка краевой задачи сегнетоэлектроругоности

Дифференциальные уравнения электромеханической краевой задачи в объеме $V \in \mathbb{R}^3$ для инфинитезимального изотермического квазистатического случая при отсутствии свободных объемных зарядов имеют вид:

$$\nabla \cdot \sigma + \bar{\mathbf{f}}_V = 0, \quad (3.28)$$

$$\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^S, \quad (3.29)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (3.30)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0. \quad (3.31)$$

Формулировка краевой задачи для сегнетоэлектроругоного материала включает наряду с уравнениями (3.28)-(3.31) и определяющими уравнениями (2.15) граничные условия на внешней поверхности $S = S_\sigma \cup S_u = S_E \cup S_D$ ($S_\sigma \cap S_u = \emptyset$, $S_E \cap S_D = \emptyset$):

$$\mathbf{n} \cdot \sigma|_{S_\sigma} = \bar{\mathbf{f}}_S, \quad (3.32)$$

$$\mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\mathbf{u}}, \quad (3.33)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = \bar{D}_n, \quad (3.34)$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E}|_{S_E} = \bar{\mathbf{E}}_S. \quad (3.35)$$

С использованием в качестве базовых переменных вектора перемещений $\mathbf{u}$ и скалярного потенциала φ формулировка (3.28)-(3.35) может быть переписана с учетом (3.13) в виде:

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \bar{\mathbf{f}}_V &= \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \end{aligned} \right\} \\
 & \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_\sigma} = \bar{\mathbf{f}}_S \\
 & \mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\mathbf{u}}_S \\
 & \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = \bar{D}_n \\
 & \phi|_{S_E} = \bar{\phi}_S.
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

где тензор напряжений и вектор электрического смещения определяются выражениями (см. также (2.143)):

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\sigma} &= {}^4\mathbf{C}^E \cdot \left[(\nabla \mathbf{u})^S - \boldsymbol{\varepsilon}^r \right] + (\nabla \phi) \cdot {}^3\mathbf{e}, \\
 \mathbf{D} &= {}^3\mathbf{e} \cdot \left[(\nabla \mathbf{u})^S - \boldsymbol{\varepsilon}^r \right] - \mathbf{k}^\varepsilon \cdot (\nabla \phi) + \mathbf{P}^r.
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

С использованием в качестве базовых переменных вектора перемещений $\mathbf{u}$ и векторного потенциала $\boldsymbol{\psi}$ формулировка (3.28)-(3.35) может быть переписана с учетом штрафной кулоновской калибровки (3.23) для случая односвязной области в виде:

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \bar{\mathbf{f}}_V &= \mathbf{0} \\ \nabla \times \mathbf{E} + \nabla (\bar{\alpha} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) &= \mathbf{0} \end{aligned} \right\} \\
 & \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_\sigma} = \bar{\mathbf{f}}_S \\
 & \mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\mathbf{u}}_S \\
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_{S_D} &= \bar{\boldsymbol{\psi}}_S \\ \bar{\alpha} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi}|_{S_D} &= 0 \end{aligned} \right\} \\
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{n} \times \mathbf{E}|_{S_E} &= \bar{\mathbf{E}}_S \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_{S_E} &= 0 \end{aligned} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

где тензор напряжений и вектор напряженности электрического поля определяются выражениями (см. также (2.142)):

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\sigma} &= {}^4\mathbf{C}^D \cdot \left[(\nabla \mathbf{u})^S - \boldsymbol{\varepsilon}^r \right] + \left[(\nabla \times \boldsymbol{\psi}) + \mathbf{P}^r \right] \cdot {}^3\mathbf{h}, \\
 \mathbf{E} &= -{}^3\mathbf{h} \cdot \left[(\nabla \mathbf{u})^S - \boldsymbol{\varepsilon}^r \right] - \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \left[(\nabla \times \boldsymbol{\psi}) + \mathbf{P}^r \right].
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

3.1.7 Вариационная формулировка задачи сегнетоэлектроругоности

Скалярно-потенциальная вариационная формулировка для сегнетоэлектроругоного материала определяется равенством [129]:

$$\int_V (\boldsymbol{\sigma} \cdots \delta \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{D} \cdot \delta \mathbf{E}) dV = \int_V \bar{\mathbf{f}}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_\sigma} \bar{\mathbf{f}}_S \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_{S_D} \bar{q}_S \delta \varphi dS, \quad (3.40)$$

где $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \delta \mathbf{u})^S$, $\delta \mathbf{E} = -\nabla \delta \varphi$, $\boldsymbol{\sigma}$ и $\mathbf{D}$ вычисляются в соответствии с уравнениями (3.37), $\bar{\mathbf{f}}_V$ - вектор объемной силы ($\bar{\mathbf{f}}_V = \rho \bar{\mathbf{f}}_m$, где $\bar{\mathbf{f}}_m$ - вектор массовой силы), $\bar{\mathbf{f}}_S$ - вектор поверхностной силы, $\bar{q}_S = -\bar{D}_n$ - плотность поверхностных зарядов. Граничные условия $\delta \mathbf{u}|_{S_u} = \mathbf{0}$ и $\delta \varphi|_{S_E} = 0$ предполагаются выполненными.

Векторно-потенциальная вариационная формулировка для сегнетоэлектрoупругого материала имеет вид [306, 422]:

$$\int_V (\boldsymbol{\sigma} \cdots \delta \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{D}) dV = \int_V \bar{\mathbf{f}}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_\sigma} \bar{\mathbf{f}}_S \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_{S_E} \bar{\mathbf{E}}_S \cdot \delta \boldsymbol{\psi} dS, \quad (3.41)$$

где $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \delta \mathbf{u})^S$, $\delta \mathbf{D} = -\nabla \times \delta \boldsymbol{\psi}$, $\boldsymbol{\sigma}$ и $\mathbf{E}$ определяются уравнениями (3.39), $\bar{\mathbf{E}}_S = -\mathbf{n} \times \nabla \bar{\varphi}_S$, $\bar{\varphi}_S$ - заданный на части внешней поверхности S_E электрический потенциал.

Модификацией вариационного принципа (3.41) в целях обеспечения единственности векторного потенциала на основе использования кулоновской калибровки и соответствующих граничных условий (см. разделы 3.1.4 и 3.1.5) является равенство [422]:

$$\int_V [\boldsymbol{\sigma} \cdots \delta \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{D} + \bar{\alpha} (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) (\nabla \cdot \delta \boldsymbol{\psi})] dV = \int_V \bar{\mathbf{f}}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_\sigma} \bar{\mathbf{f}}_S \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_{S_E} \bar{\mathbf{E}}_S \cdot \delta \boldsymbol{\psi} dS. \quad (3.42)$$

С учетом равенства $-\int_{S_E} [\mathbf{n} \times (\nabla \bar{\varphi}_S)] \cdot \delta \boldsymbol{\psi} dS = \int_{S_E} \bar{\varphi}_S \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \delta \boldsymbol{\psi}) dS = \int_{S_E} \bar{\varphi}_S \delta q_S dS$ выражение (3.42) допускает следующее представление, удобное для КЭ реализации:

$$\int_V [\boldsymbol{\sigma} \cdots \delta \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{D} + \bar{\alpha} (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) (\nabla \cdot \delta \boldsymbol{\psi})] dV = \int_V \bar{\mathbf{f}}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_\sigma} \bar{\mathbf{f}}_S \cdot \delta \mathbf{u} dS + \int_{S_E} \bar{\varphi}_S \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \delta \boldsymbol{\psi}) dS. \quad (3.43)$$

3.1.8 Конечно-элементная формулировка задачи сегнетоэлектрoупругости

В качестве узловых степеней свободы в *векторно-потенциальной* формулировке выступают три компоненты вектора перемещений и три компоненты электрического векторного потенциала. Таким образом, в КЭ модели в каждом узле будет 6 степеней свободы.

В пределах КЭ $\mathbf{r} \in V_e$ вектор перемещения $\{\mathbf{u}(\mathbf{r})\} = \{u_x(\mathbf{r}), u_y(\mathbf{r}), u_z(\mathbf{r})\}^T$ и векторный потенциал $\{\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r})\} = \{\psi_x(\mathbf{r}), \psi_y(\mathbf{r}), \psi_z(\mathbf{r})\}^T$ аппроксимируются на основе узловых значений КЭ $\{\mathbf{u}^n\}$ и $\{\boldsymbol{\Psi}^n\}$ при помощи функций формы $[\mathbf{N}^u(\mathbf{r})]$ и $[\mathbf{N}^\psi(\mathbf{r})]$:

$$\{\mathbf{u}\} = [\mathbf{N}^u] \{\mathbf{u}^n\} \quad \text{и} \quad \{\boldsymbol{\Psi}\} = [\mathbf{N}^\psi] \{\boldsymbol{\Psi}^n\}. \quad (3.44)$$

Дифференцирование уравнений (3.44) дает следующие выражения для деформаций $\{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})\} = \{\varepsilon_x(\mathbf{r}), \varepsilon_y(\mathbf{r}), \varepsilon_z(\mathbf{r}), \gamma_{xy}(\mathbf{r}), \gamma_{yz}(\mathbf{r}), \gamma_{zx}(\mathbf{r})\}^T$ и для электрических смещений $\{\mathbf{D}(\mathbf{r})\} = \{D_x(\mathbf{r}), D_y(\mathbf{r}), D_z(\mathbf{r})\}^T$:

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}\} = [\mathbf{B}^u] \{\mathbf{u}^n\} \quad \text{и} \quad \{\mathbf{D}\} = [\mathbf{B}^\psi] \{\boldsymbol{\Psi}^n\}, \quad (3.45)$$

где матрицы «градиента» [515] и «ротора» [306] определяются как

$$[\mathbf{B}^u] = \begin{bmatrix} \partial_x & 0 & 0 \\ 0 & \partial_y & 0 \\ 0 & 0 & \partial_z \\ \partial_y & \partial_x & 0 \\ 0 & \partial_z & \partial_y \\ \partial_z & 0 & \partial_x \end{bmatrix} [\mathbf{N}^u] \quad \text{и} \quad [\mathbf{B}^\psi] = \begin{bmatrix} 0 & \partial_z & -\partial_y \\ -\partial_z & 0 & \partial_x \\ \partial_y & -\partial_x & 0 \end{bmatrix} [\mathbf{N}^\psi], \quad (3.46)$$

где $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ представляет собой частичную производную по i -ой координате.

Дивергенция векторного потенциала аппроксимируется соотношением

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\Psi} = \{\mathbf{A}\}^T \{\boldsymbol{\Psi}^n\}, \quad (3.47)$$

где вектор «дивергенции» определяется как

$$\{\mathbf{A}\}^T = \{\partial_x \quad \partial_y \quad \partial_z\} [\mathbf{N}^\psi]. \quad (3.48)$$

Система КЭ уравнений получается подстановкой определяющих уравнений (3.39) и формул (3.44)-(3.47) в вариационный принцип (3.43):

$$\begin{cases} [\mathbf{K}^{uu}] \{\mathbf{u}^n\} + [\mathbf{K}^{u\psi}] \{\boldsymbol{\Psi}^n\} & = \{\mathbf{F}_r\} + \{\mathbf{F}_V\} + \{\mathbf{F}_S\}, \\ [\mathbf{K}^{\psi u}] \{\mathbf{u}^n\} + ([\mathbf{K}^{\psi\psi}] + [\mathbf{K}^\alpha]) \{\boldsymbol{\Psi}^n\} & = \{\mathbf{Q}_r\} + \{\mathbf{Q}_S\}, \end{cases} \quad (3.49)$$

где матрицы жесткости имеют вид

$$\begin{aligned} [\mathbf{K}^{uu}] &= \int_V [\mathbf{B}^u]^T [\mathbf{C}^D] [\mathbf{B}^u] dV, & [\mathbf{K}^{u\psi}] &= -\int_V [\mathbf{B}^u]^T [\mathbf{h}]^T [\mathbf{B}^\psi] dV, \\ [\mathbf{K}^{\psi u}] &= -\int_V [\mathbf{B}^\psi]^T [\mathbf{h}] [\mathbf{B}^u] dV, & [\mathbf{K}^{\psi\psi}] &= \int_V [\mathbf{B}^\psi]^T [\boldsymbol{\beta}^\varepsilon] [\mathbf{B}^\psi] dV, \\ [\mathbf{K}^\alpha] &= \int_V \bar{\alpha} \{\mathbf{A}\} \{\mathbf{A}\}^T dV, \end{aligned} \quad (3.50)$$

а векторы нагрузки равны

$$\begin{aligned} \{\mathbf{F}_r\} &= \int_V [\mathbf{B}^u]^T \{\boldsymbol{\sigma}^r\} dV, & \{\mathbf{F}_V\} &= \int_V [\mathbf{N}^u]^T \{\mathbf{f}_V\} dV, & \{\mathbf{F}_S\} &= \int_{S_\sigma} [\mathbf{N}^u]^T \{\mathbf{f}_S\} dS, \\ \{\mathbf{Q}_r\} &= \int_V [\mathbf{B}^\psi]^T \{\mathbf{E}^r\} dV, & \{\mathbf{Q}_S\} &= - \int_{S_E} [\mathbf{B}^\psi]^T \varphi_S \{\mathbf{n}\} dS. \end{aligned} \quad (3.51)$$

В уравнениях (3.51) использованы обозначения:

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{\sigma}^r\} &= [\mathbf{C}^D] \{\boldsymbol{\varepsilon}^r\} - [\mathbf{h}]^T \{\mathbf{P}^r\}, \\ \{\mathbf{E}^r\} &= -[\mathbf{h}] \{\boldsymbol{\varepsilon}^r\} + [\boldsymbol{\beta}^\varepsilon] \{\mathbf{P}^r\}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Следует отметить, что матрица жесткости системы (3.49)

$$\begin{bmatrix} [\mathbf{K}^{uu}] & [\mathbf{K}^{u\psi}] \\ [\mathbf{K}^{\psi u}] & ([\mathbf{K}^{\psi\psi}] + [\mathbf{K}^\alpha]) \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

является *симметричной* и *положительно* определенной для положительно определенной матрицы электромеханических модулей материала

$$\begin{bmatrix} [\mathbf{C}^D] & -[\mathbf{h}]^T \\ -[\mathbf{h}] & [\boldsymbol{\beta}^\varepsilon] \end{bmatrix}. \quad (3.54)$$

Существование термодинамического потенциала Гельмгольца определяет симметрию матрицы (3.54), а его выпуклость – ее положительную определенность.

3.2 Метод возвратного отображения

Одним из основных этапов численного решения нелинейных начально-краевых задач для сегнетоэластостатики является численное интегрирование определяющих уравнений (2.206) или в развернутом виде (2.197), (2.195), (2.190), (2.191). Интегрирование выполняется *локально* в каждой гауссовой точке квадратуры КЭ. Метод возвратного отображения (return mapping algorithm) представляет собой эффективную схему интегрирования нелинейных определяющих уравнений эволюционного типа при наличии ограничений (типа (2.195)). Метод является обобщением метода радиального возврата, предложенного Wilkins [482] для идеально-пластических материалов, удовлетворяющих критерию Мизеса.

Метод возвратного отображения основан на методологии *расщепления оператора* [439], приводящей к двухэтапному алгоритму, включающему для сегнетоэластостатического материала следующие шаги:

- электроупругий предиктор;
- сегнетоэластостатический корректор.

Электроупругий *предиктор* (пробный шаг) (см. п. 3.2.2) используется для проверки условий нагружения / разгрузки, а также формирует начальное условие для *корректора*. Сегнетоэлектроупругий корректор осуществляет наикратчайшую проекцию пробного состояния на поверхность нагружения. Это позволяет удовлетворить критерий переключения с высокой точностью и избежать недопустимых состояний с $\Phi > 0$. Наличие проектирования или возврата на поверхность нагружения и определило название рассматриваемого метода.

Корректор осуществляет интегрирование по времени (параметру нагружения) определяющих уравнений при выполнении ограничений и состоит из:

- Дискретизатора (см. п. 3.2.1), приводящего систему дифференциально-алгебраических уравнений к системе нелинейных алгебраических уравнений;
- Итератора (см. п.3.2.3), осуществляющего поиск решений системы нелинейных алгебраических уравнений.

Эффективность применения метода возвратного отображения, возможность получения единственного решения, монотонность и скорость сходимости итерационных процедур чувствительны к виду определяющих уравнений. Существенным является условие выпуклости поверхности нагружения, гарантирующее однозначность направления возврата и, следовательно, единственность численного решения. Условие выпуклости термодинамического потенциала (свободной энергии) также является весьма желательным, обеспечивая положительную определенность тензоров упругих и упругопластических модулей. Применение ассоциированных законов эволюции приводит к симметричности тензора упругопластических модулей.

Алгоритм метода возвратного отображения для сегнетоэлектроупругого материала при использовании векторно-потенциальной КЭ формулировки проиллюстрирован на Рисунке 3.4. Интегрирование определяющего уравнения осуществляется на временном интервале $[t_n, t_{n+1}]$ при заданных $\Delta \epsilon$ и $\Delta \mathbf{D}$.

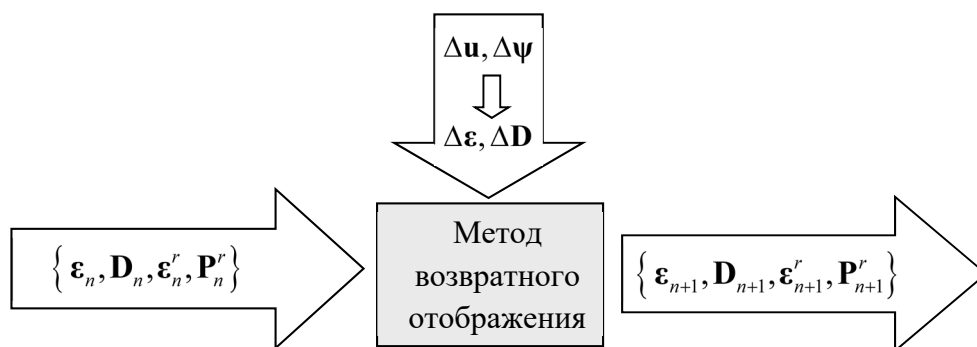


Рисунок 3.4 – Исходные данные и выходные переменные на n-ом шаге метода возвратного отображения при использовании векторно-потенциальной формулировки

3.2.1 Неявный интегратор

Интегрирование уравнения эволюции (2.197) осуществляется на основе использования неявного метода Эйлера, который имеет первый порядок точности и безусловно устойчив. Рассматриваемый метод является одним из самых популярных методов интегрирования для неупругих задач из-за относительной простоты и хорошей точности при больших шагах нагружения [297, 437, 439]. Примеры использования других более сложных методов интегрирования в комбинации с методом возвратного отображения рассмотрены в работах [157, 194, 378, 437].

Предполагается заданной история изменения обобщенных термодинамических перемещений $\Gamma(t) = \{\varepsilon(t), \mathbf{D}(t)\}^T$ на интервале $t \in [0, t_{\max}]$. Целью является определение зависимости от времени обобщенных термодинамических сил (отклика материала) $\Sigma(t) = \{\sigma(t), \mathbf{E}(t)\}^T$ в пределах указанного временного интервала. Разобьем $[0, t_{\max}]$ на N частей (шагов или инкрементов), определяемых временными точками $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < t_{n+1} < \dots < t_N = t_{\max}$. Рассмотрим характерный интервал интегрирования $[t_n, t_{n+1}]$, предполагая известным состояние в момент времени t_n . Все величины в моменты времени t_n и $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ будем обозначать нижними индексами n и $n+1$ соответственно. Дискретная форма уравнения эволюции (2.197) при использовании *неявного метода Эйлера* имеет вид:

$$\Gamma_{n+1}^r = \Gamma_n^r + \Delta\lambda \partial_{\hat{\Sigma}} \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}, \Gamma_{n+1}^r), \quad (3.55)$$

где $\Delta\lambda = \lambda^{n+1} \Delta t$. Уравнения (3.55) рассматриваются совместно с (2.193) и (2.190):

$$\hat{\Sigma}_{n+1} = \Sigma_{n+1} - \Sigma^B(\Gamma_{n+1}^r) + \Sigma^G(\Sigma_{n+1}, \Gamma_{n+1}^r), \quad (3.56)$$

$$\Sigma_{n+1} = \mathbb{G}(\Gamma_{n+1}^r) \circ (\Gamma_{n+1} - \Gamma_{n+1}^r) \quad (3.57)$$

и с дискретным аналогом условий Куна-Таккера (2.137):

$$\Delta\lambda \geq 0, \quad \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}, \Gamma_{n+1}^r) \leq 0, \quad \Delta\lambda \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}, \Gamma_{n+1}^r) = 0. \quad (3.58)$$

Подстановка (3.57) в (3.56) и затем в (3.55) и (3.58) позволяет исключить из рассмотрения Σ_{n+1} и $\hat{\Sigma}_{n+1}$, что уменьшает количество неизвестных в задаче обратного отображения до Γ_{n+1}^r и $\Delta\lambda$.

3.2.2 Электроупругий предиктор

Структура дискретных уравнений (3.55)-(3.57) позволяет аддитивно разложить Σ_{n+1} на две части: предиктор и корректор:

$$\begin{aligned}\Sigma_{n+1} &= \mathbb{G}_{n+1} \circ (\Gamma_{n+1} - \Gamma_{n+1}^r) = \\ &= \mathbb{G}_n \circ (\Gamma_{n+1} - \Gamma_n^r) - \mathbb{G}_{n+1} \circ (\Gamma_{n+1}^r - \Gamma_n^r) + (\mathbb{G}_{n+1} - \mathbb{G}_n) \circ (\Gamma_{n+1} - \Gamma_n^r) = \\ &= \underbrace{\Sigma_{n+1}^{trial}}_{\text{предиктор}} - \underbrace{\mathbb{G}_{n+1} \circ (\Gamma_{n+1}^r - \Gamma_n^r) + (\mathbb{G}_{n+1} - \mathbb{G}_n) \circ (\Gamma_{n+1} - \Gamma_n^r)}_{\text{корректор}}.\end{aligned}\quad (3.59)$$

Цель такой декомпозиции - ввести параметр Σ_{n+1}^{trial} , зависящий только от известных $\mathbb{G}_n, \Gamma_n^r$ и заданного вектора Γ_{n+1} , позволяющий предсказать наличие или отсутствие процессов переключения на текущем $n+1$ шаге интегрирования.

Следует отметить, что вектор Σ_{n+1}^{trial} вычисляется на основе линейных соотношений.

Пробное состояние, реализуемое в конце шага предиктора, фактически получается путем замораживания внутренних переменных на известных значениях в момент времени t_n :

$$\begin{aligned}\Sigma_{n+1}^{trial} &= \mathbb{G}_n \cdot (\Gamma_{n+1} - \Gamma_n^r), \\ \Gamma_{n+1}^{rtrial} &= \Gamma_n^r, \\ \hat{\Sigma}_{n+1}^{trial} &= \Sigma_{n+1}^{trial} - \Sigma_n^B + \Sigma_n^G, \\ \Phi_{n+1}^{trial} &= \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}^{trial}, \Gamma_{n+1}^{rtrial}).\end{aligned}\quad (3.60)$$

Пробное состояние проверяется на соответствие условиям переключения (3.58). Для выпуклой функции переключения (2.195) и выпуклой свободной энергии (2.184) имеет место неравенство $\Phi_{n+1}^{trial} \geq \Phi_{n+1}$ [85, 426]. Как следует из (3.58) условия нагружения / разгрузки определяется исключительно по Φ_{n+1}^{trial} следующим образом:

$$\begin{aligned}\Phi_{n+1}^{trial} < 0 &\Rightarrow \text{шаг без переключений} \Leftrightarrow \Delta\lambda = 0, \\ \Phi_{n+1}^{trial} > 0 &\Rightarrow \text{шаг с переключениями} \Leftrightarrow \Delta\lambda > 0.\end{aligned}\quad (3.61)$$

Проверка знака функции переключения Φ_{n+1}^{trial} позволяет классифицировать процесс на $n+1$ шаге нагружения как электроупругий (отсутствуют переключения) или сегнетоэлектроупругий (происходят переключения). Если $\Phi_{n+1}^{trial} < 0$ и, следовательно $\Phi_{n+1} \leq \Phi_{n+1}^{trial} < 0$, то пробное состояние Σ_{n+1}^{trial} удовлетворяет условиям Куна-Таккера (3.58). Следствием (3.58)₃ $\Delta\lambda\Phi_{n+1} = 0$ устанавливаем $\Delta\lambda = 0$, а значит на шаге

будет реализован электроупругий процесс без переключений. В этом случае пробное состояние Σ_{n+1}^{trial} представляет собой конечное состояние Σ_{n+1} . Если, наоборот, Σ_{n+1}^{trial} выходит за пределы поверхности переключения ($\Phi_{n+1}^{trial} > 0$), то наше предположение о линейной электроупругости на $n+1$ шаге было неверным, и финальное состояние Σ_{n+1} получается путем корректировки пробного состояния Σ_{n+1}^{trial} на основе ортогональной проекции (проекция к наикратчайшей точке) на обновленную поверхность переключения.

3.2.3 Сегнетоэлектроупругий корректор

Рассмотрим вычисление корректора, реализуемого в случае $\Phi_{n+1}^{trial} > 0$, требующем определения Γ_{n+1}^r и $\Delta\lambda > 0$. Для компактности представления введем в рассмотрение вектор, содержащий все неизвестные задачи в виде единого объекта:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \left\{ \begin{matrix} \Gamma_{n+1}^r \\ \Delta\lambda \end{matrix} \right\}. \quad (3.62)$$

При использовании неявных интеграторов, к числу которых относится метод возвратного отображения, искомые величины заданы неявно, и возникает необходимость итерационного поиска решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Уравнения метода возвратного отображения (3.55)-(3.58) требуют обращения в нуль следующего вектора невязки:

$$\mathbf{r}_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}) = \left\{ \begin{matrix} \mathbf{r}_{n+1}^\Gamma \\ r_{n+1}^\Phi \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} -\Gamma_{n+1}^r + \Gamma_n^r + \Delta\lambda \partial_{\Sigma} \Phi_{n+1} \\ \Phi_{n+1} \end{matrix} \right\} = \mathbf{0}. \quad (3.63)$$

Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений (3.63) используется метод Ньютона:

$$\mathbf{x}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{x}_{n+1}^{(k)} + \delta \mathbf{x}_{n+1}^{(k)} = \mathbf{x}_{n+1}^{(k)} - \left[\left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{n+1}^{(k)} \right]^{-1} \cdot \mathbf{r}_{n+1}^{(k)}. \quad (3.64)$$

Условие окончания итерационного процесса (3.64) может быть записано в виде требования малости невязок

$$\|\mathbf{r}_{n+1}^\Gamma\| \leq tol_{r^\Gamma} \quad \text{и} \quad \|r_{n+1}^\Phi\| \leq tol_{r^\Phi}, \quad (3.65)$$

или малости приращений самого решения

$$\|\delta \Gamma_{n+1}^{r(k)}\| \leq tol_\Gamma \quad \text{и} \quad \|\delta \Delta\lambda_{n+1}^{(k)}\| \leq tol_\lambda, \quad (3.66)$$

где tol_{Γ^r} , ol_{Γ^Φ} , tol_{Γ^r} , tol_{λ} заданные константы, характеризующие точность решения.

Основная трудность при применении процедуры (3.64) заключается в обращении квадратной матрицы 10×10 на каждой итерации. Заметив, что последний компонент остаточного вектора $\mathbf{r}_{n+1}$ не зависит от $\Delta\lambda$, результирующая линеаризованная система уравнений может быть уменьшена в размере на единицу посредством статической конденсации.

Поскольку Γ_{n+1} фиксируется на этапе корректора, из (2.199), (2.203) и (2.205) следует $\delta\hat{\Sigma} = -\mathbb{B} \cdot \delta\Gamma^r$. С учетом этого следствием (3.63) получаем линеаризованную задачу:

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}} \\ r_{n+1}^{\Phi^{(k)}} \end{Bmatrix} - \left[\begin{array}{c|c} \mathbb{J}^{-1} & -\mathbf{N} \\ \hline \mathbf{N} \cdot \mathbb{B} - \mathbf{M} & 0 \end{array} \right] \begin{Bmatrix} \delta\Gamma_{n+1}^{(k)} \\ \delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)} \end{Bmatrix} = \mathbf{0}, \quad (3.67)$$

где

$$\mathbb{J} = \left[\mathbb{I} + \Delta\lambda_{n+1}^{(k)} \left(\partial_{\hat{\Sigma}\hat{\Sigma}}^2 \Phi_{n+1}^{(k)} \cdot \mathbb{B} - \partial_{\hat{\Sigma}\Gamma^r}^2 \Phi_{n+1}^{(k)} \right) \right]^{-1}, \quad (3.68)$$

$$\mathbf{N} = \partial_{\hat{\Sigma}} \Phi_{n+1}^{(k)}, \quad \mathbf{M} = \partial_{\Gamma^r} \Phi_{n+1}^{(k)}. \quad (3.69)$$

Индексы $(\bullet)_{n+1}^{(k)}$ в $\mathbb{J}, \mathbb{B}, \mathbf{N}, \mathbf{M}$ здесь и ниже для компактности опущены.

Решая линеаризованную задачу (3.67), получаем $\delta\Gamma_{n+1}^{r^{(k)}}$ и $\delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)}$ в виде:

$$\delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)} = \frac{r_{n+1}^{\Phi^{(k)}} - (\mathbf{N} \cdot \mathbb{B} - \mathbf{M}) \cdot \mathbb{J} \cdot \mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}}}{(\mathbf{N} \cdot \mathbb{B} - \mathbf{M}) \cdot \mathbb{J} \cdot \mathbf{N}}, \quad (3.70)$$

$$\delta\Gamma_{n+1}^{r^{(k)}} = \mathbb{J} \cdot \left(\mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}} + \mathbf{N} \delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)} \right). \quad (3.71)$$

Внутренние переменные Γ^r и параметр согласованности $\Delta\lambda$ обновляются на каждой итерации следующим образом:

$$\Delta\lambda_{n+1}^{(k+1)} = \Delta\lambda_{n+1}^{(k)} + \delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)}, \quad (3.72)$$

$$\Gamma_{n+1}^{r^{(k+1)}} = \Gamma_{n+1}^{r^{(k)}} + \delta\Gamma_{n+1}^{r^{(k)}}. \quad (3.73)$$

Алгоритм метода возвратного отображения, резюмирующий приведенные в разделах 3.2.1–3.2.3 соотношения в лаконичной форме, удобной для анализа и программной реализации, представлен ниже:

Алгоритм метода возвратных отображений

Заданы: Γ_n, Γ_n^r и Γ_{n+1}

1. Электроупругий предиктор: вычисление пробного состояния

$$\begin{aligned}\Gamma_{n+1}^{trial} &= \Gamma_n^r \\ \Sigma_{n+1}^{trial} &= \mathbb{G}_n \cdot (\Gamma_{n+1} - \Gamma_n^r) \\ \hat{\Sigma}_{n+1}^{trial} &= \Sigma_{n+1}^{trial} - \Sigma_n^B + \Sigma_n^G \\ \Phi_{n+1}^{trial} &= \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}^{trial}, \Gamma_{n+1}^{trial})\end{aligned}$$

2. Проверка условия переключений для пробного состояния

Если $\Phi_{n+1}^{trial} < 0$, то $(\cdot)_{n+1} = (\cdot)_{n+1}^{trial}$ и **выйти** $\mapsto$

3. Сегнетоэлектроупругий корректор

3.1. Инициализация: $k = 0$, $\Gamma_{n+1}^{r(0)} = \Gamma_{n+1}^{trial}$, $\Sigma_{n+1}^{(0)} = \Sigma_{n+1}^{trial}$, $\Delta\lambda_{n+1}^{(0)} = \Delta\lambda_n$

3.2. Вычисление невязок:

$$\mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}} = -\Gamma_{n+1}^{r(k)} + \Gamma_n^r + \Delta\lambda_{n+1}^{(k)} \partial_{\Sigma} \Phi_{n+1}^{(k)}, \quad r_{n+1}^{\Phi^{(k)}} = \Phi_{n+1}^{(k)}$$

3.3. Проверка сходимости:

Если $\|\mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}}\| \leq \text{tol}_{\Gamma}$ и $\|r_{n+1}^{\Phi^{(k)}}\| \leq \text{tol}_{\Phi}$, то $(\cdot)_{n+1} = (\cdot)_{n+1}^{(k)}$ и **выйти** $\mapsto$

3.4. Вычисление инвертированного (неполного) Якобиана:

$$\mathbb{J} = [\mathbb{I} + \Delta\lambda_{n+1}^{(k)} (\partial_{\Sigma\Sigma}^2 \Phi_{n+1}^{(k)} \cdot \mathbb{B} - \partial_{\Sigma}^2 \Gamma_{n+1}^{r(k)})]^{-1}$$

3.5. Вычисление инкремента пластического множителя:

$$\delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)} = \frac{r_{n+1}^{\Phi^{(k)}} - (\partial_{\Sigma} \Phi_{n+1}^{(k)} \cdot \mathbb{B} - \partial_{\Gamma^r} \Phi_{n+1}^{(k)}) \cdot \mathbb{J} \cdot \mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}}}{(\partial_{\Sigma} \Phi_{n+1}^{(k)} \cdot \mathbb{B} - \partial_{\Gamma^r} \Phi_{n+1}^{(k)}) \cdot \mathbb{J} \cdot \partial_{\Sigma} \Phi_{n+1}^{(k)}}$$

3.6. Получение решения на k-ой итерации:

$$\begin{aligned}\Delta\lambda_{n+1}^{(k+1)} &= \Delta\lambda_{n+1}^{(k)} + \delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)} \\ \Gamma_{n+1}^{r(k+1)} &= \Gamma_{n+1}^{r(k)} + \mathbb{J} \cdot (\mathbf{r}_{n+1}^{\Gamma^{(k)}} + \partial_{\Sigma} \Phi_{n+1}^{(k)} \delta\Delta\lambda_{n+1}^{(k)}) \\ \Sigma_{n+1}^{(k+1)} &= \mathbb{G}(\Gamma_{n+1}^{r(k+1)}) \cdot (\Gamma_{n+1} - \Gamma_{n+1}^{r(k+1)}) \\ \hat{\Sigma}_{n+1}^{(k+1)} &= \Sigma_{n+1}^{(k+1)} - \Sigma_n^B(\Gamma_{n+1}^{r(k+1)}) + \Sigma_n^G(\Sigma_{n+1}^{(k+1)}, \Gamma_{n+1}^{r(k+1)})\end{aligned}$$

3.7. Увеличение номера итерации ($k \rightarrow k+1$) и переход к 3.2.

3.2.4 Геометрическая интерпретация. Метод наикратчайшей проекции

Частный случай метода возвратного отображения для ассоциированных законов эволюции получил название *метода наикратчайшей проекции*. Суть метода заключается в сведении рассматриваемой дискретной задачи (3.55)-(3.58) к эквивалентной задаче выпуклой оптимизации [239, 438], связанной с введением некоторой

функции, поиск минимальных значений которой приводит к решению исходной задачи. Эта проблема возникает как алгоритмический аналог принципа максимальной остаточной диссипации. Задача ограниченной выпуклой минимизации предлагает также геометрическую интерпретацию метода возвратного отображения как проекцию пробного состояния на поверхность переключения.

Введем дополнительную энергию как преобразование Лежандра свободной энергии Гельмгольца (2.184)

$$\chi(\Sigma, \hat{\Sigma}) = \max_{\Gamma, \Gamma^r} [\Sigma \cdot \Gamma - \hat{\Sigma} \cdot \Gamma^r - \Psi(\Gamma, \Gamma^r)]. \quad (3.74)$$

В предположении *выпуклости* свободной энергии соотношения (2.192) и (2.191) могут быть обращены, и обобщенные термодинамические перемещения (Γ, Γ^r) могут быть выражены через обобщенные термодинамические силы $(\Sigma, \hat{\Sigma})$. С использованием обозначений $\tilde{\Gamma}(\Sigma, \hat{\Sigma})$ и $\tilde{\Gamma}^r(\Sigma, \hat{\Sigma})$ для результатов инверсии (2.192) и (2.191) дополнительную функцию энергии (3.74) можно переписать как

$$\chi(\Sigma, \hat{\Sigma}) = \Sigma \cdot \tilde{\Gamma} - \hat{\Sigma} \cdot \tilde{\Gamma}^r - \Psi(\tilde{\Gamma}, \tilde{\Gamma}^r). \quad (3.75)$$

Следствием дифференцирования (3.75) по Σ и $\hat{\Sigma}$ получаем соотношения:

$$\begin{aligned} \Gamma &= \partial_{\Sigma} \chi(\Sigma, \hat{\Sigma}), \\ \Gamma^r &= -\partial_{\hat{\Sigma}} \chi(\Sigma, \hat{\Sigma}). \end{aligned} \quad (3.76)$$

Уравнения метода возвратного отображения (3.55) и (3.58) могут быть получены как необходимые условия вариационной задачи с односторонними ограничениями:

$$\min_{\Phi(\hat{\Sigma}) \leq 0} [\chi(\Sigma, \hat{\Sigma}) - \Gamma_{n+1} \cdot \Sigma + \Gamma_{n+1}^{rtrial} \cdot \hat{\Sigma}], \quad (3.77)$$

где Γ_{n+1}^{rtrial} определяется формулой (3.60)₂. Для простоты ограничимся случаем $\Phi(\hat{\Sigma})$. Условие (3.77) вводится по аналогии с подходами, развитыми в области вычислительной пластичности. Случай квадратичной функции свободной энергии с постоянными модулями рассмотрен в [439]. Обобщение для нелинейного потенциала дано в [133, 134]. Особенности анализа сегнетоэлектрорукого материала являются зависимость модулей материала от внутренних переменных и полностью связанная неквадратичная форма свободной энергии.

Следуя методу множителей Лагранжа в задачах оптимизации с ограничениями, для доказательства (3.77) введем функцию Лагранжа:

$$\mathcal{L}(\Sigma, \hat{\Sigma}, \Delta\lambda) = \chi(\Sigma, \hat{\Sigma}) - \Gamma_{n+1} \cdot \Sigma + \Gamma_{n+1}^{rtrial} \cdot \hat{\Sigma} + \Delta\lambda \Phi(\hat{\Sigma}) \quad (3.78)$$

Необходимые условия первого порядка для локальных минимумов:

$$\begin{aligned} \partial_{\hat{\Sigma}} \mathcal{L}(\Sigma_{n+1}, \hat{\Sigma}_{n+1}, \Delta\lambda) &= \partial_{\hat{\Sigma}} \chi(\Sigma_{n+1}, \hat{\Sigma}_{n+1}) + \Gamma_{n+1}^{rtrial} + \Delta\lambda \partial_{\hat{\Sigma}} \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}) = 0, \\ \partial_{\Sigma} \mathcal{L}(\Sigma_{n+1}, \hat{\Sigma}_{n+1}, \Delta\lambda) &= \partial_{\Sigma} \chi(\Sigma_{n+1}, \hat{\Sigma}_{n+1}) - \Gamma_{n+1} = 0, \\ \partial_{\Delta\lambda} \mathcal{L}(\Sigma_{n+1}, \hat{\Sigma}_{n+1}, \Delta\lambda) &= \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}) \leq 0. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Уравнение (3.79)₁ в точности соответствует (3.55) с учетом (3.76)₂. Уравнение (3.79)₂ соответствует (3.76)₁. Уравнение (3.79)₃ с $\Delta\lambda \geq 0$ и $\Delta\lambda \Phi(\hat{\Sigma}_{n+1}, \Gamma_{n+1}^r) = 0$ определяет условия Куна-Таккера (3.58).

Чтобы прояснить геометрическую интерпретацию (3.77), рассмотрим квадратичный потенциал $\Psi = \frac{1}{2}(\Gamma - \Gamma^r) \cdot \mathbb{G} \cdot (\Gamma - \Gamma^r) + \frac{1}{2} \Gamma^r \cdot \mathbb{H} \cdot \Gamma^r$ с постоянными и положительно определенными $\mathbb{G}$ и $\mathbb{H}$. В соответствии с (3.74) получаем $\chi = \frac{1}{2} \Sigma \cdot \mathbb{G}^{-1} \cdot \Sigma + \frac{1}{2} \Sigma^r \cdot \mathbb{H}^{-1} \cdot \Sigma^r$, где $\Sigma^r = \hat{\Sigma} - \Sigma$. В этом случае вариационная задача (3.77) может быть переписана как

$$\min_{\Phi(\Sigma, \Sigma^r) \leq 0} \left[\frac{1}{2} (\Sigma - \Sigma_{n+1}^{trial}) \cdot \mathbb{G}^{-1} \cdot (\Sigma - \Sigma_{n+1}^{trial}) + \frac{1}{2} (\Sigma^r - \Sigma_{n+1}^{rtrial}) \cdot \mathbb{H}^{-1} \cdot (\Sigma^r - \Sigma_{n+1}^{rtrial}) + \chi_{n+1}^{trial} \right], \quad (3.80)$$

где Σ_{n+1}^{trial} определяется равенством (3.60)₁, $\Sigma_{n+1}^{rtrial} = \hat{\Sigma}_{n+1}^{trial} - \Sigma_{n+1}^{trial}$, $\chi_{n+1}^{trial} = \chi(\Sigma_{n+1}^{trial}, \Sigma_{n+1}^{rtrial}) = const$. Решение $\{\Sigma_{n+1}, \Sigma_{n+1}^r\}$ является наикратчайшей проекцией пробного состояния $\{\Sigma_{n+1}^{trial}, \Sigma_{n+1}^{rtrial}\}$ на поверхность переключения в энергетической норме, индуцированной метрикой

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} \mathbb{G}^{-1} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \mathbb{H}^{-1} \end{bmatrix}, \quad (3.81)$$

где $\mathbb{O}$ - нулевая матрица 9×9 .

Соответственно, $\{\Sigma_{n+1}, \Sigma_{n+1}^r\}$ является решением задачи оптимизации (3.80), переписанной в следующем виде:

$$\{\Sigma_{n+1}, \Sigma_{n+1}^r\} = \arg \min_{\Phi(\Sigma, \Sigma^r) \leq 0} \left[\|\Sigma - \Sigma_{n+1}^{trial}\|_{\mathbb{G}^{-1}}^2 + \|\Sigma^r - \Sigma_{n+1}^{rtrial}\|_{\mathbb{H}^{-1}}^2 \right], \quad (3.82)$$

где

$$\|\Sigma\|_{\mathbb{C}} = \sqrt{\frac{1}{2} \Sigma \cdot \mathbb{C} \cdot \Sigma}, \quad (3.83)$$

является нормой, определяемой $\mathbb{C}$ равной $\mathbb{G}$ или $\mathbb{H}$. Таким образом, метод обратного отображения можно рассматривать как минимизацию расстояния между пробным состоянием и допустимой областью, определяемой поверхностью переключений, по норме, индуцированной метрикой $\mathbb{M}$. Геометрическая интерпретация метода, проиллюстрированная на Рисунке 3.5, представляет решение $\{\Sigma_{n+1}, \Sigma_{n+1}^r\}$ в 18-мерном пространстве как ортогональную проекцию в метрике $\mathbb{M}$ пробного состояния $\{\Sigma_{n+1}^{trial}, \Sigma_{n+1}^{rtrial}\}$ на поверхность переключения $\Phi_{n+1} = 0$.

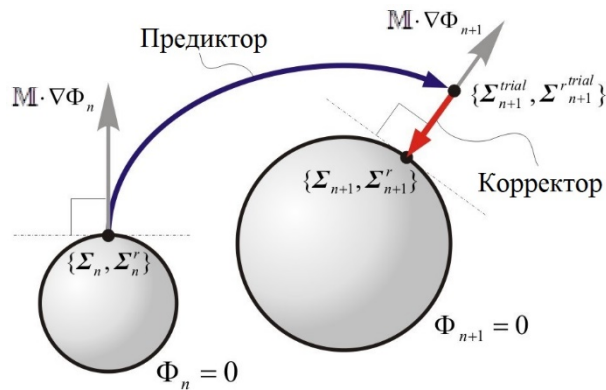


Рисунок 3.5 – Геометрическая иллюстрация метода наискратчайшей проекции для квадратичного потенциала

Геометрическая задача поиска проекции точки на криволинейную выпуклую поверхность, связанная с определением расстояния между точкой и поверхностью, является детально исследованной. В этом случае успешно применяются методы оптимизации и нелинейного математического программирования. Для выпуклых поверхностей задача имеет единственное решение.

3.3 Согласованная матрица жесткости

3.3.1 Линеаризация конечно-элементных уравнений

Следствием вариационного принципа (3.43) получается система нелинейных КЭ уравнений:

$$\mathbf{F}^{\text{int}}(\Sigma) - \mathbf{F}^{\text{ext}} = \mathbf{0}, \quad (3.84)$$

где $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ - заданный глобальной вектор внешних сил (воздействий), $\mathbf{F}^{\text{int}}$ - глобальной вектор внутренних сил (воздействий), определяемый уравнением:

$$\mathbf{F}^{\text{int}}(\boldsymbol{\Sigma}) = \mathbf{A} \int_{e=1}^{n_e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\Sigma} dV, \quad (3.85)$$

где $\mathbf{A}$ - оператор сборки (ансамблирования) КЭ [439], $\{V_e, e = 1, \dots, n_e\}$ - объемы КЭ, на которые разделена исследуемая область, матрица $\mathbf{B}$ является комбинацией дискретного симметричного градиента и оператора ротора (см. (3.46), а также [306, 422]).

Обеспечивая выполнение (3.84) в момент времени t_{n+1} , получаем

$$\mathbf{F}^{\text{int}}(\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}) - \mathbf{F}_{n+1}^{\text{ext}} = \mathbf{0}, \quad (3.86)$$

где $\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}$ определяется на основе метода возвратных отображений (3.55)-(3.58)

$$\boldsymbol{\Sigma}_{n+1} = \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{\Gamma}_{n+1}, \boldsymbol{\Gamma}_n^r, \boldsymbol{\Sigma}_n). \quad (3.87)$$

Уравнения совместимости в дискретной форме могут быть выражены через вектор узловых перемещений и электрических векторных потенциалов в виде:

$$\boldsymbol{\Gamma}_{n+1} = \mathbf{B} \mathbf{U}_{n+1}. \quad (3.88)$$

Комбинируя уравнения (3.84)-(3.88), приходим к выражению

$$\mathbf{A} \int_{e=1}^{n_e} \mathbf{B}^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{B} \mathbf{U}_{n+1}, \boldsymbol{\Gamma}_n^r, \boldsymbol{\Sigma}_n) dV - \mathbf{F}_{n+1}^{\text{ext}} = \mathbf{0}, \quad (3.89)$$

которое представляет собой систему нелинейных уравнений для определения узловых неизвестных $\mathbf{U}_{n+1}$. Следует отметить, что на вид уравнения (3.89) оказывает влияние выбор метода вычисления внутренних сил (воздействий) (3.87).

Инкрементально-итерационное решение системы нелинейных уравнений (3.89) на основе метода Ньютона-Рафсона приводит к системе линейных уравнений

$$(\mathbf{F}^{\text{int}}(\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^{(k)}) - \mathbf{F}_{n+1}^{\text{ext}}) + \left[\frac{\partial \mathbf{F}^{\text{int}}(\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^{(k)})}{\partial \mathbf{U}_{n+1}^{(k)}} \right] \Delta \mathbf{U}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{0}, \quad (3.90)$$

с глобальной касательной матрицей жесткости

$$\mathbf{K}_{n+1}^{(k)} = \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{int}}(\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^{(k)})}{\partial \mathbf{U}_{n+1}^{(k)}} = \mathbf{A} \int_{e=1}^{n_e} \mathbf{B}^T \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}^{(k)}}{\partial \boldsymbol{\Gamma}_{n+1}^{(k)}} \frac{\partial \boldsymbol{\Gamma}_{n+1}^{(k)}}{\partial \mathbf{U}_{n+1}^{(k)}} dV = \mathbf{A} \int_{e=1}^{n_e} \mathbf{B}^T \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}^{(k)}}{\partial \boldsymbol{\Gamma}_{n+1}^{(k)}} \mathbf{B} dV = \mathbf{A} \int_{e=1}^{n_e} \mathbf{B}^T \hat{\mathbb{G}}_{n+1}^{(k)} \mathbf{B} dV, \quad (3.91)$$

Введенные в (3.91) алгоритмически согласованные касательные модули (см. также [377, 439, 440])

$$\hat{\mathbb{G}}_t^{(k)} \Big|_{n+1} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}^{(k)}}{\partial \boldsymbol{\Gamma}_{n+1}^{(k)}}, \quad (3.92)$$

чувствительны к выбору метода вычисления внутренних сил (воздействий) (3.87). Согласованные касательные модули $\hat{\mathbb{G}}_i$ для метода возвратного отображения (3.55)-(3.58), использующего при интегрировании неявный метод Эйлера, отличаются от непрерывных касательных модулей $\mathbb{G}_i$ (2.207). Однако модули $\hat{\mathbb{G}}_i$ стремятся к $\mathbb{G}_i$ при $\Delta t_{n+1} \rightarrow 0$. Здесь и ниже все алгоритмически согласованные объекты отмечены дугой сверху.

Использование согласованных касательных модулей $\hat{\mathbb{G}}_i$ существенно для обеспечения квадратичной скорости асимптотической сходимости глобальной итерационной процедуры Ньютона-Рафсона. Для нахождения согласованного касательного оператора используется линейаризация дискретной задачи, соответствующей методу возвратного отображения, представленному в разделе 3.2.

3.3.2 Согласованные сегнетоэлектроупругие касательные модули

Согласованные сегнетоэлектроупругие касательные модули $\hat{\mathbb{G}}_i$ получены ниже на основе линейаризации результатов метода возвратного отображения (3.55)-(3.58). Одним из преимуществ рассматриваемого алгоритма является возможность получения согласованных касательных модулей в замкнутой математической форме. Дифференцируя соотношения метода возвратного отображения (3.55)-(3.58), получаем:

$$d\Gamma_{n+1}^r = \Delta\lambda\partial_{\hat{\Sigma}\Sigma}^2\Phi_{n+1} \cdot d\hat{\Sigma}_{n+1} + \Delta\lambda\partial_{\hat{\Sigma}\Gamma^r}^2\Phi_{n+1} \cdot d\Gamma_{n+1}^r + d\Delta\lambda\partial_{\Sigma}\Phi_{n+1}, \quad (3.93)$$

$$d\hat{\Sigma}_{n+1} = (\mathbb{I} + \mathbb{A}_{n+1}^T) \cdot d\Sigma_{n+1} - (\mathbb{H}_{n+1} - \mathbb{U}_{n+1}) \cdot d\Gamma_{n+1}^r, \quad (3.94)$$

$$d\Sigma_{n+1} = \mathbb{G}_{n+1} \cdot [d\Gamma_{n+1} - (\mathbb{I} + \mathbb{A}_{n+1}) \cdot d\Gamma_{n+1}^r], \quad (3.95)$$

$$\partial_{\Sigma}\Phi_{n+1} \cdot d\hat{\Sigma}_{n+1} + \partial_{\Gamma^r}\Phi_{n+1} \cdot d\Gamma_{n+1}^r = 0. \quad (3.96)$$

Все переменные в (3.93)-(3.96) имеют один и тот же индекс $n+1$, который в дальнейшем будет опускаться для компактности записи.

Для получения связи между $d\Sigma$ и $d\Gamma$ в виде $d\Sigma = \hat{\mathbb{G}}_i \cdot d\Gamma$ необходимо найти решение линейной системы уравнений (3.93)-(3.96), которая может быть представлена в виде:

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbb{I} - \mathbb{W} & -\mathbb{V} & \mathbb{O} & -\mathbb{N} \\ \hline \mathbb{H} - \mathbb{U} & \mathbb{I} & -(\mathbb{I} + \mathbb{A}^T) & \mathbf{0} \\ \hline \mathbb{G} \cdot (\mathbb{I} + \mathbb{A}) & \mathbb{O} & \mathbb{I} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{M} & \mathbf{N} & \mathbf{0} & 0 \end{array} \right] \cdot \begin{Bmatrix} d\Gamma^r \\ d\hat{\Sigma} \\ d\Sigma \\ d\Delta\lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ d\Gamma \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (3.97)$$

где $\mathbf{M}$ и $\mathbf{N}$ определены формулами (3.69), $\mathbb{O}$ - нулевая матрица 9×9 , $\mathbf{0}$ - нулевой вектор 9×1 и

$$\mathbb{V} = \Delta\lambda \partial_{\Sigma\Sigma}^2 \Phi, \quad \mathbb{W} = \Delta\lambda \partial_{\Sigma\Gamma^r}^2 \Phi. \quad (3.98)$$

Подстановка (3.94) в (3.93) исключает $d\hat{\Sigma}$ и позволяет выразить $d\Gamma^r$ через $d\Sigma$ и $d\Delta\lambda$

$$d\Gamma^r = \mathbb{Q} \cdot [\mathbf{N} d\Delta\lambda + \mathbb{V} \cdot (\mathbb{I} + \mathbb{A}^T) \cdot d\Sigma], \quad (3.99)$$

где

$$\mathbb{Q} = [\mathbb{I} + \mathbb{V} \cdot (\mathbb{H} - \mathbb{U}) - \mathbb{W}]^{-1}. \quad (3.100)$$

Подстановка (3.99) в (3.95) исключает $d\Gamma^r$ и позволяет выразить $d\Sigma$ через $d\Gamma$ и $d\Delta\lambda$

$$d\Sigma = \hat{\mathbb{G}} \cdot [d\Gamma - (\mathbb{I} + \mathbb{A}) \cdot \mathbb{Q} \cdot \mathbf{N} d\Delta\lambda], \quad (3.101)$$

где $\hat{\mathbb{G}}$ - модифицированные (алгоритмические) пьезоэлектрические модули, определяемые следующим выражением:

$$\hat{\mathbb{G}} = [\mathbb{G}^{-1} + (\mathbb{I} + \mathbb{A}) \cdot \mathbb{Q} \cdot \mathbb{V} \cdot (\mathbb{I} + \mathbb{A}^T)]^{-1}. \quad (3.102)$$

Следует отметить, что $\hat{\mathbb{G}} \rightarrow \mathbb{G}$ при $\Delta t \rightarrow 0$ (и соответственно $\Delta\lambda \rightarrow 0$), тогда как $\mathbb{Q} \rightarrow \mathbb{I}$.

Подстановка уравнений (3.94), (3.99) и (3.101) в (3.96) позволяет получить выражение для $d\Delta\lambda$:

$$d\Delta\lambda = \frac{\tilde{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbb{G}}}{\tilde{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbb{G}} \cdot \tilde{\mathbf{N}} + \tilde{D}}, \quad (3.103)$$

где

$$\tilde{\mathbf{N}} = (\mathbb{I} + \mathbb{A}) \cdot \mathbb{Q} \cdot \mathbf{N}, \quad (3.104)$$

$$\tilde{\mathbf{L}} = \{\mathbf{N} - [\mathbf{N} \cdot (\mathbb{H} - \mathbb{U}) - \mathbf{M}] \cdot \mathbb{Q} \cdot \mathbb{V}\} \cdot (\mathbb{I} + \mathbb{A}^T), \quad (3.105)$$

$$\tilde{D} = [\mathbf{N} \cdot (\mathbb{H} - \mathbb{U}) - \mathbf{M}] \cdot \mathbb{Q} \cdot \mathbf{N}. \quad (3.106)$$

Окончательно, следствием (3.101) и (3.103) получаем итоговое выражение для согласованных сегнетоэлектростатических касательных модулей:

$$\hat{\mathbb{G}}_t = \hat{\mathbb{G}} - \frac{\hat{\mathbb{G}} \cdot \tilde{\mathbb{N}} \quad \tilde{\mathbb{L}} \cdot \hat{\mathbb{G}}}{\tilde{\mathbb{L}} \cdot \hat{\mathbb{G}} \cdot \tilde{\mathbb{N}} + \tilde{\mathbb{D}}} . \quad (3.107)$$

Структура матрицы согласованных касательных модулей $\hat{\mathbb{G}}_t$ (3.107) такая же, как и у непрерывных касательных модулей $\mathbb{G}_t$ (2.207). Различия заключаются в замене пьезоэлектрических модулей $\mathbb{G}$ на алгоритмически согласованные модули $\hat{\mathbb{G}}$ и в использовании $\tilde{\mathbb{N}}$ и $\tilde{\mathbb{L}} \neq \tilde{\mathbb{N}}$ вместо $(\mathbb{I} + \mathbb{A}) \cdot \mathbb{N}$. Матрица согласованных касательных сегнетоэлектростатических модулей $\hat{\mathbb{G}}_t$ является в общем случае несимметричной.

3.3.3 Анализ частных случаев

В случае исчезающе малых шагов по времени $\Delta t \rightarrow 0$ имеем $\Delta \lambda \rightarrow 0$ и как следствие (3.98) получаем

$$\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{O}, \quad \mathbb{W} \rightarrow \mathbb{O}, \quad (3.108)$$

что с помощью (3.68), (3.100), (3.102) и (3.108) приводит к

$$\mathbb{J} \rightarrow \mathbb{I}, \quad \mathbb{Q} \rightarrow \mathbb{I}, \quad \hat{\mathbb{G}} \rightarrow \mathbb{G}, \quad \hat{\mathbb{G}}_t \rightarrow \mathbb{G}_t . \quad (3.109)$$

Таким образом, согласованный и континуальный касательные модули совпадают в пределе при $\Delta t \rightarrow 0$.

В случае упрощенного представления функции переключения в виде $\Phi(\hat{\Sigma})$, используемого вместо рассмотренного выше общего случая $\Phi(\hat{\Sigma}, \Gamma^r)$, следствием (3.69)₂, (3.98)₂ получаем $\mathbb{M} = \mathbf{0}$, $\mathbb{W} = \mathbb{O}$ и, как следствие этого и соотношений (3.102) и (3.100), приходим к выражению для согласованных модулей

$$\hat{\mathbb{G}} = \left\{ \mathbb{G}^{-1} + (\mathbb{I} + \mathbb{A}) \cdot \left[\mathbb{V}^{-1} + (\mathbb{H} - \mathbb{U}) \right]^{-1} \cdot (\mathbb{I} + \mathbb{A}^T) \right\}^{-1} . \quad (3.110)$$

Как следует из анализа выражения (3.110), $\hat{\mathbb{G}}$ является симметричной матрицей, поскольку $\mathbb{G}$, $\mathbb{V}$, $\mathbb{H}$, $\mathbb{U}$ являются симметричными. Согласованные касательные модули (3.107) в этом случае также симметричны:

$$\hat{\mathbf{G}}_t = \hat{\mathbf{G}} - \frac{\hat{\mathbf{G}} \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{A}) \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \quad \mathbf{N} \cdot \mathbf{Q}^T \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{A}^T) \cdot \hat{\mathbf{G}}}{\mathbf{N} \cdot [(\mathbf{H} - \mathbf{U}) \cdot \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{A}^T) \cdot \hat{\mathbf{G}} \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{A}) \cdot \mathbf{Q}] \cdot \mathbf{N}}, \quad (3.111)$$

где

$$\mathbf{Q}^T = [\mathbf{I} + (\mathbf{H} - \mathbf{U}) \cdot \mathbf{V}]^{-1} = (\mathbf{H} - \mathbf{U}) \cdot \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{H} - \mathbf{U})^{-1} = \mathbf{I} - (\mathbf{H} - \mathbf{U}) \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{V}. \quad (3.112)$$

Таким образом, исключение внутренних переменных из выражения функции переключения позволяет получить симметричную матрицу согласованных касательных модулей $\hat{\mathbf{G}}_t$ (3.111) в отличие от общего случая с несимметричной матрицей (3.107). Общие ограничения на вид функции переключения, обеспечивающие симметрию матрицы $\hat{\mathbf{G}}_t$, исследованы в [426].

3.4 Примеры решения связанных краевых задач

3.4.1 Программное обеспечение

Необходимым элементом и условием успешного проведения вычислительных экспериментов является создание проблемно-ориентированного программного обеспечения, позволяющего выполнять многовариантные автоматизированные научные исследования. Предложенные в разделах 2.1 и 2.2 *микроструктурные и феноменологические модели* сегнетоэластичного материала имплементированы в конечно-элементном программном комплексе PANTOCRATOR [84], разрабатываемом в СПбПУ под руководством автора. PANTOCRATOR предназначен для выполнения многоуровневых мультидисциплинарных исследований, моделирования нелинейного поведения материалов и конструкций со сложными физико-механическими свойствами. PANTOCRATOR ориентирован на решение геометрически и физически нелинейных задач механики деформируемого твердого тела, механики связанных полей и обладает широким набором шаблонов моделей неупругих сред и высокоэффективных вычислительных методов, алгоритмов и процедур решения нелинейных задач. Следует отметить, что получившие широкое распространение современные многоцелевые коммерческие КЭ программы ANSYS, ABAQUS, LS-DYNA, LUSAS, MSC.MARC, MSC.NASTRAN, PAM-SYSTEM и др.

в настоящее время *не обладают* возможностью решения нелинейных связанных краевых задач сегнетоэлектростатичности.

Предложенные выше в разделах 3.1-3.3 эффективные *методы* решения краевых задач сегнетоэлектростатичности, основанные на использовании векторно-потенциальной (ВП) формулировки (см. раздел 3.1), метода возвратных отображений (см. раздел 3.2) и согласованной матрицы жесткости (см. раздел 3.3) были программно реализованы наряду с другими подходами (скалярно-потенциальной (СП) формулировкой, явными и неявными, одношаговыми и многошаговыми методами интегрирования определяющих уравнений) в КЭ программном комплексе PANTOCRATOR.

Сравнение представленных ниже результатов решения линейных и нелинейных тестовых и модельных краевых задач с аналитическими решениями и экспериментальными данными является основой для валидации и верификации пакета PANTOCRATOR. Полученные результаты сравнения различных вариантов вариационных формулировок, вариантов граничных условий, методов интегрирования определяющих уравнений и методов решения систем нелинейных КЭ уравнений позволяют осуществить выбор *оптимальной стратегии решения* нелинейных связанных краевых задач сегнетоэлектростатичности.

Примеры решения краевых задач различной тематики и степени сложности с использованием программного комплекса PANTOCRATOR представлены в работах [7, 15, 67, 84, 86, 88, 91–96, 16, 97, 98, 101, 126, 226, 229, 311, 328, 329, 420, 17, 421, 424, 426, 427, 430, 431, 448, 449, 23, 27, 42, 43, 58, 66] и др.

3.4.2 Пьезоэлектрическая пластина при комбинированном нагружении

3.4.2.1 Постановка задачи

Рассматривается представительный объем однородного пьезоэлектрического конденсатора (пластины) с плоскопараллельными электродами на верхней и нижней гранях, подвергнутый комбинированным одноосным электрическим и механическим воздействиям. Связанная электромеханическая задача рассматривается как обобщение электростатической задачи, которая подробно проанализирована в ра-

боте [449]. Этот пример используется для проверки достоверности различных вариантов электрических граничных условий. Нетривиальность их задания связана с многосвязностью поверхности свободной от электродов. Граничные условия (ГУ), введенные для этой задачи, могут рассматриваться как шаблон для многих других задач и поэтому проанализированы здесь достаточно подробно.

Представительный объем пьезоэлектрического конденсатора представляет собой куб с длиной ребра $l = 0,01$ м. Конечно-элементная модель представляет собой разбиение $7 \times 7 \times 7$ исходного куба на 20-узловые гексагональные КЭ. Задача решается в декартовой системе координат (x, y, z) . Оси координат направлены вдоль ребер куба (см. Таблицу 3.1).

3.4.2.2 Электрические граничные условия

Для удобства описания грани куба пронумерованы римскими цифрами I ÷ VI (см. Таблицу 3.1): $(x=l \rightarrow \text{I}, x=0 \rightarrow \text{II}, y=l \rightarrow \text{III}, y=0 \rightarrow \text{IV}, z=l \rightarrow \text{V}, z=0 \rightarrow \text{VI})$. Грани I-IV образуют многосвязную поверхность S_D с граничным условием физической симметрии $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = \bar{D}_n = 0$. Грани V и VI являются электродами $S_{E,1}$ и $S_{E,2}$ соответственно. На верхней грани (V) задан скалярный потенциал $\varphi|_{S_{E,1}} = \bar{\varphi} = -10^4$ В, на нижней стороне (VI) задан нулевой потенциал $\varphi|_{S_{E,2}} = 0$ В.

Четыре рассматриваемых варианта эквивалентных электрических граничных условий с различными калибровками (**1**, **2a**, **2b**, **2c**) представлены в Таблице 3.1 и конкретизированы в Таблице 3.2.

Набор граничных условий для *варианта калибровки 1* (см. уравнение (3.24)) включает два скалярных условия: одно физическое $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = 0$ или $\varphi|_{S_E} = \bar{\varphi}$ и одно калибровочное $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_S = 0$ (только последним условием данная ВП формулировка отличается от СП формулировки).

Таблица 3.1 – Примеры граничных условий для представительного объема пьезоэлектрического конденсатора (пластины) с плоскопараллельными электродами

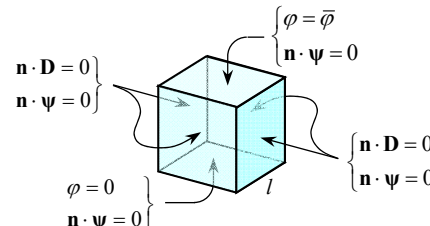
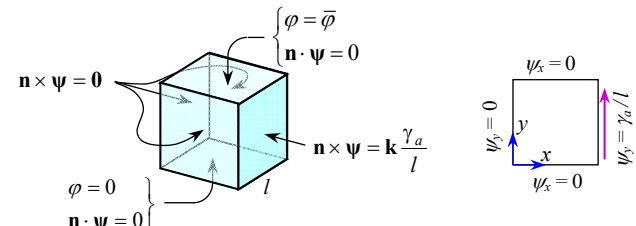
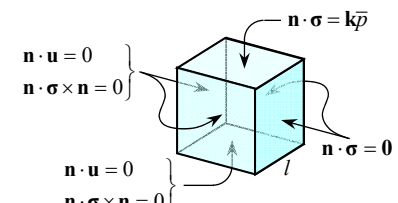
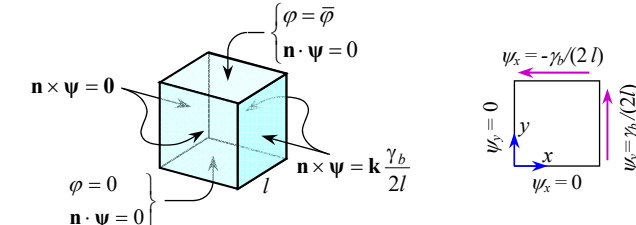
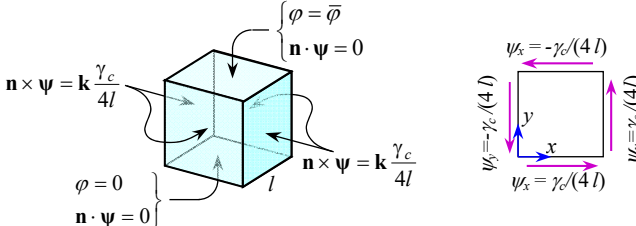
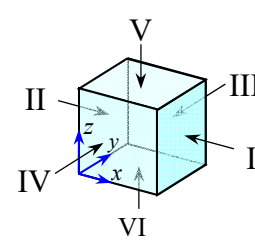
	Электрические граничные условия	Механические граничные условия
I		
2a		
2b		
2c		

Таблица 3.2 – Компонентная форма электрических граничных условий для представительного объема пьезоэлектрического конденсатора (пластины)

Сторона		Электрические граничные условия							
		Вариант калибровки 1		Вариант калибровки 2					
		I		2a		2b		2c	
I	S_D	$D_x = 0$	$\psi_x = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_y = \frac{\gamma_a}{l}$	$\psi_z = 0$	$\psi_y = \frac{\gamma_b}{2l}$	$\psi_z = 0$	$\psi_y = \frac{\gamma_c}{4l}$
II	S_D	$D_x = 0$	$\psi_x = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_y = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_y = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_y = -\frac{\gamma_c}{4l}$
III	S_D	$D_y = 0$	$\psi_y = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_x = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_x = -\frac{\gamma_b}{2l}$	$\psi_z = 0$	$\psi_x = -\frac{\gamma_c}{4l}$
IV	S_D	$D_y = 0$	$\psi_y = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_x = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_x = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_x = \frac{\gamma_c}{4l}$
V	$S_{E,1}$	$\varphi = \bar{\varphi}$	$\psi_z = 0$	$\varphi = \bar{\varphi}$	$\psi_z = 0$	$\varphi = \bar{\varphi}$	$\psi_z = 0$	$\varphi = \bar{\varphi}$	$\psi_z = 0$
VI	$S_{E,2}$	$\varphi = 0$	$\psi_z = 0$	$\varphi = 0$	$\psi_z = 0$	$\varphi = 0$	$\psi_z = 0$	$\varphi = 0$	$\psi_z = 0$

В отличие от калибровочного варианта 1, выбор граничных условий на S_D для *калибровочного варианта 2* связан с некоторым произволом выбора потенциала $\bar{\mathcal{A}}_1$ из (3.25)₃. Для задания функции $\bar{\mathcal{A}}_1$ на S_D вводится окружная координата s вдоль контура m^1 , охватывающего куб в плоскости $z = \text{const}$:

$$s = \begin{cases} x & \text{на стороне IV,} \\ l + y & \text{на стороне I,} \\ 3l - x & \text{на стороне III,} \\ 4l - y & \text{на стороне II.} \end{cases} \quad (3.113)$$

Используя введенные обозначения, определим функцию $\bar{\mathcal{A}}_1$ для вариантов **2a**, **2b**, **2c** следующим образом:

$$\bar{\mathcal{A}}_1^a = \begin{cases} 0, & \text{при } 0 \leq s < l; \\ (s-l)/l, & \text{при } l \leq s < 2l; \\ 1, & \text{при } 2l \leq s < 4l; \end{cases} \quad \bar{\mathcal{A}}_1^b = \begin{cases} 0, & \text{при } 0 \leq s < l; \\ (s-l)/l, & \text{при } l \leq s < 3l; \\ 1, & \text{при } 3l \leq s < 4l; \end{cases} \quad \bar{\mathcal{A}}_1^c = s/4l. \quad (3.114)$$

При таком выборе $\bar{\mathcal{A}}_1$ поверхностные градиенты $\tilde{\nabla} \bar{\mathcal{A}}_1$ этих функций удовлетворяют граничному условию $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = -\mathbf{n} \cdot (\tilde{\nabla} \times \boldsymbol{\Psi})|_{S_D} = -\gamma_1 \mathbf{n} \cdot (\tilde{\nabla} \times \tilde{\nabla} \bar{\mathcal{A}}_1)|_{S_D} \equiv 0$ и требованию $\oint_{m^1} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\Psi} dl = \gamma_1 \oint_{m^1} \mathbf{t} \cdot \tilde{\nabla} \bar{\mathcal{A}}_1 dl = \gamma_1 = Q_1$ (3.26) для любого замкнутого контура m^1 , окружающего куб на боковых гранях S_D . Поскольку функции $\bar{\mathcal{A}}_1$ не зависят от z , мы получаем во всех случаях $\psi_z = 0$. Остальные ГУ для ψ_x и ψ_y для вариантов **2a**, **2b**, **2c** приведены в Таблице 3.2. Из-за постоянного значения или линейной зависимости $\bar{\mathcal{A}}_1$ от s в (3.114) компоненты ψ_x и ψ_y могут быть 0 или постоянными.

Константы γ_1^a , γ_1^b и γ_1^c , определяющие векторный потенциал на границе, для вариантов **2a**, **2b**, **2c** неизвестны. Соответствующие ГУ вида $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\Psi}|_{S_D} = \gamma_1 \mathbf{n} \times \tilde{\nabla} \bar{\mathcal{A}}_1$ (3.25)₃ с неопределенным множителем γ_1 в КЭ реализуются введением линейных ограничений (связей) на соответствующие степени свободы соседних узлов, принадлежащих одной или нескольким граням. Например, для варианта **2a** граничное условие на боковой грани I реализуется путем установления ограничений вида

$\psi_y(x_i, y_i, z_i) = \psi_y(x_j, y_j, z_j)$ для всех пар узлов (i и j), принадлежащих стороне I. Указанный подход аналогичен используемому при решении контактных задач (случай контакта «узел-в-узел»).

3.4.2.3 Механические граничные условия

Механические ГУ соответствуют одноосному сжатию куба в вертикальном направлении (см. Таблицу 3.1). На верхней стороне (V) приложено равномерное постоянное давление $\sigma_{zz}|_{z=l} = \bar{p} = -10$ МПа. На трех гранях (II, IV, VI) заданы условия симметрии в виде запрета нормальных перемещений. Остальные две боковые стороны (I и III) предполагаются свободными.

3.4.2.4 Свойства материала

Упругие свойства пьезоэлектрического материала предполагаются изотропными с модулем Юнга $E = 100$ ГПа и коэффициентом Пуассона $\nu = 0,3$. Значение $\kappa = 10^{-8}$ Ф/м используется для всех диагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости $\kappa^\sigma = \kappa \mathbf{1}$, где $\mathbf{1}$ - единичный тензор. Ненулевые пьезоэлектрические коэффициенты равны $d_{33} = 2 \cdot 10^{-10}$ м/В, $d_{31} = -10^{-10}$ м/В, $d_{15} = 10^{-10}$ м/В.

3.4.2.5 Аналитическое решение

Аналитическое решение для компонент вектора электрического смещения и тензора деформаций:

$$\begin{cases} D_z = d_{33}\sigma_{zz} + \kappa E_z, \\ D_x = D_y = 0, \\ \varepsilon_{zz} = \frac{1}{E}\sigma_{zz} + d_{33}E_z, \\ \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = -\frac{\nu}{E}\sigma_{zz} + d_{31}E_z, \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{yz} = 0, \end{cases} \quad (3.115)$$

где $\sigma_{zz} = \bar{p} = -10$ МПа, $E_z = -\frac{\bar{\varphi}}{l} = 10^6$ В/м. Вертикальные компоненты поля электрического смещения и тензора деформаций однородны по объему и для используемых постоянных материалов и параметров нагружения равны $D_z = 0,8 \cdot 10^{-2}$ Кл/м² и $\varepsilon_{zz} = 0,01\%$ (далее $D_z^{analytic}$ и $\varepsilon_{zz}^{analytic}$).

Аналитическое решение для векторного потенциала с вариантом калибровки **1** определяется разложением в ряд Фурье (В.14). Более простые решения имеют место для **2a** (см. (В.3)) и для **2b** (см. (В.4)). Решение для **2c** отличается от **2b** только расположением оси вихря.

3.4.2.6 Сравнение точности решений для различных граничных условий

На Рисунке 3.6 показаны результаты КЭ расчетов распределения полей электрического векторного потенциала ψ в представительном объеме пьезоэлектрической пластины для различных вариантов граничных условий. Осредненные по объему значения электрического смещения $D_z / D_{z \text{ analytic}}$ приведены в Таблице 3.3. Все полученные результаты для D_z близки к аналитическому решению, вариант калибровки **1** показывает наибольшее отклонение (0,66 %) в сравнении с вариантам **2a**, **2b** и **2c** ($< 0,015$ %). Причина понижения точности решения для варианта калибровки **1** связана с резким изменением направления ψ в окрестности углов (см. Рисунок 3.6a), определяемым видом граничных условий $\mathbf{n} \cdot \psi = 0$ на смежных сторонах. Подобное изменение не может быть точно воспроизведено рассматриваемыми функциями формы КЭ. Как следствие этого, решение методом КЭ вблизи углов значительно отличается от точного решения. Указанные погрешности решения присутствуют локально в угловых элементах и, следовательно, не оказывают существенного влияния на среднее значение D_z .

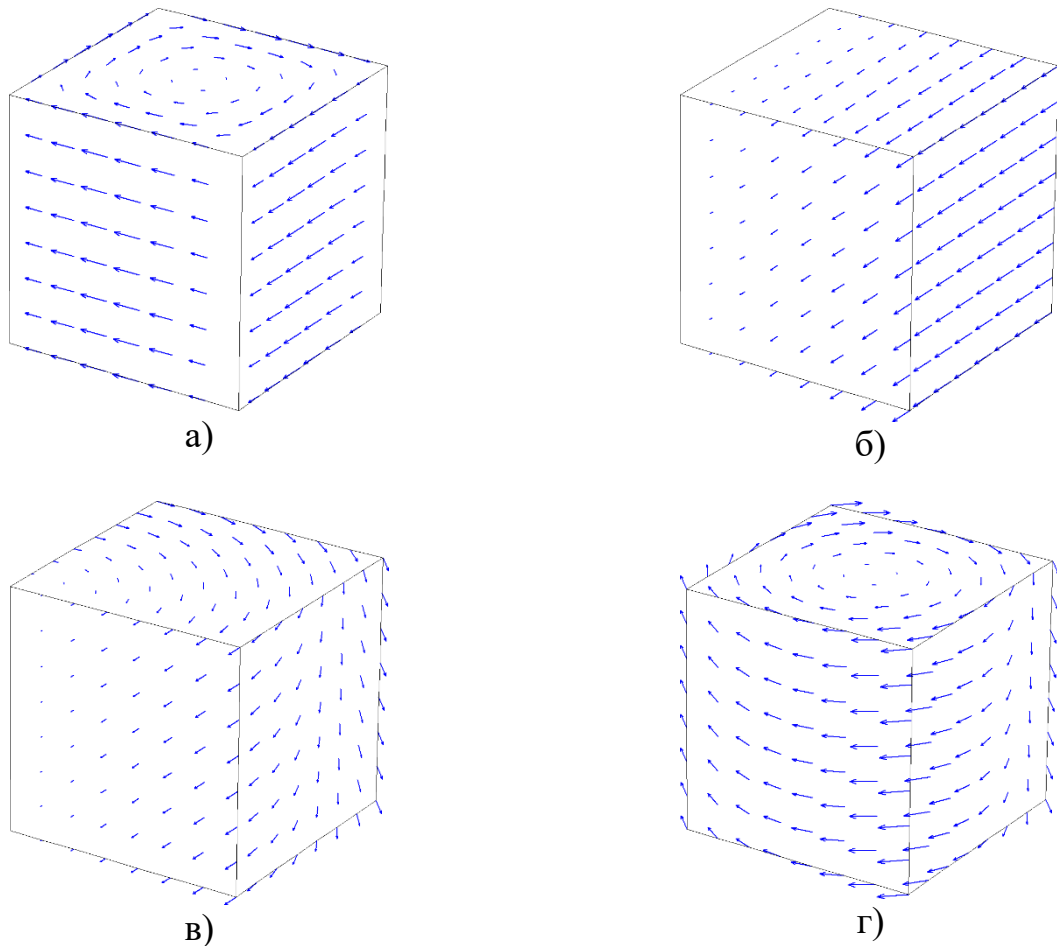


Рисунок 3.6 – Результаты КЭ расчетов полей электрического векторного потенциала ψ с различными вариантами граничных условий а) **1**; б) **2a**; в) **2b**; г) **2c**

Таблица 3.3 – Значения $D_z / D_{z \text{ analytic}}$ и $\varepsilon_{zz} / \varepsilon_{zz \text{ analytic}}$ для СП и ВП формулировок и различных вариантов калибровки для пьезоэлектрического конденсатора (пластины)

	$D_z / D_{z \text{ analytic}}$		$\varepsilon_{zz} / \varepsilon_{zz \text{ analytic}}$
	Пьезоэлектрическая задача	Электростатическая задача	Пьезоэлектрическая задача
СП	1,00004	1,00003	1,00004
ВП 1	0,99344	0,99593	0,99626
ВП 2a	0,99985	1,00002	0,99994
ВП 2b	0,99991	1,00002	0,99996
ВП 2c	1,00002	1,00002	0,99998

Для деформации ε_{zz} наблюдаются одинаковые уровни погрешности и тенденции влияния калибровки в сравнении с электрическим смещением D_z (см. Таблицу 3.3).

Рисунок 3.7 иллюстрирует сходимость значения энергии $\bar{W} = \frac{1}{2V} \int_V (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}) dV$ при уменьшении размера элемента h_e . Видно, что в отличие от калибровки **1**, аналитические решения (В.3) и (В.4) для вариантов калибровки **2a**, **2b** и **2c** могут быть точно представлены функциями формы КЭ (см. Рисунки 3.7 и 3.8). Следовательно, наблюдаемые ошибки для этих вариантов связаны только с конечными значениями штрафов и точностью вычислений. Также в этом контексте отметим, что рассчитанные поля электрических смещений однородны для всех версий варианта **2** калибровки.

Сравнение пространственных распределений компонент векторного потенциала с аналитическими решениями (В.14), (В.3) и (В.4) для различных граничных условий (**1**, **2a**, **2b**) продемонстрировало хорошее совпадение (см. Рисунок 3.8).

Константы γ_1^a , γ_1^b и γ_1^c соответствуют суммарному свободному заряду на верхнем электроде. Значения, рассчитанные на основе аналитических решений (В.3) и (В.4), равны $\gamma_1^a = \gamma_1^b = \gamma_1^c = -l^2 D_{z \text{ analytic}}$. Отклонение полученных численных результатов от приведенного аналитического решения незначительно (менее 1%).

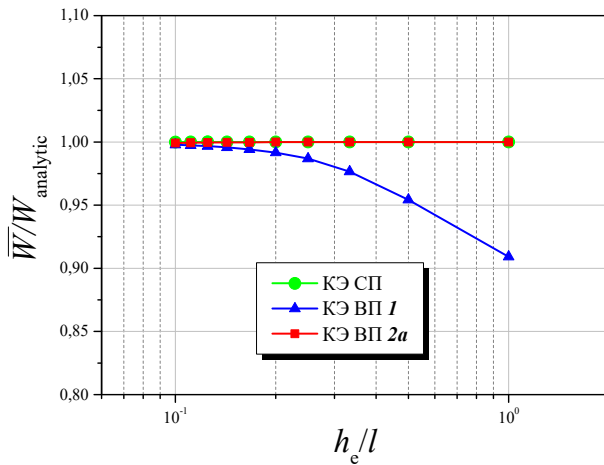


Рисунок 3.7 – Зависимость энергии $\bar{W}$ от размера КЭ h_e для различных граничных условий. $W_{\text{analytic}} = \frac{1}{2} \frac{\bar{p}^2}{E} - d_{33} \bar{p} \left(\frac{\bar{\varphi}}{l} \right) + \frac{1}{2} \kappa \left(\frac{\bar{\varphi}}{l} \right)^2$

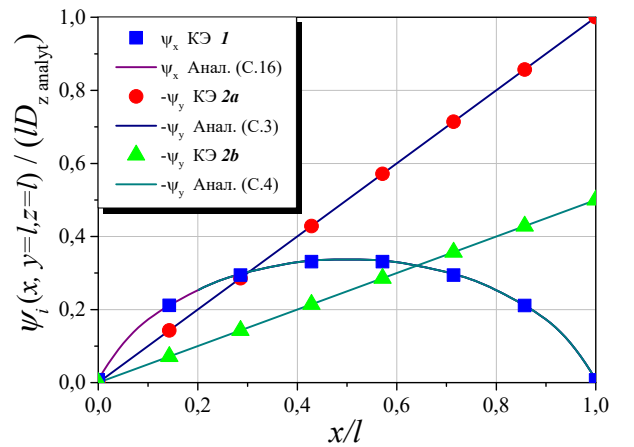


Рисунок 3.8 – Сравнение результатов КЭ расчетов полей компонент векторного потенциала с аналитическими решениями для ребра $y = 1, z = 1$ с различными вариантами граничных условий (**1**, **2a**, **2b**)

3.4.2.6 Анализ чувствительности решений к штрафным коэффициентам

При проведении КЭ расчетов использовались следующие значения штрафных коэффициентов: $\bar{\alpha} = \kappa^{-1} = 10^8 \frac{\text{м}}{\Phi}$, $\bar{\alpha}_D = \bar{\alpha}_{ie} = \kappa^{-1} \cdot 10^6 \text{ м} = 10^{14} \frac{\text{м}^2}{\Phi}$, $\bar{\alpha}_{\psi_i} = \bar{\alpha}_{\psi_n} = \kappa^{-1} \cdot 10^{12} \text{ м} = 10^{20} \frac{\text{м}^2}{\Phi}$, где κ - диэлектрическая проницаемость материала. Диапазоны допустимых значений штрафных коэффициентов показаны на Рисунках 3.9а и б в виде областей с зеленой штриховкой. Следует отметить, что $\bar{\alpha}$ варьируется в очень широком диапазоне, от $10^{-5} \kappa^{-1}$ до $10^{12} \kappa^{-1}$, коэффициенты $\bar{\alpha}_D$ и $\bar{\alpha}_{ie}$ варьируются в диапазоне от $10^{-1} \text{ м} \cdot \kappa^{-1}$ до $10^9 \text{ м} \cdot \kappa^{-1}$. Диапазон допустимых штрафных коэффициентов для варианта **2а** граничных условий шире, чем для варианта **1**. В интервале допустимых штрафных коэффициентов векторные потенциалы соответствуют аналитическим решениям (В.14) и (В.3). Поле электрического смещения в этом случае однородно.

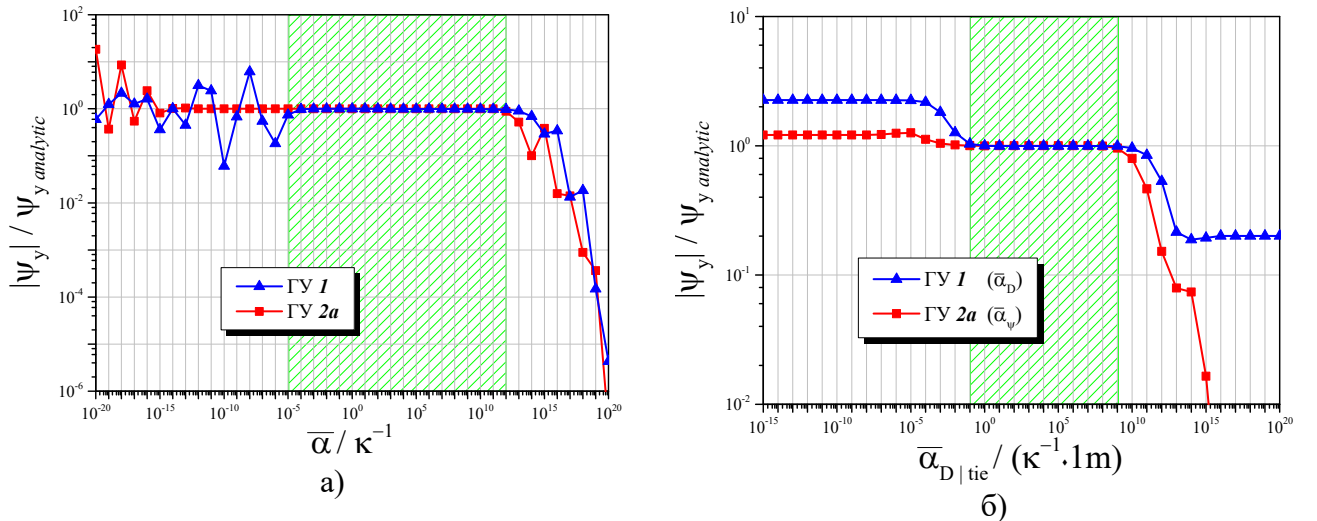


Рисунок 3.9 – Диапазон допустимых значений штрафных коэффициентов для вариантов граничных условий **1** и **2а**

Несмотря на простоту решаемой в данном примере задачи, полученные результаты показали (i) пригодность используемых вариантов калибровки для многосвязной поверхности S_D и (ii) их корректную реализацию в рамках метода КЭ. Кроме того, результаты продемонстрировали, как одно и то же физическое поле $\mathbf{D}$ может быть представлено различными полями векторного потенциала $\boldsymbol{\psi}$, которые могут являться как «ламинарными», так и «вихревыми».

3.4.3 Радиальная поляризация полого цилиндра

3.4.3.1 Постановка задачи

Рассматривается представительный элемент бесконечно длинного полого цилиндра (цилиндрического конденсатора), имеющего кольцевое поперечное сечение, с заданным постоянным потенциалом $\varphi|_{r=a} = \bar{\varphi}$ на внутренней поверхности радиуса a и нулевым потенциалом $\varphi|_{r=b} = 0$ В на внешней поверхности радиуса b . Подобное расположение электродов позволяет инициировать осесимметричное электрическое поле в радиальном направлении. Целью выполнения расчетов является верификация предложенных методов (вариационных формулировок, способов задания граничных условий, процедур интегрирования нелинейных дифференциальных уравнений и методов решения систем нелинейных КЭ уравнений) для многосвязного объекта на основе сравнения полученных результатов с аналитическими решениями (см. Приложение Г).

Объем цилиндрического конденсатора является многосвязным ($N^H = 1$) и имеет топологию аналогичную тору. Одной из основных целей рассмотрения данного теста является проверка выполнения условий (3.24)₃ и (3.25)₄ при использовании ВП формулировки для многосвязной области. Несмотря на то, что при решении данной задачи вследствие симметрии можно было бы ограничиться рассмотрением только односвязной четвертью области, в целях проверки предложенных формулировок для многосвязного случая рассматривается полный объем.

В отличие от первого теста в данном примере физические поля неоднородны, а векторный потенциал зависит от всех трех декартовых координат, что является подходящим тестом для КЭ процедур.

При получении численных решений использовались следующие значения: высота цилиндра $h = 0,003$ м, внутренний радиус $a = 0,01$ м, внешний радиус $b = 0,02$ м.

Трехмерная КЭ модель конденсатора включает регулярную сетку 8-узловых гексагональных КЭ. Базовая дискретная модель представляет собой КЭ разбиение на 4 элемента в осевом направлении, на 10 элементов в радиальном направлении и на 56 элементов в окружном направлении.

3.4.3.2 Граничные условия

ГУ для СП формулировки и для ВП формулировок с различными калибровками (1, 2) представлены в Таблице 3.4 и конкретизированы в Таблице 3.5.

Таблица 3.4 – Примеры граничных условий для цилиндрического конденсатора

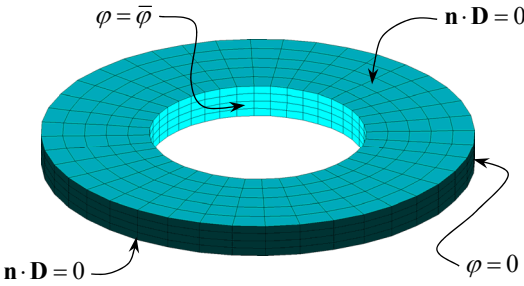
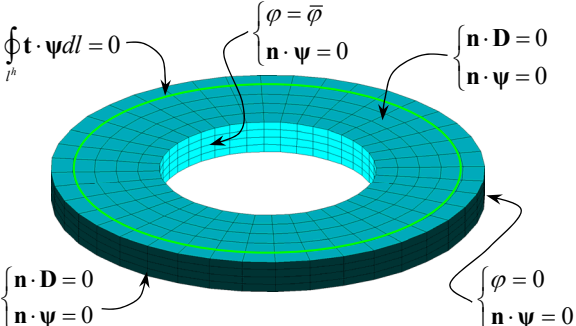
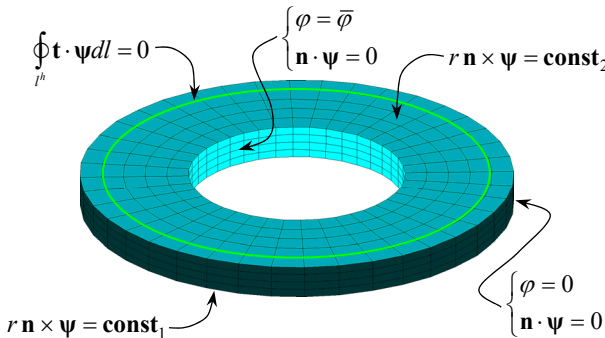
	Скалярно-потенциальная формулировка	Векторно-потенциальные формулировки
1		
2	—	

Таблица 3.5 – Компонентная форма граничных условий для ВП формулировок при решении задачи о радиальной поляризации цилиндрического конденсатора

Поверх- ность	Электрические граничные условия			
	Вариант калибровки 1		Вариант калибровки 2	
$S_{D,1}$	$D_z = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_\theta = \frac{\gamma_1}{2\pi r}$	$\psi_r = 0$
$S_{D,2}$	$D_z = 0$	$\psi_z = 0$	$\psi_\theta = \frac{\gamma_2}{2\pi r}$	$\psi_r = 0$
$S_{E,1}$	$\varphi = \bar{\varphi}$	$\psi_r = 0$	$\varphi = \bar{\varphi}$	$\psi_r = 0$
$S_{E,2}$	$\varphi = 0$	$\psi_r = 0$	$\varphi = 0$	$\psi_r = 0$

В качестве внешних границ объема конденсатора V рассматриваются 4 поверхности: внутренняя цилиндрическая $S_{E,1}$ ($r = a$ и $0 \leq z \leq h$), которая является электродом и на ней задан потенциал $\varphi|_{S_{E,1}} = \bar{\varphi}$, внешняя цилиндрическая $S_{E,2}$ ($r = b$ и $0 \leq z \leq h$) на

которой как на электроде задан $\varphi|_{S_{E,2}} = 0$, нижняя кольцевая $S_{D,1}$ ($z = 0$ и $a \leq r \leq b$) и верхняя кольцевая $S_{D,2}$ ($z = h$ и $a \leq r \leq b$), на которых задано ГУ $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = 0$.

Набор граничных условий для *варианта калибровки 1* (см. уравнение (3.24)) включает два скалярных условия: одно физическое $\varphi|_{S_E} = \bar{\varphi}$ или $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = 0$ и одно калибровочное $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_S = 0$ (только последним условием ГУ для данной ВП формулировки отличается от ГУ СП формулировки). Кроме того, для замкнутого контура l^1 вводится условие отсутствия циркуляции (3.24)₃.

ГУ на многосвязных поверхностях $S_{D,1}$ и $S_{D,2}$ для *калибровочного варианта 2* в соответствии с (3.25)₃ определяются потенциалами $\bar{\varphi}_1$ и $\bar{\varphi}_2$, которые выбираются пропорциональными угловой координате (в цилиндрической системе координат r, θ, z) $\bar{\varphi}_1 = \bar{\varphi}_2 = \frac{\theta}{2\pi}$. При таком выборе $\bar{\varphi}_1$ и $\bar{\varphi}_2$ компоненты векторного потенциала, лежащие в плоскости S_D , определяются равенствами (3.25)₃: $\psi_r|_{S_{D,1}} = \psi_r|_{S_{D,2}} = 0$, $\psi_\theta|_{S_{D,1}} = \frac{\gamma_1}{2\pi r}$, $\psi_\theta|_{S_{D,2}} = \frac{\gamma_2}{2\pi r}$ (см. также Таблицы 3.4 и 3.5), где γ_1 и γ_2 - константы. Соответствующие ГУ с неопределенными множителями γ_1 и γ_2 реализуются в КЭ расчетах введением линейных ограничений (связей) на соответствующие степени свободы соседних узлов, принадлежащих одной плоскости.

3.4.3.3 Свойства материала

Используемые в линейных и нелинейных КЭ расчетах цилиндрического конденсатора сегнетоэлектрические свойства материала приведены в Таблице 3.6.

Таблица 3.6 – Параметры материала, используемые в КЭ расчетах цилиндрического конденсатора

Параметр	Символ	Размерность	Значение
Диэл. проницаемость	κ	Ф/м	10^{-8}
Коэрцитивное поле	E_0	В/м	10^6
Спонт. поляризация	P_0	Кл/м ²	0,5
Параметр упрочнения	H^e	-	0,01

3.4.3.4 Результаты расчетов для случая линейного поведения материала

При низком уровне нагрузки ($|\mathbf{E}| < E_0 \rightarrow \bar{\varphi} < \varphi_* = E_0 a \ln b / a$) сегнетоэлектрический материал ведет себя линейно. При решении линейных задач производилась верификация вариационных формулировок, способов задания граничных условий, скоростей сходимости КЭ решения при варьировании размеров линейных и квадратичных КЭ на основе сравнения полученных результатов с аналитическими решениями (см. Приложение Г).

На Рисунке 3.10 показаны результаты КЭ расчетов распределения полей электрического векторного потенциала Ψ в представительном объеме цилиндрического конденсатора для варианта калибровки **1** (результаты для калибровки **2** визуально неотличимы).

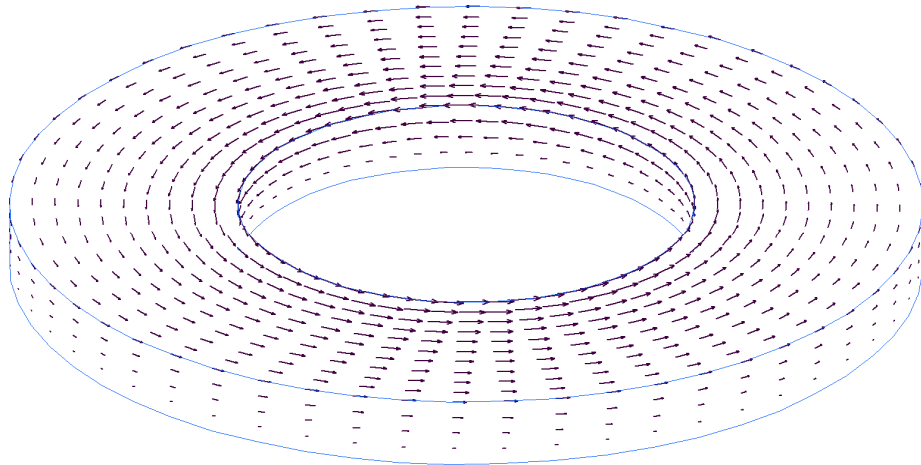


Рисунок 3.10 – Результаты КЭ расчетов электрического векторного потенциала Ψ в цилиндрическом конденсаторе

Сравнение полученного численного решения для $|\Psi|$ с аналитическим решением (Г.14) показано на Рисунке 3.11а для трех радиальных путей, определяемых пересечением поверхности $\theta = 0$ с поверхностями $z/h = 0$, $z/h = 0,5$ и $z/h = 1$. Наблюдается отличное соответствие численного и аналитического решений для всех трех путей. Аналогично, численное решение для радиального распределения абсолютного значения вектора электрического смещения $|\mathbf{D}|$ демонстрирует очень

хорошее соответствие с аналитическим решением (Г.13) (см. Рисунок 3.11б). Численные результаты для варианта калибровки **2** практически идентичны результатам для калибровки **1** и поэтому не показаны на Рисунках 3.11а и б.

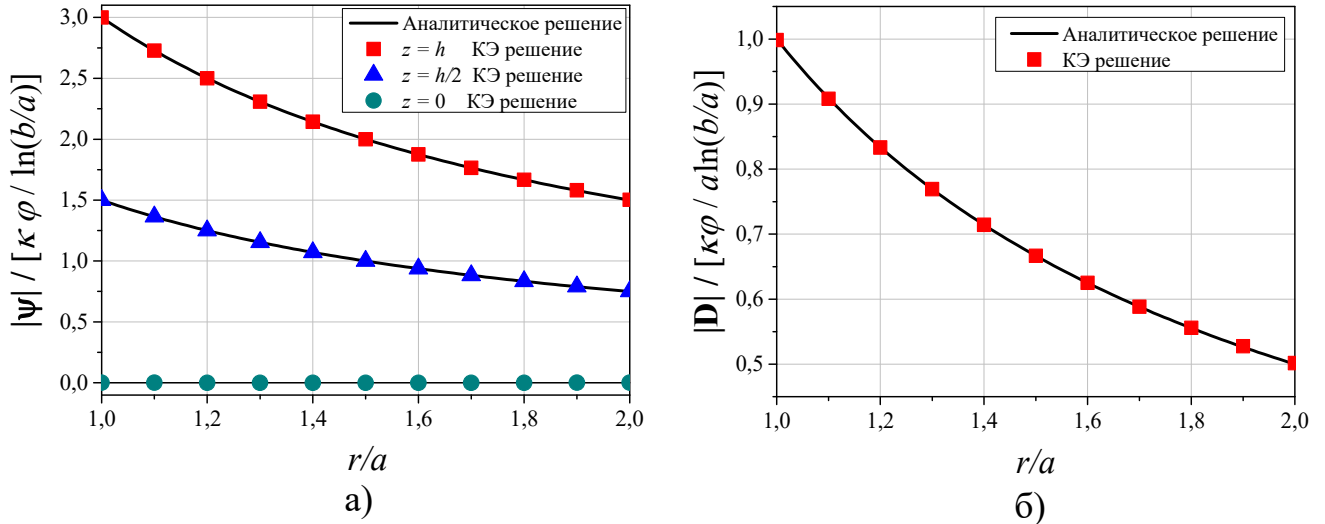


Рисунок 3.11 – Сравнение результатов КЭ расчетов а) модуля векторного потенциала $|\psi|$, б) модуля вектора электрического смещения $|D|$ с аналитическими решениями для цилиндрического конденсатора

Сравнение отношений максимального абсолютного значения вектора электрического смещения $\max |D| = |D|_{r=a}$ к аналитическому значению (Г.13) для СП и ВП формулировок с различными вариантами калибровок представлено в Таблице 3.7. Наименьшей погрешностью обладает ВП формулировка с вариантом калибровки **2**.

Таблица 3.7 – Значения $D_z / D_{z \text{ analytic}}$ для различных методов КЭ решения задачи о цилиндрическом конденсаторе

	$D_z / D_{z \text{ analytic}}$	Относительная погрешность
СП	0,95291	4,7%
ВП 1	1,00206	0,2%
ВП 2	1,00106	0,1%

На Рисунке 3.12 показана зависимость численной погрешности решения от размера КЭ для двух вариантов калибровки ВП формулировки и для СП формулировки. Рассматриваются как линейные (8-узловые), так и квадратичные (20-узловые) КЭ.

Размер КЭ сетки характеризуется отношением $h_r / (b - a)$, где h_r – размер КЭ в радиальном направлении. Для определения характеристик скорости сходимости КЭ решения при измельчении сетки используется следующая энергетическая норма:

$$e = \frac{\int_V (\mathbf{E}_{analytic} - \mathbf{E}) \cdot (\mathbf{D}_{analytic} - \mathbf{D}) dV}{\int_V \mathbf{E}_{analytic} \cdot \mathbf{D}_{analytic} dV}. \quad (3.116)$$

Как видно из Рисунка 3.12, два варианта калибровки ВП формулировки демонстрируют близкое поведение при анализе сходимости. Для 8-узловых КЭ скорость сходимости составила 1,12; для 20-узловых КЭ - 1,86. Скорости сходимости были рассчитаны как половины углов наклона линейных аппроксимаций данных на Рисунке 3.12, построенных на основе метода наименьших квадратов. СП формулировка показала более высокий уровень численных ошибок e и меньшую скорость сходимости, чем формулировка векторного потенциала. Скорость сходимости для СП формулировки составила: для 8-узловых КЭ - 0,94; для 20-узловых КЭ - 1,85.

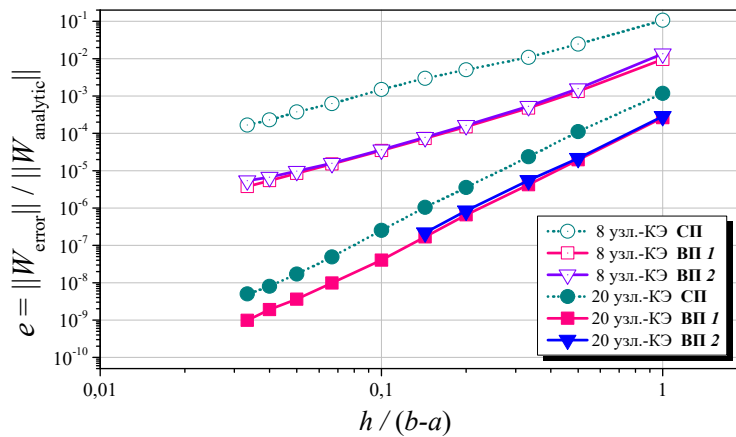


Рисунок 3.12 – Зависимость погрешности решения от размера КЭ сетки для цилиндрического конденсатора

3.4.3.5 Результаты расчетов для случая нелинейного поведения материала

При превышении критического уровня нагрузки ($|\mathbf{E}| \geq E_0 \rightarrow \bar{\varphi} \geq \varphi_* = E_0 a \ln b / a$) в сегнетоэлектрическом материале начинаются переключения, что приводит к необходимости использования специальных методов интегрирования определяющих соотношений и решения систем нелинейных КЭ уравнений.

Решения нелинейной краевой задачи, соответствующие трем различным уровням нагружения ($\bar{\varphi} = 8401 \text{ В}$, 9414 В , 10045 В , приводящие к состояниям с радиусами зоны переключения $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$ и $\frac{3}{4}$ толщины цилиндра), показаны на Рисунке 3.13. Наблюдается хорошее соответствие численных решений с аналитическими прогнозами (Г.8).

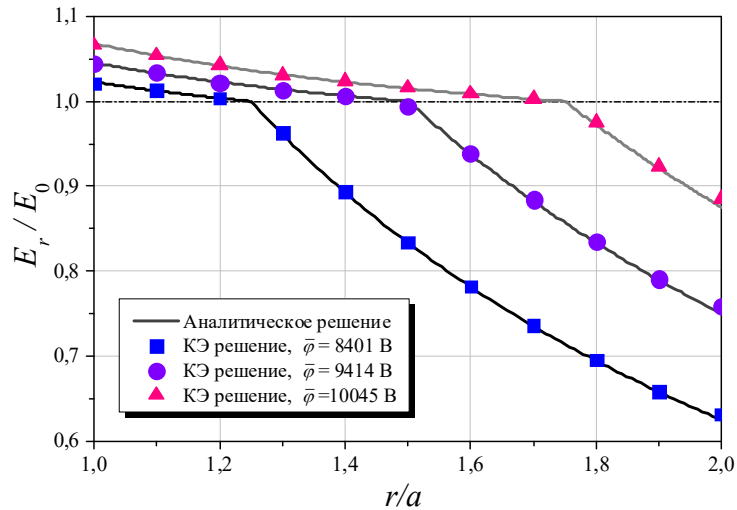


Рисунок 3.13 – Сравнение результатов КЭ расчетов распределений радиальной компоненты электрического поля E_r по радиусу r с аналитическими решениями для цилиндрического конденсатора при различных уровнях нагружения

Сравнение показателей сходимости глобального метода Ньютона-Рафсона при решении системы нелинейных КЭ уравнений, полученных в расчетах с СП и ВП формулировками при различных уровнях нагрузки, представлено в Таблице 3.8. При высоких уровнях нагрузки СП формулировка демонстрирует расходимость.

Таблица 3.8 – Количество итераций для СП и ВП формулировок при различных уровнях нагрузки в цилиндрическом конденсаторе. Точность $\varepsilon = 10^{-5}$.

$\bar{\varphi}$, кВ	10	15	20	25	30
СП формулировка	5	4	4	расходимость	расходимость
ВП формулировка	4	5	6	6	7

Полученные при решении данной задачи результаты показали (i) пригодность используемых вариантов калибровки, граничных (и интегральных) условий для многосвязной области V и для составной поверхности S_D ; (ii) их корректную КЭ реализацию для случая неоднородного поля; (iii) преимущество ВП формулировки в

сравнении с СП формулировкой в уровне численной погрешности решения при различных размерах КЭ и (iv) отсутствии расходимости итерационных процедур метода Ньютона-Рафсона для ВП формулировки в сравнении с СП формулировкой при высоких уровнях нагрузки.

3.4.4 Параллелепипед с цилиндрическим включением

3.4.4.1 Постановка задачи

Рассматривается представительный элемент плоского конденсатора в форме параллелепипеда с электродами на верхней и нижней гранях, между которыми на равном расстоянии располагается цилиндрическое включение с диэлектрической проницаемостью κ_i , внедренное в основной диэлектрический материал с проницаемостью $\kappa_e = 10\kappa_i$.

Целью выполнения расчетов является верификация предложенных методов (вариационных формулировок, способов задания граничных условий) для гетерогенной среды на основе сравнения полученных результатов с аналитическим решением (см. Приложение Д).

В силу наличия трех ортогональных плоскостей симметрии в КЭ расчетах рассматривается только одна восьмая часть представительного элемента. Задача решается в трехмерной постановке с использованием декартовой системы координат (см. Рисунок из Таблицы 3.9). Оси координат (x, y, z) направлены вдоль ребер параллелепипеда. Ось цилиндра направлена вдоль оси z .

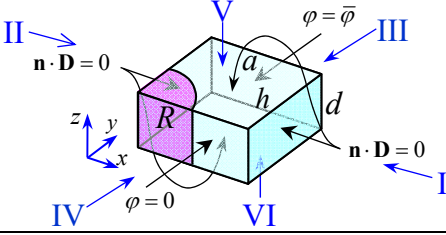
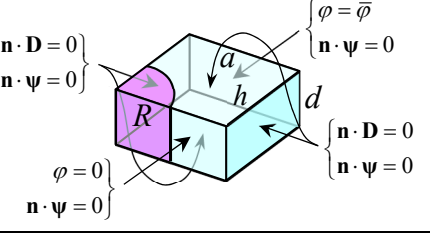
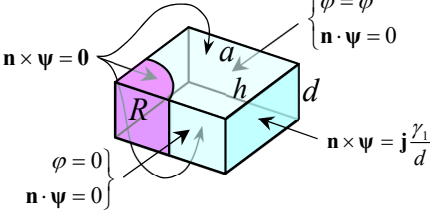
При проведении расчетов использовались следующие параметры: размеры параллелепипеда $h = 0,01 \text{ м} \times a = 0,014 \text{ м} \times d = 0,003 \text{ м}$; радиус включения: $R = 0,002 \text{ м}$; диэлектрическая проницаемость включения $\kappa_i = 10^{-9} \text{ Ф/м}$ и матрицы $\kappa_e = 10^{-8} \text{ Ф/м}$.

3.4.4.2 Граничные условия

Для удобства дальнейшего цитирования стороны параллелепипеда пронумерованы римскими цифрами от I до VI (см. Таблицу 3.9): $(x=a \rightarrow \text{I}, x=0 \rightarrow \text{II}, y=h \rightarrow \text{III}, y=0 \rightarrow \text{IV}, z=d \rightarrow \text{V}, z=0 \rightarrow \text{VI})$. Стороны I, II, V, VI образуют многосвязную поверхность S_D с граничным условием физической симметрии $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = \bar{D}_n = 0$.

На верхней грани III, являющейся электродом $S_{E,1}$, задан скалярный потенциал $\phi|_{S_{E,1}} = \bar{\varphi} = -10^4$ В, на нижней стороне IV задан нулевой потенциал $\phi|_{S_{E,2}} = 0$ В.

Таблица 3.9 – Примеры граничных условий для представительного объема параллелепипеда с цилиндрическим включением

	Скалярно-потенциальная формулировка	Векторно-потенциальные формулировки
1		
2	—	

Набор граничных условий для *варианта калибровки 1* (см. уравнение (3.24)) на каждой грани включает два скалярных условия: одно физическое $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = 0$ или $\phi|_{S_E} = \bar{\varphi}$ и одно калибровочное $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}|_S = 0$ (только последним условием данная ВП формулировка отличается от СП формулировки).

В отличие от калибровочного варианта **1**, выбор граничных условий на S_D для *калибровочного варианта 2* связан с некоторым произволом выбора потенциала $\bar{\varphi}_1$ из (3.25)₃. Для задания функции $\bar{\varphi}_1$ на S_D вводится окружная координата s вдоль контура m^1 , охватывающего параллелепипед в плоскости $y = \text{const}$:

$$s = \begin{cases} z & \text{на стороне II } (x = 0), \\ d + x & \text{на стороне V } (z = d), \\ d + a - z & \text{на стороне I } (x = a), \\ 2d + a - x & \text{на стороне VI } (z = 0). \end{cases} \quad (3.117)$$

Используя введенные обозначения, определим функцию $\bar{\varphi}_1$ следующим образом:

$$\bar{\mathcal{G}}_1 = \begin{cases} 0, & \text{при } 0 \leq s < d + a, \\ (s - d - a) / d, & \text{при } d + a \leq s < 2d + a, \\ 1, & \text{при } 2d + a \leq s < 2d + 2a. \end{cases} \quad (3.118)$$

При таком выборе $\bar{\mathcal{G}}_1$ поверхностный градиент $\tilde{\nabla} \bar{\mathcal{G}}_1$ этой функции удовлетворяет граничному условию $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = -\mathbf{n} \cdot (\tilde{\nabla} \times \boldsymbol{\Psi})|_{S_D} = -\gamma_1 \mathbf{n} \cdot (\tilde{\nabla} \times \tilde{\nabla} \bar{\mathcal{G}}_1)|_{S_D} \equiv 0$ и требованию $\oint_{m^1} \mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\Psi} dl = \gamma_1 \oint_{m^1} \mathbf{t} \cdot \tilde{\nabla} \bar{\mathcal{G}}_1 dl = \gamma_1 = Q_1$ (3.26) для любого замкнутого контура m^1 , окружающего параллелепипед на боковых гранях S_D . Поскольку функции $\bar{\mathcal{G}}_1$ не зависят от y , то $\psi_y = 0$. Таким образом, ГУ на S_D для калибровки 2 определяются уравнениями:

$$\begin{cases} \psi_y = 0, \psi_z = 0 & \text{на стороне II } (x = 0), \\ \psi_x = 0, \psi_y = 0 & \text{на стороне V } (z = d), \\ \psi_y = 0, \psi_z = -\gamma_1 / d = \text{const} & \text{на стороне I } (x = a), \\ \psi_x = 0, \psi_y = 0 & \text{на стороне VI } (z = 0). \end{cases} \quad (3.119)$$

Константа γ_1 , определяющая векторный потенциал на границе, априори неизвестна. Соответствующее ГУ вида $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\Psi}|_{S_D} = \gamma_1 \mathbf{n} \times \tilde{\nabla} \bar{\mathcal{G}}_1|_{x=a} = \mathbf{j} \gamma_1 / d$ (3.25)₃ с неопределенным множителем γ_1 в КЭ реализуются введением линейных ограничений (связей) на соответствующие степени свободы соседних узлов, принадлежащих одной грани.

3.4.4.3 Сравнение точности решений для различных граничных условий

Используемая в расчетах дискретная модель, включающая 400 КЭ, представлена на Рисунке 3.14. Для сравнения в КЭ расчетах рассматривались изопараметрические квадратичные 20-узловые и линейные 8-узловые элементы с 8 ($2 \times 2 \times 2$) и 27 ($3 \times 3 \times 3$) гауссовыми точками интегрирования.

На Рисунке 3.14 показаны результаты КЭ расчетов распределения электрического поля E_y в представительном объеме параллелепипеда с цилиндрическим включением для СП и ВП формулировок. Результаты визуально неотличимы. Детальное сравнение результатов КЭ расчетов для всех описанных выше типов ГУ с использованием СП и ВП формулировок представлено в Таблице 3.10.

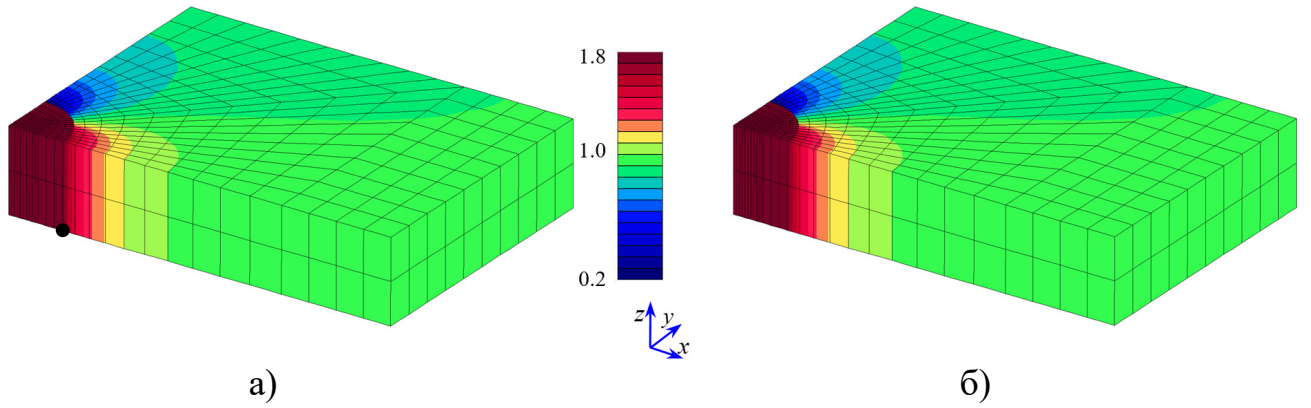


Рисунок 3.14 – Результаты КЭ расчетов распределения полей E_y / E_∞ в представительном объеме параллелепипеда с цилиндрическим включением для:
а) СП формулировки, б) ВП формулировки с калибровкой 2

ВП формулировка с вариантом калибровки **1** демонстрирует относительно низкую точность по сравнению с вариантом калибровки **2**. Причина понижения точности решения для калибровки **1** связана с ГУ $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$ на смежных сторонах, порождающих резкое изменение направления $\boldsymbol{\psi}$ в окрестности углов, не описываемое рассматриваемыми функциями формы КЭ. Замена ГУ $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$ на всех узлах на сторонах $z = 0$ и $z = d$ на фиксацию только одного (произвольного) узла на каждой стороне приводит к повышению точности (см. результаты для ГУ **1n** в Таблице 3.10). Объяснение такой возможности связано с тем, что функции формы КЭ уже накладывают некоторые ограничения на свободу $\boldsymbol{\psi}$. Некоторые примеры подобных дискретных ограничений, устраняющих ранговый дефект матрицы жесткости, приведены в [422]. Выбор дискретных ГУ Дирихле должен исключать режимы с нулевой энергией и согласовываться с другими условиями Дирихле. Другой возможностью повышения точности для варианта калибровки **1** является уменьшение параметра штрафа $\bar{\alpha}_{\psi_n}$, используемого в численной реализации для ГУ $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$ (ср. результаты для ГУ **1n** с $\bar{\alpha}_{\psi_n} = 10^{20} \frac{\text{м}^2}{\Phi}$ и ГУ **1p** с $\bar{\alpha}_{\psi_n} = 10^{20} \frac{\text{м}^2}{\Phi}$ в Таблице 3.10).

Таблица 3.10 – Сравнение максимальных значений E_y / E_∞ (реализуются в точке А, показанной на Рисунке 3.14) для СП и ВП формулировок и различных вариантов ГУ для параллелепипеда с цилиндрическим включением

	ГУ	20-узловые КЭ, 8 гауссовых точек	20-узловые КЭ, 27 гауссовых точек	8-узловые КЭ, 8 гауссовых точек
ВП формулировка	<i>1</i>	2,0471	1,3691	1,2076
	<i>1n</i>	1,7894	1,7722	1,7805
	<i>1p</i>	1,7731	1,7722	1,7840
	<i>2</i>	1,7726	1,7722	1,7816
СП формулировка	<i>1</i>	1,7722	1,7721	1,7675

Также важно отметить, что отличие между результатами СП и ВП (с ГУ 2) формулировок практически отсутствует (менее 0,006% для 20-узлового КЭ и менее 0,8% для 8-узлового КЭ, см. Таблицу 3.10). Для сравнения результатов в Таблице 3.10 была выбрана точка А (см. Рисунок 3.14), где имеет место максимальное электрическое поле. При использовании более точного правила интегрирования с 27 гауссовыми точками практически идентичные решения (различия менее 0,0001%) получены с использованием ГУ *1n* и *2* для ВП формулировки, в то время как для ГУ *1* и *2* для ВП формулировки различия превосходят 23% (см. Таблицу 3.10).

3.4.4.4 Анализ чувствительности решений к штрафным коэффициентам

Значение параметра $\bar{\alpha} = 1 / \max\{\kappa_i, \kappa_e\}$ выбирается при реализации кулоновской калибровки $\nabla \cdot \psi = 0$ в объеме на основе метода штрафных функций. Как показано в работе [422], это оптимальный вариант для неоднородных сред, и для рассматриваемой задачи эта оценка также нашла свое подтверждение. Параметр штрафа $\bar{\alpha}_D$, введенный при численной реализации версии ГУ $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{S_D} = 0$ в форме $\varphi - \bar{\alpha}_D (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} - \bar{D}_n) = 0$, выбран равным $10^{14} \text{ м}^2/\Phi$. Значения штрафов $\bar{\alpha}_{\psi_i}$ и $\bar{\alpha}_{ie}$, используемых для граничных условий Дирихле $\mathbf{n} \times \psi|_{S_D} = \mathbf{0}$ и линейных ограничений $\psi_z|_{x=a} = -\gamma_1 / d = \text{const}$, равны $10^{20} \text{ м}^2/\Phi = 10^{12} \text{ м} \cdot \kappa_e^{-1}$ и $10^{14} \text{ м}^2/\Phi = 10^6 \text{ м} \cdot \kappa_e^{-1}$ соответственно. Правильный выбор значений штрафа зависит от многих факторов, таких как свойства материала, геометрия области, граничные условия и КЭ сетка. Хотя соответствующие оценки значений штрафа

могут быть получены на основе подробного анализа характеристик задачи, вышеупомянутые значения были определены эмпирически.

Диапазоны допустимых значений штрафных коэффициентов показаны на Рисунках 3.15а-с в виде областей с зеленой штриховкой. Результаты исследований показали, что $\bar{\alpha}_{\psi_i}$ должно быть больше $10^{-1} \text{ м} \cdot \kappa_e^{-1}$, $\bar{\alpha}$ варьируется в очень широком диапазоне, от $10^{-12} \kappa_e^{-1}$ до $10^{12} \kappa_e^{-1}$, коэффициенты $\bar{\alpha}_D$ и $\bar{\alpha}_{tie}$ варьируются в диапазоне от $10^{-1} \text{ м} \cdot \kappa_e^{-1}$ до $10^{10} \text{ м} \cdot \kappa_e^{-1}$. Диапазон допустимых штрафных коэффициентов для варианта **2** граничных условий шире, чем для варианта **1**. В интервале допустимых штрафных коэффициентов результаты соответствуют аналитическим решениям (Д.6), (Д.8) и (Д.10).

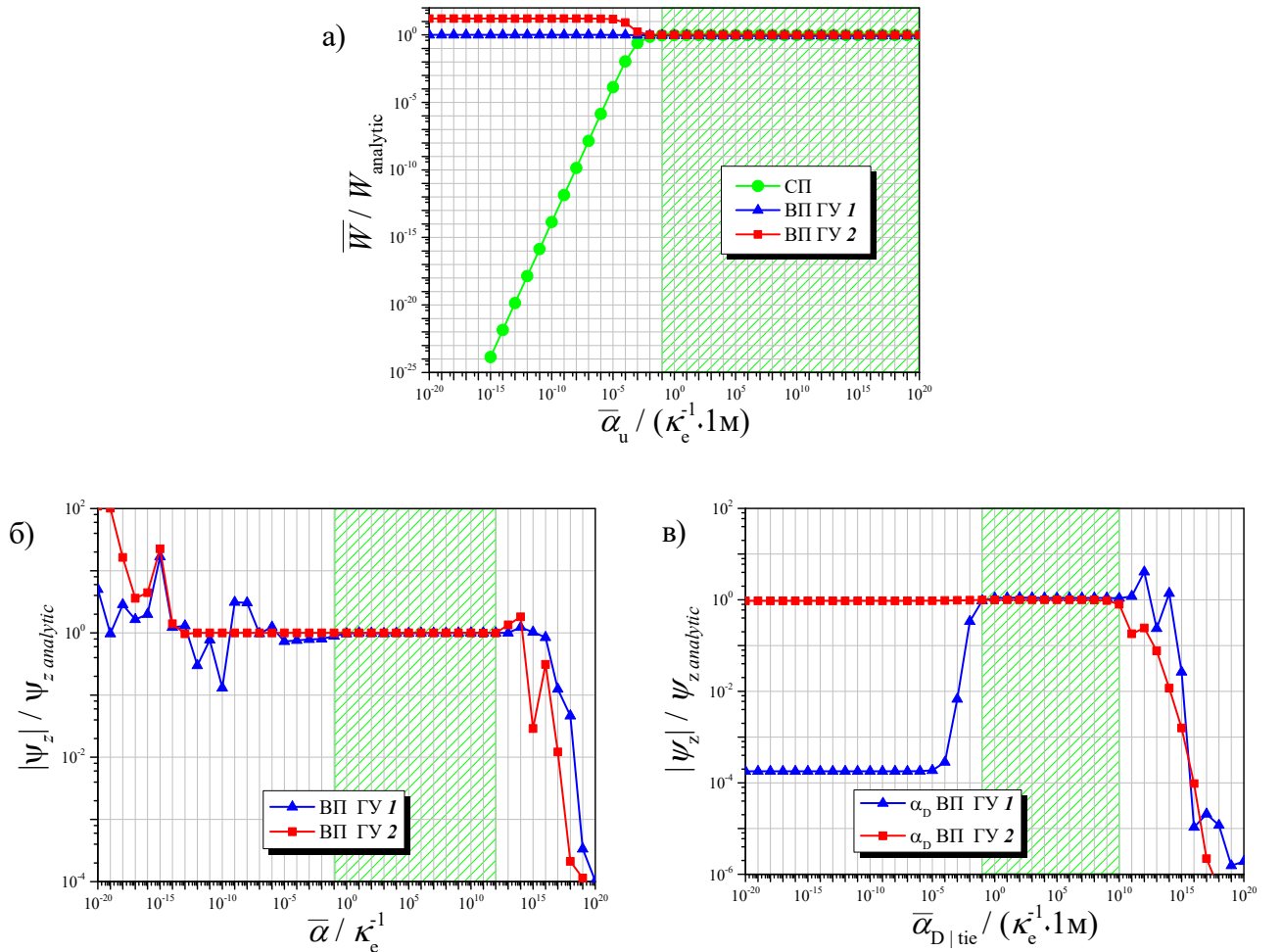


Рисунок 3.15 – Диапазон допустимых значений штрафных коэффициентов а) $\bar{\alpha}_{\psi_i}$, б) $\bar{\alpha}$, в) $\bar{\alpha}_D$ и $\bar{\alpha}_{tie}$ для граничных условий **1** и **2** в задаче о параллелепипеде с цилиндрическим включением

3.4.4.5 Анализ сходимости численного решения

Для оценки точности и скорости сходимости КЭ решения с измельчением сетки решен ряд краевых задач, допускающих аналитическое решение (см. Приложение Д). Для исключения погрешностей, вызванных конечностью области численного анализа на всех гранях использованы неоднородные ГУ, соответствующие аналитическим выражениям скалярных и векторных потенциалов (для СП формулировки: $\varphi|_S = \varphi_{analytic}$ (Д.2), для ВП формулировки: $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_S = \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}_{analytic}$ (Д.6)).

Относительная энергетическая норма невязки решения (3.113) используется для оценки численных ошибок. На Рисунке 3.16 показаны результаты для СП и ВП формулировок. Рассматриваются как 8-узловые, так и 20-узловые КЭ. Сравнение решений для разных сеток показывает, что СП и ВП формулировки демонстрируют одинаковые скорости сходимости относительно размера сетки h_e (Рисунок 3.16):

- 1,00 для 8-узлового элемента, ВП формулировка;
- 1,00 для 8-узлового элемента, СП формулировка;
- 1,86 для 20-узлового элемента, ВП формулировка;
- 1,91 для 20-узлового элемента, СП формулировка.

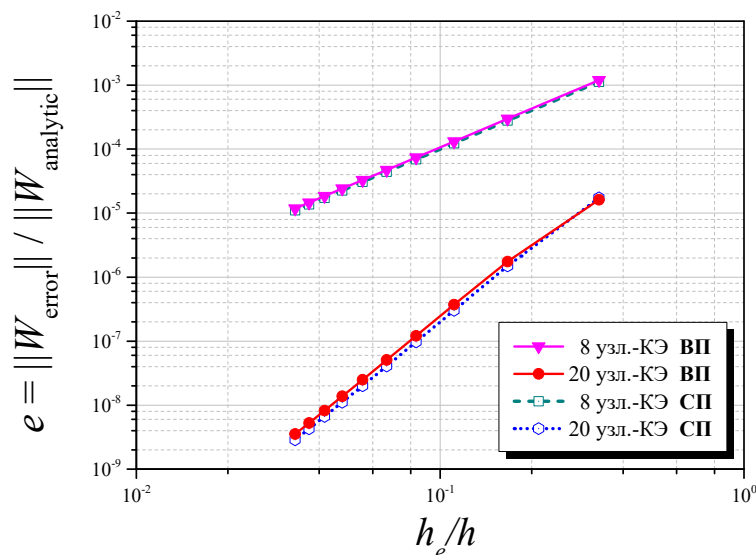


Рисунок 3.16 – Зависимость погрешности решения от размера КЭ сетки для параллелепипеда с цилиндрическим включением

3.4.5 Параллелепипед с периодическими сферическими включениями

3.4.5.1 Постановка задачи

Рассматривается электростатическая задача о плоском конденсаторе (параллелепипед с электродами на верхней и нижней гранях), содержащем периодическую в трех направлениях систему сферических включений с диэлектрической проницаемостью κ_i , внедренных в основной диэлектрический материал с проницаемостью κ_e .

Элементарным представительным объемом (ячейкой периодичности) композита является куб со стороной a , равной расстоянию между соседними центрами включений. Диэлектрические сферы радиуса $R = 1/4a$ подвергаются действию дальнего электрического поля E_∞ в направлении z .

3.4.5.2 Граничные условия / условия периодичности

Условия периодичности задавались на противоположных сторонах куба. С учетом наличия дополнительного дальнего поля они записываются для СП формулировки в общем виде (см. [340])

$$\phi|_{S^+} = \phi|_{S^-} - (\mathbf{r}^+ - \mathbf{r}^-) \cdot \mathbf{E}_\infty, \quad (3.120)$$

а для ВП формулировки предлагается использовать выражение (см. также (В.6)):

$$\psi|_{S^+} = \psi|_{S^-} + \frac{1}{2}(\mathbf{r}^+ - \mathbf{r}^-) \times \mathbf{D}_\infty. \quad (3.121)$$

В качестве S^+ и S^- рассматривается каждая из трех пар противоположащих параллельных сторон куба. Равенства (3.120) и (3.121) выполняются для каждой пары точек, расположенных на одной нормали на противоположащих сторонах куба.

Для рассматриваемого случая нагружения в z -направлении условия (3.120) и (3.121) допускают следующую конкретизацию:

$$\phi|_{x=a} = \phi|_{x=0}, \quad \phi|_{y=a} = \phi|_{y=0}, \quad \phi|_{z=a} = \phi|_{z=0} - aE_\infty \quad (3.122)$$

и

$$\begin{cases} \psi_x|_{x=a} = \psi_x|_{x=0} \\ \psi_y|_{x=a} = \psi_y|_{x=0} - \frac{a}{2}D_\infty \\ \psi_z|_{x=a} = \psi_z|_{x=0} \end{cases}, \quad \begin{cases} \psi_x|_{y=a} = \psi_x|_{y=0} + \frac{a}{2}D_\infty \\ \psi_y|_{y=a} = \psi_y|_{y=0} \\ \psi_z|_{y=a} = \psi_z|_{y=0} \end{cases}, \quad \begin{cases} \psi_x|_{z=a} = \psi_x|_{z=0} \\ \psi_y|_{z=a} = \psi_y|_{z=0} \\ \psi_z|_{z=a} = \psi_z|_{z=0} \end{cases}. \quad (3.123)$$

Одних и тех же результатов для СП и ВП формулировок можно ожидать в случае, когда $D_{\infty} = \kappa_{eff} E_{\infty}$, где $\kappa_{eff} = D_{eff} / E_{eff} = \int_{V_{RVE}} D_z dV / \int_{V_{RVE}} E_z dV$ - эффективная диэлектрическая проницаемость композита.

3.4.5.3 Сравнение точности решений для СП и ВП формулировок

КЭ модель ячейки периодичности включает 1944 элементов (половина модели представлена на Рисунке 3.17). Используются изопараметрические квадратичные 20-узловые элементы и схема интегрирования с 27 ($3 \times 3 \times 3$) гауссовыми точками.

КЭ решения получены для двух вариантов отношения диэлектрических модулей компонент композита: $\kappa_i = 1000 \kappa_e$ (приближение к случаю «сферический диэлектрик в воздухе») и $\kappa_i = \kappa_e / 10$ (приближение к случаю «сферическая полость в диэлектрике»). На Рисунке 3.17а, б, г, д показаны результаты КЭ расчетов распределения электрического поля E_z / E_{eff} в половине ячейки периодичности для СП и ВП формулировок. Распределения электрического поля для обеих формулировок практически идентичны (ср. Рисунок 3.17а с б и Рисунок 3.17г с д). В случае $\kappa_i = 1000 \kappa_e$ электрическое поле во включении меньше, чем в матрице, а при $\kappa_i = \kappa_e / 10$ больше. Электрическое смещение демонстрирует обратную тенденцию.

Распределение поля векторного потенциала (Рисунок 3.17в) соответствует граничным условиям 2с из примера 3.4.2. В случае $\kappa_i = \kappa_e / 10$ векторный потенциал во включении меньше, чем в матрице, а при $\kappa_i = 1000 \kappa_e$ больше.

Сравнение результатов КЭ расчетов D_z / D_{eff} в точке А для СП и ВП формулировок представлено в Таблице 3.11. Следует отметить, что $D_{eff} = D_{\infty}$ для ВП и $D_{eff} = \int_{V_{RVE}} D_z dV$ для СП. Разница между результатами составляет менее 4% для случая $\kappa_i = 1000 \kappa_e$ и менее 0,4% для случая $\kappa_i = \kappa_e / 10$. Эффективная диэлектрическая проницаемость $\kappa_{eff} = 1.21 \kappa_e$ для случая $\kappa_i = 1000 \kappa_e$ и $\kappa_{eff} = 0.918 \kappa_e$ для случая $\kappa_i = \kappa_e / 10$.

На Рисунке 3.18 показаны результаты КЭ расчетов распределения D_z / D_{eff} для СП и ВП формулировок. Наблюдается хорошее совпадение результатов, за исключением области резкого изменения границы между двумя материалами.

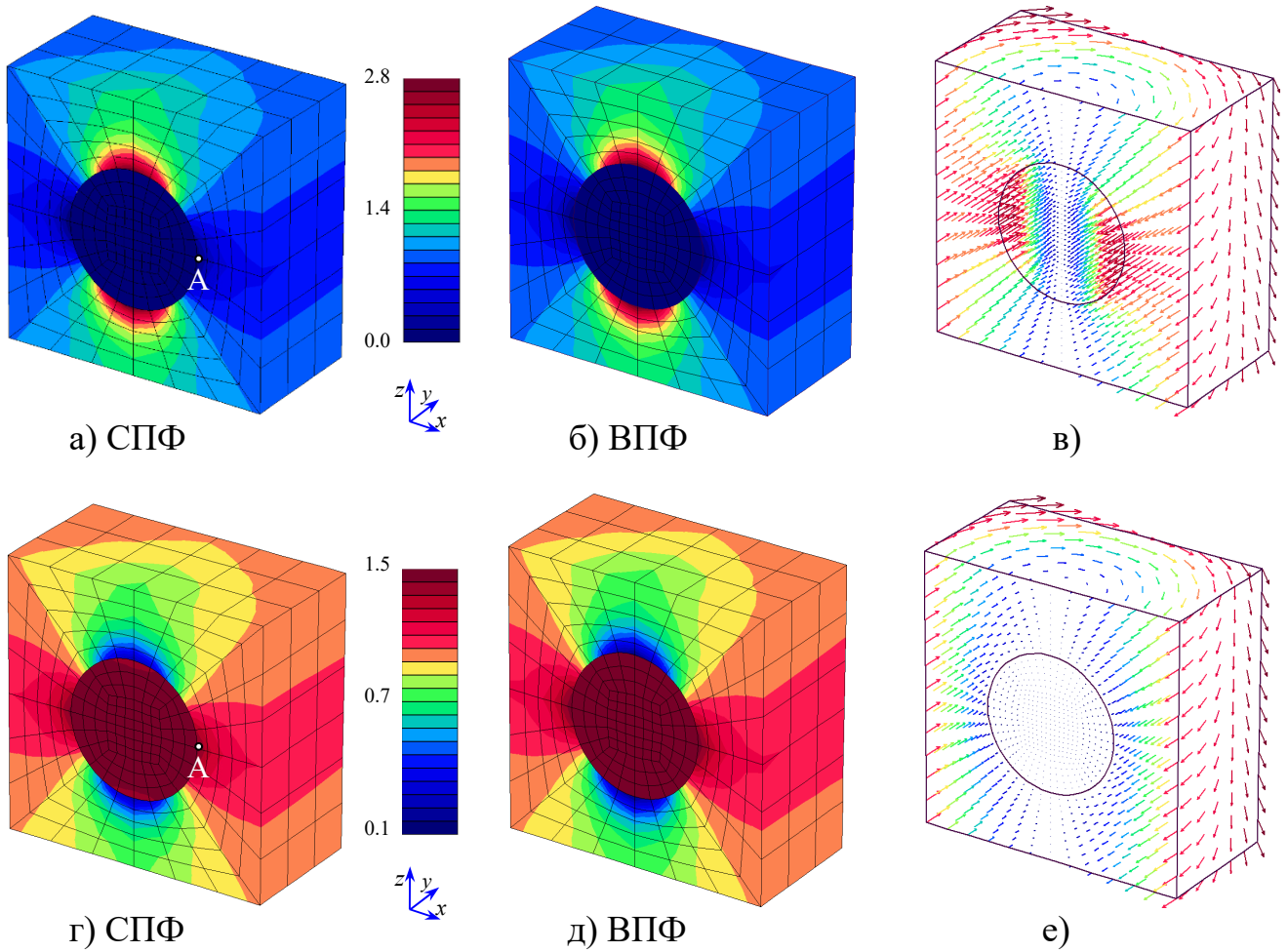


Рисунок 3.17 – Результаты КЭ расчетов распределения электрического поля E_z / E_∞ в ячейке периодичности со сферическим включением (показана только половина):

а) СПФ, $\kappa_i = 1000 \kappa_e$; б) ВПФ, $\kappa_i = 1000 \kappa_e$; г) СПФ, $\kappa_i = \kappa_e / 10$; д) ВПФ, $\kappa_i = \kappa_e / 10$.

Распределение векторного потенциала ψ для случаев: в) $\kappa_i = 1000 \kappa_e$; е) $\kappa_i = \kappa_e / 10$

Таблица 3.11 – Сравнение относительного электрического смещения D_z / D_{eff} в точке А (принадлежит включению, см. Рисунке 3.17а) для СП и ВП формулировок для параллелепипеда с периодическими сферическими включениями

	$\kappa_i = 1000 \kappa_e$		$\kappa_i = \kappa_e / 10$	
	Абсолютное значение	Отличие	Абсолютное значение	Отличие
ВП формулировка	2,515	3.6%	1,526	0.39%
СП формулировка	2,609		1,532	

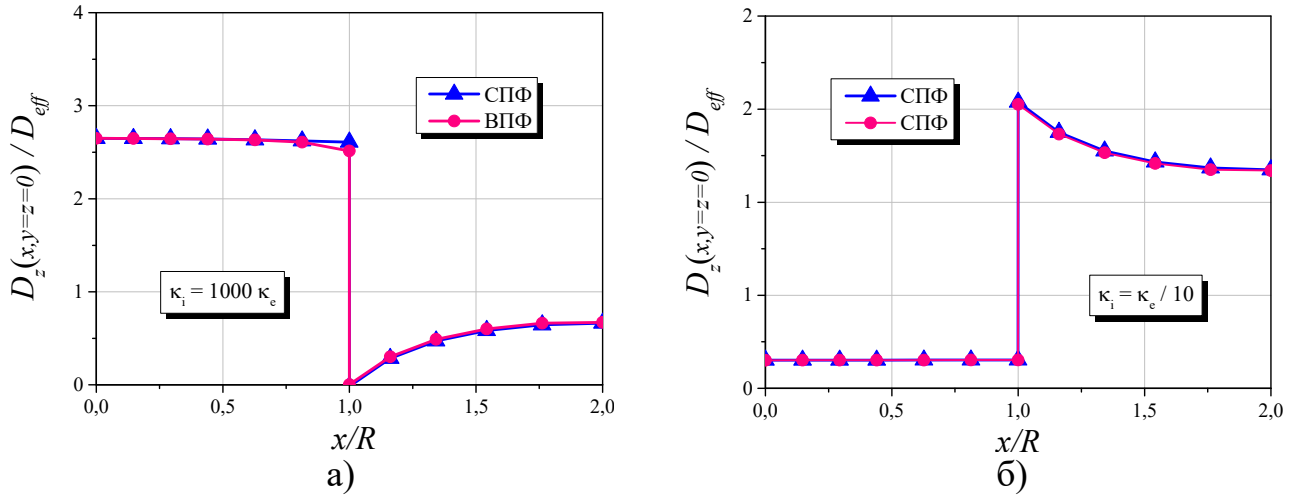


Рисунок 3.18 – Сравнение результатов КЭ расчетов электрического смещения D_z / D_{eff} вдоль линии $y = z = 0$, пересекающей границу раздела сред, для СП и ВП формулировок для случаев а) $\kappa_i = 1000 \kappa_e$ и б) $\kappa_i = \kappa_e / 10$ для ячейки периодичности со сферическим включением

3.4.5.4 Анализ чувствительности решений к штрафному коэффициенту $\bar{\alpha}_{tie}$

Диапазон допустимых значений штрафного коэффициента $\bar{\alpha}_{tie}$, введенного при численной реализации условий периодичности (3.122) и (3.123), представлен в виде областей с зеленой штриховкой на Рисунке 3.19. Схожее поведение наблюдается для СП и ВП формулировок. Следует отметить, что область допустимых значений $\bar{\alpha}_{tie}$ варьируется в очень широком диапазоне от $10^0 \kappa_e^{-1}$ до $10^{12} \kappa_e^{-1}$. Полученные результаты указывают на сходство с поведением $\bar{\alpha}_{tie}$ для других задач (см. Рисунки 3.9б и 3.15в).

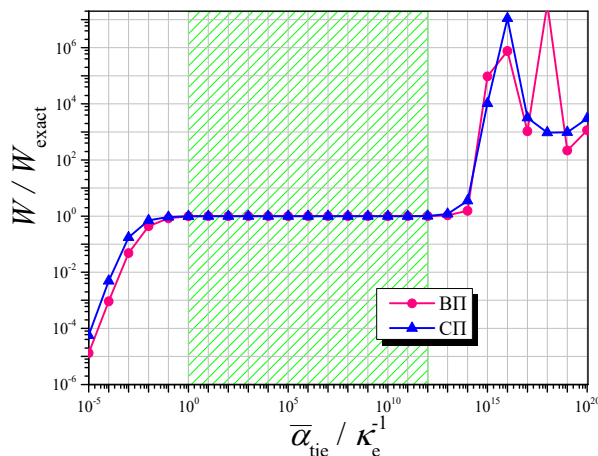


Рисунок 3.19 – Диапазон допустимых значений штрафного коэффициента $\bar{\alpha}_{tie}$ для ячейки периодичности со сферическим включением

3.4.5.5 Анализ сходимости численного решения

В случае $R \ll a$ влиянием соседних включений можно пренебречь и для оценки точности и скорости сходимости КЭ решения можно воспользоваться аналитическим решением задачи о сфере в однородном поле (см. Приложение Е). Для исключения погрешностей, вызванных конечностью области численного анализа, на всех гранях использованы неоднородные ГУ, соответствующие аналитическим выражениям скалярных и векторных потенциалов: для СП формулировки: $\varphi|_S = \varphi_{analytic}$, где $\varphi_{analytic}$ вычисляется на основе (Е.1), для ВП формулировки: $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}|_S = \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}_{analytic}$ по (Е.5)-(Е.7).

Относительная энергетическая норма невязки решения (3.113) используется для оценки численных ошибок. На Рисунке 3.20 показаны результаты для СП и ВП формулировок. Рассматриваются как 8-узловые, так и 20-узловые КЭ. Сравнение решений для разных сеток показывает, что СП и ВП формулировки демонстрируют одинаковые скорости сходимости относительно размера сетки h_e (Рисунок 3.20):

- 0,97 для 8-узловой элемента, ВП формулировка;
- 1,01 для 8-узловой элемента, СП формулировка;
- 2,55 для 20-узловой элемента, ВП формулировка;
- 2,48 для 20-узловой элемента, СП формулировка.

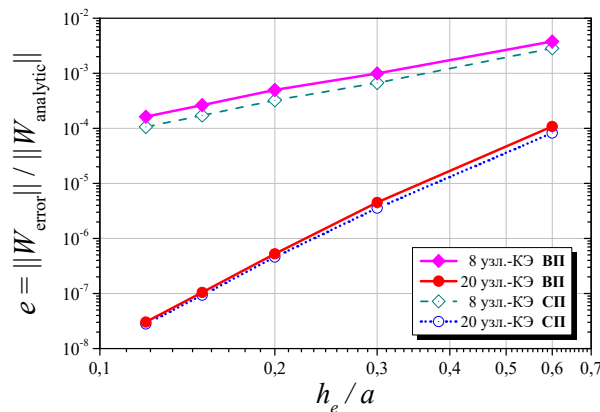


Рисунок 3.20 – Зависимость погрешности решения от размера КЭ для ячейки периодичности со сферическим включением

3.4.6 Поляризация пьезоэлектрической пластины с отверстием

Квадратная пластина размером $0,02 \text{ м} \times 0,02 \text{ м} \times 0,006 \text{ м}$ с центральным круговым отверстием диаметра $0,004 \text{ м}$ находится под действием электрической нагрузки, заданной в виде разности потенциалов $\Delta\varphi = 2\bar{\varphi}$, приложенной на двух противоположных сторонах. В силу симметрии в геометрии, симметрии и антисимметрии в нагрузке КЭ модель (см. Рисунок 3.21а) соответствует 1/8 исходной геометрии образца.

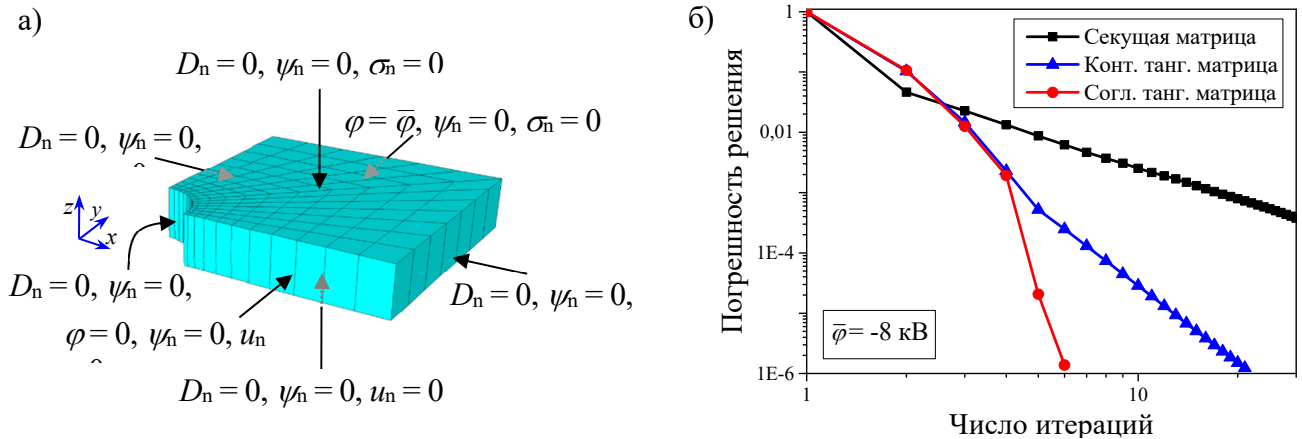


Рисунок 3.21 – Задача о поляризации квадратной пластины с центральным круговым отверстием: а) КЭ модель и ГУ, б) сходимость итерационных процедур для различных матриц жесткости

Плоскости симметрии зафиксированы в направлении нормали ($u_n = 0$) и свободны от заряда ($D_n = 0$). Используемый вариант ГУ соответствует типу **1** (см. Раздел 3.4.2, Таблицу 3.1). В расчетах использовались трехмерные восьмиузловые КЭ. Параметры материала соответствуют PZT-5H [426].

Сходимость итерационных процедур глобального метода Ньютона-Рафсона для различных матриц жесткости представлена на Рисунке 3.21б. Скорость сходимости при применении СМЖ является максимальной, и преобладание оказывается наиболее заметным при высоких уровнях нагрузки (см. в Таблицу 3.12).

Таблица 3.12 – Суммарное число итераций для КЭ процедур с континуальной матрицей жесткости (КМЖ) и согласованной матрицей жесткости (СМЖ) при различных уровнях нагрузки. Точность $\varepsilon = 10^{-4}$

$\bar{\varphi}$, кВ	-5	-8	-9	-10	-15
Число инкрементов	1	1	2	3	6
КМЖ	4	5	6	расходимость	расходимость
СМЖ	5	6	11	16	29

3.4.7 Четырехточечный изгиб образца с краевой трещиной

Рассматривается КЭ моделирование процесса разрушения пьезокерамических образцов с центральной краевой трещиной (Рисунок 3.22а), наблюдаемого в экспериментах [271] при четырехточечном изгибе в условиях сложного непропорционального комбинированного электромеханического нагружения. Образцы выполнены из сегнетопьезокерамики PZT PIC-151 [271]. Целью проведенного 3D сегнетоэлектроупругого КЭ анализа являлась оценка размера зон переключений (аналог зон пластичности) в момент разрушения. Результаты проведенных исследований позволяют определить условия, при которых можно ограничиться методами линейной механики разрушения в расчетах прочности пьезоэлектриков.

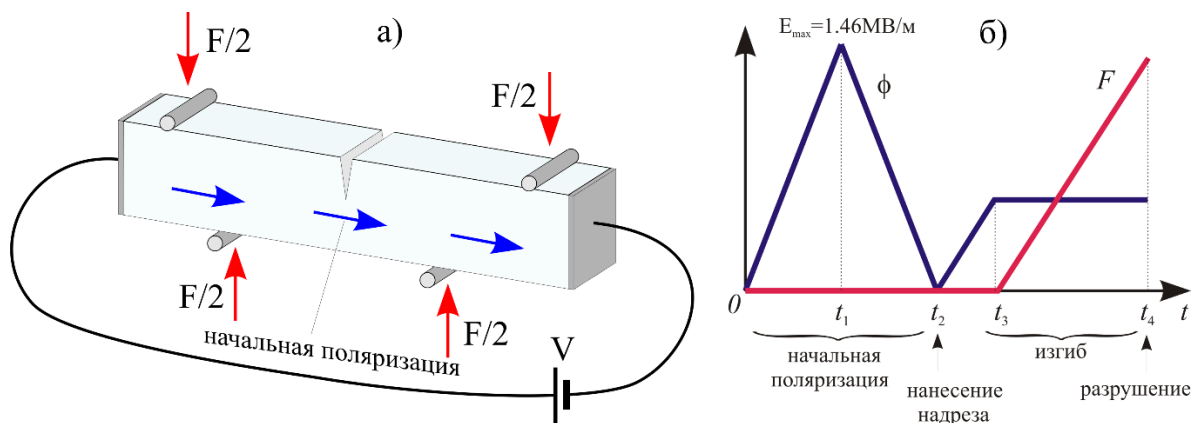


Рисунок 3.22 – Четырехточечный изгиб образца с трещиной: условия нагружения (а), программа нагружения (б)

Программа нагружения (Рисунок 3.22б) включала три этапа: (1) начальную поляризацию образцов без трещины в осевом направлении; (2) нанесение трещины (узкого выреза) заданной длины с последующим приложением электрического поля; (3) приложение возрастающей механической нагрузки вплоть до момента разрушения при постоянном электрическом поле. В расчетах принималось, что берега трещины являются непроводящими и свободными от механических нагрузок.

Получены КЭ решения для различных длин трещин и комбинаций электрической и механической нагрузок, соответствующие условиям проведенных экспериментов. Характерное распределение полей горизонтальных напряжений для трещины равной половине высоты и критической нагрузке $E = 0,45 \text{ MB/m}$, $F = 20 \text{ Н}$ представлено на Рисунке 3.23.

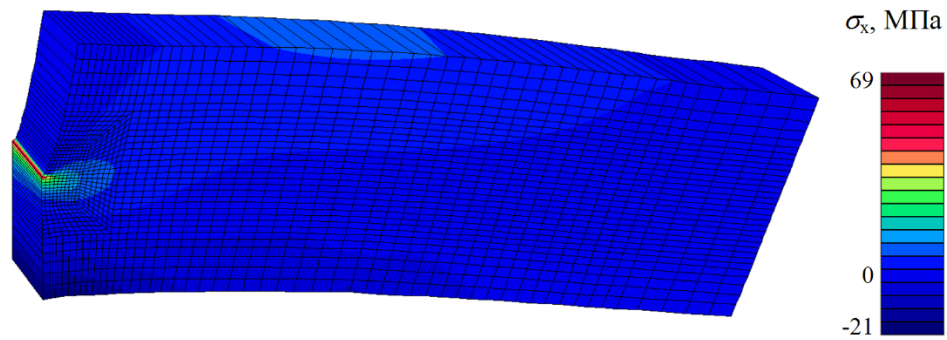


Рисунок 3.23 – Распределение полей горизонтальных напряжений в пьезоэлектрическом образце при четырехточечном изгибе ($E = 0,45$ МВ/м, $F = 20$ Н)

Эволюция зон переключений при различных уровнях механической нагрузки показана на Рисунке 3.24 для случая приложения электрического поля в направлении, противоположном начальной поляризации ($E = -0,15$ МВ/м). В этом случае в момент разрушения ($F_{cr} = 20$ Н [271]) в образце наблюдаются обширные зоны переключений, что указывает на необходимость использования методов нелинейной механики разрушения при анализе процесса разрушения образца в рассматриваемых условиях.

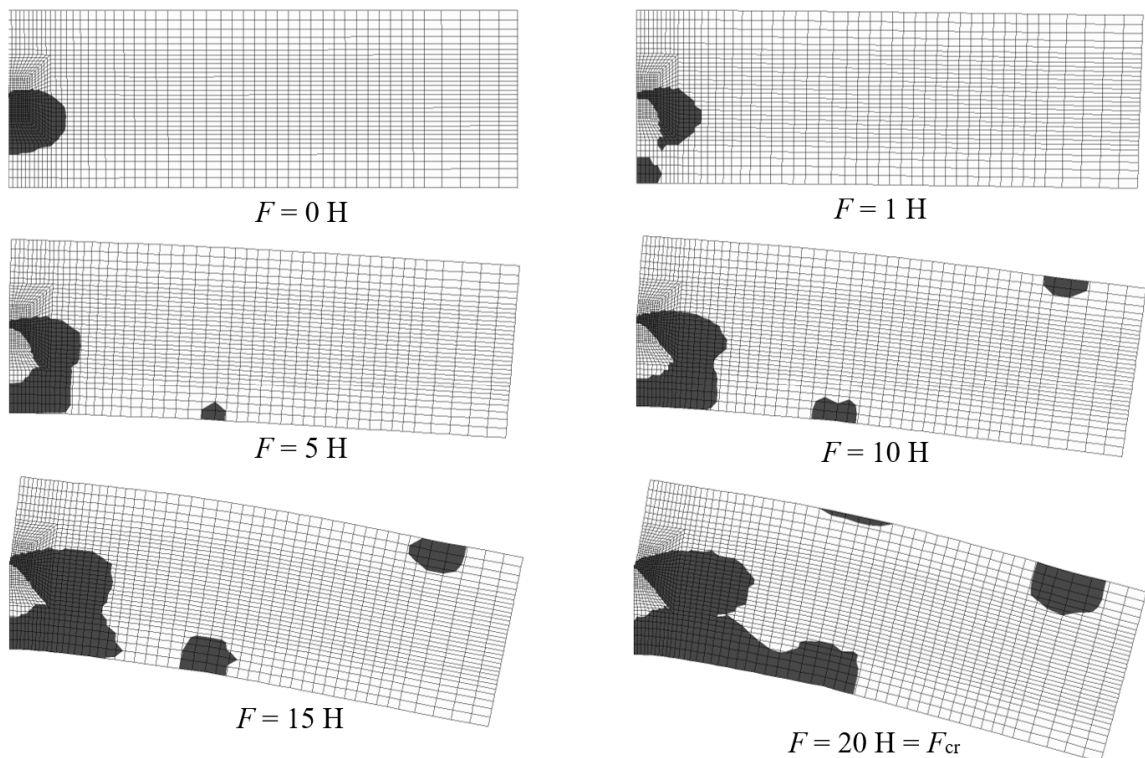


Рисунок 3.24 – Зоны переключений в образце с трещиной при четырехточечном изгибе для различных уровней механической нагрузки (электрическая нагрузка $E = -0,15$ МВ/м)

Однако, следует отметить, что при задании электрического поля, сонаправленного с начальной поляризацией ($E > 0$), зоны переключений имеют более локальный характер (см. Рисунок 3.25).

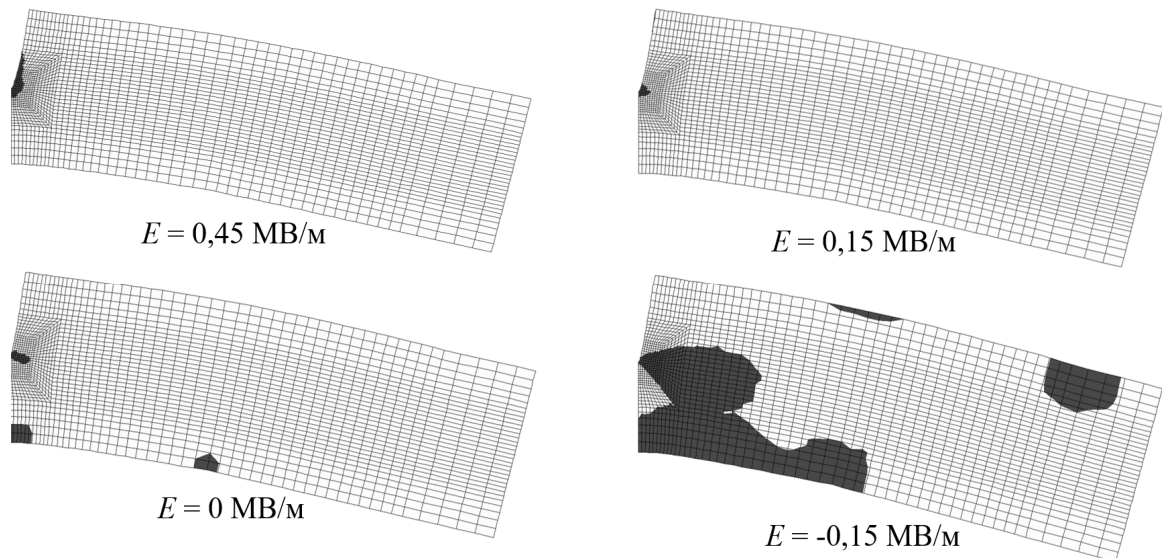


Рисунок 3.25 – Зоны переключений в образце с трещиной при четырехточечном изгибе для различных уровней электрической нагрузки (механическая нагрузка $F = 20 \text{ Н}$)

Все представленные решения получены с использованием ВП формулировки. Применение СП формулировки приводит к расходимости при тех же условиях нагружения. При использовании СМЖ число итераций на начальных инкрементах каждого шага на 25% меньше, чем при использовании КМЖ.

3.4.8 Многослойный сегнетоэлектрический актуатор

3.4.8.1 Постановка задачи

Актуаторы являются одними из наиболее распространенных пьезокерамических силовых устройств. В данном исследовании рассматривается связанная электромеханическая задача о восьмислойном пьезоэлектрическом актуаторе (Рисунок 3.26), результаты экспериментальных исследований процесса деформирования которого представлены в [499]. В многослойных актуаторах в окрестностях вершин внутренних электродов наблюдается концентрация механических напряжений и электрического поля, которые демонстрируют неоднородность и высокий уровень значений, что может приводить к процессам переключения доменов, а также к за-

рождению и распространению трещин [298, 409]. В связи с этим возникает необходимость использования численных методов для моделирования неоднородных механических и электрических полей в целях оценки прочности, долговечности и точности позиционирования.

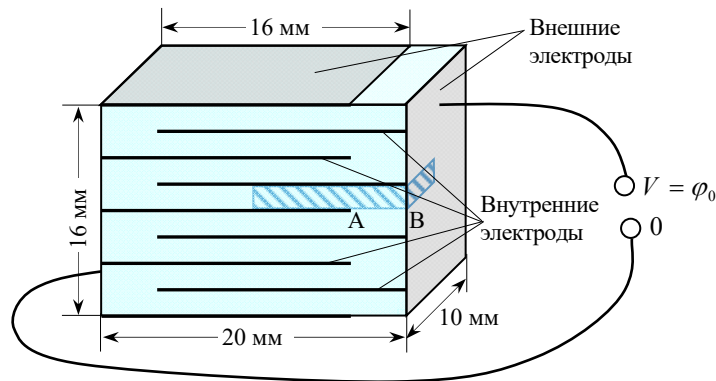


Рисунок 3.26 – Внешний вид восьмислойного пьезоэлектрического актуатора

3.4.8.2 Граничные условия

В соответствии с [499] рассматриваются два варианта конструкции многослойного актуатора:

- со сплошной межслойной периферийной перемычкой между вершиной горизонтального электрода и внешним вертикальным электродом (см. отрезок АВ на Рисунке 3.26);
- с несплошной межслойной перемычкой перед вершиной электрода, заполненной мягким воском, позволяющей снизить вертикальные напряжения в периферийной части актуатора.

ГУ для однослойной модели актуатора со сплошной и несплошной межслойной перемычкой представлены на Рисунках 3.27а и б соответственно. ГУ для этих вариантов отличаются только условиями на перемычке: вместо $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0$ в первом случае используется $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$ во втором, что фактически эквивалентно наличию трещины со свободными берегами на продолжении электрода (на правой части нижней грани).

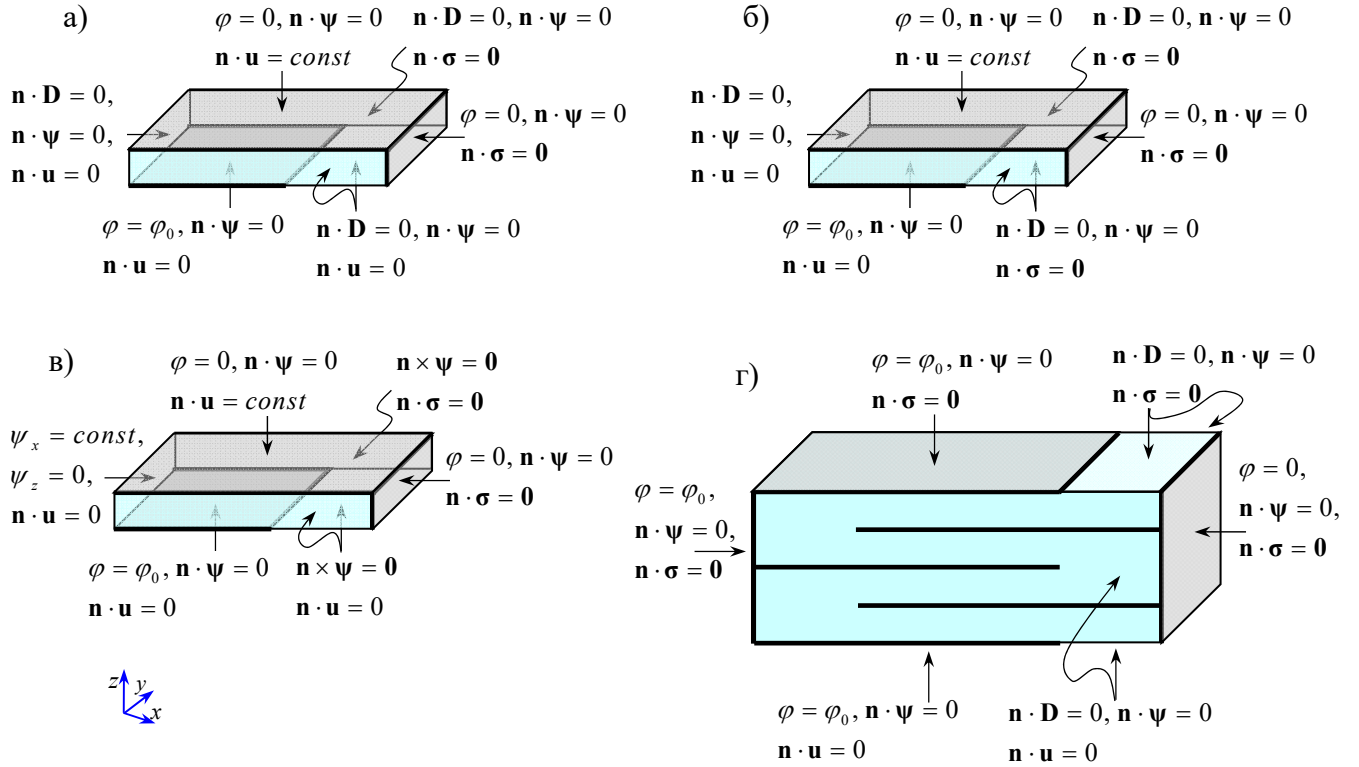


Рисунок 3.27 – Расчетные модели актуатора и соответствующие граничные условия:

- а) однослойная модель со сплошной перемычкой, ВП ГУ 1,
- б) однослойная модель с несплошной перемычкой, ВП ГУ 1,
- в) однослойная модель со сплошной перемычкой, ВП ГУ 2,
- г) четырехслойная модель со сплошной перемычкой, ВП ГУ 1

Также в целях поиска оптимального способа задания электрических ГУ для ВП формулировки для каждого из вариантов конструкции актуатора рассматривались два варианта ГУ. В качестве альтернативы представленному ранее на Рисунке 3.27а (соответствует ГУ 1 из Таблицы 3.1 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0, \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$) варианту на Рисунке 3.27в показан способ задания электрических ГУ с использованием ВП (соответствует ГУ 2 из Таблицы 3.1 $\mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi} = const$).

Кроме этого, для верификации упрощенной однослойной модели (Рисунок 3.27а), представляющей собой четверть отдельного слоя (показана штриховкой на Рисунке 3.26), рассматривалась четырехслойная расчетная модель для верхней части всего актуатора (Рисунок 3.27г). Упрощенная однослойная модель ранее использовалась в работах [227, 279, 499]. Для актуаторов с относительно небольшим количеством слоев условие $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = const$ является достаточно грубым приближением, поэтому в данном исследовании также рассматривалась четырехслойная модель.

3.4.8.3 Результаты расчетов

Результаты КЭ расчетов многослойного пьезоэлектрического актуатора на основе применения ВП формулировки показаны на Рисунках 3.28 и 3.29 для случая нагружения $\varphi_0=1800$ В. Полученный в КЭ расчетах характер пространственного распределения полей вертикальных перемещений в окрестности вершины электрода для обоих вариантов конструкции актуатора (см. Рисунок 3.29а и б) демонстрирует совпадение с результатами экспериментального определения при помощи метода цифровой корреляции спекл-изображений (DSCM) [499].

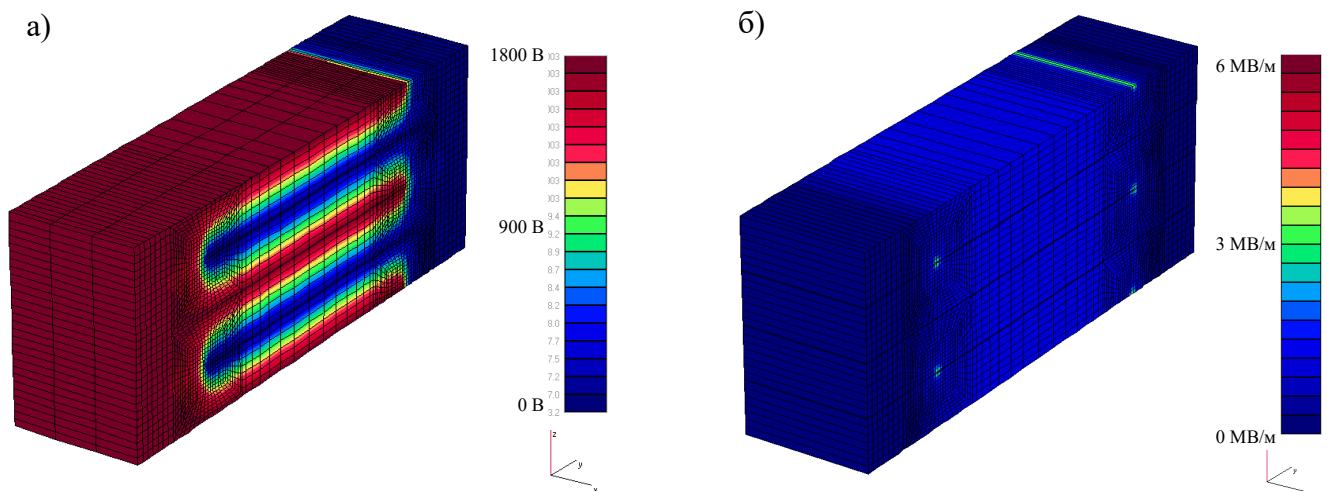


Рисунок 3.28 – Распределение полей а) электрического скалярного потенциала φ , б) модуля электрического поля $|E|$ в многослойном актуаторе (для расчетной модели, показанной на Рисунке 3.27г)

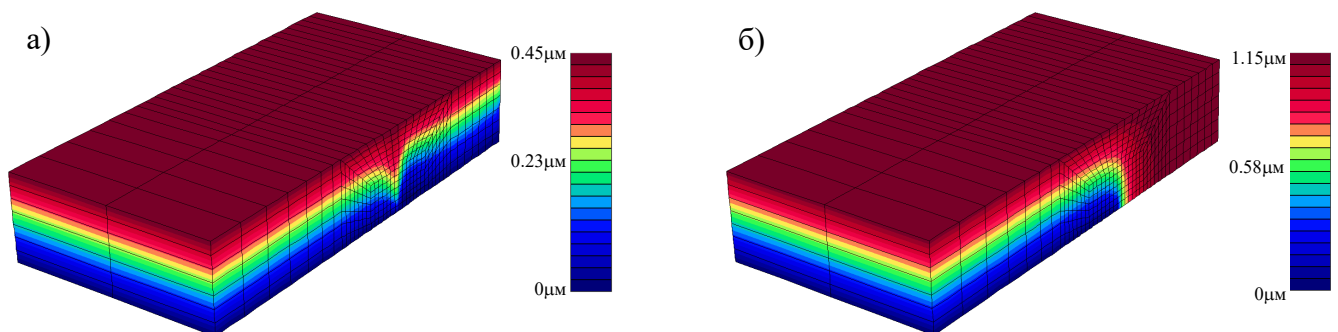


Рисунок 3.29 – Распределение полей вертикальных перемещений u_z в актуаторе с а) сплошной и б) несплошной межслойной перемычкой (для расчетной модели, показанной на Рисунке 3.27в)

Результаты КЭ расчетов электрических и механических полей с использованием ВП (с ГУ 1 и 2 типа) и СП формулировок на идентичных сетках оказались близки, что указывает на возможность использования ВП формулировки для анализа сложных структур с неоднородным распределением полей. Отличие результатов решений с использованием ВП и СП формулировок для перемещений составляет менее 0,03%, а для электрического поля - около 7%.

Результаты КЭ расчетов полей вертикальных напряжений для двух вариантов конструкции многослойного актуатора со сплошной и несплошной межслойной перемычкой представлены на Рисунках 3.30а и б соответственно. Полученные результаты указывают на преимущество второго варианта, поскольку для него характерен более низкий уровень напряжений в окрестности вершины электрода и отсутствие зоны повышенных напряжений в периферийной нерабочей части актуатора, благодаря наличию разрезов (несплошностей) в межслойной перемычке.

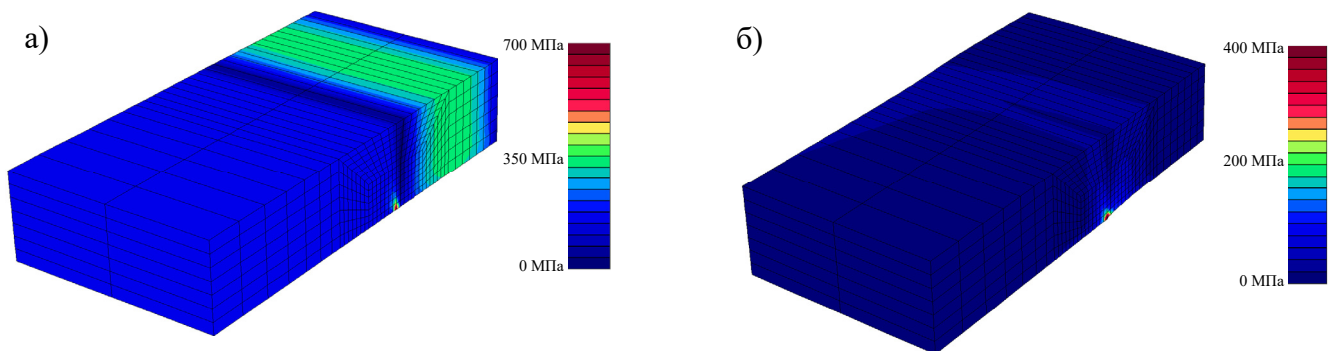


Рисунок 3.30 – Распределение полей интенсивности напряжений по Мизесу σ_i в актуаторе с а) сплошной и б) несплошной межслойной перемычкой

Относительные отклонения вертикальных перемещений, полученных с использованием упрощенной однослойной модели (Рисунок 3.27а) с ГУ $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = const$ на верхней грани, в сравнении с результатами более совершенной четырехслойной модели (Рисунок 3.27г) с ГУ $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ на верхней грани варьируются от 6% для электрода вблизи вертикальной плоскости симметрии до 11% на свободном краю актуатора (внешний вертикальный электрод).

Проведенное сравнение результатов 2D и 3D решений на совместных сетках показывает, что максимальное отличие в перемещениях составляет менее 0,7%, в интенсивности напряжений по Мизесу - около 10%, в интенсивности деформаций по Мизесу 3,9%, по величине электрического поля 8,5% и по величине электрического смещения - около 7,4%.

Решения краевых задач с использованием ВП формулировки с вариантами ГУ 1 (Рисунок 3.27а) и 2 (Рисунок 3.27в) продемонстрировали близость во всех рассмотренных случаях. Так, для конструкции актуатора со сплошной межслойной перемычкой при использовании однослойных расчетных моделей разница между решениями для максимальных вертикальных перемещений составляет менее 0,07%

(0,4478 мкм для варианта ГУ 1 и 0,4475 мкм для варианта ГУ 2). Оба значения хорошо согласуются со СП решением (0,4470 мкм). Пространственные распределения векторных потенциалов для ГУ 1 и 2 демонстрируют значительные отличия (ср. Рисунки 3.31а и б).

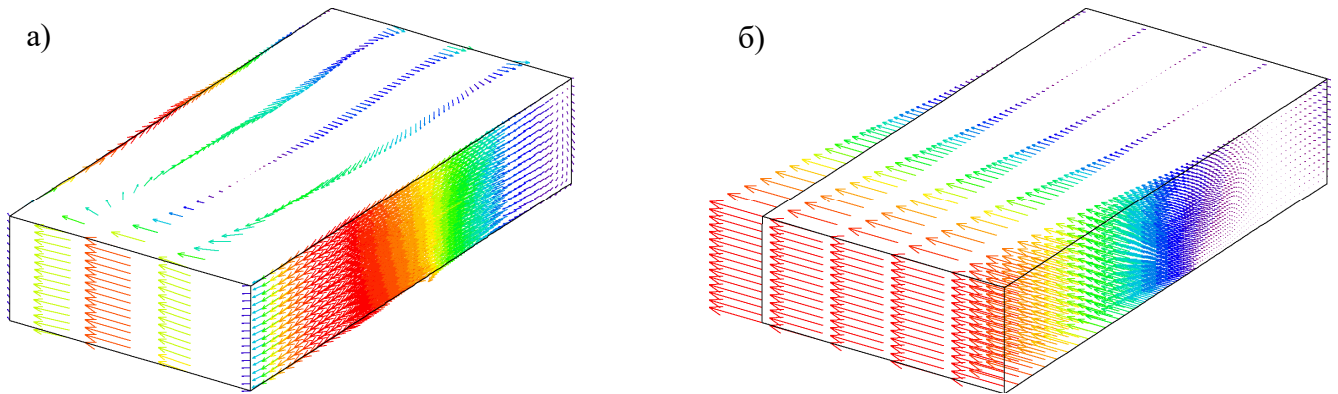


Рисунок 3.31 – Результаты КЭ расчетов полей электрического векторного потенциала ψ в актуаторе с различными вариантами ГУ: а) 1 (Рисунок 3.27а), б) 2 (Рисунок 3.27в)

3.5 Краткие выводы к главе 3

1. Использование стандартной СП вариационной формулировки при решении нелинейных краевых задач сегнетоэлектростатости приводит к проблемам со сходимостью итерационных процедур метода Ньютона-Рафсона. Для устранения указанного недостатка предложена и верифицирована *ВП вариационная формулировка*, соответствующая принципу виртуальной электромеханической работы и приводящая к положительно-определенной матрице жесткости. Решение краевой задачи с использованием ВП соответствует *минимуму* в пространстве узловых степеней свободы $\mathbf{u}$ и ψ , в то время как решение с использованием СП находится в *седловой точке* в пространстве узловых степеней свободы $\mathbf{u}$ и φ .
2. Для обеспечения единственности векторного потенциала, наряду с калибровкой в объеме, предложены и апробированы специальные виды граничных условий для односвязных и многосвязных областей.
3. В целях повышения точности интегрирования определяющих уравнений сегнетоэлектростатости и недопущения дрейфа решения от поверхности переключений предложен *метод возвратного отображения* (метод

наикратчайшей проекции, метод расщепления оператора на электроупругий предиктор и сегнетоэлектроупругий корректор), представляющий собой эффективную схему интегрирования нелинейных определяющих уравнений эволюционного типа при наличии ограничений.

4. Использование согласованных касательных модулей существенно для обеспечения квадратичной скорости асимптотической сходимости глобальной итерационной процедуры Ньютона-Рафсона. В работе найден согласованный касательный оператор на основе линеаризации дискретной задачи, соответствующей методу возвратного отображения.
5. Условия *выпуклости* свободной энергии и поверхности нагружения являются необходимыми для обеспечения положительной определенности континуальной и согласованной касательных матриц жесткости (устойчивости поведения материала), численной устойчивости итерационных процедур и единственности решения интегрирования определяющих уравнений.
6. Предложенные методы эффективного решения краевых задач сегнетоэлектроупругости, основанные на использовании ВП формулировки, метода возвратных отображений и согласованной матрицы жесткости, были реализованы в КЭ программном комплексе PANTOCRATOR, разработанном автором.
7. Верификация предложенных вариационных формулировок, способов задания граничных условий, методов решения нелинейных задач, произведенная на основе сравнения полученных результатов с аналитическими решениями, результатами экспериментов и альтернативными численными подходами, показала работоспособность используемых подходов для широкого класса задач различной размерности, топологии и условий нагружения. Исследована скорость сходимости численного решения и определены диапазоны допустимых значений штрафных параметров.

ГЛАВА 4. ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГОГО МАТЕРИАЛА

4.1 Верификация микроструктурных моделей

Для определения отклика поликристаллического сегнетоэлектроругого материала с использованием микроструктурных моделей с учетом взаимного влияния кристаллитов необходимо решение краевой задачи для элементарного представительного объема (ЭПО) поликристаллического агрегата. Формулировка краевой задачи с использованием микроструктурных моделей для представительного объема поликристалла включает уравнения баланса в объеме (1.68)-(1.71), граничные условия на внешней поверхности (1.44)-(1.45), (1.59)-(1.60) и определяющие уравнения (2.12)-(2.18), (2.41). В соответствии с используемой процедурой конечно-элементной (КЭ) гомогенизации искомые макроскопические (для поликристалла) механические и электрические переменные определяются на основе уравнений (2.1)-(2.5).

Микроструктурные модели сегнетоэлектроругого поведения материалов были реализованы автором в рамках КЭ программного комплекса PANTOCRATOR [84], на основе которого были проведены многочисленные вычислительные эксперименты для различных программ электромеханического нагружения ЭПО поликристалла.

4.1.1 Интерпретация кристаллитов в ЭПО

В качестве ЭПО поликристалла рассматривался куб (см. Рисунки 4.1 и 4.2). Для исследуемого класса гетерогенных сред с нерегулярной микронеоднородностью выбор ЭПО не является тривиальным. Поэтому при проведении вычислительных экспериментов рассматривались варианты с различным числом монокристаллов и различной интерпретацией кристаллита в КЭ модели ЭПО поликристалла:

- куб с полиэдрическими кристаллитами различной ориентации, каждый из которых разбит на несколько КЭ (Рисунок 4.1а);
- куб с нерегулярным разбиением на КЭ, каждый из которых рассматривался как отдельный полиэдрический кристаллит (Рисунок 4.1б);
- куб с регулярным разбиением на КЭ, каждый из которых рассматривался как отдельный кристаллит [381] (Рисунок 4.1в);

- куб с регулярным разбиением на КЭ, каждая Гауссова точка которых рассматривалась как отдельный кристаллит [321] (Рисунок 4.1г).

Ориентация кристаллитов генерировалась случайным образом (нормальное распределение в пределах полного телесного угла) путем задания углов Эйлера [321] ($\varphi = 2\pi Z_1$, $\theta = \arccos(1 - 2Z_2)$, $\psi = 2\pi Z_3$), где Z_1, Z_2, Z_3 – независимые случайные величины, изменяющиеся от 0 до 1.

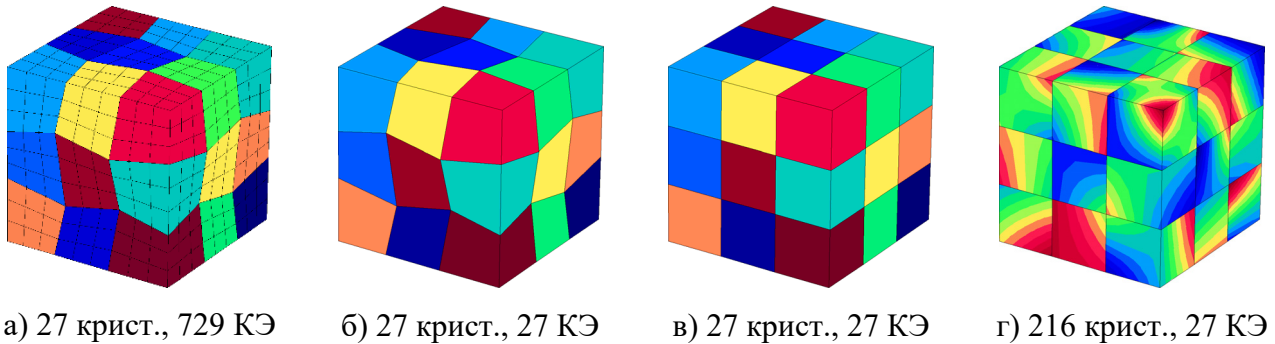


Рисунок 4.1 – Примеры ЭПО поликристалла с различными способами введения кристаллитов: а) состоящий из нескольких КЭ, б) одиночный КЭ нерегулярной формы, в) одиночный КЭ регулярной формы, г) Гауссова точка КЭ

На Рисунке 4.1 цветом показаны поля распределения угловых отклонений ориентаций [001] кристаллов от вертикали (цветовая палитра изменяется от 0 (синий цвет) до π (темно-красный цвет)). Эти распределения однородны в пределах одного КЭ в случае совпадения монокристалла с КЭ.

Сравнительный анализ моделирования гистерезисных кривых и начальной поверхности переключений показал, что при равном количестве степеней свободы дискретной модели преимуществом обладает вариант, показанный на Рисунке 4.1г. Он позволяет учесть взаимное влияние кристаллитов и ввести наибольшее количество различно ориентированных кристаллитов при меньшем количестве КЭ.

4.1.2 Влияние числа конечных элементов

При проведении вычислительных экспериментов рассматривались различные варианты ЭПО поликристалла с разбиениями от $1 \times 1 \times 1$ до $10 \times 10 \times 10$ КЭ, содержащих от 8 до 8 000 кристаллитов (см. Рисунок 4.2). В качестве кристаллита рассматривалась Гауссова точка КЭ.

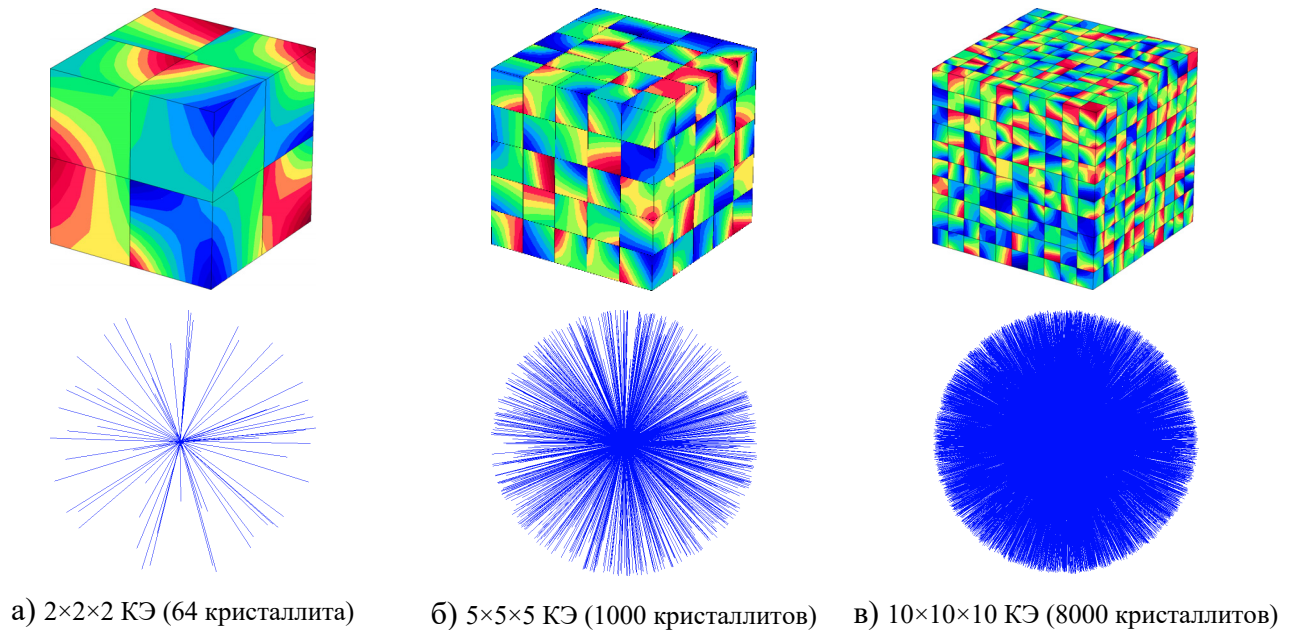


Рисунок 4.2 – Примеры ЭПО поликристалла с различным числом разбиений на КЭ.
Сверху - поля распределения угловых отклонений осей [001] кристаллов от вертикали,
снизу - вектора начальной ориентации [001] кристаллитов

Для каждого КЭ разбиения в целях получения статистических оценок производились расчеты для 20 различных вариантов генерации случайных ориентаций кристаллитов в ЭПО. При анализе кривых зависимости электрической индукции от задаваемой напряженности электрического поля (в цикле амплитудой 2 МВ/м) разброс уменьшался с ростом числа КЭ. Среднеквадратичное отклонение электрической индукции после цикла нагружения (для фазы цикла $E = 0$ МВ/м) составляло 4,0% от ее среднего значения для разбиения $1 \times 1 \times 1$; 1,4% - для $2 \times 2 \times 2$; 0,68% - для $3 \times 3 \times 3$; 0,36% - для $4 \times 4 \times 4$; 0,17% - для $5 \times 5 \times 5$. При анализе начальной поверхности переключения на плоскости $E_x - E_y$ среднеквадратичное отклонение радиуса составило 0,77% от его среднего значения для разбиения $1 \times 1 \times 1$; 0,29% - для $2 \times 2 \times 2$; 0,17% - для $3 \times 3 \times 3$; 0,11% - для $4 \times 4 \times 4$; 0,06% - для $5 \times 5 \times 5$. Полученные результаты указывают на высокую точность расчетов электрических величин даже с малым количеством КЭ. Погрешность менее 1% обеспечивается при разбиении $2 \times 2 \times 2$.

Относительное среднеквадратичное отклонение деформации оказалось много больше (на порядок) наблюдаемого для электрической индукции. Указанный эффект визуально заметен при сравнении расчетных кривых диэлектрического и электромеханического гистерезиса. В качестве примера на Рисунках 4.3а и б показаны гистерезисные кривые для 50 различных вариантов ориентаций кристаллитов в

ЭПО с разбиением $1 \times 1 \times 1$. Разброс в результатах стремительно уменьшается с ростом числа разбиений (ср. Рисунок 4.3 для $1 \times 1 \times 1$ с Рисунок 4.4 для $3 \times 3 \times 3$). Среднеквадратичное отклонение деформации после цикла нагружения амплитудой 2 МВ/м (при $E = 0$ МВ/м) составляло 29,5% от ее среднего значения для разбиения $1 \times 1 \times 1$; 11,9% - для $2 \times 2 \times 2$; 4,9% - для $3 \times 3 \times 3$; 2,9% - для $4 \times 4 \times 4$; 1,9% - для $5 \times 5 \times 5$.

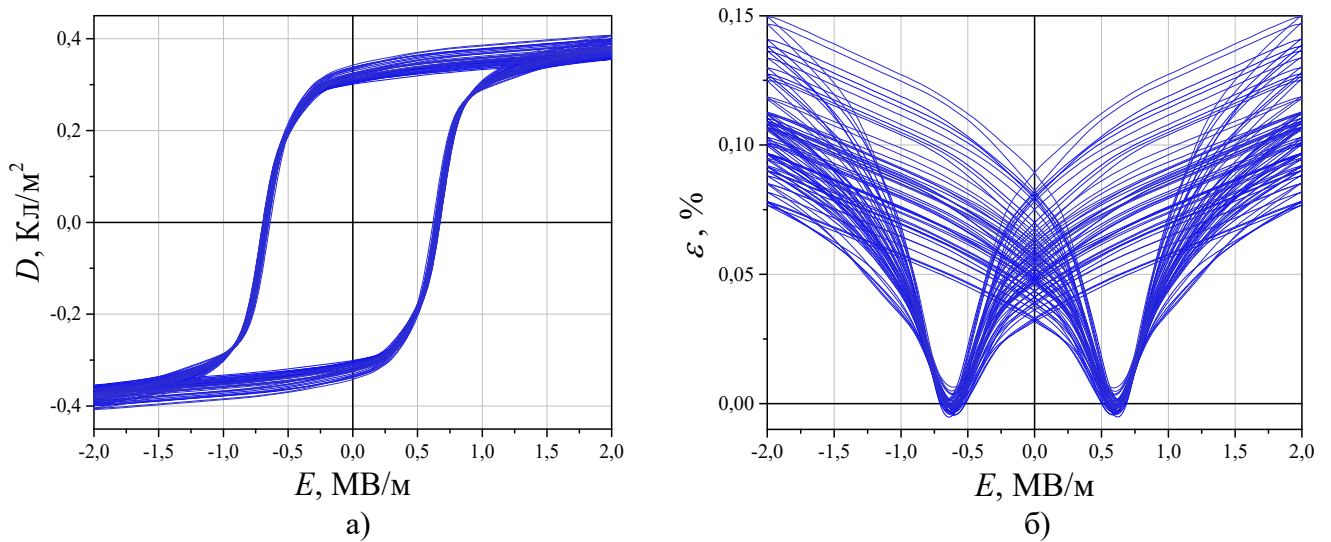


Рисунок 4.3 – Расчетные кривые а) диэлектрического и б) электромеханического гистерезиса (один цикл) для 50 различных вариантов ориентаций кристаллитов в ЭПО с разбиением $1 \times 1 \times 1$ (8 кристаллитов, 1 КЭ)

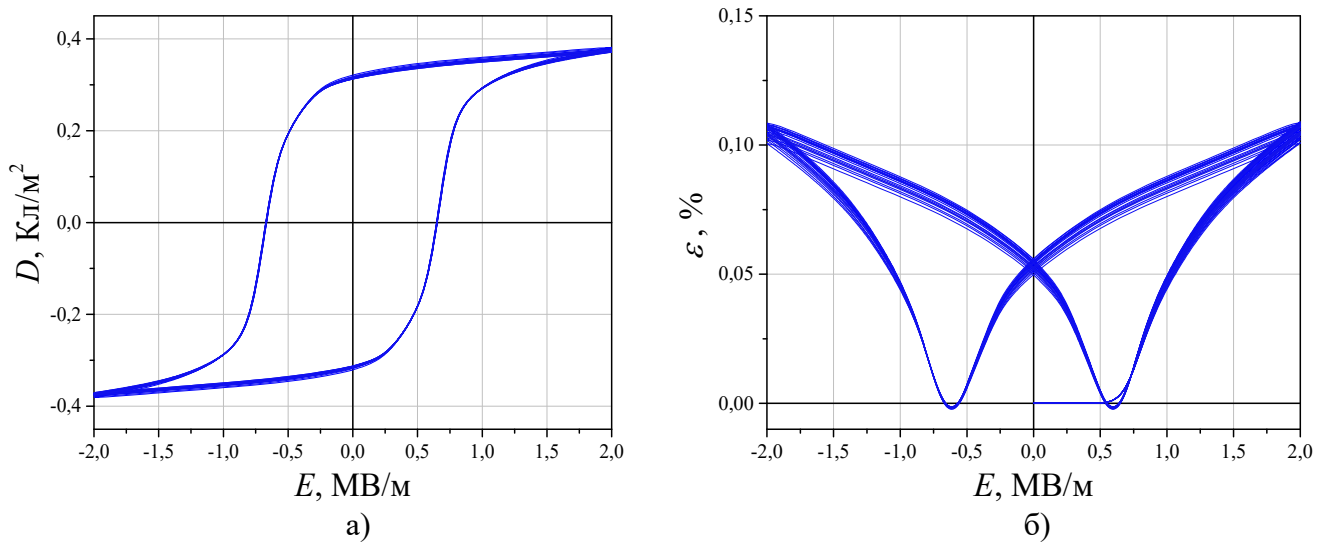


Рисунок 4.4 – Расчетные кривые а) диэлектрического и б) электромеханического гистерезиса (один цикл) для 50 различных вариантов ориентаций кристаллитов в ЭПО с разбиением $3 \times 3 \times 3$ (216 кристаллитов, 27 КЭ)

С ростом числа разбиений ЭПО резко увеличивается время решения задачи КЭ гомогенизации (см. Рисунок 4.5). Решение эволюционной нелинейной краевой

задачи моделирования гистерезисных кривых для сегнетоэлектрорупругого материала требует использования инкрементально-итерационных процедур, включающих тысячи шагов по времени (инкрементов по параметру нагружения). При проведении многовариантных вычислительных экспериментов поиск оптимального разбиения представляет компромисс между точностью и экономичностью решения. При разбиении ЭПО $3 \times 3 \times 3$ погрешность при вычислении деформаций составляет менее 5%, при вычислении электрической индукции – менее 0,2%.

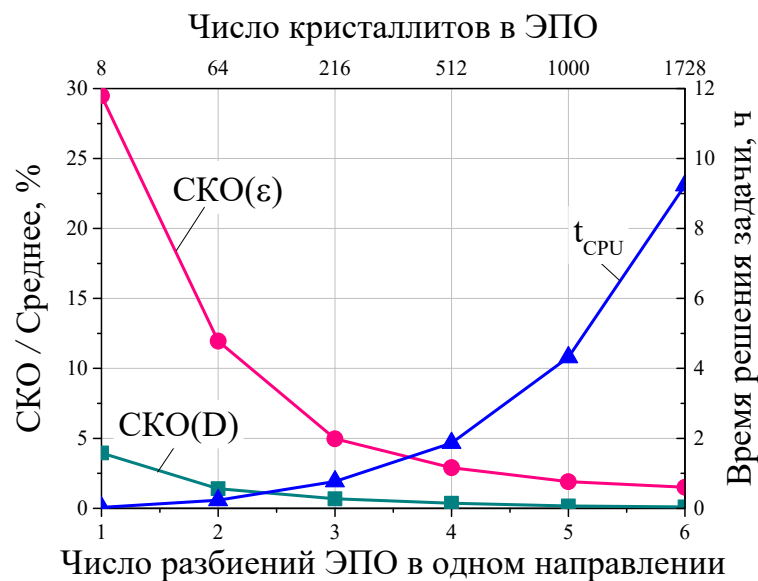


Рисунок 4.5 – Уменьшение среднеквадратичного отклонения деформации и электрической индукции и увеличение времени решения КЭ задачи с ростом числа разбиений

4.1.3 Сравнение результатов расчетов с использованием различных моделей

Для описания процессов переключения сегнетоэлектрорупругого материала в Разделе 2.1 в рамках микроструктурной модели были введены 3 варианта уравнений эволюции:

- (2.40) - *реономная модель с порогом переключения*, представляющая собой аналог *вязкопластической* модели,
- (2.41) - *реономная модель без порога переключения*, представляющая собой аналог нелинейной *вязкоупругой* модели,
- (2.42) - *склерономная модель с порогом переключения*, представляющая собой аналог *упругопластической* модели.

Первые две (реономные) модели материала являются, в отличие от третьей (склерономной), чувствительными к скорости нагружения (темповозависимыми).

Однако они путем выбора соответствующих параметров материала (см. Раздел 2.1.1.3), так же как и третья модель, могут быть использованы для описания квазистатических режимов нагружения, наиболее характерных при эксплуатации сенсоров и актуаторов. В качестве иллюстрации подобной возможности на Рисунке 4.6 представлено сравнение трех перечисленных выше моделей при моделировании поведения поликристаллической сегнетопьезокерамики (ЭПО с разбиением $3 \times 3 \times 3$) при электрическом циклическом нагружении амплитудой 2 МВ/м со скоростью нагружения $\dot{E} = 0,08$ МВ/м·с ($t_{\text{ц}} = 100$ сек; $f = 0,01$ Гц).

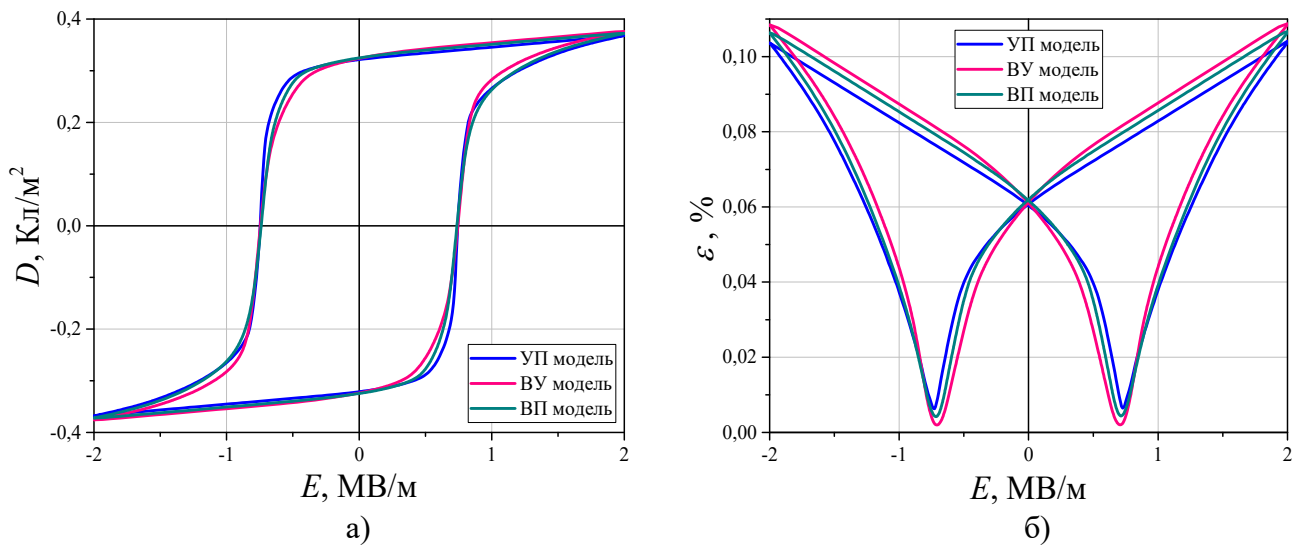


Рисунок 4.6 – Сравнение прогнозов реономных моделей (с порогом переключения (ВП) и без порога переключения (ВУ)) с результатами склерономной модели с порогом переключения (УП) при описании: а) диэлектрического гистерезиса и б) электромеханического гистерезиса

В расчетах использовалась микроструктурная модель материала с тетрагональной структурой со следующими константами материала: для *реономной версии модели без порога переключения* $G_c^{90} = 0,5$ МДж/м³, $n = 20$; для *реономной модели с порогом переключения* $G_c^{90} = 0,4$ МДж/м³, $n = 1$; для *склерономной модели с порогом переключения* $G_c^{90} = 0,43$ МДж/м³, $H^{90} = 0,01$ МДж/м³. Остальные параметры у всех рассмотренных моделей выбирались одинаковыми (см. Таблицу 4.3).

Все модели продемонстрировали близость прогнозов при сравнении диэлектрического (Рисунок 4.6а) и электромеханического (Рисунок 4.6б) гистерезиса в условиях медленного квазистатического нагружения. Поэтому в дальнейшем при

верификации микроструктурных моделей исследования будут ограничены рассмотрением только одного варианта, в качестве которого выбран наиболее экономичный в КЭ расчетах вариант *реономной модели без порога переключения*.

Детальный анализ поведения трех рассматриваемых математических моделей для монокристаллических материалов при электрическом и механическом нагружении представлен в Приложении Б.

Учет наличия большого количества произвольно ориентированных кристаллитов в поликристаллическом сегнетоэлектрострикционном материале в рамках данного исследования производится на основе КЭ гомогенизации, позволяющей учесть взаимное влияние кристаллов. Важность учета совместности деформаций и взаимного влияния кристаллитов на поведение сегнетопьезокерамики детально обсуждается в Разделе 5.1. Ниже, в качестве иллюстрации существенных отличий, показаны результаты сравнения с альтернативными подходами. На Рисунке 4.7 показано сравнение диэлектрического и электромеханического гистерезиса для:

- одиночного монокристалла ориентации $[001]$ (6 доменов),
- модели простого осреднения деформаций и поляризации 216 кристаллитов (1296 доменов) с равномерным распределением их ориентаций в пределах телесного угла в предположении равенства напряжений и электрического поля во всех кристаллах (приближение Рейсса),
- КЭ гомогенизации ЭПО (разбиение $3 \times 3 \times 3$, 216 кристаллитов, 1296 доменов) с учетом взаимного влияния кристаллитов.

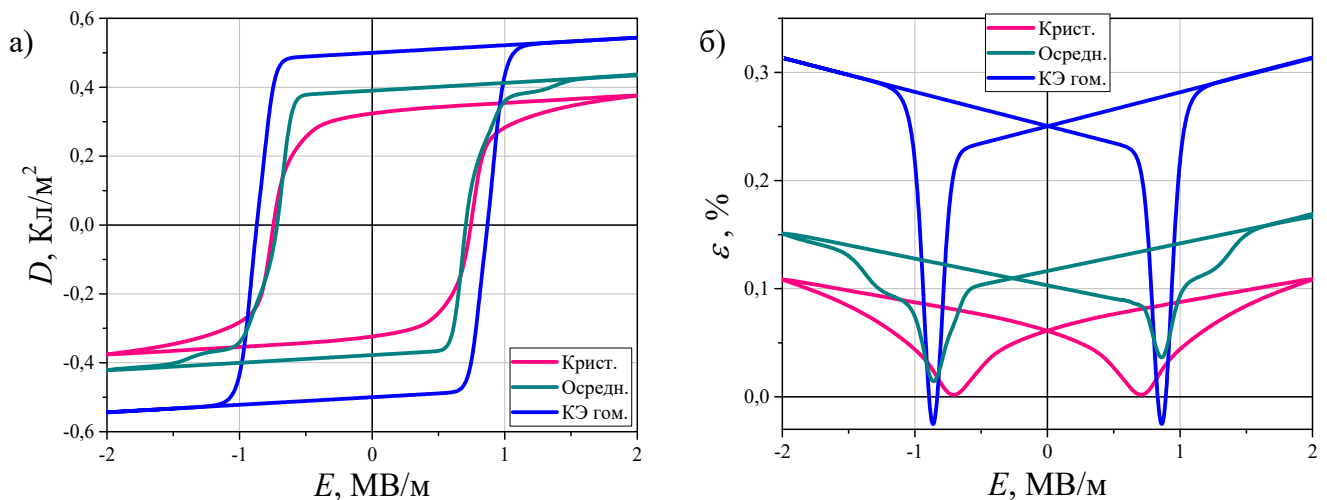


Рисунок 4.7 – Сравнение а) диэлектрического гистерезиса и б) электромеханического гистерезиса для монокристалла (6 доменов), модели простого осреднения отклика (216 кристаллитов, 1296 доменов), модели КЭ гомогенизации ЭПО поликристалла (216 кристаллитов, 1296 доменов)

В расчетах использовалась микроструктурная реономная модель материала без порога переключения, обладающая тетрагональной структурой. Константы материала для всех рассматриваемых вариантов осреднения выбирались одинаковыми (см. Таблицу 4.3). Условия нагружения соответствуют описанным выше (используемым при получении результатов, показанных на Рисунке 4.6).

Как видно из Рисунка 4.7, результаты модели монокристалла и простого осреднения в отличие от КЭ гомогенизации демонстрируют достижение состояния насыщения при нагрузке 2 МВ/м, что приводит к более высокому уровню остаточной поляризации и деформации. Наиболее разительные отличия в прогнозах моделей наблюдаются при сравнении кривых электромеханического гистерезиса. Остаточная деформация в модели КЭ гомогенизации в 4 раза меньше спонтанной деформации, наблюдаемой для модели монокристалла. Остаточная деформация в модели простого осреднения составляет в 2 раза меньше спонтанной деформации. Взаимное влияние кристаллитов приводит к сглаживанию кривых гистерезиса и понижению остаточных характеристик.

4.1.4 Сравнение результатов расчетов с использованием однофазной модели поликристалла с экспериментальными данными

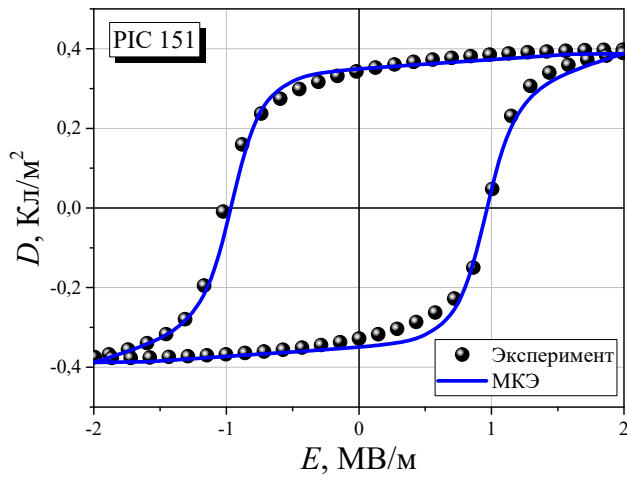
Идентификация параметров микроструктурных моделей может осуществляться как на основе данных опытов на макроуровне (то есть аналогично феноменологическим моделям по гистерезисным кривым), так и на основе данных микроструктурных характеристик материала (например, P_0 и ε_0), определяемых параметрами кристаллической решетки. Второй путь является более предпочтительным, однако на практике редко употребим по причине отсутствия в полном объеме необходимых экспериментальных данных, их чувствительности к малым примесям и температурному воздействию, нестабильности отдельных фаз в чистом виде. В рамках этого раздела 4.1.4 будет рассмотрена верификация однофазной модели тетрагонального поликристалла с идентификацией параметров в соответствии с первым подходом, а затем в следующем разделе 4.1.5 будет предпринята попытка срав-

нения экспериментальных данных с результатами расчетов по двухфазной микроструктурной модели тетрагональной/ромбоэдрической смеси с константами материала, определенными в соответствии со вторым подходом на основе данных измерения параметров кристаллической решетки.

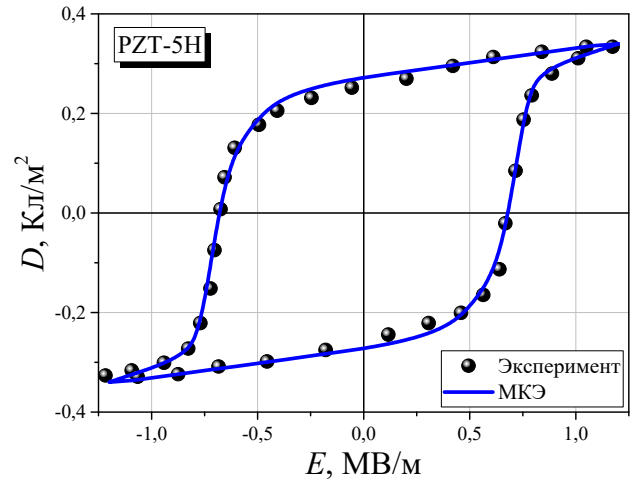
На Рисунке 4.8 представлено сравнение результатов КЭ моделирования поведения поликристаллической сегнетопъезокерамики (представительный объем с разбиением $3 \times 3 \times 3$) при циклическом нагружении ($t_{\text{ц}} = 100$ сек, $f = 0,01$ Гц) с результатами экспериментов для шести различных материалов: PIC 151 [502], PZT-5H [254], PLZT 8/65/35 [341], PZT-51 [208], PZT-4D [433] и BaTiO₃ [433]. Во всех случаях наблюдаются лишь незначительные отклонения результатов расчета от эксперимента, что указывает на возможность использования рассматриваемой модели материала для адекватного описания диэлектрического гистерезиса поликристаллических сегнетопъезоматериалов. Расчеты выполнялись с использованием однофазной модели тетрагонального поликристалла с идентификацией параметров на основе данных опытов на макроуровне. Найденные в результате проведения многовариантных вычислительных экспериментов параметры рассматриваемых материалов приведены в Таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Константы материалов, используемые в КЭ расчетах с применением однофазной тетрагональной модели

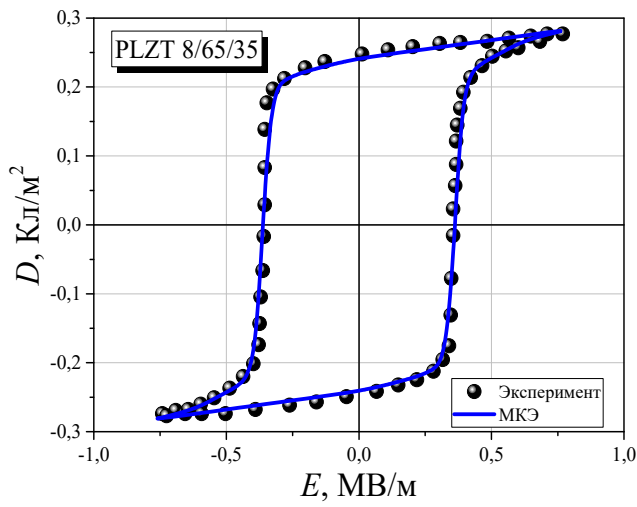
Величина	Символ	Размерность	PIC 151	PZT-5H	PLZT	PZT-51	PZT-4D	BaTiO ₃
Упругие модули	C_{3333}^E C_{1133}^E	ГПа	126 53,3	74,9 33,6	165 94,5	126 55,0	139 74,3	150 60,0
Диэл. проницаемость	κ_{33}^σ	нФ/м	22	88	56,3	53,1	9,8	10,7
Пьезоэлектр. модуль	d_{333}	пм/В	315	2200	594	1520	291	1900
Спонт. поляризация и деформация	P_0 ε_0	Кл/м ² %	0,56 0,3	0,48 0,3	0,35 0,05	0,42 0,3	0,38 0,3	0,15 0,3
Крит. движ. сила	G_c^{90}	МДж/м ³	0,450	0,360	0,165	0,360	0,640	0,150
Коэфф. вязкости	B^{90}	1/с	0,00015	0,05	1	0,05	1	1
Показатели степени уравнения эволюции	n m	- -	12 2,5	15 1,5	21 1,4	10 1,2	7 4,5	5 6
Параметр насыщения	C_0	-	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01



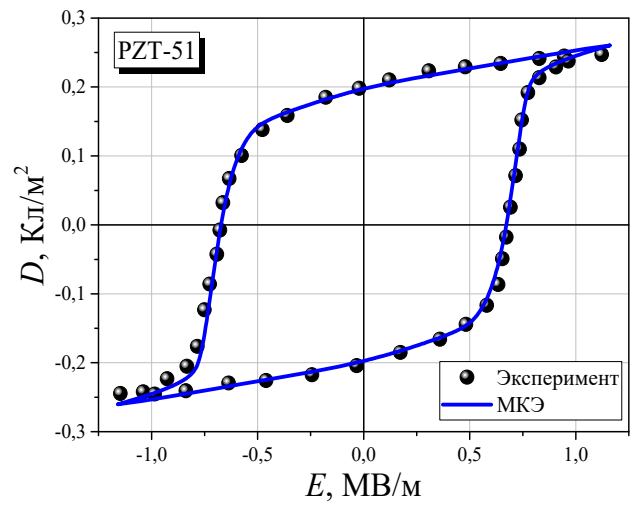
а)



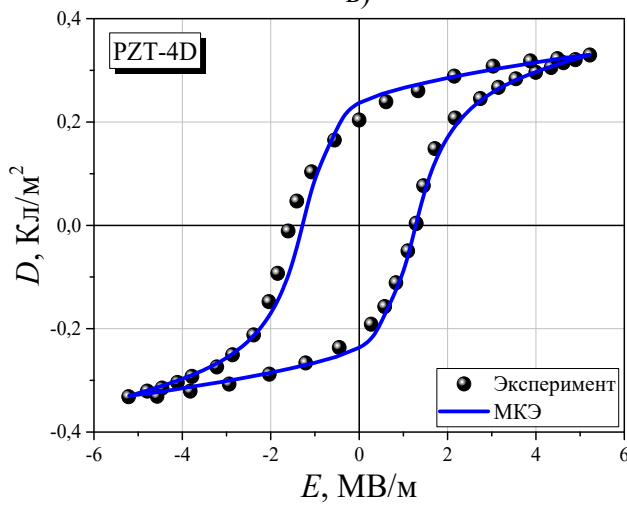
б)



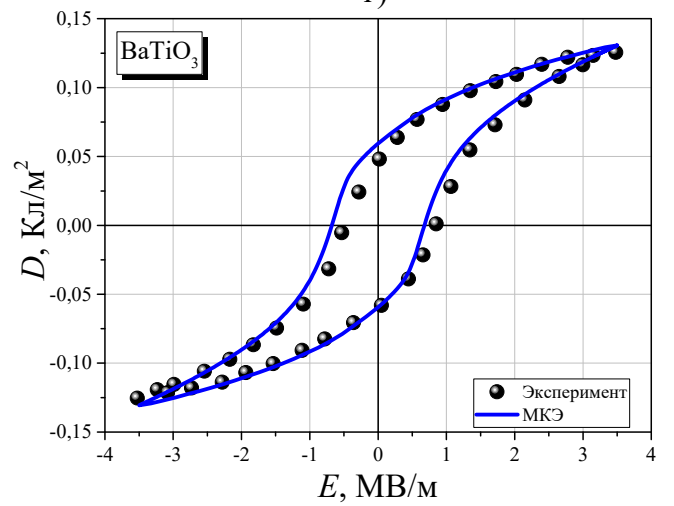
в)



г)



д)



е)

Рисунок 4.8 – Сравнение результатов КЭ расчетов (тетрагональная модель) с экспериментами для шести материалов: а) PZT PIC 151, б) PZT-5H, в) PLZT 8/65/35, г) PZT-51, д) PZT-4D и е) BaTiO₃

4.1.5 Сравнение результатов расчетов с использованием двухфазной модели поликристалла с экспериментальными данными

Современная сегнетопъезокерамика на основе ЦТС (PZT, бинарный твердый раствор цирконата-титаната свинца $(1-x) \text{PbZrO}_3 \text{ — } x \text{PbTiO}_3$ ($0 < x < 1$)) производится с составом, соответствующим морфотропной фазовой границе (МФГ), когда одновременно соприисутствуют две фазы: тетрагональная (PbTiO_3) и ромбоэдрическая (PbZrO_3). При комнатной температуре МФГ проходит в области $x \approx 47\div 48\%$ [113]. Использование композиций ЦТС вблизи МФГ связано с экстремальными значениями диэлектрической проницаемости, пьезоэлектрических коэффициентов, остаточной деформации и поляризации. Учет обеих фаз при формулировке микроструктурных моделей необходим для адекватного описания поведения PZT сегнетопъезокерамики вблизи МФГ.

Ниже представлены результаты верификации двухфазной микроструктурной модели тетрагональной/ромбоэдрической (Т/Р) смеси с константами материала, определенными на основе данных измерения параметров кристаллической решетки. Для определения координат узлов решетки используются методы рентгеноструктурного анализа (рентгеновская дифрактометрия) или нейтронной спектроскопии [270, 372]. Определенные подобным образом значения спонтанной деформации по изменению размеров решетки элементарной ячейки (на основе уравнения (1.1)) для PZT керамики вблизи морфотропной границы при комнатной температуре для тетрагональной и ромбоэдрических фаз соответствуют $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ и $\varepsilon_0^R = 0,55\%$ [270, 368, 372]. Для расчета спонтанной поляризации недостаточно только определения положения ионов в элементарных ячейках, поскольку существуют дополнительные вклады ковалентных связей. Поэтому в работах [242] для уточненного расчета спонтанной поляризации монокристаллов используются также термодинамические модели, основанные на энергии Ландау-Гинзбурга, приводящие для PZT к значениям $E_d \sim 1/Q^P$ [242, 368]. Остальные параметры материала, используемые ниже в КЭ расчетах поведения ЭПО поликристаллической пьезокерамики PZT PIC151 с применением модели двухфазной Т/Р смеси, представлены в Таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Используемые в КЭ расчетах с применением модели двухфазной Т/Р смеси константы материала

Величина	Сим-вол	Размерность	PIC 151
Упругие модули	C_{3333}^E C_{1133}^E	ГПа	150 65,3
Диэл. проницаемость	κ_{33}^σ	нФ/м	22
Пьезоэлектр. модуль	d_{333}	пм/В	415
Объемная доля Т-фазы	c_T	-	0,17
Спонтанная поляризация	P_0^T P_0^P	Кл/м ²	0,47 0,47
Спонтанная деформация	ε_0^T ε_0^P	%	1,91 0,55
Критическая движущая сила	$G_c^{T,90}$ $G_c^{P,71}$	МДж/м ³	0,500 0,500
Коэфф. вязкости	B	1/с	1
Показатели степени уравнения эволюции	n m	- -	12 2,5
Параметр насыщения	C_0	-	0,01

На Рисунке 4.9 представлено сравнение результатов КЭ моделирования поведения поликристаллической сегнетопьезокерамики (представительный объем с разбиением $3 \times 3 \times 3$) при циклическом электрическом нагружении ($t_{\text{ц}} = 100$ сек, $f = 0,01$ Гц) с результатами экспериментов D. Zhou для PIC 151 [502].

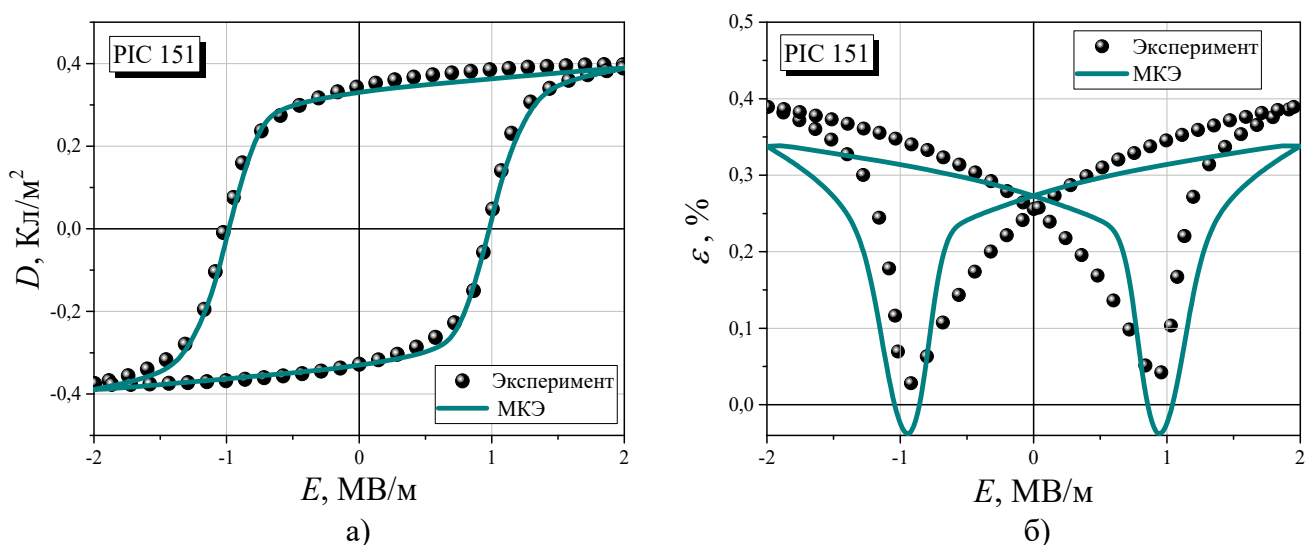


Рисунок 4.9 – Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментом [502] для PZT PIC 151:
а) диэлектрический гистерезис, б) электромеханический гистерезис

Расчетная кривая диэлектрического гистерезиса (Рисунок 4.9а) демонстрирует хорошее совпадение с результатами эксперимента. Точность в прогнозировании кривой электромеханического гистерезиса в форме "бабочки" (Рисунке 4.9б) несколько ниже.

Представленный на Рисунке 4.10 результат указывает на возможности рассматриваемой модели для идентификации по данным опытов на макроуровне. Однако в дальнейших расчетах будет использоваться рассмотренный ранее вариант (см. Таблицу 4.2) физически обоснованных значений спонтанных деформаций $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ и $\varepsilon_0^R = 0,55\%$, полученных на основе данных измерения параметров кристаллической решетки.

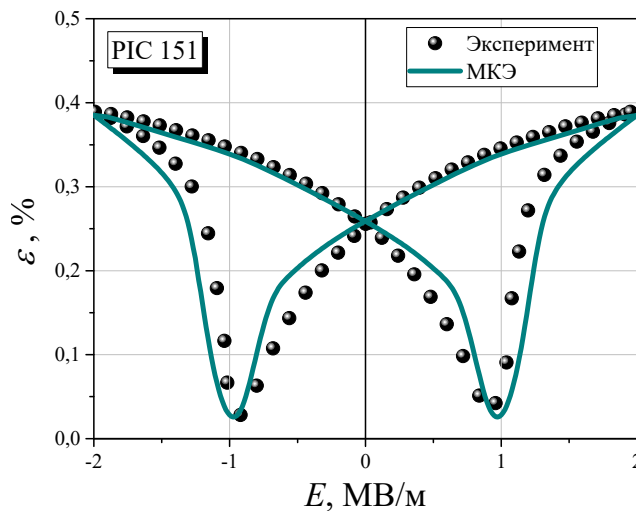


Рисунок 4.10 – Сравнение результатов КЭ расчетов электромеханического гистерезиса (двух-фазная модель Т/Р смеси с модифицированными параметрами $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 1,2\%$ и $d_{333} = 1 \text{ нм/В}$) с экспериментом [502] для PZT PIC 151

Следует отметить, что удовлетворительного совпадения кривых электромеханического гистерезиса с результатами эксперимента удастся добиться только при использовании модели, учитывающей наличие и тетрагональной, и ромбоэдрической фаз, что подтверждают результаты работы [368]. Использование микромеханических моделей с реальными константами и при учете только тетрагональной фазы приводит к заниженным уровням (2÷4 раза) остаточных деформаций (см. Рисунок 5.31). Детальный анализ причин подобного эффекта произведен в разделе 5.

На Рисунке 4.11 представлено сравнение результатов КЭ моделирования нелинейного поведения при сжатии до 400 МПа с последующей разгрузкой до 0 ($t_{\text{нагр}} = 160 \text{ сек}$) с результатами экспериментов для неполяризованной керамики PIC 151 [502]. Рассматривалось одноосное механическое воздействие в условиях

отсутствия внешнего электрического поля. Расчетные кривые для продольной (Рисунок 4.11а) и поперечной (Рисунок 4.11б) деформаций демонстрируют удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента.

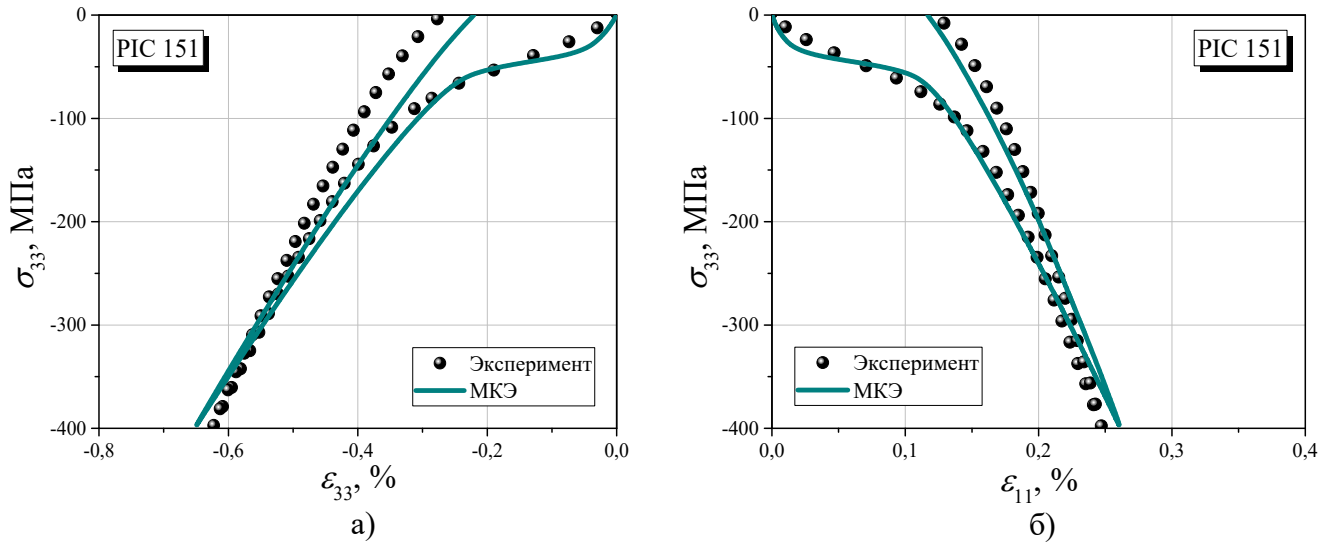


Рисунок 4.11 – Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментами [502] на сжатие *неполяризованной* PZT PIC 151 керамики: а) продольная деформация–продольное напряжение, б) поперечная деформация–продольное напряжение

Аналогичные результаты для *поляризованной* керамики (предварительное электрическое воздействие 2 МВ/м с разгрузкой до 0, приводящее к остаточной деформации $\epsilon_{33}^r = \epsilon_{33}|_{E=0} = 0,276\%$ и остаточной поляризации $P_3^r = D_3|_{E=0} = -0,349$ Кл/м²) показаны на Рисунке 4.12.

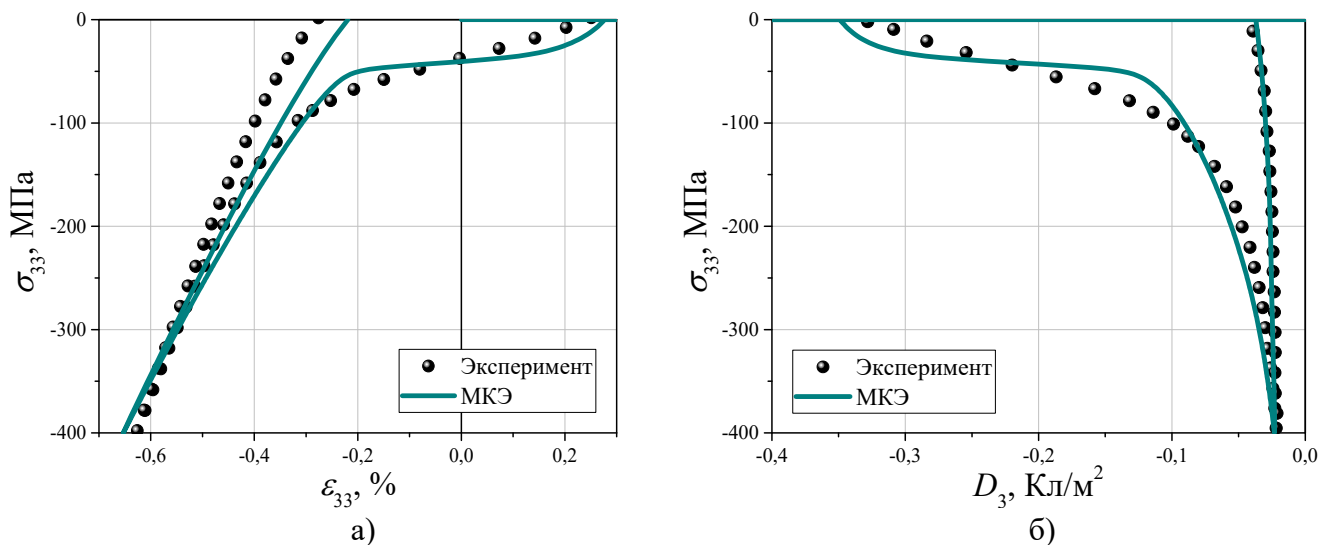


Рисунок 4.12 – Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментами [502] на сжатие *поляризованной* PZT PIC 151 керамики: а) кривая сжатия с разгрузкой, б) кривая деполяризации

Остаточная деформация после полуцикла сжатия начально поляризованной керамики оказалась равной остаточной деформации неполяризованной керамики (ср. Рисунки 4.11а и 4.12а). Материал восстанавливает форму, фактически «забывая» начальную поляризацию. В рассмотренном выше случае механического воздействия на неполяризованную керамику изменения поляризации не происходит – среднее значение поляризации для поликристалла остается равным нулю. Для поляризованной керамики в результате механического сжимающего воздействия вдоль оси начальной поляризации наблюдается деполяризация (Рисунок 4.12б) – изменение осевой поляризации до значений, близких к 0. При этом наблюдаются переключения, отличные от 180° . Следует отметить высокую точность при моделировании кривой механической деполяризации при помощи двухфазной модели. Отличие расчетного и экспериментальных значений поляризации после снятия сжимающих напряжений составляет менее 1,2% от начального уровня поляризации.

Кривые *реполяризации*, характеризующие изменение деформаций при электрическом воздействии после предварительного сжатия до -400 МПа с разгрузкой до 0 (и последующим циклическим электрическим нагружением), показаны на Рисунке 4.13.

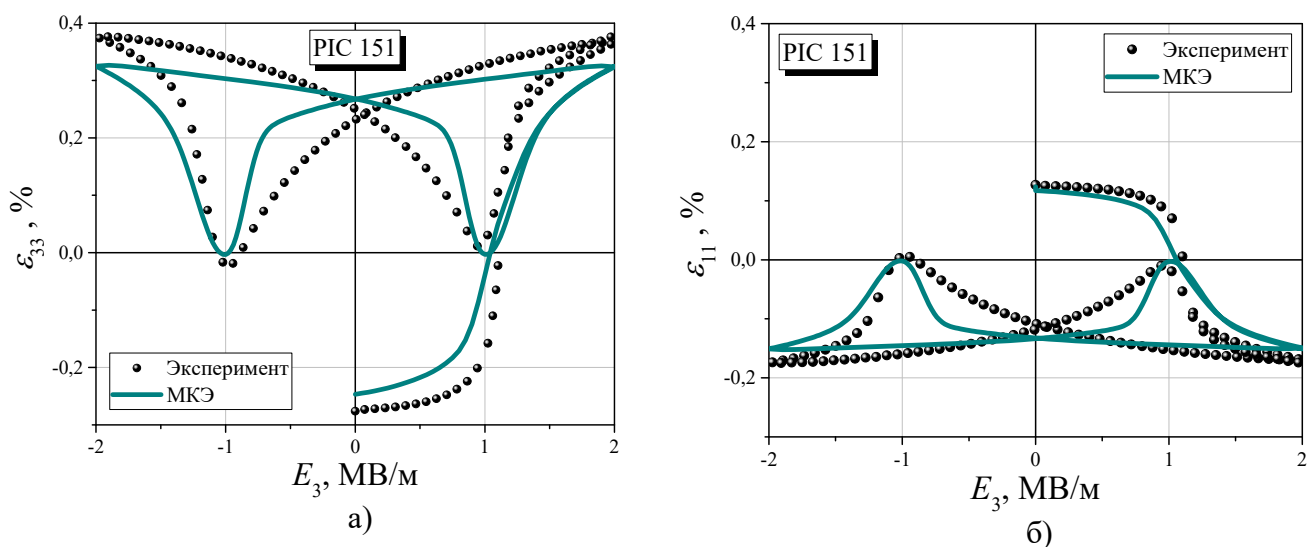


Рисунок 4.13 – Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментами [502] для PZT PIC 151 керамики при электрической реполяризации после механической поляризации: а) продольная и б) поперечная деформация

Как видно из Рисунка 4.13, сегнетопьезокерамика обладает способностью запоминать полярное состояние и форму. Изменения поляризации и деформации, вызванные механическим нагружением, могут быть возвращены к их первоначальным значениям путем последующего приложения электрического поля. Наблюдаемый эффект памяти формы сегнетоэлектростриктивных материалов аналогичен одноименному эффекту материалов с памятью формы. Отличие заключается в том, что в первом случае форма восстанавливается под действием электрического поля, а во втором вследствие изменения температуры.

Для практики представляют интерес экспериментальные и теоретические исследования нелинейного поведения сегнетоэлектростриктивных материалов при *комбинированном* электрическом и механическом воздействии. На Рисунке 4.14 показаны расчетные и экспериментальные кривые диэлектрического и электромеханического гистерезиса при семи различных постоянных уровнях сжимающей нагрузки (в диапазоне от -400 МПа до 0), действующих одновременно с циклически изменяющимся ($t_{ц} = 100$ сек, $f = 0,01$ Гц) электрическим полем амплитудой 2 МВ/м. Электрическое воздействие задавалось соосным механическому. Экспериментальные кривые были представлены выше отдельно на Рисунках 1.35 и 1.36 [502, 509].

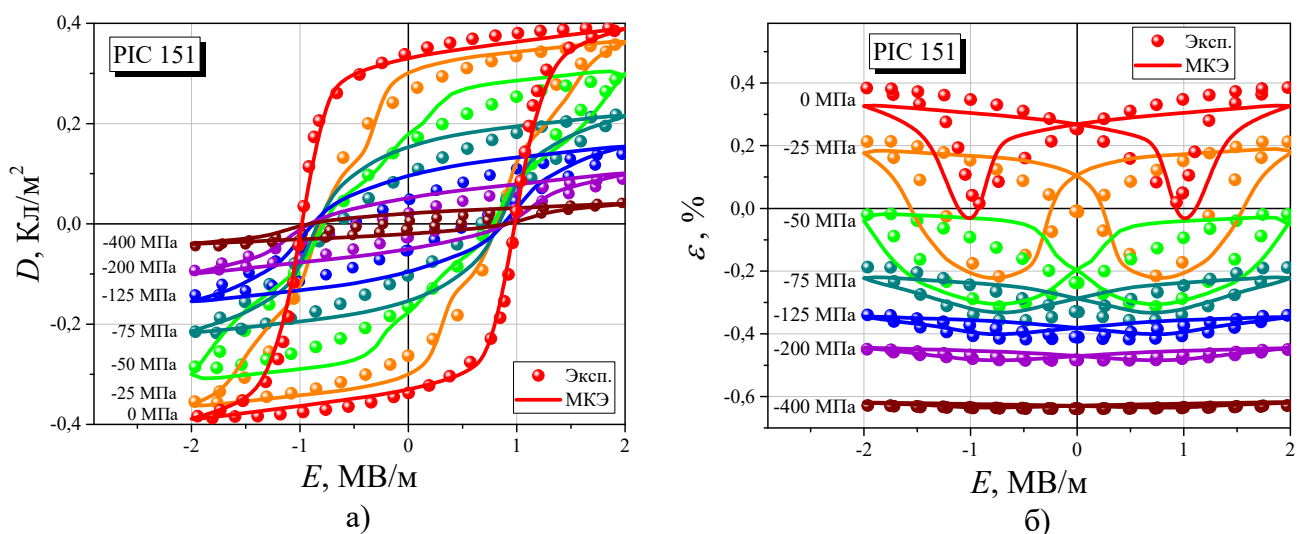


Рисунок 4.14 – Влияние сжимающих напряжений на кривые а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса. Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментами [502] для PZT PIC 151 керамики

Высота петли диэлектрического гистерезиса (Рисунок 4.14а) и электромеханического гистерезиса (Рисунок 4.14б) уменьшается с ростом интенсивности механического воздействия. Расчетные кривые демонстрирует хорошее совпадение с результатами эксперимента. Более высокая точность наблюдается при экстремальных значениях электрического поля (± 2 МВ/м). Для промежуточных значений цикла имеют место некоторые отклонения расчетной от экспериментальной формы петли гистерезиса. Двухфазная модель позволяет достаточно точно описать смещение петли электромеханического гистерезиса в область отрицательных значений деформаций с ростом сжимающих напряжений.

Эффект наложения постоянного электрического поля на переменное механическое воздействие (полуцикл сжатия с последующей разгрузкой) представлен на Рисунке 4.15. Механическое воздействие задавалось соосным электрическому. Рассматривались четыре различных уровня электрического поля различной полярности (+0,5 МВ/м; 0 МВ/м; 1 МВ/м; 2 МВ/м). Экспериментальные кривые представлены отдельно на Рисунках 1.37 и 1.38 [264, 273]. Наложение постоянного электрического поля приводит к смещению кривой деполяризации (Рисунок 4.15а) в направлении действия поля. Расчетные кривые деполяризации (Рисунок 4.15а) и механического полугистерезиса (Рисунок 4.15б) демонстрируют хорошее совпадение с результатами эксперимента при максимальном уровне сжимающих напряжений. Точность прогноза несколько снижается при стремлении напряжений к нулю.

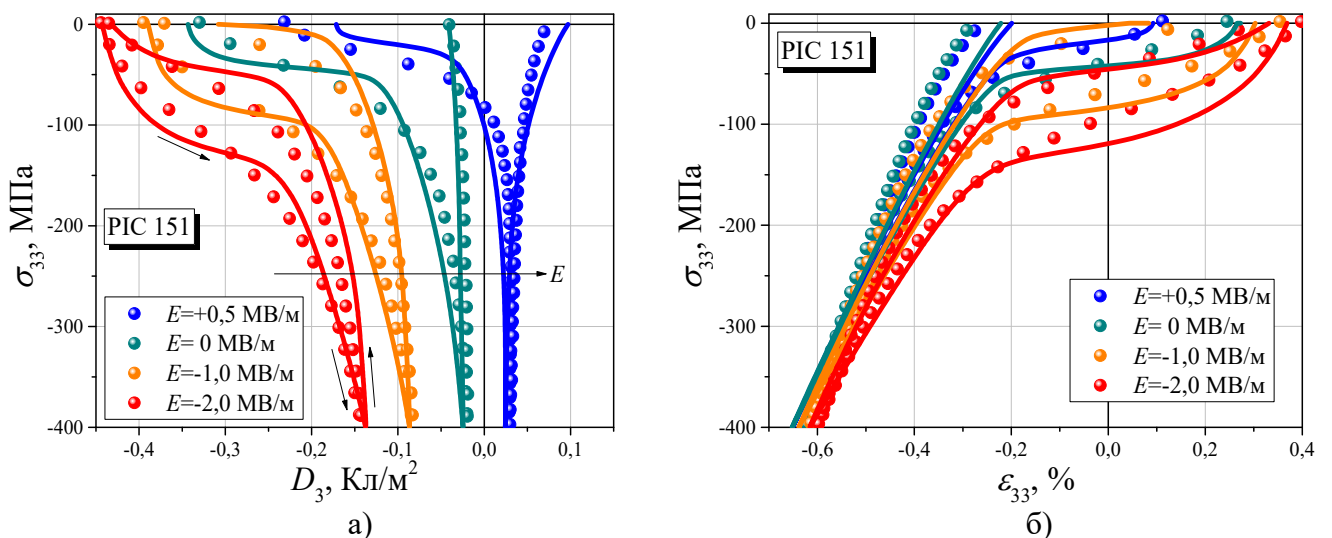


Рисунок 4.15 – Влияние электрического поля на кривые а) деполяризации, б) сжатия. Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментами [502] для PZT PIC 151 керамики

Результаты моделирования нелинейного поведения сегнетоэлектрорупругих материалов при *непропорциональном* нагружении представлены на Рисунке 4.16. Рассматривается двухлучевое (трехзвенное) электрическое нагружение: нагрузка до 2 МВ/м, разгрузка до 0 и последующее нагружение в направлении, не совпадающем с первоначальным. Рассматривались 5 различных углов отклонения от первоначального направления на траектории нагружения: 0°, 45°, 90°, 135°, 180°. На практике [503] подобные схемы нагружения были реализованы в два этапа. После начальной поляризации из пластины под различными углами к направлению поляризации вырезались призматические образцы меньшего размера, которые подвергались последующему электрическому нагружению вплоть до достижения уровня начальной поляризации.

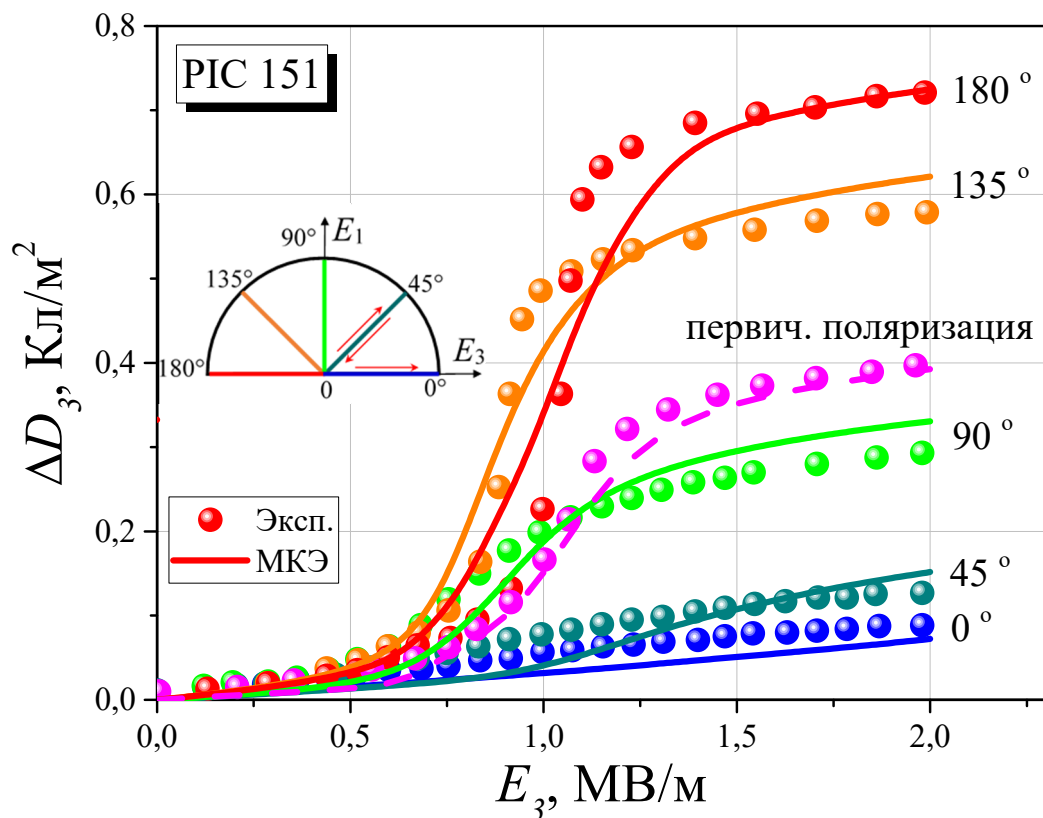


Рисунок 4.16 – Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с экспериментами [503] для керамики PZT PIC 151 при непропорциональном двухлучевом нагружении

Зависимости изменения поляризации на втором этапе двухлучевого нагружения показаны на Рисунке 1.16 для различных путей непропорционального нагружения, определяемых углом отклонения от направления начальной поляризации.

При значительных углах отклонения пути вторичного нагружения ($\geq 90^\circ$) наблюдается стремительный рост изменения поляризации. Объяснением этому служит то, что в этом случае при углах отклонения $\geq 90^\circ$ происходит активное нагружение, так как путь нагружения на третьем этапе целиком лежит вне поверхности переключения, сформированной в конце второго этапа. При 180° изменение электрического смещения близко к удвоенному значению начальной поляризации. Отличие составляет 15%. Расчеты для пропорционального нагружения с 180° отклонением также показали, что для сегнетоэластичных материалов принцип Мазинга (подобия кривых первоначального нагружения и разгрузки) не выполняется.

Все наблюдаемые в экспериментах эффекты непропорционального нагружения удастся качественно и количественно повторить при КЭ моделировании с использованием двухфазной микроструктурной модели. Расчетные кривые переполаризации (см. Рисунок 4.16, где показано изменение поляризации на последнем этапе нагружения) демонстрируют хорошее совпадение с результатами эксперимента [503] при всех рассмотренных углах отклонения на траектории непропорционального нагружения.

Рассматриваемая реономная микроструктурная модель также позволяет качественно описать эффекты влияния скорости нагружения и промежуточных выдержек на нелинейное поведение сегнетоэластичного материала. На Рисунке 4.17а представлено сравнение результатов КЭ моделирования поведения сегнетоэластичной керамики при циклическом электрическом нагружении с *различными скоростями* с результатами экспериментов D. Zhou для PIC 151 [502]. Рассматривались 2 режима циклического нагружения амплитудой 2МВ/м со *скоростями* нагружения: $\dot{E} = 0,08 \text{ МВ}/(\text{м} \cdot \text{с})$ ($t_{\text{ц}} = 100 \text{ сек}$; $f = 0,01 \text{ Гц}$) и $\dot{E} = 0,02 \text{ МВ}/(\text{м} \cdot \text{с})$ ($t_{\text{ц}} = 400 \text{ сек}$; $f = 0,0025 \text{ Гц}$). С ростом скорости нагружения увеличивается коэрцитивное поле. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 4.17а) показали удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента.

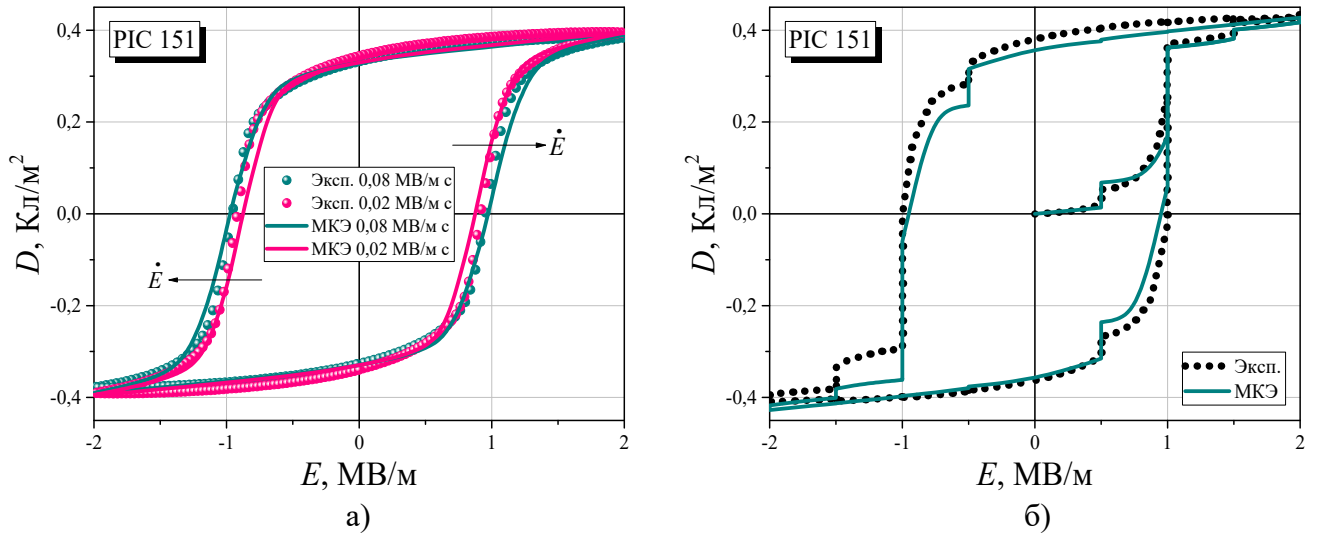


Рисунок 4.17 – Влияние а) скорости нагружения и б) промежуточных выдержек на диэлектрический гистерезис. Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси) с результатами экспериментов [502] для PZT PIC 151 керамики

На Рисунке 4.17б показано сравнение результатов КЭ моделирования диэлектрического гистерезиса с *промежуточными выдержками* с результатами экспериментов [502]. Выдержки длительностью 300 сек производились при достижении уровней нагрузки: $\pm 0,5 \text{ МВ/м}$; $\pm 1 \text{ МВ/м}$; $\pm 1,5 \text{ МВ/м}$; $\pm 2 \text{ МВ/м}$. Максимальное влияние выдержки оказывают при уровнях нагрузки $\pm 1 \text{ МВ/м}$, соответствующих коэрцитивному полю. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса с выдержками (Рисунок 4.17б) демонстрируют удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента.

Следует отметить, что точность прогнозов рассматриваемых моделей при описании склерономных процессов (при квазистатическом нагружении) выше, чем при описании реономных процессов (при динамическом нагружении), требующих учета чувствительности к скорости (частоте) или времени нагружения. Причиной этого является использование простейших (модельных) аппроксимаций в формулировках функций переключения и насыщения (1.38)-(1.39). На необходимость использования более сложных аппроксимаций при описании темпозависимых явлений указывалось в работах [99, 147, 293, 327].

4.1.6 Сравнение результатов расчетов с данными расчетов других авторов

В целях валидации используемой модели материала и методов численного решения также производилось сравнение полученных результатов с данными расчетов других авторов. На Рисунке 4.18 представлено сравнение результатов КЭ моделирования поведения поликристаллической сегнетопьезокерамики при циклическом bipolarном электрическом нагружении амплитуды 5 МВ/м с результатами расчетов Pathak, McMeeking [381]. Отличие в подходах заключалось: в методах осреднения (в [381] – кристаллит=КЭ, здесь – кристаллит=Гауссова точка), в методах решения (в [381] – скалярно-потенциальная КЭ формулировка, здесь – векторно-потенциальная КЭ формулировка), в степени дискретизации КЭ модели (в [381] – разбиение ЭПО $9 \times 9 \times 9$ (729 кристаллитов), здесь – разбиение ЭПО $3 \times 3 \times 3$ (216 кристаллитов)), в значении показателя степени уравнения эволюции n (в [381] – 50, здесь – 20). Остальные параметры материала выбирались совпадающими с [381].

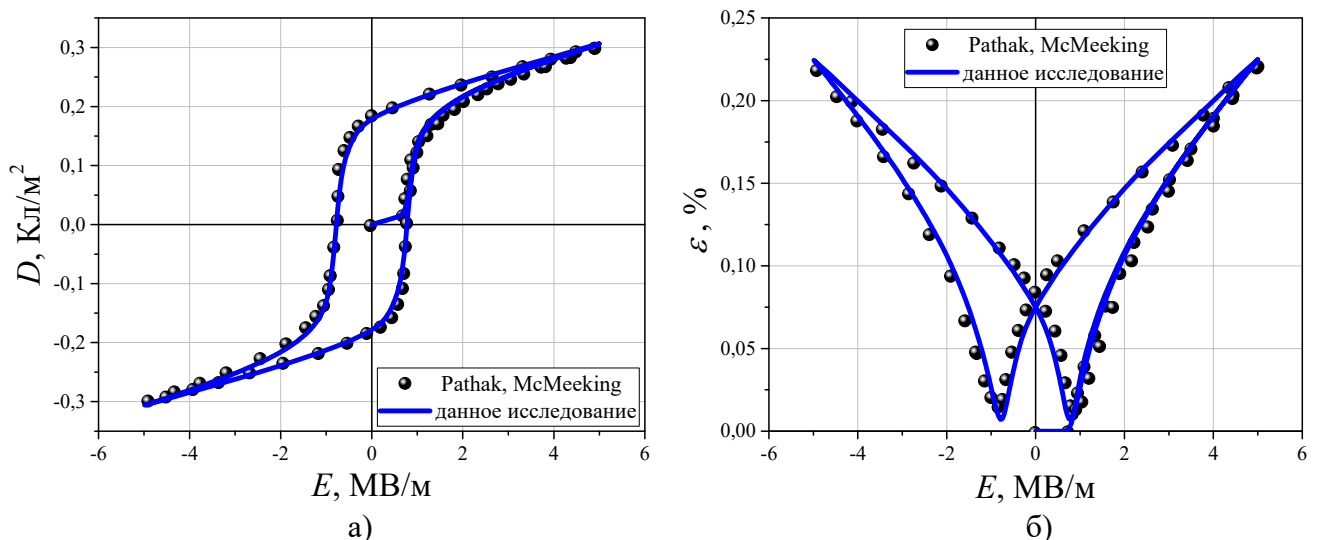


Рисунок 4.18 – Сравнение результатов КЭ расчетов с результатами Pathak, McMeeking [381]: а) диэлектрический гистерезис, б) электромеханический гистерезис

Сравнение результатов расчетов кривых диэлектрического (Рисунок 4.18а) и электромеханического (Рисунке 4.18б) гистерезиса демонстрирует хорошее совпадение. Также высокая точность наблюдается и при сравнении кривых механического гистерезиса (Рисунок 4.19).

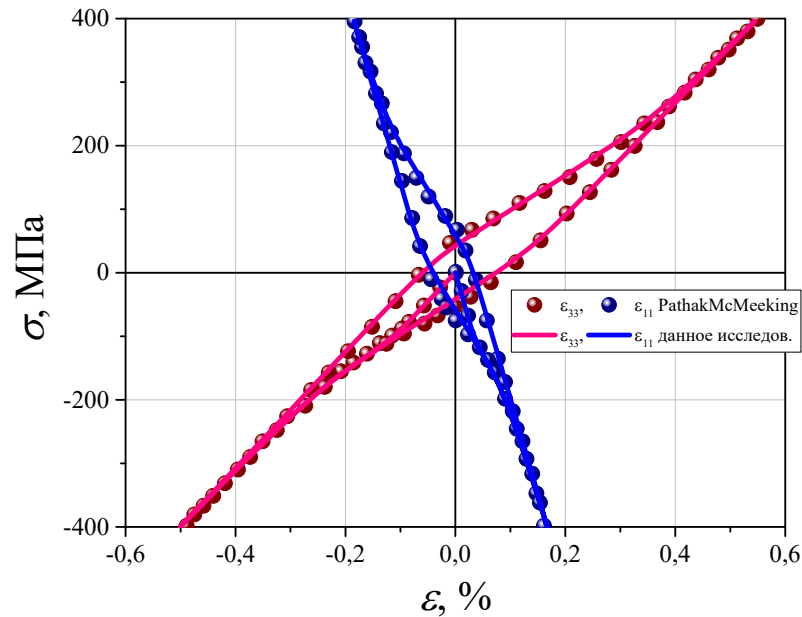


Рисунок 4.19 – Сравнение результатов КЭ расчетов механического гистерезиса с результатами расчетов Pathak, McMeeking [381] для продольной и поперечной деформации

Исследование представленного на Рисунке 4.19 электроупругого отклика имеет скорее теоретическое значение, поскольку эксперименты подобного рода отсутствуют ввиду сложности их реализации на этапе растяжения. Кроме этого, для рассматриваемого класса материалов предел прочности при растяжении меньше предела прочности при сжатии и для большинства современных сегнетопьезокерамик значительно меньше рассматриваемого уровня напряжений.

Валидация используемой модели материала при различном фазовом составе тетрагональной/ромбоэдрической смеси производилась на основе сравнения с результатами расчетов Neumeister, Balke [368]. Отличие в подходах заключалось в методах решения (в [368] – скалярно-потенциальная КЭ формулировка, здесь – векторно-потенциальная КЭ формулировка), в модели материала (в [368] – вязкопластическая, здесь – вязкоупругая). Остальные параметры материала и условия нагружения выбирались совпадающими с [368].

Сравнение результатов расчетов кривых пластического (механического) гистерезиса (Рисунок 4.20) при трех значениях объемных долей смеси ($c_T = 0$; $c_T = 0,24$; $c_T = 1$) демонстрирует хорошее совпадение.

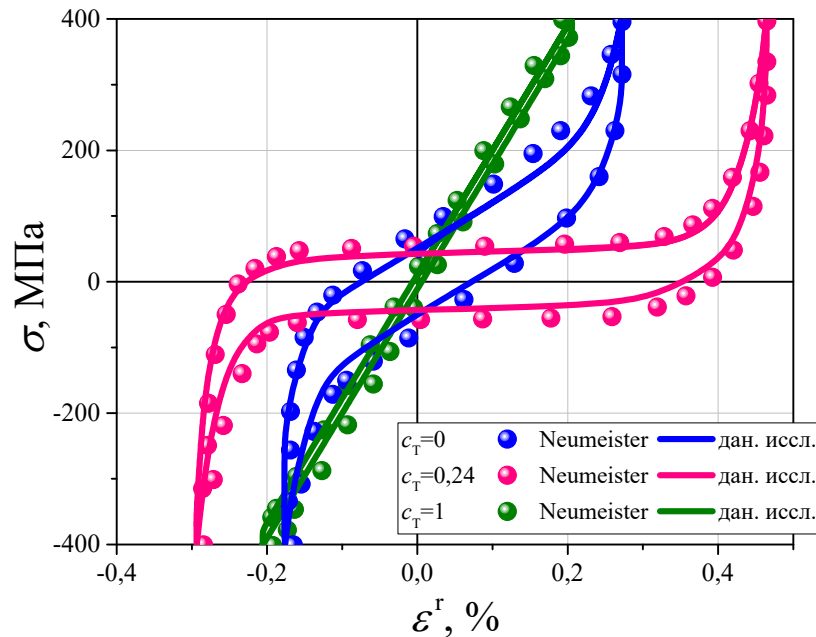


Рисунок 4.20 – Сравнение результатов КЭ расчетов пластического гистерезиса с результатами Neumeister, Balke [368] при трех различных составах Т/Р смеси

4.1.7 Параметрический анализ микроструктурной модели

Результаты параметрического анализа, характеризующие чувствительность размеров и формы гистерезисных кривых к варьированию параметров материала, позволяют повысить эффективность процедуры идентификации параметров модели на основе экспериментальных данных.

Микроструктурная модель *тетрагонального* кристалла (2.15)-(2.18), (2.34), (2.41) в общем случае содержит 18 параметров: 6 компонент тензора упругих модулей ($C_{1111}^E, C_{3333}^E, C_{1122}^E, C_{1133}^E, C_{1212}^E, C_{1313}^E$), 2 компоненты тензора диэлектрической проницаемости ($\kappa_{11}^\sigma, \kappa_{33}^\sigma$), 3 пьезоэлектрических константы ($d_{131}, d_{311}, d_{333}$), 2 критические движущие силы (G_c^{90}, G_c^{180}), спонтанную деформацию и поляризацию (ε_0, P_0), показатели степени уравнения эволюции (m, n), параметр насыщения C_0 .

Базовые значения основных параметров материала, относительно которых производилось варьирование, показаны в Таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Используемые в многовариантных КЭ расчетах базовые значения варьируемых параметров материала

Величина	Символ	Размерность	РЭС 151
Упругие модули	C_{3333}^E C_{1133}^E	ГПа	126 53,3
Диэл. проницаемость	κ_{33}^σ	нФ/м	22
Пьезоэлектр. модуль	d_{333}	пм/В	315
Спонтанная поляризация	P_0	Кл/м ²	0,5
Спонтанная деформация	ε_0	%	0,2
Критич. движущая сила	G_c^{90} G_c^{180}	МДж/м ³	0,8 ∞
Коэфф. вязкости	B	1/с	1
Показатели степени уравнения эволюции	n m	- -	10 2
Параметр насыщения	C_0	-	0,01

Результаты представленных ниже многовариантных вычислительных экспериментов получены на основе выполнения КЭ расчетов для ЭПО поликристаллического агрегата, включающего 216 кристаллитов (разбиение ЭПО 3×3×3). Во всех расчетах использована единая ориентация кристаллитов в ЭПО.

Период цикла нагружения при проведении расчетов соответствовал 100 с.

Влияние критической движущей силы 90°-переключения G_c^{90} на диэлектрический и электромеханический гистерезис для ЭПО поликристалла представлено на Рисунке 4.21 для 5 различных значений G_c^{90} , варьируемых в диапазоне от 0,6 до 1 МДж/м³ с шагом 0,1 МДж/м³. Механизм 180°-переключения был отключен ($B^{180} = 0$, что эквивалентно $G_c^{180} \rightarrow \infty$). С ростом G_c^{90} *ширина* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов увеличивается (коэрцитивное поле поликристалла $\bar{E}_c$ увеличивается пропорционально G_c^{90}). С ростом G_c^{90} *высота* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов уменьшается. В случае диэлектрического гистерезиса это изменение практически незаметно.

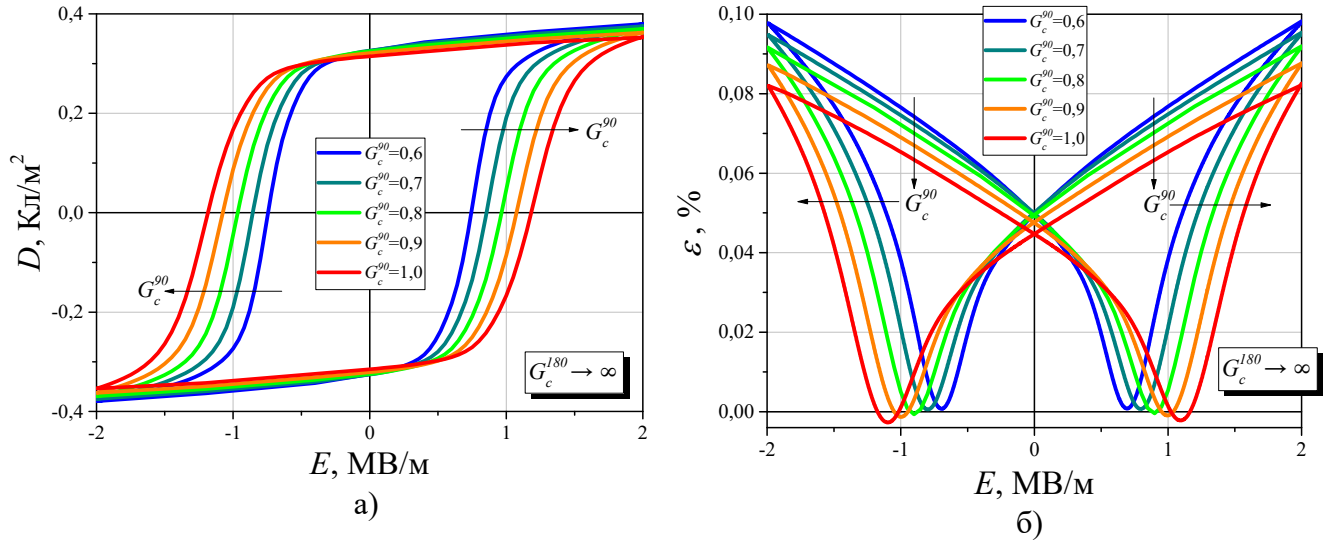


Рисунок 4.21 – Влияние критической движущей силы G_c^{90} [МДж/м³] при отсутствии 180°-переключений на: а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Влияние критической движущей силы 180°-переключения G_c^{180} на диэлектрический и электромеханический гистерезис представлено на Рисунке 4.22 для 5 различных значений G_c^{180} , варьируемых в диапазоне от 0,6 до 1 МДж/м³ с шагом 0,1 МДж/м³. Механизм 90°-переключения был отключен ($B^{90} = 0$ или $G_c^{90} \rightarrow \infty$). С ростом G_c^{180} ширина петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов увеличивается (коэрцитивное поле поликристалла $\bar{E}_c$ увеличивается пропорционально G_c^{180}).

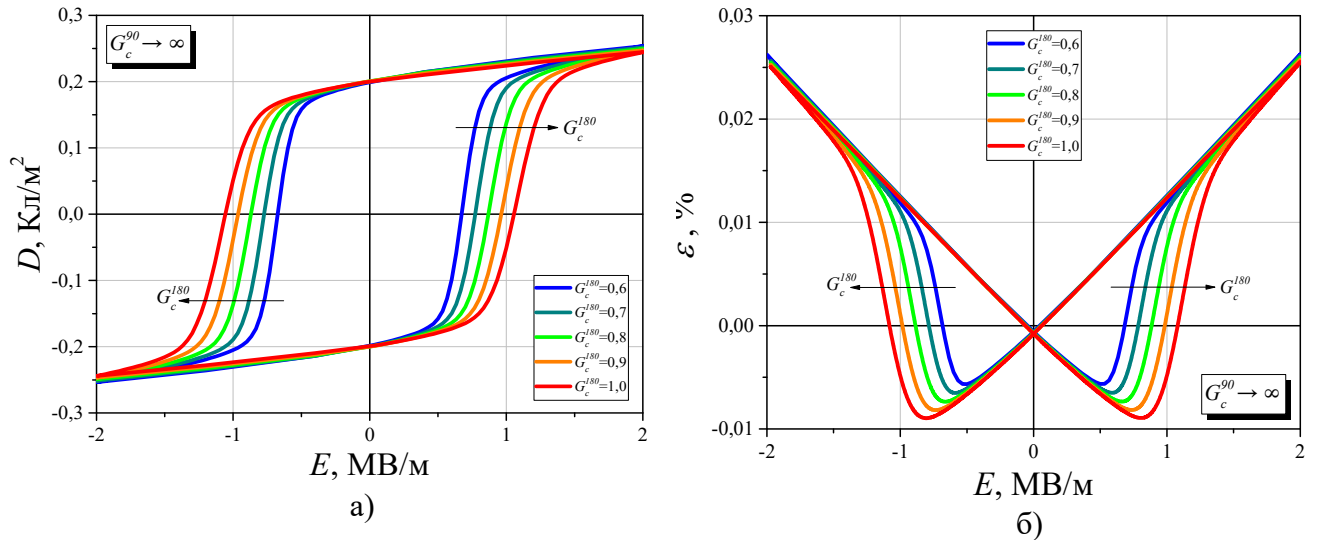


Рисунок 4.22 – Влияние критической движущей силы G_c^{180} [МДж/м³] при отсутствии 90°-переключений на: а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Кривые диэлектрического гистерезиса при 180°-переключении (Рисунок 4.22а) близки по форме к кривым 90°-переключения (Рисунок 4.21а). Но петля

гистерезиса при 180° -переключении оказалась на 10% уже и на 40% ниже петли гистерезиса при 90° -переключении. Объяснением отличий служит меньшее количество потенциально возможных систем 180° -переключений, а также естественные различия в геометрии переключений. Следует отметить, что для монокристаллов наблюдаются еще большие отличия. Петля диэлектрического гистерезиса монокристалла, ориентированного одной из осей вдоль поля, при 180° -переключении в 2 раза уже и в 3 раза ниже петли гистерезиса при 90° -переключении. Основным отличием процессов 180° -переключений от 90° -переключений является отсутствие изменения остаточных деформаций при 180° -переключении. Кривые электромеханического гистерезиса при 180° -переключении при разгрузке до 0 возвращаются в начало координат (см. Рисунок 4.22б).

В случае одновременного присутствия механизмов 90° - и 180° -переключений основное влияние на гистерезисное поведение ЭПО поликристалла оказывает меньший из параметров G_c^{90} и G_c^{180} . При фиксированном значении $G_c^{90} = 0,8 \text{ МДж/м}^3$ влияние движущей силы 180° -переключения G_c^{180} на диэлектрический и электромеханический гистерезис представлено на Рисунке 4.23 для 5 различных значений G_c^{180} , варьируемых в диапазоне от 0,4 до 1,6 МДж/м³.

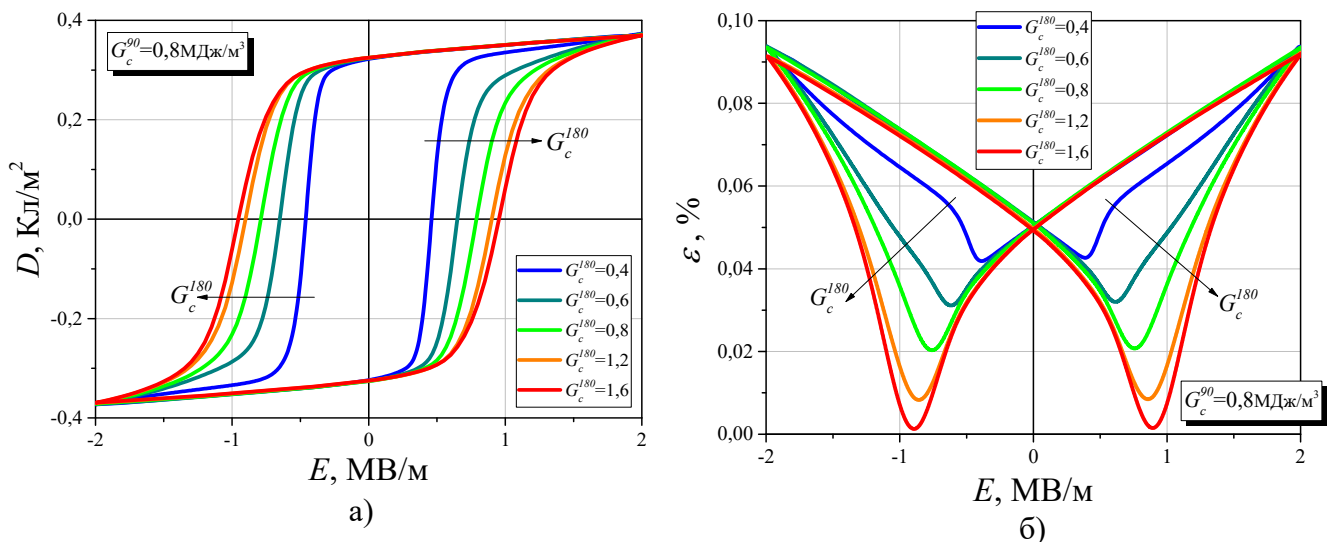


Рисунок 4.23 – Влияние критической движущей силы G_c^{180} [МДж/м³] при фиксированном значении $G_c^{90} = 0,8 \text{ МДж/м}^3$ на

а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

С ростом G_c^{180} (то есть при постепенном выключении механизма 180° -переключения) *ширина* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов увеличивается, асимптотически приближаясь к петле с механизмом 90° -переключения (ср. с Рисунком 4.21). Изменение G_c^{180} не оказывает влияния на *высоту* петли диэлектрического гистерезиса. В случае электромеханического гистерезиса с ростом G_c^{180} *высота* петли значительно увеличивается.

При фиксированном значении $G_c^{180} = 0,8 \text{ МДж/м}^3$ влияние движущей силы 90° -переключения G_c^{90} на диэлектрический и электромеханический гистерезис представлено на Рисунке 4.24 для 5 различных значений G_c^{90} , варьируемых в диапазоне от 0,4 до 2,0 МДж/м³. Основное отличие полученной в условиях наличия 2х механизмов 90° - и 180° -переключения (см. Рисунок 4.24) от аналогичной серии кривых при 90° -переключении (см. Рисунок 4.21) заключается в значительном влиянии G_c^{90} на *высоту* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов. С ростом G_c^{90} (то есть при постепенном выключении механизма 90° -переключения) *высота* петли электромеханического гистерезиса и остаточная деформация значительно уменьшаются.

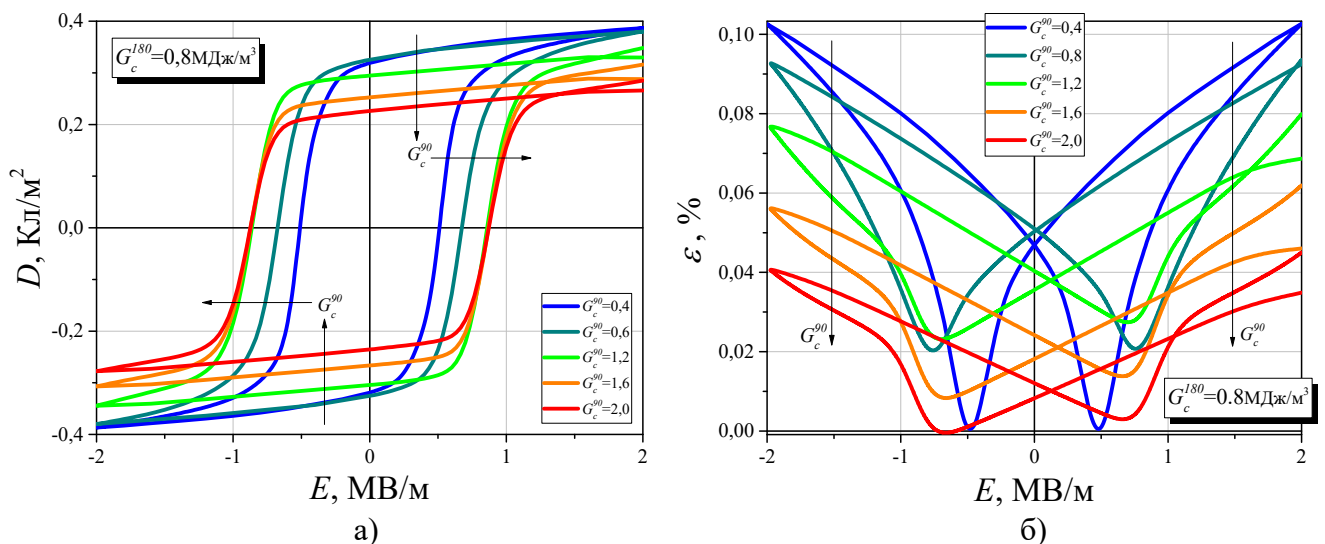


Рисунок 4.24 – Влияние критической движущей силы G_c^{90} [МДж/м³] при фиксированном значении $G_c^{180} = 0,8 \text{ МДж/м}^3$ на а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Кривые электромеханического гистерезиса, представленные на Рисунке 4.24б для первого полного цикла нагружения, при значениях $G_c^{90} \geq G_c^{180}$ оказались незамкнутыми. Начальная циклическая нестабильность петель гистерезиса наблюдается (с разной степенью выраженности в зависимости от значений G_c^{90} и G_c^{180}) при одновременном присутствии 90°- и 180°-переключений. Стабилизация петель гистерезиса происходит с ростом числа циклов. В качестве примера на Рисунке 4.25 показана стабилизация петель диэлектрического и электромеханического гистерезиса на 4 цикле нагружения для значений $G_c^{90} = 1,2 \text{ МДж/м}^3$ и $G_c^{180} = 0,8 \text{ МДж/м}^3$.

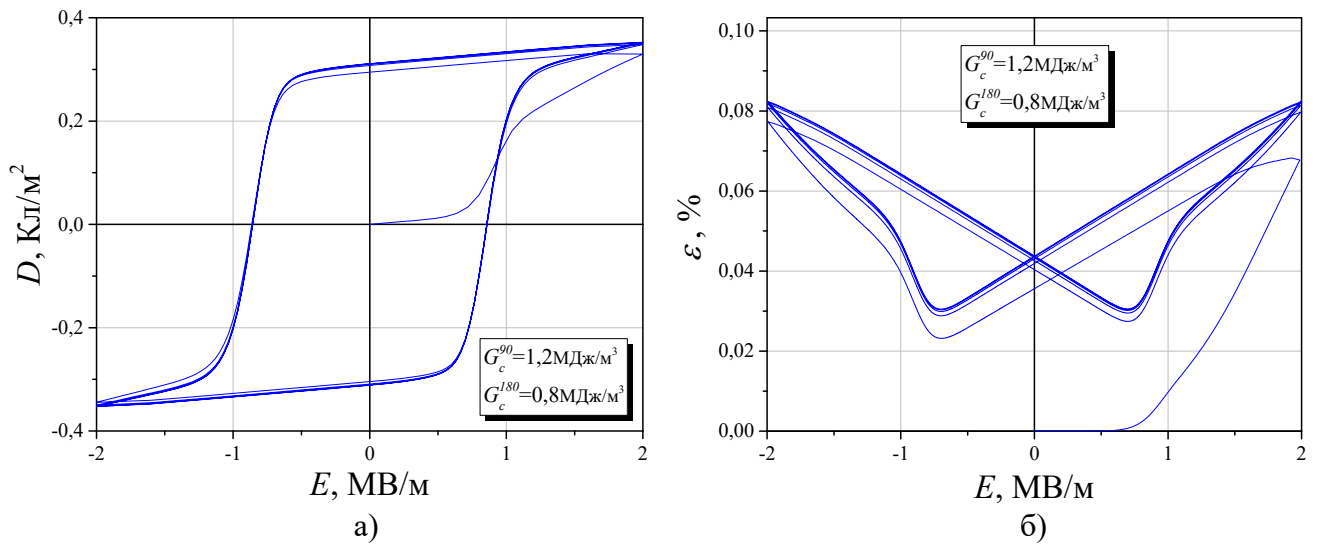


Рисунок 4.25 – Стабилизация петель а) диэлектрического и б) электромеханического гистерезиса при одновременном присутствии 90°- и 180°-переключений (для значений $G_c^{90} = 1,2 \text{ МДж/м}^3$ и $G_c^{180} = 0,8 \text{ МДж/м}^3$)

При одновременном присутствии 90°- и 180°-переключений коэрцитивное поле поликристалла $\bar{E}_c$ чувствительно к каждому из параметров G_c^{90} и G_c^{180} . На Рисунке 4.26 показана зависимость $\bar{E}_c$ от G_c^{90} и G_c^{180} , полученная на основе многовариантных КЭ расчетов (25 задач для ЭПО поликристалла с варьируемыми в пределах от 0,4 до 2 МДж/м³ с шагом 0,4 МДж/м³ G_c^{90} и G_c^{180}).

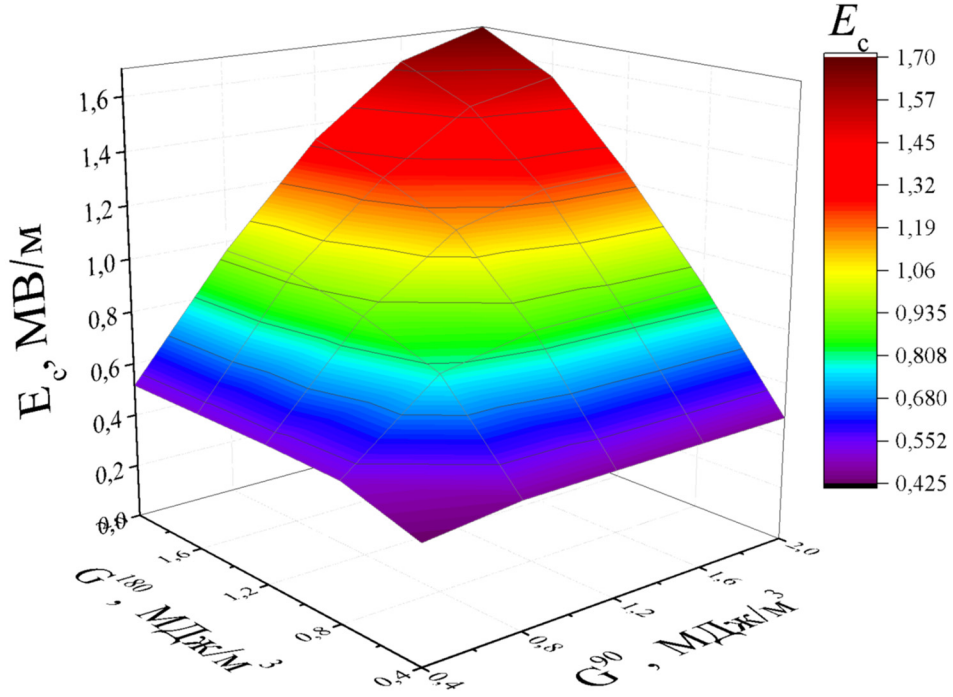


Рисунок 4.26 – Стабилизация петель а) диэлектрического и б) электромеханического гистерезиса при одновременном присутствии 90°- и 180°-переключений (для значений $G_c^{90}=1,2$ МДж/м³ и $G_c^{180}=0,8$ МДж/м³)

Достаточно хорошей аппроксимацией зависимости коэрцитивного поля поликристалла $\bar{E}_c$ от G_c^{90} и G_c^{180} является:

$$\bar{E}_c = A \frac{G_c^{eq}}{2P_0}, \quad 1/G_c^{eq} = \sqrt{(1/G_c^{90})^2 + (1/G_c^{180})^2}, \quad (4.1)$$

где A – параметр материала, зависящий от n и ε_0 . Для рассмотренного на Рисунке 4.26 случая погрешность аппроксимации (4.1) не превышает 15% при $A = 1,24$. Обратная величина эквивалентной критической движущей силы G_c^{eq} введена как евклидова норма (метрика L2) над обратными критическими движущими силами G_c^{90} и G_c^{180} .

Результаты влияния показателя степени n уравнения эволюции (параметр функции переключения, см. (2.41)) на кривые диэлектрического и электромеханического гистерезиса представлены на Рисунке 4.27 для 5 различных значений n , варьируемых в диапазоне от 5 до 50. Показатель степени n , так же как и критические движущие силы G_c^{90} и G_c^{180} , оказывает существенное влияние на коэрцитивное

поле поликристалла $\bar{E}_c$. С ростом n *ширина* петель диэлектрического и электро-механического гистерезисов увеличивается. С ростом n *высота* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов уменьшается. В случае диэлектрического гистерезиса это изменение практически незаметно. С ростом n *наклон* боковых сторон диэлектрического гистерезиса ($\bar{H} = \left. \frac{d\bar{D}}{dE} \right|_{D=0}$), фактически характеризующий упрочнение, увеличивается (см. Рисунок 4.27а).

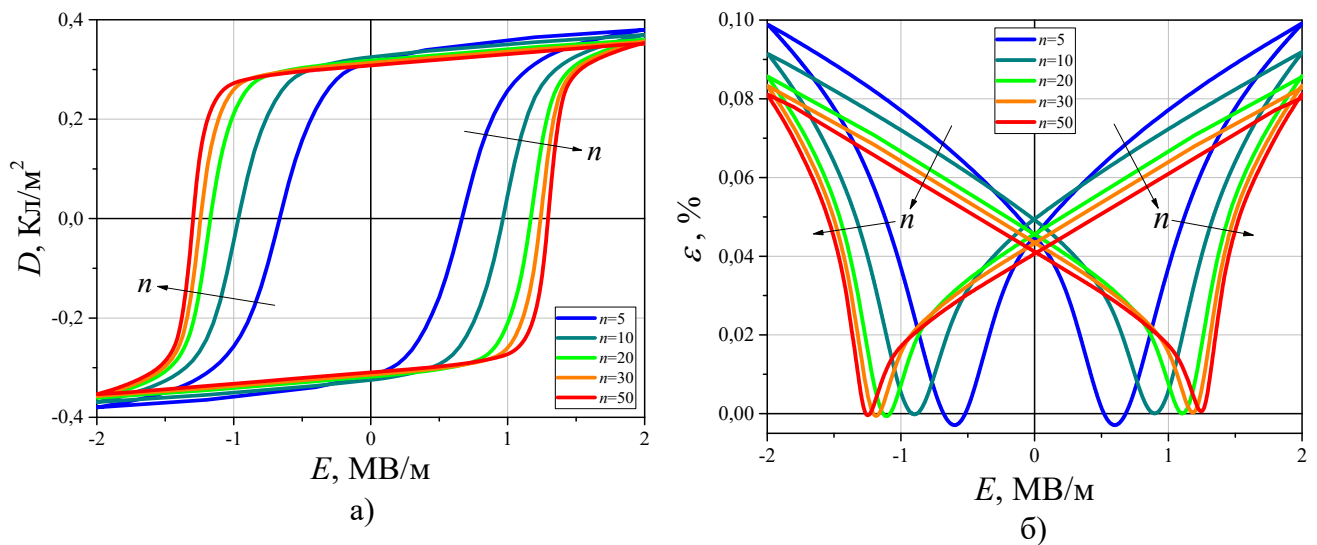


Рисунок 4.27 – Влияние показателя степени n уравнения эволюции на а) диэлектрический гистерезис и б) электро-механический гистерезис

В реономной модели без порога переключения (2.41), которая изначально вводилась в [255] как регуляризация склерономной модели с порогом переключения (2.42) без упрочнения, параметр n выбирался достаточно большим и рассматривался как приближение к условию $n \rightarrow \infty$, что обеспечивало мгновенное переключение при достижении движущей силы G порогового значения G_c . Однако учет упрочнения, наблюдаемого у реальных поликристаллических сегнетоэлектродупругих материалов, позволяет обоснованно использовать конечное значение n , которое может быть определено на основе наклона кривой, наблюдаемой в эксперименте.

Результаты влияния показателя степени m уравнения эволюции (параметр функции насыщения, см. (2.41)) на кривые диэлектрического и электро-механического гистерезиса представлены на Рисунке 4.28 для 6 различных значений m , варьируемых в диапазоне от 0,5 до 5. Увеличение параметра m позволяет избежать резкого перехода от вертикальных к горизонтальным участкам гистерезиса, снижая

скорость насыщения. С ростом m высота петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов уменьшается. Параметр m также, наряду с параметром n , оказывает влияние на наклон боковых сторон диэлектрического гистерезиса

($\bar{H} = \frac{d\bar{D}}{d\bar{E}} \Big|_{D=0}$), характеризующий упрочнение.

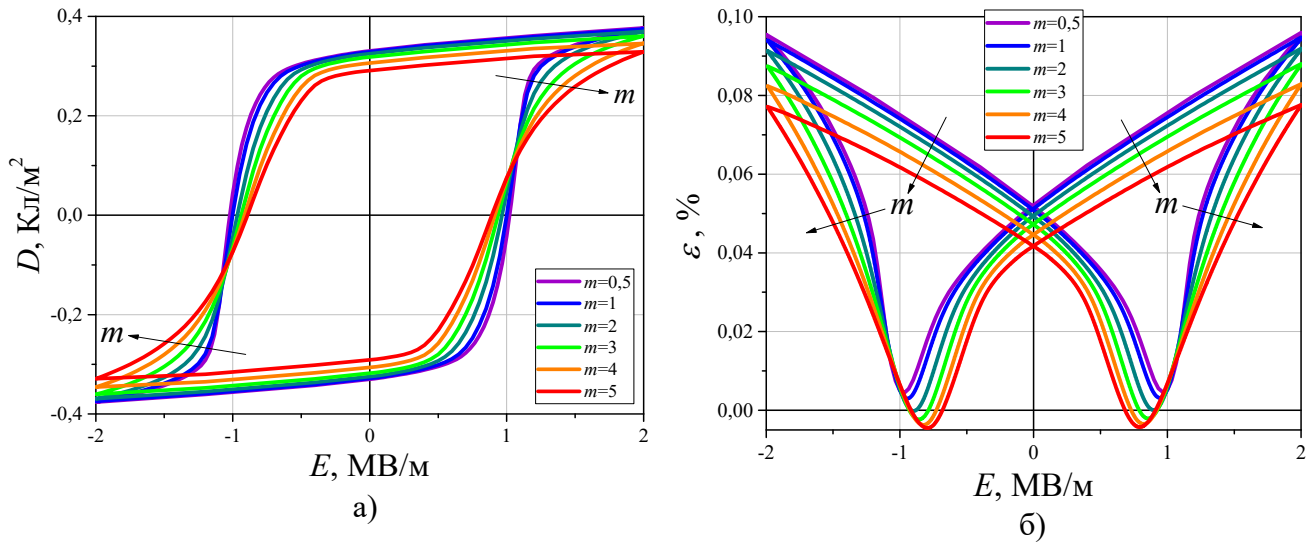


Рисунок 4.28 – Влияние показателя степени m уравнения эволюции на а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Результаты анализа влияния спонтанной поляризации P_0 на диэлектрический и электромеханический гистерезис поликристаллического материала представлены на Рисунке 4.29 для 5 различных значений P_0 , варьируемых в диапазоне от 0,3 до 0,7 Кл/м^2 с шагом 0,1 Кл/м^2 . При проведении расчетов критическое значение движущей силы G_c^{90} увеличивалось пропорционально P_0 , обеспечивая постоянство коэрцитивного поля. Результаты расчетов показали, что с ростом P_0 пропорционально увеличивается высота петли диэлектрического гистерезиса. Значение остаточной поляризации $\bar{P}^r = \bar{D} \Big|_{\bar{E}=0}$ составляет около 65% спонтанной поляризации P_0 (одинаковое значение для всех рассматриваемых значений P_0). Отличие вызвано двумя основными причинами: недостаточно высоким уровнем электрического поля при первичной поляризации ($E / \bar{E}_c = 2,07$) и естественным уменьшением вследствие осреднения по всем возможным направлениям различно ориентированных кристаллитов в поликристалле. Параметр P_0 оказывает незначительное влияние на электромеханический гистерезис.

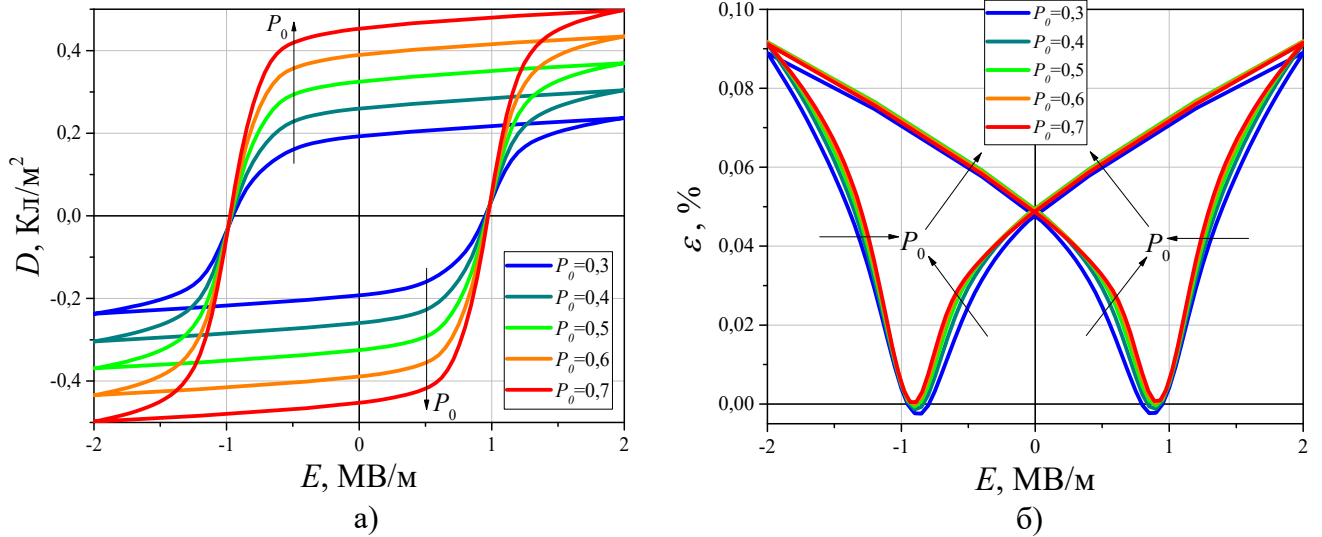


Рисунок 4.29 – Влияние спонтанной поляризации P_0 [Кл/м²] на:
а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Влияние спонтанной деформации кристаллита ε_0 на диэлектрический и электромеханический гистерезис поликристалла представлено на Рисунке 4.30 для 6 различных значений ε_0 , варьируемых в диапазоне от 0,1% до 0,8%. Параметр ε_0 не оказывает влияния на *ширину* петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов. С ростом ε_0 *высота* петли диэлектрического гистерезиса уменьшается.

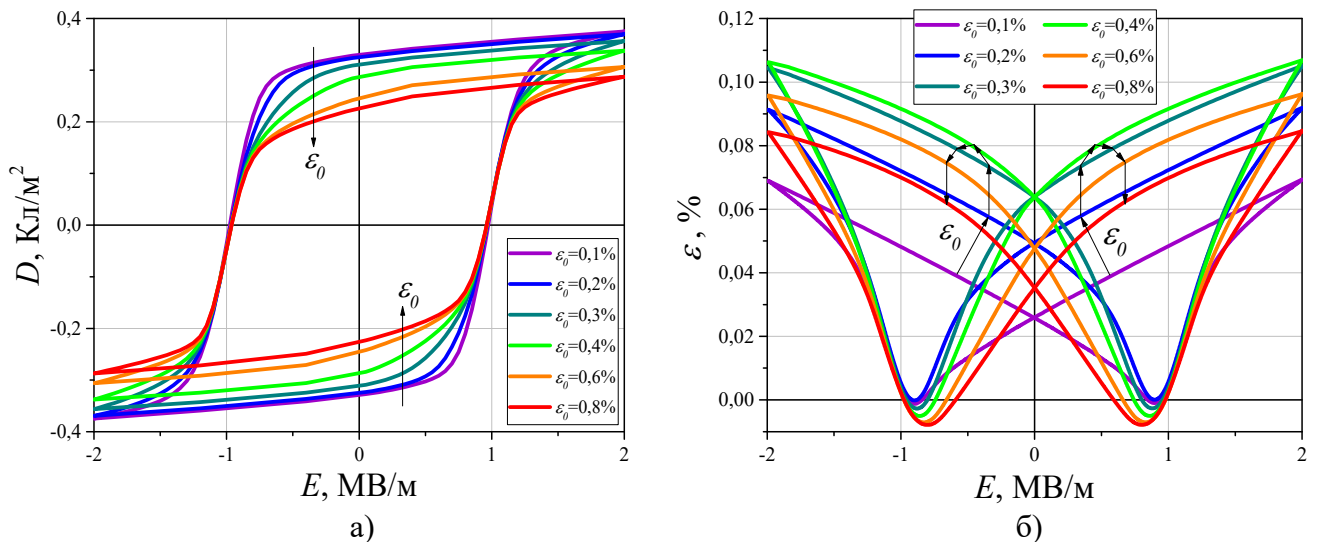


Рисунок 4.30 – Влияние спонтанной деформации ε_0 [%] на:
а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Высота петли электромеханического гистерезиса и соответственно *остаточная деформация* $\bar{\varepsilon}^r = \bar{\varepsilon}|_{\bar{E}=0}$ зависят от ε_0 немонотонным образом (см. Рисунок 4.30б).

В диапазоне изменения ε_0 от 0 до 0,4% наблюдается увеличение остаточной деформации, а при значениях, больших 0,4%, наблюдается уменьшение остаточной деформации. Для монокристаллов остаточная деформация изменяется пропорционально спонтанной деформации. Немонотонный характер изменения остаточной деформации у поликристалла связан с взаимным влиянием кристаллитов. Детально этот вопрос исследуется в Разделе 5.3.1.

Модуль Юнга E не влияет на диэлектрический и электромеханический гистерезисы, но оказывает существенное влияние на механический гистерезис (см. Рисунок 4.31б для 6 различных значений E , варьируемых в диапазоне от 70 до 120 ГПа с шагом 10 ГПа (соответственно компонента тензора упругости C_{3333}^E изменялась от 94,2 ГПа до 161,5 ГПа)). Для упрощения интерпретации результатов при выполнении данных расчетов рассматривался случай изотропного тензора упругости, определяемого 2 константами: E и $\nu=0,3$. При выполнении КЭ расчетов задавалось сжатие до -400 МПа с последующей разгрузкой до 0.

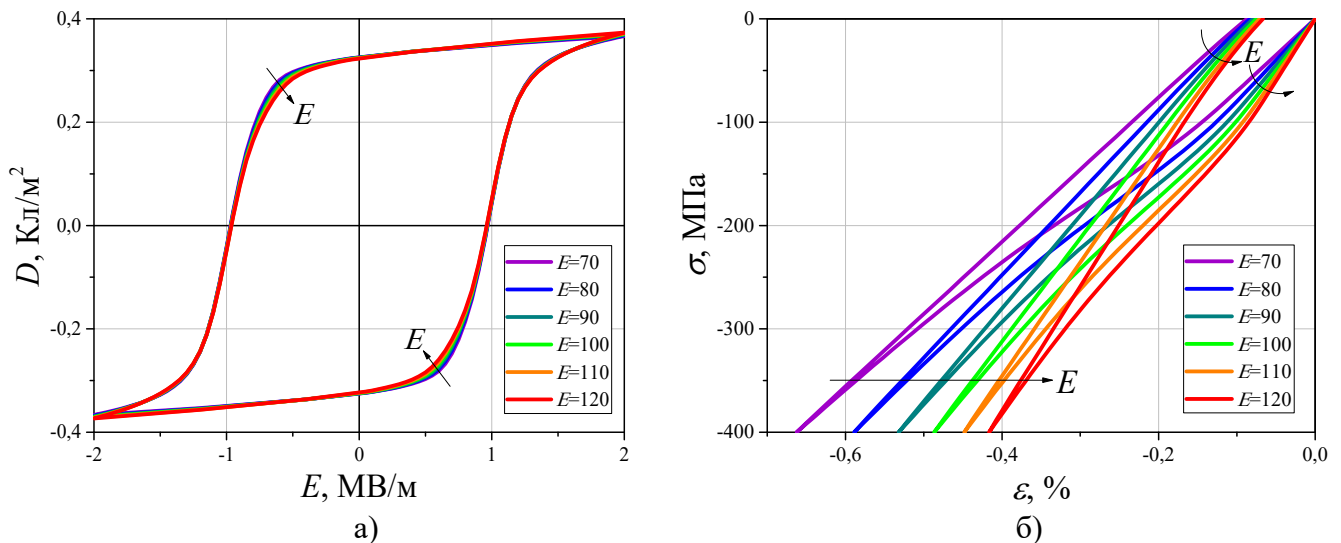


Рисунок 4.31 – Влияние модуля упругости E [ГПа] на:
а) диэлектрический гистерезис и б) механический гистерезис

Основное влияние модуль диэлектрической проницаемости κ^σ оказывает на *наклон* кривых разгрузки и первичной нагрузки диэлектрического гистерезиса $\bar{\kappa} = \left. \frac{d\bar{D}}{d\bar{E}} \right|_{\bar{E}=0}$ (Рисунок 4.32а). Расчетные кривые диэлектрического и электромеханического гистерезиса поликристалла представлены на Рисунке 4.32 для 3 различных значений κ^σ , варьируемых в диапазоне от 10 до 30 нФ/м с шагом 10 нФ/м. Для

упрощения интерпретации результатов при выполнении данных расчетов рассматривался случай изотропного тензора диэлектрической проницаемости с $\kappa^\sigma = \kappa_{11}^\sigma = \kappa_{22}^\sigma = \kappa_{33}^\sigma$. Параметр κ^σ оказывает влияние также на *высоту* петли электро-механического гистерезиса и остаточную деформацию (см. Рисунок 4.32б).

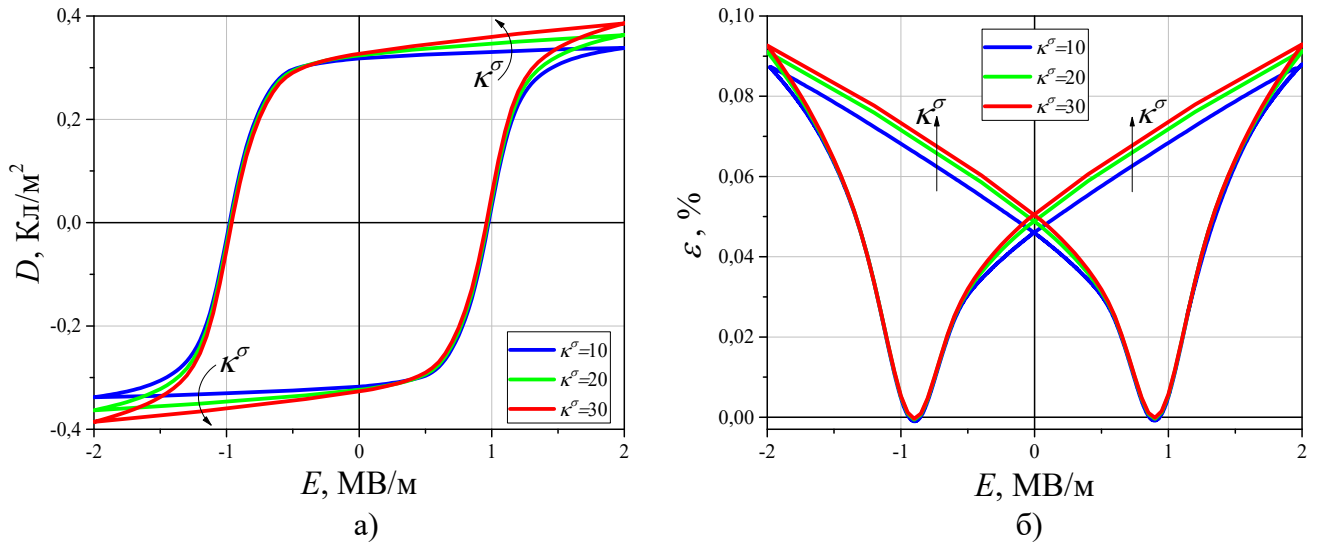


Рисунок 4.32 – Влияние модуля диэлектрической проницаемости κ^σ [нФ/м] на а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Результаты влияния пьезоэлектрического модуля d_{333} на диэлектрический и электромеханический гистерезис для ЭПО поликристалла представлены на Рисунке 4.33 для 5 значений d_{333} , варьируемых в диапазоне от 0,1 до 0,5 нм/В.

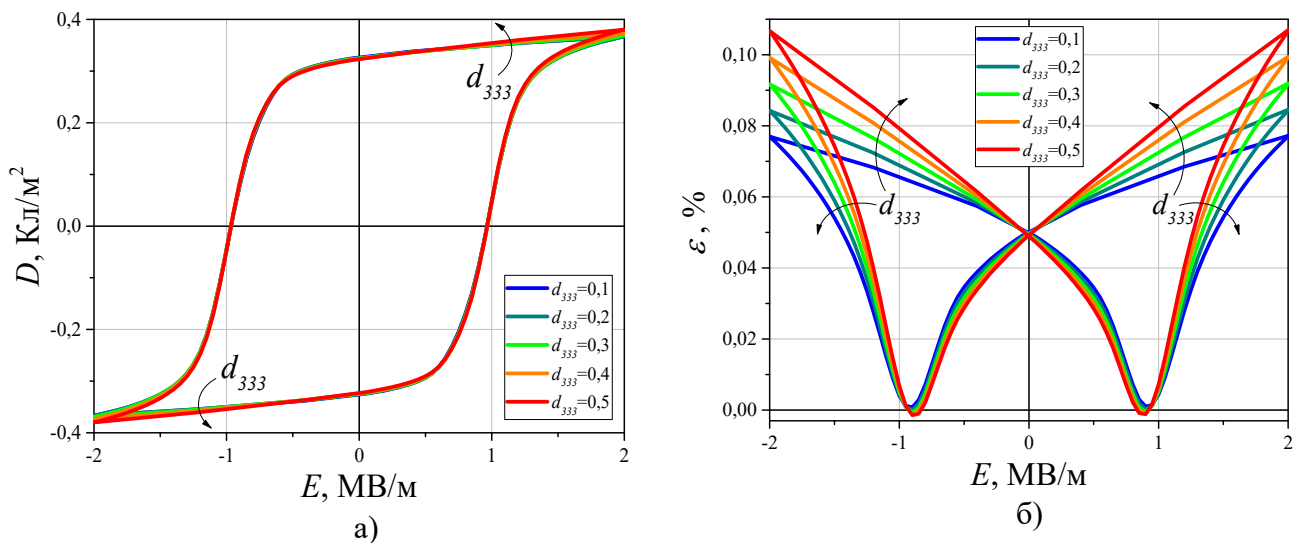


Рисунок 4.33 – Влияние пьезоэлектрического модуля d_{333} [нм/В] на: а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

С ростом d_{333} пропорционально увеличивается *наклон* участков разгрузки электромеханического гистерезиса $\bar{d} = \left. \frac{d\bar{\varepsilon}}{d\bar{E}} \right|_{\bar{E}=0}$. Параметр d_{333} не оказывает заметного влияния на диэлектрический гистерезис (см. Рисунок 4.33а).

Следует также отметить, что частота циклического нагружения (или период цикла t_u) оказывает некоторое влияние на форму и размеры диэлектрического и электромеханического гистерезисов. Аналогичное частоте влияние оказывает параметр материала B . Однако в модели обычно этот параметр выбирают равным 1, поскольку он не является независимым (как следует из анализа структуры уравнения эволюции (2.41), влияние на результаты оказывает комбинация B / G_c^n). Результаты влияния периода цикла t_u на диэлектрический и электромеханический гистерезис поликристалла представлены на Рисунке 4.34 для 5 различных значений t_u , варьируемых в диапазоне от 1 до 10 000 с. С ростом t_u уменьшается *ширина* и увеличивается *высота* гистерезисов. Указанные изменения отражают влияние эффектов вязкости используемой модели материала.

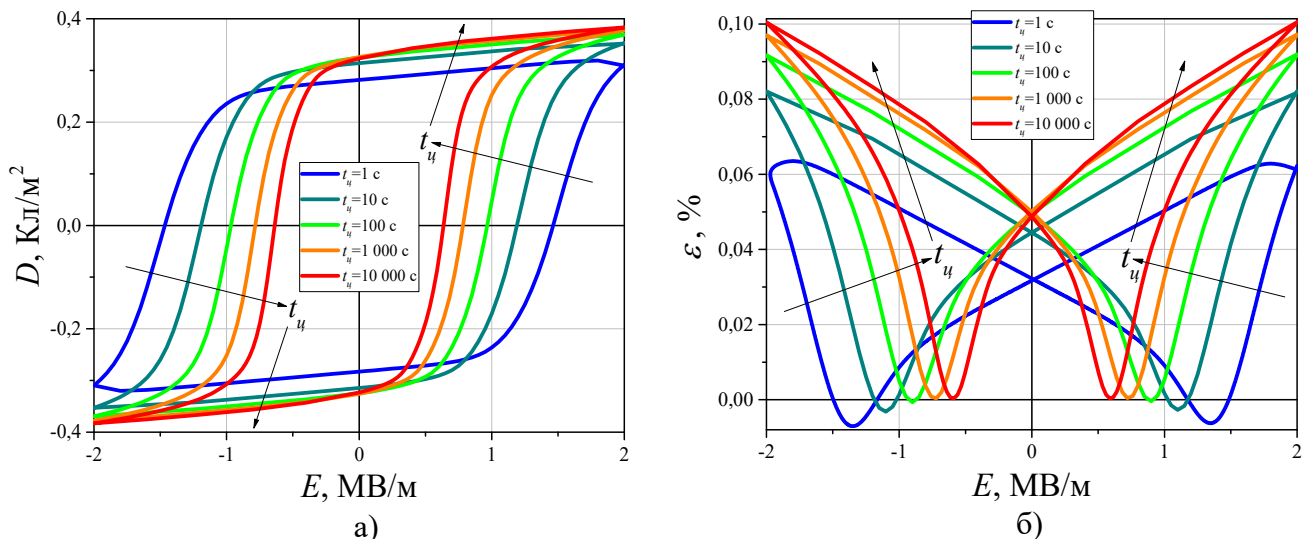


Рисунок 4.34 – Влияние периода цикла t_u [с] на:

а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Представленные выше результаты варьирования 8 параметров материала продемонстрировали различную степень влияния на характеристики кривых гистерезиса. Для комплексной оценки эффекта влияния параметров материала par_j микроструктурной модели на переменные var_i , характеризующие на макроуровне поведение материала, при проведении анализа чувствительности вводится матрица коэффициентов относительной чувствительности $S_{par_j}^{var_i}$ в соответствии с правилом

$$\frac{\delta var_i}{var_i} = S_{par_j}^{var_i} \cdot \frac{\delta par_j}{par_j} \quad [313].$$

Введенные коэффициенты фактически показывают, на сколько процентов увеличится переменная при увеличении параметра материала на 1%. Поиск экстремальных коэффициентов позволяет выявить доминирующие связи, а также определить параметры материала, погрешность в определении которых оказывает наибольшее влияние на точность предсказания модели, что важно учитывать при идентификации параметров модели материала.

На Рисунке 4.35 представлены коэффициенты относительной чувствительности $S_{par_j}^{var_i}$ для: коэрцитивного поля поликристалла $\bar{E}_c = \bar{E}|_{\bar{D}=0}$, наклона боковых сторон диэлектрического гистерезиса $\bar{H} = \frac{d\bar{D}}{d\bar{E}}|_{\bar{D}=0}$ (характеризующего упрочнение), остаточной поляризации $\bar{P}^r = \bar{D}|_{\bar{E}=0}$ и деформации $\bar{\varepsilon}^r = \bar{\varepsilon}|_{\bar{E}=0}$, наклонов кривой разгрузки диэлектрического $\bar{\kappa} = \frac{d\bar{D}}{d\bar{E}}|_{\bar{E}=0}$ и электромеханического $\bar{d} = \frac{d\bar{\varepsilon}}{d\bar{E}}|_{\bar{E}=0}$ гистерезисов поликристалла по отношению к изменению первых 4 доминирующих параметров микроструктурной модели материала, упорядоченных по степени влияния. Набор и порядок следования параметров материала для каждой из рассмотренных характеристик оказался неповторяющимся.

Рассмотренные коэффициенты чувствительности могут принимать как положительные ($S_{G_c}^{\bar{E}_c}, S_{G_c}^{\bar{E}_c}, S_n^{\bar{E}_c}, S_n^{\bar{H}}, S_{P_0}^{\bar{P}^r}, S_{\varepsilon_0}^{\bar{\varepsilon}^r}, S_{G_c}^{\bar{\varepsilon}^r}, S_{\kappa^{\sigma}}^{\bar{\kappa}}, S_{G_c}^{\bar{\kappa}}, S_{\varepsilon_0}^{\bar{d}}, S_{d_{333}}^{\bar{d}}$), так и отрицательные значения ($S_m^{\bar{E}_c}, S_{G_c}^{\bar{H}}, S_{G_c}^{\bar{H}}, S_m^{\bar{H}}, S_{\varepsilon_0}^{\bar{P}^r}, S_{G_c}^{\bar{P}^r}, S_m^{\bar{\varepsilon}^r}, S_n^{\bar{\varepsilon}^r}, S_n^{\bar{\kappa}}, S_{G_c}^{\bar{\kappa}}, S_{G_c}^{\bar{d}}, S_n^{\bar{d}}$). В последнем случае наблюдается уменьшение контролируемой переменной с ростом параметра материала.

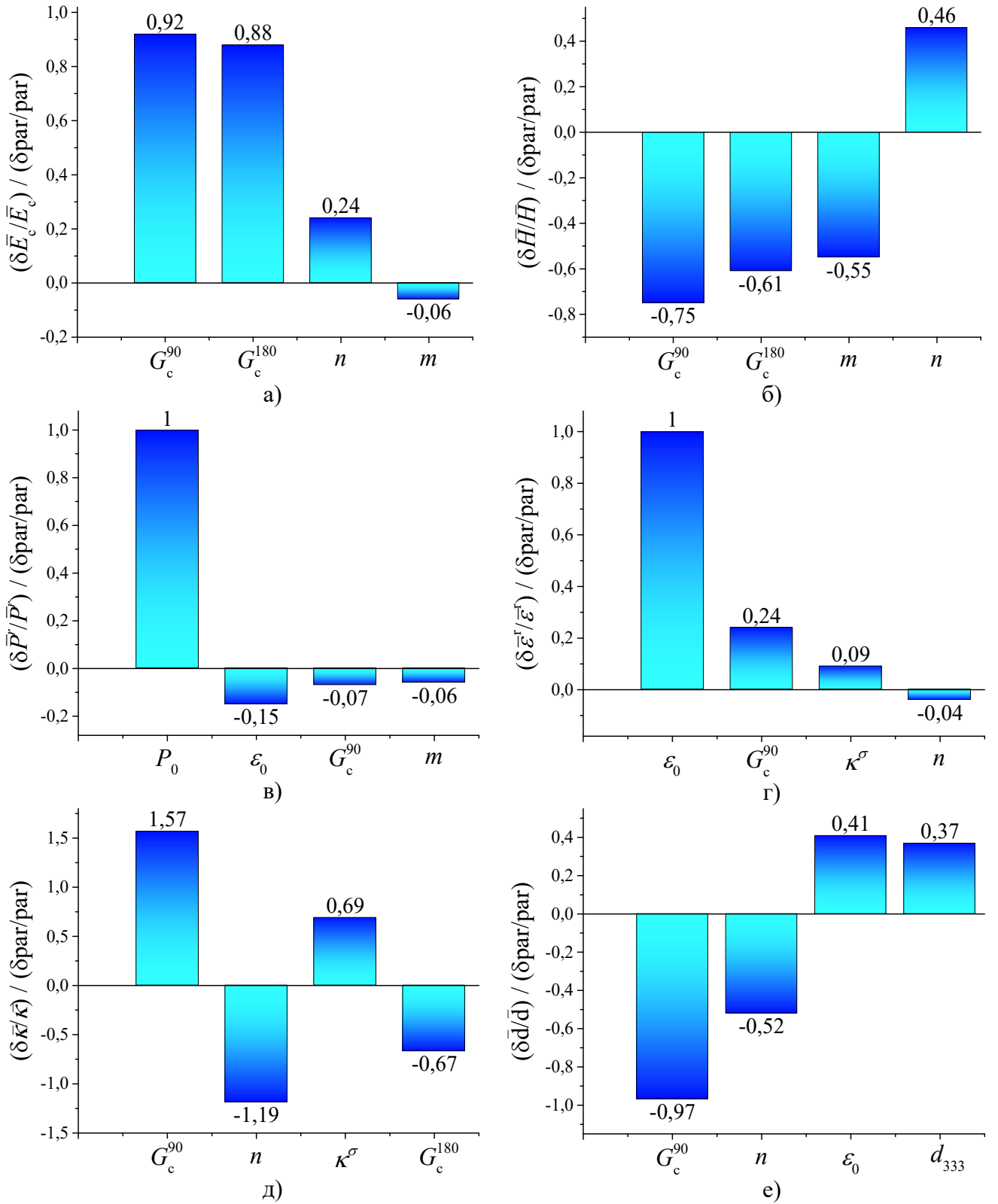


Рисунок 4.35 – Относительная чувствительность а) коэрцитивного поля $\bar{E}_c$, б) наклона боковых сторон диэлектрического гистерезиса (упрочнения) $\bar{H}$, в) остаточной поляризации $\bar{P}^r$, г) остаточной деформации $\bar{\varepsilon}^r$, д) наклон кривой разгрузки диэлектрического гистерезиса $\bar{\kappa}^\sigma$, е) наклон кривой разгрузки электромеханического гистерезиса $\bar{d}$ к изменению параметров материала (показаны только для первых 4х доминирующих параметров материала)

Следует отметить, что матрица коэффициентов относительной чувствительности не является постоянной, а зависит от начальных значений параметров, относительно которых проводится варьирование. Представленные на Рисунке 4.35 результаты соответствуют базовым значениям параметров материала, указанным в Таблице 4.3.

На основе представленных на Рисунке 4.35 диаграмм для каждой контролируемой переменной можно определить доминантный параметр материала. Однако за исключением переменных $\bar{P}^r$ и $\bar{\varepsilon}^r$, изменение которых контролируется преимущественно одним параметром материала ($P_0 \mapsto \bar{P}^r$, $\varepsilon_0 \mapsto \bar{\varepsilon}^r$) с единичными коэффициентами влияния ($S_{P_0}^{\bar{P}^r} = S_{\varepsilon_0}^{\bar{\varepsilon}^r} = 1$), в остальных случаях несколько параметров материала оказывают сопоставимое влияние на изменение контролируемых переменных, что затрудняет процесс идентификации.

Пороговое значение движущей силы G_c^{90} оказывает наибольшее влияние на рассматриваемые контролируемые переменные: в 4 случаях (для $\bar{E}_c$, $\bar{H}$, $\bar{\kappa}^\sigma$, $\bar{d}$) он является доминантным, а в 2 оставшихся случаях (для $\bar{P}^r$, $\bar{\varepsilon}^r$) он входит в тройку наиболее влиятельных параметров.

4.2 Верификация феноменологических моделей

Сравнение результатов различных феноменологических моделей с данными опытов рассматривалось в работах [305, 307, 309]. В данном разделе представлены результаты сравнения предсказаний разработанного варианта модели склерономного сегнетоэлектродупругого трансверсально-изотропного материала с квадратичным критерием переключения (2.138)-(2.142), (2.161)-(2.164), (2.172) с результатами экспериментов для поликристаллической пьезокерамики PZT PIC151. Параметры феноменологической модели, использованные в расчетах, приведены в Таблице 4.4.

Таблица 4.4 – Используемые в расчетах с применением феноменологической модели константы материала

Величина	Сим-вол	Размерность	PIC 151
Упругие модули	C_{3333}^E C_{1133}^E	ГПа	194 87,1
Диэл. проницаемость	κ_{33}^σ	нФ/м	22
Пьезоэлектр. модуль	d_{333}	пм/В	680
Спонтанная поляризация	P_0	Кл/м ²	0,5
Спонтанная деформация	ε_0	%	0,48
Коэрцитивное поле	E_c	МВ/м	0,93
Коэрцитивное напряжение	σ_c	МПа	28
Показатели степени уравнения эволюции	m_e m_m	- -	2,1 5,0
Параметры упрочнения	H_e H_m	м/Ф МПа	250000 2000
Фактор формы функции переключения	$\bar{\beta}$	-	2,0

На Рисунке 4.36 представлено сравнение результатов моделирования поведения поликристаллической сегнетопьезокерамики с использованием феноменологической модели при циклическом электрическом нагружении ($t_{\text{ц}} = 100$ сек, $f = 0,01$ Гц) с результатами экспериментов D. Zhou для PIC 151 [502].

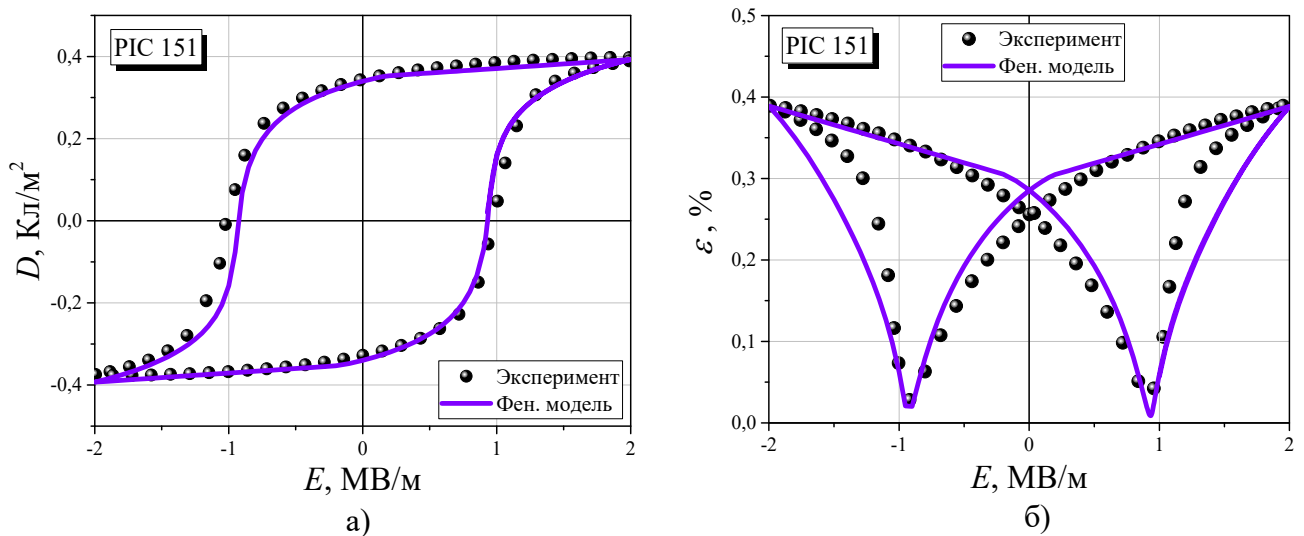


Рисунок 4.36 – Сравнение результатов расчетов с использованием феноменологической модели с экспериментом [502] для PZT PIC 151:

а) диэлектрический гистерезис, б) электромеханический гистерезис

Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 4.36а) и электро-механического гистерезиса в форме "бабочки" (Рисунке 4.36б) демонстрируют хорошее совпадение с результатами эксперимента.

На Рисунке 4.37 показано сравнение результатов моделирования нелинейного поведения при сжатии до 400 МПа с последующей разгрузкой до 0 ($t_{\text{нагр}} = 160$ сек) с результатами экспериментов для *неполяризованной* керамики PIC 151 [502]. Рассматривается одноосное механическое воздействие в условиях отсутствия внешнего электрического поля. Расчетные кривые для продольной (Рисунок 4.37а) и поперечной (Рисунок 4.37б) деформаций демонстрируют удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента.

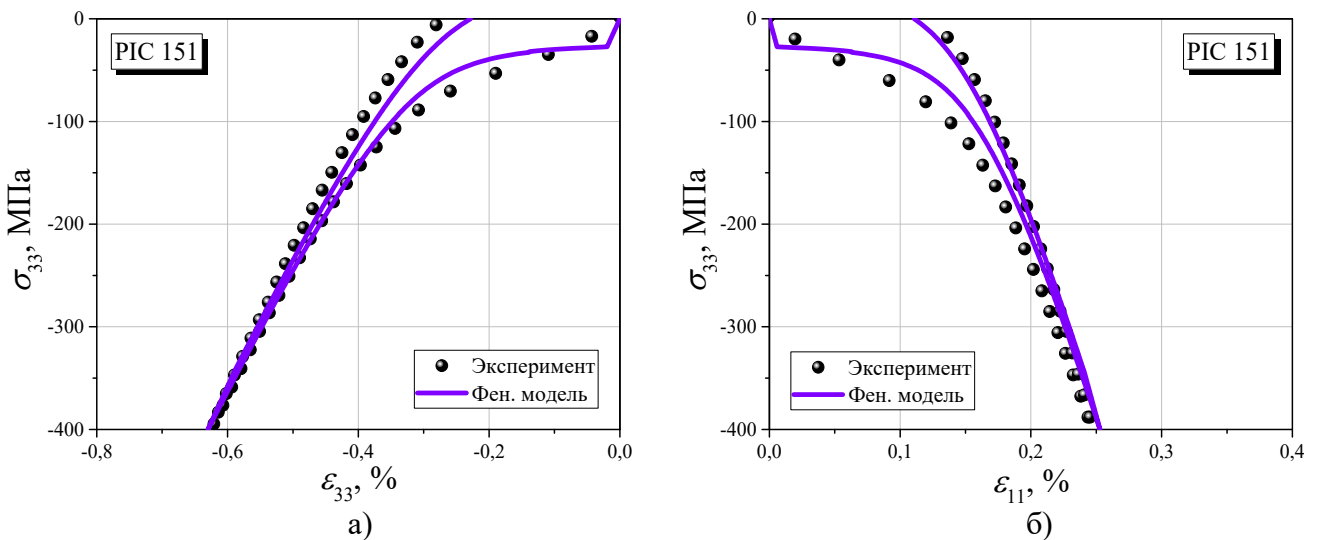


Рисунок 4.37 – Сравнение результатов расчетов с использованием феноменологической модели с экспериментами [502] на сжатие *неполяризованной* PZT PIC 151 керамики: а) продольная деформация-продольное напряжение, б) поперечная деформация-продольное напряжение

Аналогичные результаты для *поляризованной* керамики (предварительное электрическое воздействие 2 МВ/м с разгрузкой до 0, приводящее к остаточной деформации $\epsilon_{33}^r = \epsilon_{33}|_{E=0} = 0,28\%$ и остаточной поляризации $P_3^r = D_3|_{E=0} = -0,34$ Кл/м²) показаны на Рисунке 4.38.

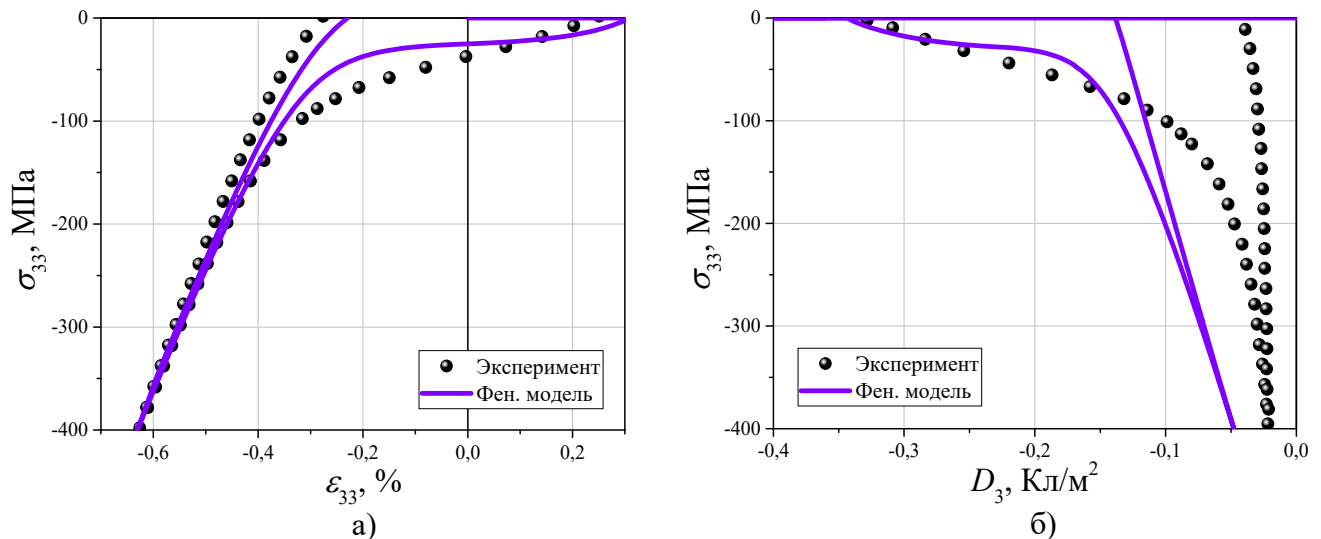


Рисунок 4.38 – Сравнение результатов расчетов с использованием феноменологической модели с экспериментами [502] на сжатие *поляризованной* PZT PIC 151 керамики:
а) кривая сжатия с разгрузкой, б) кривая деполяризации

Остаточная деформация после полуцикла сжатия начально поляризованной керамики оказалась равной остаточной деформации неполяризованной керамики (ср. Рисунки 4.37а и 4.38а). Феноменологическая модель корректно описывает наблюдаемое в эксперименте восстановление формы материала при механическом нагружении/разгрузке, приводящем к «забвению» формы, инициируемой начальной поляризацией при электрическом воздействии.

В рассмотренном выше случае механического воздействия на неполяризованную керамику (Рисунок 4.37) изменения поляризации не происходит – значение поляризации остается равным нулю. Для поляризованной керамики в результате механического сжимающего воздействия вдоль оси начальной поляризации наблюдается деполяризация (Рисунок 4.38б) – изменение осевой поляризации до значений, приближающихся к 0.

Следует отметить, что точность феноменологической модели может быть повышена при ограничении рассмотрением одного вида нагружения и идентификации констант материала на основе только рассматриваемого вида воздействия. Используемый в расчетах, показанных на Рисунках 4.36-4.38, единый набор констант материала позволяет получить валидные результаты как при электрическом, так и механическом и комбинированном нагружении, с достаточной точностью построить диэлектрический, электромеханический и механический гистерезисы.

Сравнение результатов расчетов с использованием критерия переключения (2.171), формулируемого в комбинированном пространстве внутренних сил и внутренних переменных, и предложенного критерия (2.172), формулируемого в пространстве внутренних сил и параметров анизотропии, показано на Рисунке 4.39. Все характеристики моделей выбраны совпадающими за исключением параметров формы критерия переключения: $\bar{\beta} = 2$ и $\delta = 0,6$. Наблюдается близость полученных результатов, указывающая на возможность использования (2.172) вместо (2.171).

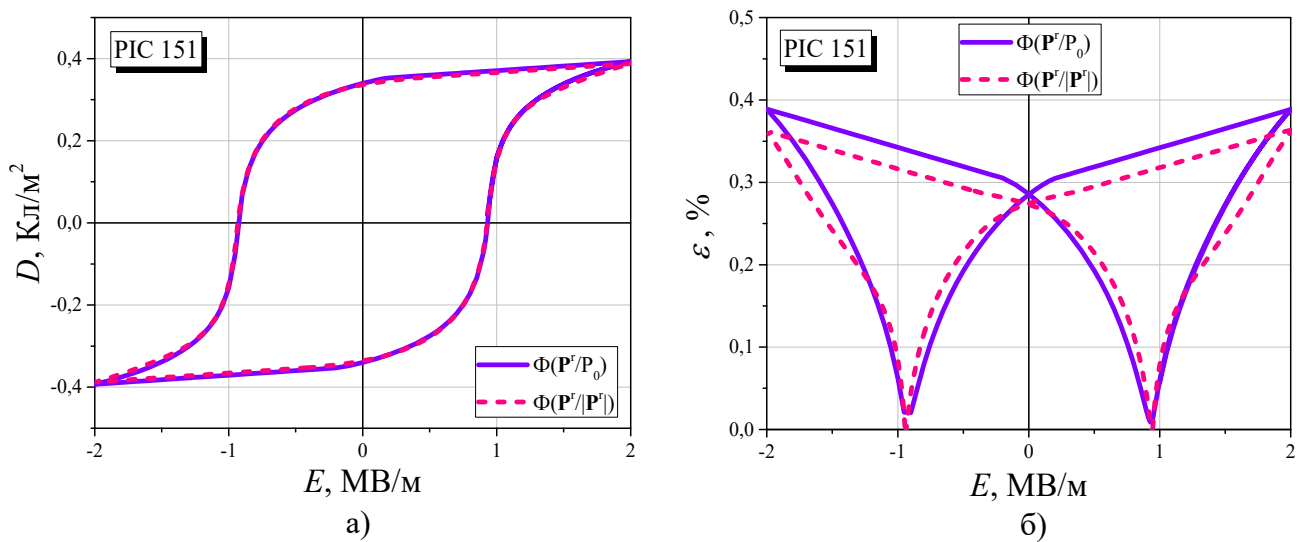


Рисунок 4.39 – Сравнение результатов расчетов с использованием критериев переключения $\Phi(\mathbf{P}^r / P_0)$ (2.171) и $\Phi(\mathbf{P}^r / |\mathbf{P}^r|)$ (2.172) для PZT PIC 151:

а) диэлектрический гистерезис, б) электромеханический гистерезис

Сравнение результатов расчетов с использованием *феноменологической* модели (Рисунки 4.36-4.38) с *микромеханической* моделью (Рисунки 4.9-4.12) при *одноосном* нагружении показало близость результатов. Однако при *многоосном* и *непропорциональном* нагружении точность прогнозов феноменологической модели становится ниже в сравнении с результатами микромеханической модели. Одной из возможных причин снижения точности является использование ассоциированных законов, справедливых для траекторий нагружения малой кривизны. Попытки обобщения феноменологической модели в рамках формализма эндохронной теории [466] или общей теории упругопластических процессов Ильюшина А.А. [37] представлены в работе [100]. В настоящее время при описании поведения сегнето-пьезокерамики при многоосном и непропорциональном нагружении использование микроструктурных моделей является предпочтительным.

Идентификация констант материала феноменологической модели и вида нелинейной функциональной зависимости потенциалов может осуществляться как на основе данных опыта, так и на основе результатов вычислительных экспериментов с использованием микроструктурных моделей.

В частности, оба базовых потенциала феноменологической модели сегнетоэлектростроупругости: свободная энергия и функция переключения могут быть определены на основе гомогенизации прогнозов микроструктурной теории при различных видах нагружения. В качестве примера на Рисунке 4.40 показаны результаты определения зависимости деформации насыщения ε_{sat} от вида деформированного состояния, входящей в выражение необратимой части свободной энергии. Сплошная кривая получена на основе метода КЭ гомогенизации ЭПО $3 \times 3 \times 3$ поликристалла для ряда случаев нагружения с различными видами деформированного состояния, характеризующихся тензором остаточных деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}^r = \varepsilon^r \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + b \varepsilon^r \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 - (1+b) \varepsilon^r \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3$, где b - произвольная постоянная, $I_3^r / I_2^r = -\text{sign} \varepsilon^r \sqrt{3} \sqrt{b+b^2} / \sqrt{2} \sqrt{1+b+b^2}$ [309]. Аппроксимация полученной кривой насыщения при помощи полинома 3ей степени (2.164) показана на Рисунке 4.40 пунктирной линией. Максимальное отличие не превосходит 5%.

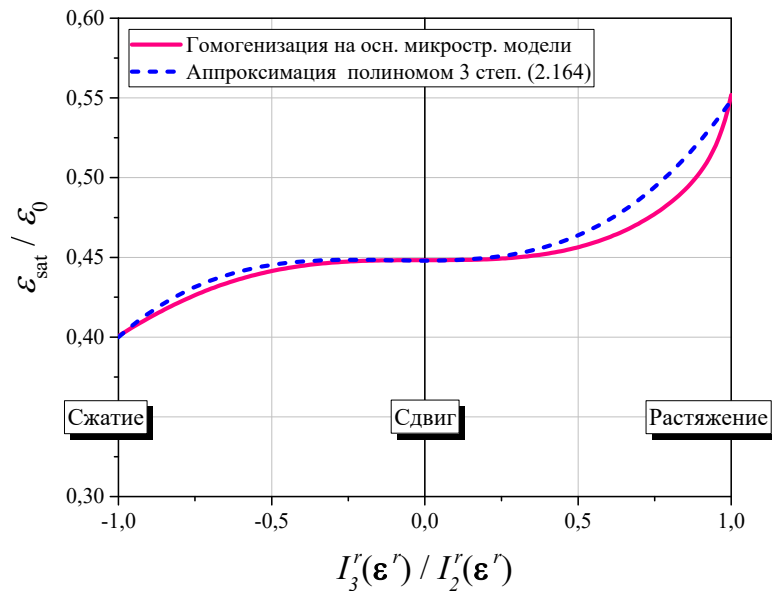


Рисунок 4.40 – Зависимость деформации насыщения поликристалла $\varepsilon_{sat} = I_2^r(\boldsymbol{\varepsilon}^r)$ от вида деформированного состояния (одноосное сжатие: $I_3^r / I_2^r = -1$, одноосное растяжение: $I_3^r / I_2^r = 1$, сдвиг: $I_3^r / I_2^r = 0$). Сплошная кривая соответствует КЭ гомогенизации на основе микроструктурной модели, пунктирная - аппроксимация полиномом 3ей степени (2.164)

Более трудоемкой является задача идентификации поверхности переключения на основе КЭ гомогенизации прогнозов микроструктурной теории. Результаты моделирования эволюции поверхности переключения в процессе нагружения по двухзвенной траектории с 90° изломом на основе тетрагональной микроструктурной модели показаны на Рисунке 4.41. Нагружение производилось до значения $E_x = 4$ МВ/м, а затем после излома до значения $E_x = 4$ МВ/м, $E_y = 4$ МВ/м.

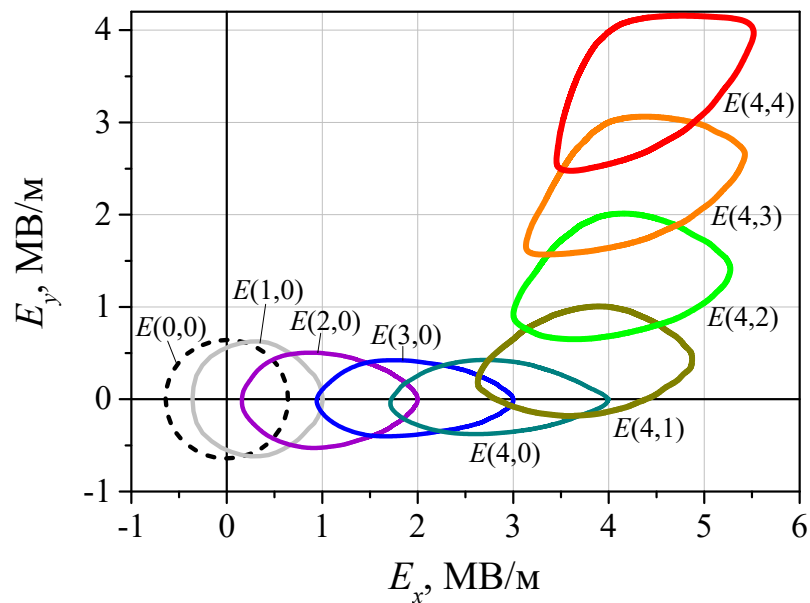


Рисунок 4.41 – Эволюция поверхности переключения в процессе электрического нагружения по двухзвенной траектории с 90° изломом (КЭ гомогенизация микроструктурной модели)

Для определения каждого из показанных на Рисунке 4.41 двумерных сечений поверхности переключения решалась серия краевых задач для ЭПО поликристалла для различных направлений лучевого нагружения из состояния, достигнутого после предварительного нагружения. По заданному допуску $\delta_{pr} = |\Delta \mathbf{P}^r| / P_0 = 0,1\%$ на изменение остаточной поляризации для каждого луча определялась точка границы поверхности переключения. Для получения каждой замкнутой кривой производился расчет 72 лучевых траекторий нагружения (шаг по углу 5°). Характер изменения формы и размеров поверхности переключения сегнетоэлектродупругих материалов в процессе нагружения обладает рядом схожих черт с поверхностью нагружения металлов (см., например, [385]). В качестве простейшей аппроксимации получившихся кривых переключения рассматривалось уравнение повернутого эллипса, ориентированного большой полуосью к началу координат

$\Phi = \frac{\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}}}{b^2 + e^2 (\hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{P}^r)^2 / (\mathbf{P}^r \cdot \mathbf{P}^r)} - 1$, где b и e – малая полуось и эксцентриситет эллипса, допускающие линейные аппроксимации от $|\mathbf{P}^r|$.

Как показали результаты КЭ гомогенизации для ЭПО поликристалла, двумерные сечения поверхности переключения в смешанном пространстве (механическое напряжение – электрическое поле) после предварительной поляризации также имеют вид, близкий к эллиптическому (Рисунок 4.42). Граница поверхности переключения определялась в серии лучевых нагружений после предварительного воздействия по заданному допуску $\delta_{P^r \varepsilon^r} = \sqrt{\Delta \mathbf{P}^r \cdot \Delta \mathbf{P}^r / P_0^2 + 2 / 3 \Delta \varepsilon^r \cdot \Delta \varepsilon^r / \varepsilon_0^2} = 0,1\%$ на изменение остаточной поляризации и деформации. Константы материала, используемые в КЭ расчетах с применением однофазной тетрагональной микроструктурной модели, соответствуют PZT PIC 151 из Таблицы 4.1.

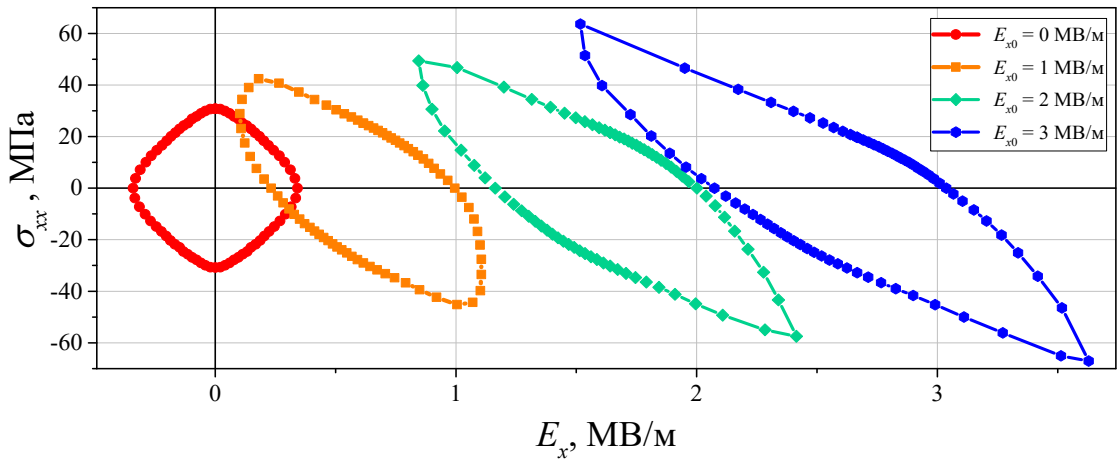


Рисунок 4.42 – Эволюция поверхности переключения в процессе одноосного электрического нагружения (КЭ гомогенизация микроструктурной модели)

В феноменологической модели на форму эллипса (отношение длин полуосей) наряду с коэрцитивным полем и напряжением оказывает влияние параметр $\bar{\beta}$ в (2.171) или δ в (2.172). Анализ условия выпуклости поверхности переключения приводит к следующим ограничениям $0 \leq \bar{\beta} \leq 3$ и $0 \leq \delta \leq 3$. Результаты варьирования $\bar{\beta}$ в (2.171) или δ в (2.172) для рассматриваемого случая комбинированного нагружения показаны на Рисунке 4.43.

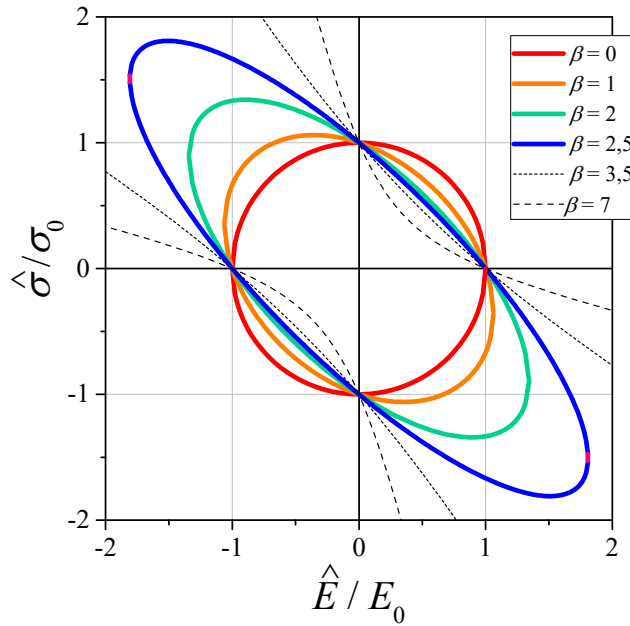


Рисунок 4.43 – Зависимость формы поверхности переключения в процессе электрического нагружения по двухзвенной траектории с 90° изломом

4.3 Краткие выводы к главе 4

Результаты проведенных многовариантных вычислительных экспериментов для моно- и поли-кристаллических сегнетоэлектрорупругих материалов позволяют сделать следующие выводы:

1. Для адекватного описания поведения поликристаллической сегнетопьезокерамики с использованием *микроструктурной* модели необходимо использование метода конечно-элементной *гомогенизации*, учитывающего взаимное влияние кристаллитов в поликристалле. В работе на основе многовариантных вычислительных экспериментов предложена оптимальная стратегия выполнения расчетов и даны рекомендации по численной интерпретации кристаллита, выбору числа кристаллитов и конечных элементов, выбору модели материала.
2. При использовании *однофазной микроструктурной* модели с *идентификацией* ее параметров на основе данных опытов на *макроуровне* удастся получить *хорошее* соответствие результатов расчета поведения поликристалла с данными опытов для поликристаллических сегнетопьезокерамик PIC 151, PZT-5H, PLZT 8/65/35, PZT-51, PZT-4D и BaTiO₃. Однако при *идентификации* параметров однофазной тетрагональной микроструктурной модели на основе

данных на *микроуровне* (для кристаллической решетки) наблюдаются значительные отличия от результатов экспериментов для поликристаллической пьезокерамики. Наибольшие отличия выявлены в прогнозировании электромеханического гистерезиса.

3. При использовании *двухфазной микроструктурной* модели (тетрагональной/ромбоэдрической смеси) с *идентификацией* ее параметров на *микроуровне* удастся получить *хорошее* соответствие результатов расчета поведения поликристалла с данными опытов для поликристаллических сегнетопьезокерамик (с составами вблизи морфотропной границы). Удастся получить качественное и количественное соответствие для диэлектрического, электромеханического и механического гистерезисов, эффекта памяти формы, кривых деполяризации и реполяризации, эффекта наложения постоянного механического напряжения на циклическое электрическое поле и наоборот, а также кривых переполаризации при *непропорциональном* электрическом воздействии.
4. На основе результатов систематического *параметрического анализа* микроструктурной модели предложены оптимальные алгоритмы *идентификации* констант материала.
5. При использовании *феноменологической* модели удастся получить *хорошее* соответствие результатов расчета с данными опытов для поликристаллической сегнетопьезокерамики при пропорциональном нагружении. При комбинированном и непропорциональном нагружении точность прогнозов феноменологической модели ниже в сравнении с результатами микромеханической модели.
6. 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.

ГЛАВА 5. ОПИСАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ ВБЛИЗИ МОРФОТРОПНОЙ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ

5.1 Блокирующий эффект поликристалла вследствие взаимного влияния кристаллитов

5.1.1 Ориентационная зависимость остаточной деформации и остаточной поляризации для монокристалла

Рассмотрим ориентационные зависимости остаточной деформации и поляризации монокристалла относительно кристаллографической системы координат, связанной с элементарной ячейкой. Направление в пространстве, вдоль которого будем оценивать деформацию и поляризацию, будем характеризовать единичным вектором $\mathbf{n}$, который определяется двумя углами (сферической системы координат) $0 \leq \theta \leq \pi$ и $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ (см. Рисунок 5.1).

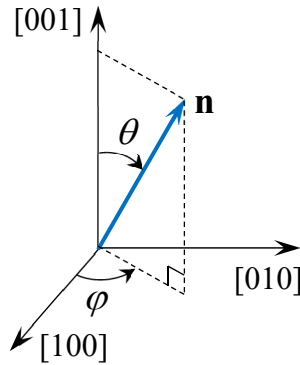


Рисунок 5.1 – Углы, характеризующие направление $\mathbf{n}$ относительно кристаллографической системы координат

Остаточная деформация и остаточная поляризация кристаллита в выбранном направлении с учетом (2.16) и (2.17) могут быть записаны как сумма вкладов отдельных доменов:

$$\varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I) = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^r \cdot \mathbf{n} = \sum_{I=1}^N c_I \mathbf{n} \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r \cdot \mathbf{n}, \quad (5.1)$$

$$P_n^r(\theta, \varphi, c_I) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}^r = \sum_{I=1}^N c_I \mathbf{n} \cdot \tilde{\mathbf{P}}_I^r, \quad (5.2)$$

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_{[100]} \sin \theta \cos \varphi + \mathbf{e}_{[010]} \sin \theta \sin \varphi + \mathbf{e}_{[001]} \cos \theta, \quad (5.3)$$

где c_I – концентрация (объемная доля) I -го домена в монокристалле ($I = 1 \dots N$). Тензоры спонтанной поляризации доменов $\tilde{\epsilon}_I^r$ и векторы спонтанной поляризации доменов $\tilde{P}_I^r$ являются постоянными величинами, определяемыми параметрами кристаллической решетки. Их выражения для тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического кристаллов представлены в Приложении А.

Основной интерес представляют ориентационные зависимости максимально возможной остаточной деформации $\max_{c_I} \epsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ и максимально возможной остаточной поляризации $\max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$. В силу линейных зависимостей $\epsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ (5.1) и $P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$ (5.2) от c_I максимальное значение остаточной деформации $\max_{c_I} \epsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ и поляризации $\max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$ кристалла соответствуют монодомону с ориентацией поляризации, наиболее близкой к рассматриваемому направлению $\mathbf{n}$ (инициируемой, например, при действии электрического поля $\mathbf{E}$ вдоль $\mathbf{n}$).

Целью представленных ниже исследований является определение экстремальных значений

$$\epsilon_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \epsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I), \quad \epsilon_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \epsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I), \quad (5.4)$$

$$P_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I), \quad P_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I) \quad (5.5)$$

и направлений в элементарной ячейке, при которых они реализуются для тетрагонального, ромбоэдрического, орторомбического монокристалла, а также произвольных смесей перечисленных фаз.

Полученные результаты могут быть использованы также при первичной оценке максимальной остаточной деформации и поляризации поликристалла (без учета взаимного влияния кристаллитов) на основе поверхностного усреднения в пределах полного телесного угла:

$$\epsilon_{mean}^r = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \max_{c_I} \epsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I) \sin \theta d\varphi d\theta, \quad (5.6)$$

$$P_{mean}^r = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I) \sin \theta d\varphi d\theta. \quad (5.7)$$

5.1.1.1 Тетрагональный монокристалл

Ориентационные зависимости максимально возможной относительной остаточной деформации $\max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I) / \varepsilon_0$ и максимально возможной относительной остаточной поляризации $\max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I) / P_0$ тетрагонального монокристалла представлены на Рисунке 5.2. Равные для всех доменов значения $\varepsilon_0 = \|\tilde{\varepsilon}_1^r\|$ и $P_0 = |\tilde{P}_1^r|$ соответствуют спонтанной деформации и спонтанной поляризации кристаллита. 6 лепестков получившихся фигур соответствуют 6 вариантам различных доменов тетрагонального монокристалла (поляризуемых вдоль 3 осей элементарной ячейки).

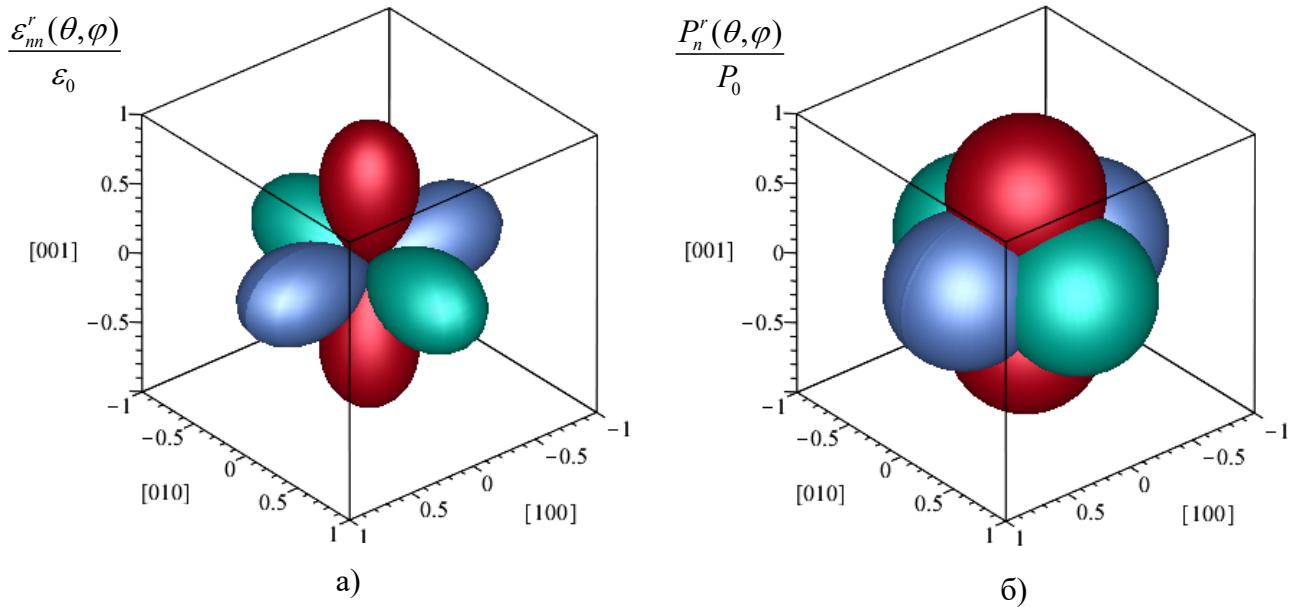


Рисунок 5.2 – Ориентационные зависимости:
 а) максимально возможной относительной остаточной деформации,
 б) максимально возможной относительной остаточной поляризации
 для тетрагонального монокристалла

Анализ экстремальных значений максимально возможной остаточной деформации при вариации направлений показал, что максимальные значения остаточной деформации $\max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ наблюдаются для 6 ориентаций $\langle 001 \rangle$, а минимальные $\min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ для 8 ориентаций $\langle 111 \rangle$ (см. Рисунки 5.2а и 5.3). Аналогичные направления экстремальных значений наблюдаются и для максимально возможной остаточной поляризации (см. Рисунок 5.4). Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации представлены в Таблице 5.1.

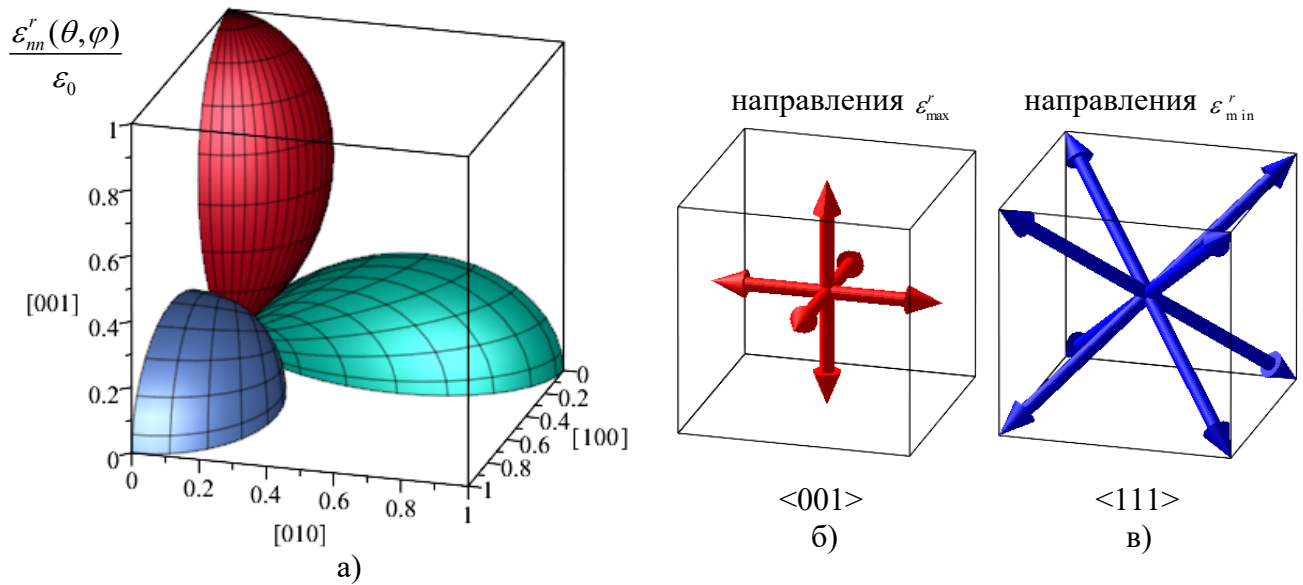


Рисунок 5.3 – Максимально возможные остаточные деформации для тетрагонального монокристалла:

- а) ориентационные зависимости относительной остаточной деформации (в I квадранте),
- б) направления максимальных значений,
- в) направления минимальных значений

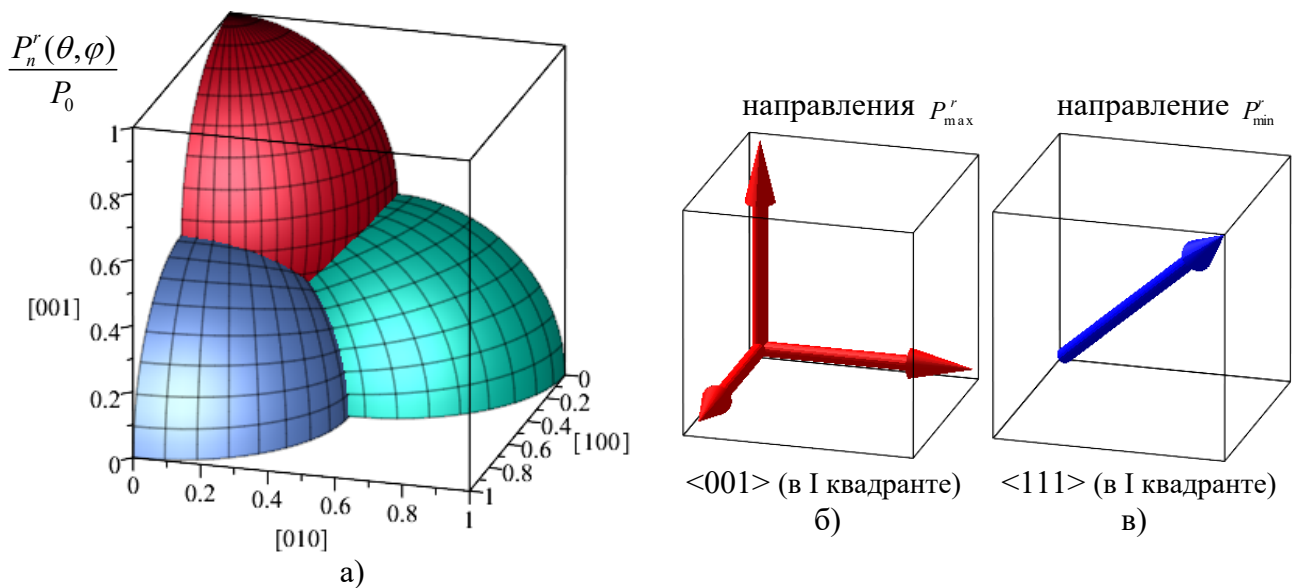


Рисунок 5.4 – Максимально возможные остаточные поляризации для тетрагонального монокристалла:

- а) ориентационные зависимости относительной остаточной поляризации (в I квадранте),
- б) направления максимальных значений (в I квадранте),
- в) направление минимального значения (в I квадранте)

Расчеты производились на основе (5.1)-(5.5) с использованием программного пакета символьных вычислений Maple 2019.

Таблица 5.1 – Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для тетрагонального монокристалла

	Значение	Направления
$\varepsilon_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$	ε_0	$\langle 001 \rangle$
$\varepsilon_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$	0	$\langle 111 \rangle$
$P_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$	P_0	$\langle 001 \rangle$
$P_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$	$P_0 / \sqrt{3}$	$\langle 111 \rangle$

Ориентационная зависимость остаточной деформации демонстрирует более сильную неоднородность (локализацию вдоль $\langle 001 \rangle$) в сравнении с ориентационной зависимостью остаточной поляризации (ср. Рисунки 5.3а и 5.4а). Важной особенностью тетрагонального монокристалла является равенство 0 максимальных значений остаточной деформации вдоль 8 направлений $\langle 111 \rangle$ (см. Таблицу 5.1 и Рисунок 5.3в).

Осредненные по всем возможным направлениям значения максимальных остаточных деформации и поляризации, вычисленные на основе формул (5.6)-(5.7), $\varepsilon_{mean}^r = 0,551\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,831P_0$ соответствуют представленным в различных литературных источниках [270, 276, 309, 333]. Полученные оценки указывают на существенное (почти в 2 раза) снижение у тетрагонального поликристалла по сравнению монокристаллом максимального уровня остаточной деформации. Снижение уровня остаточной поляризации на 27% является не таким значительным в сравнении со снижением на 45% для остаточных деформаций. Причиной этому является большая однородность ориентационного распределения у первых, в сравнении с более ярко выраженной локализацией вдоль $\langle 001 \rangle$ у вторых. Объяснением большей неоднородности (локализации) является наличие вторых степеней тригонометрических функций углов для остаточных деформаций и первых степеней у остаточной поляризации (см. (5.1)-(5.3)).

5.1.1.2 Ромбоэдрический монокристалл

Ориентационные зависимости максимально возможной относительной остаточной деформации $\max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I) / \varepsilon_0$ и максимально возможной относительной остаточной поляризации $\max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I) / P_0$ ромбоэдрического монокристалла представлены на Рисунке 5.5. Равные для всех доменов значения $\varepsilon_0 = \|\tilde{\varepsilon}_1^r\|$ и $P_0 = |\tilde{P}_1^r|$ соответствуют спонтанной деформации и спонтанной поляризации кристаллита. 8 лепестков получившихся фигур соответствует различным 8 доменам ромбоэдрического монокристалла (поляризуемых вдоль 4 главных диагоналей элементарной ячейки).

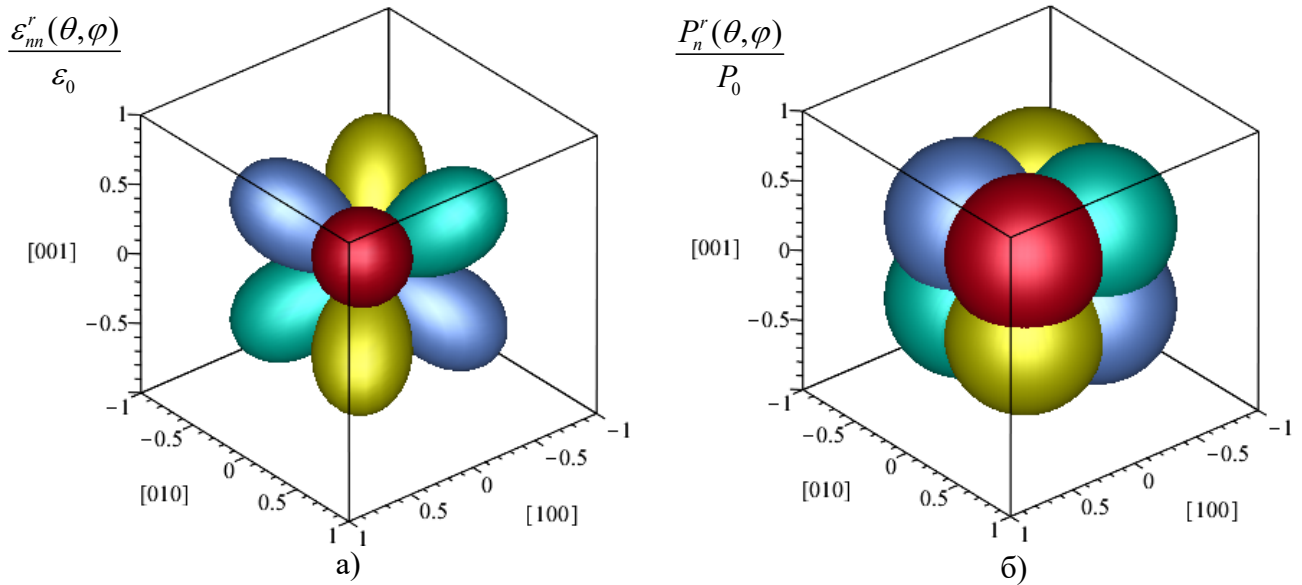


Рисунок 5.5 – Ориентационные зависимости:
 а) максимально возможной относительной остаточной деформации,
 б) максимально возможной относительной остаточной поляризации
 для ромбоэдрического монокристалла

Анализ экстремальных значений максимально возможной остаточной деформации при вариации направлений показал, что максимальные значения остаточной деформации $\max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ наблюдаются для 8 ориентаций $\langle 111 \rangle$, а минимальные $\min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ для 6 ориентаций $\langle 001 \rangle$ (см. Рисунки 5.5а и 5.6). Аналогичные направления экстремальных значений наблюдаются и для максимально возможной остаточной поляризации (см. Рисунок 5.7). Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации представлены в Таблице 5.2.

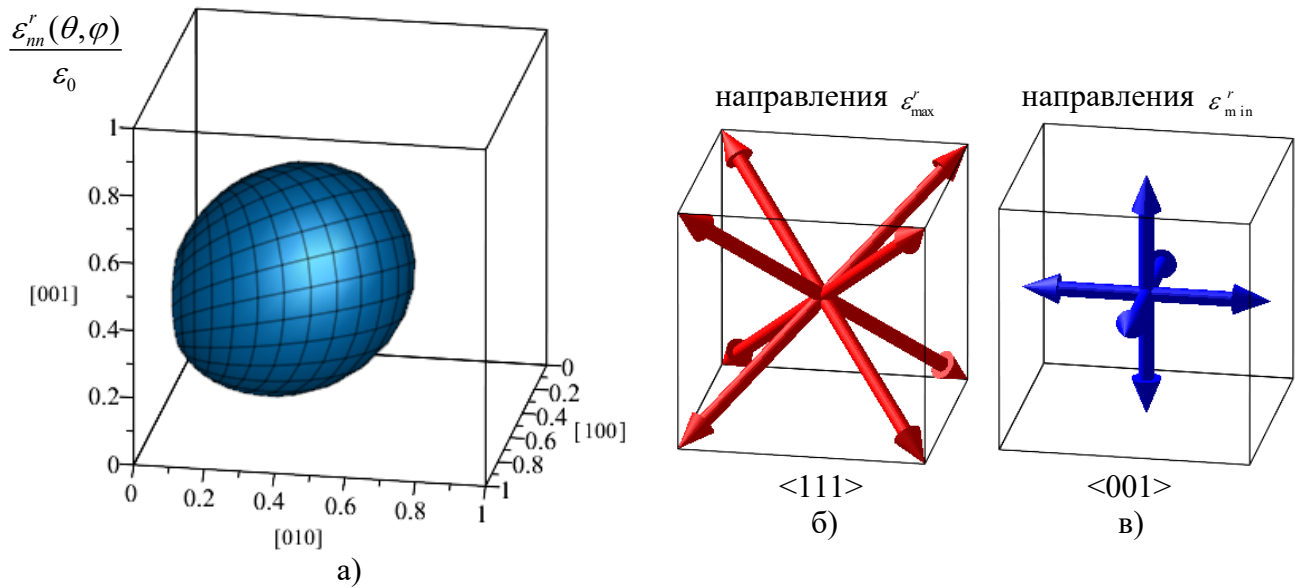


Рисунок 5.6 – Максимально возможные остаточные деформации для ромбоэдрического монокристалла:

- а) ориентационные зависимости относительной остаточной деформации (в I квадранте),
 б) направления максимальных значений,
 в) направления минимальных значений

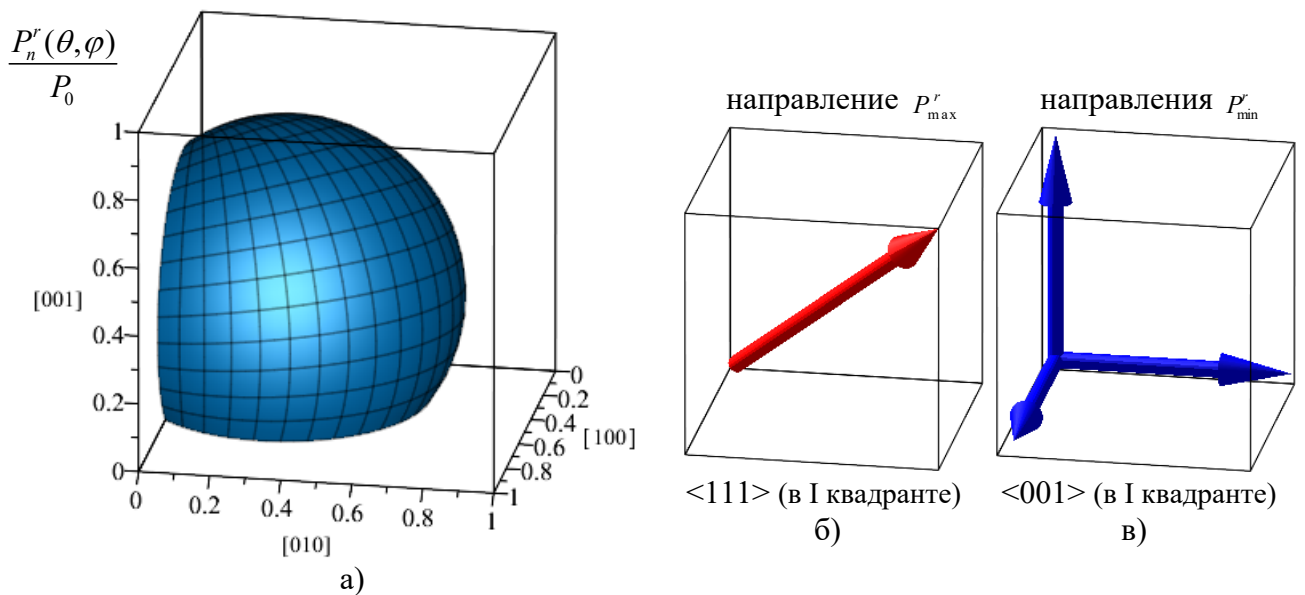


Рисунок 5.7 – Максимально возможные остаточные поляризации для ромбоэдрического монокристалла:

- а) ориентационные зависимости относительной остаточной поляризации (в I квадранте),
 б) направление максимального значения (в I квадранте),
 в) направления минимальных значений (в I квадранте)

Таблица 5.2 – Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для ромбоэдрического монокристалла

	Значение	Направления
$\varepsilon_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$	ε_0	$\langle 111 \rangle$
$\varepsilon_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$	0	$\langle 001 \rangle$
$P_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$	P_0	$\langle 111 \rangle$
$P_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$	$P_0 / \sqrt{3}$	$\langle 001 \rangle$

Ориентационная зависимость остаточной деформации демонстрирует более сильную неоднородность (локализацию вдоль $\langle 111 \rangle$) в сравнении с ориентационной зависимостью остаточной поляризации (ср. Рисунок 5.6а и 5.7а). Важной особенностью ромбоэдрического монокристалла является равенство 0 максимальных значений остаточной деформации вдоль 6 направлений $\langle 001 \rangle$ (см. Таблицу 5.2 и Рисунок 5.6в).

Сравнение результатов для тетрагонального и ромбоэдрического монокристаллов (ср. Таблицу 5.1 с Таблицей 5.2) позволяет установить, что для направлений, где у тетрагонального монокристалла наблюдается максимум остаточных деформаций и поляризации, у ромбоэдрического монокристалла наблюдается минимум и наоборот.

Осредненные по всем возможным направлениям значения максимально возможных остаточных деформации и поляризации, вычисленные на основе формул (5.6)-(5.7), $\varepsilon_{mean}^r = 0,637\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,866P_0$ для ромбоэдрического поликристалла оказались выше соответствующих тетрагональному поликристаллу. Причиной этому является бóльшая однородность ориентационного распределения у ромбоэдрического кристалла в силу наличия бóльшего количества направлений локализации максимумов (8 осей), в сравнении с 6 осями локализации у тетрагонального поликристалла.

5.1.1.3 Орторомбический монокристалл

Ориентационные зависимости максимально возможной относительной остаточной деформации $\max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I) / \varepsilon_0$ и максимально возможной относительной остаточной поляризации $\max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I) / P_0$ орторомбического монокристалла представлены на Рисунке 5.8. Равные для всех доменов значения $\varepsilon_0 = \|\tilde{\varepsilon}_I^r\|$ и $P_0 = |\tilde{\mathbf{P}}_I^r|$ соответствуют спонтанной деформации и спонтанной поляризации орторомбического кристалла. 12 лепестков получившихся фигур соответствует различным 12 вариантам доменов орторомбического монокристалла (поляризуемых вдоль 6 диагоналей боковых граней элементарной ячейки).

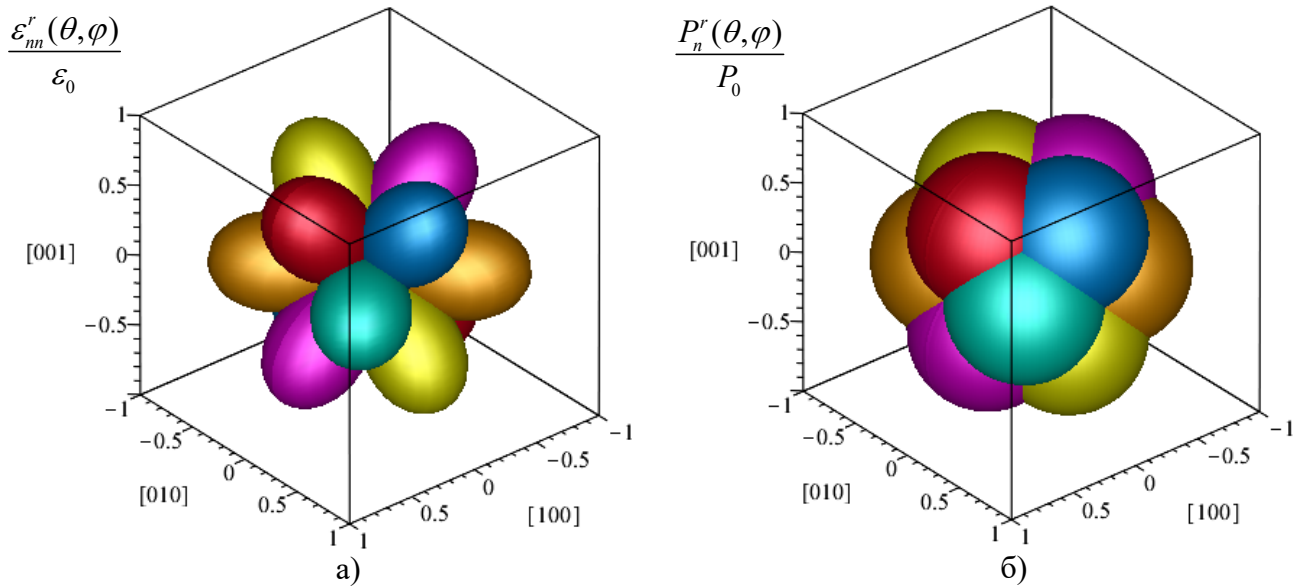


Рисунок 5.8 – Ориентационные зависимости:
 а) максимально возможной относительной остаточной деформации,
 б) максимально возможной относительной остаточной поляризации
 для орторомбического монокристалла

Анализ экстремальных значений максимально возможной остаточной деформации при вариации направлений показал, что максимальные значения остаточной деформации $\varepsilon_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ наблюдаются для 12 ориентаций $\langle 011 \rangle$, а минимальные $\varepsilon_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$ для 6 ориентаций $\langle 001 \rangle$ (см. Рисунки 5.8а и 5.9). Аналогичные направления экстремальных значений наблюдаются и для максимально возможной остаточной поляризации (см. Рисунок 5.10). Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации представлены в Таблице 5.3.

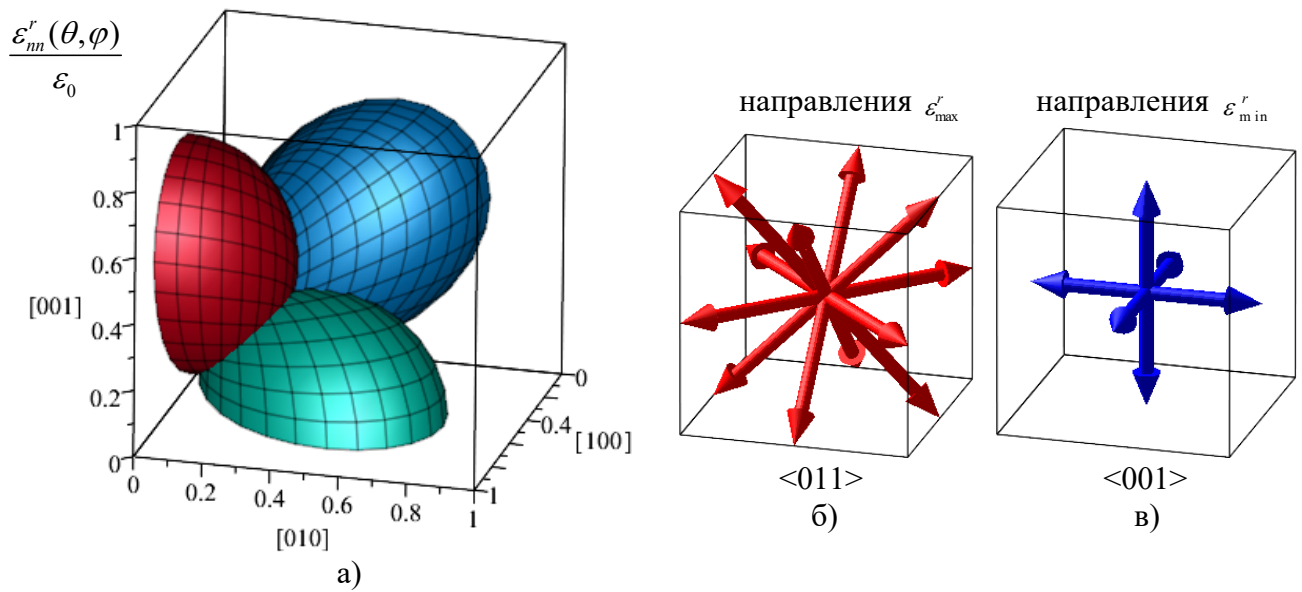


Рисунок 5.9 – Максимально возможные остаточные деформации для орторомбического монокристалла:

- а) ориентационные зависимости относительной остаточной деформации (в I квадранте),
 б) направления максимальных значений,
 в) направления минимальных значений

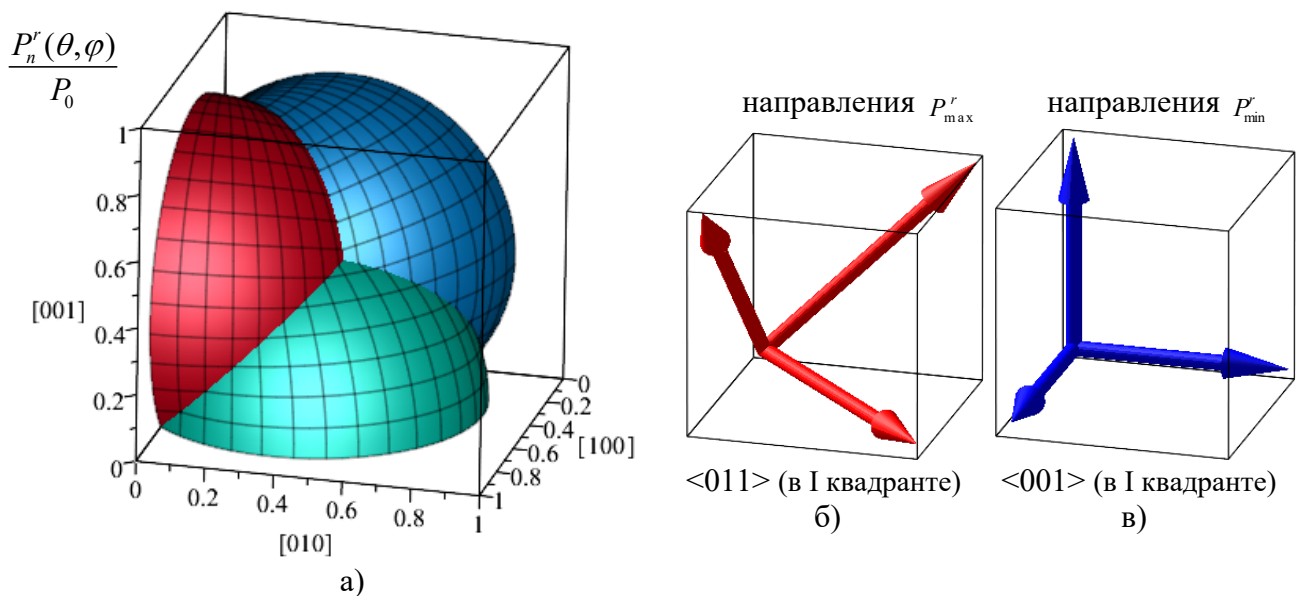


Рисунок 5.10 – Максимально возможные остаточные поляризации для орторомбического монокристалла:

- а) ориентационные зависимости относительной остаточной поляризации (в I квадранте),
 б) направление максимального значения (в I квадранте),
 в) направления минимальных значений (в I квадранте)

Таблица 5.3 – Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для орторомбического монокристалла

	Значение	Направления
$\varepsilon_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$	ε_0	$\langle 011 \rangle$
$\varepsilon_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} \varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, c_I)$	$\varepsilon_0 / 4$	$\langle 001 \rangle$
$P_{\max}^r = \max_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$	P_0	$\langle 011 \rangle$
$P_{\min}^r = \min_{\theta, \varphi} \max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$	$P_0 / \sqrt{2}$	$\langle 001 \rangle$

Ориентационная зависимость остаточной деформации демонстрирует более сильную неоднородность (локализацию вдоль $\langle 011 \rangle$) в сравнении с ориентационной зависимостью остаточной поляризации (ср. Рисунки 5.9а и 5.10а). В отличие от тетрагонального и ромбоэдрического кристаллов у орторомбического кристалла минимальное среди всех направлений значение остаточной деформации $\varepsilon_{\min}^r$ не обращается в 0 (см. Таблицу 5.3 и Рисунок 5.9в). Минимальное значение остаточной поляризации $P_{\min}^r = P_0 / \sqrt{2} = 0,707P_0$ у орторомбического кристалла также выше, чем у тетрагонального и ромбоэдрического кристаллов $P_{\min}^r = P_0 / \sqrt{3} = 0,577P_0$. Направления, при которых реализуются минимальные значения остаточной поляризации у орторомбического кристалла $\langle 001 \rangle$, совпадают с направлениями минимумов у ромбоэдрического и максимумов тетрагонального кристаллов (ср. Таблицы 5.1, 5.2 и 5.3).

Осредненные по всем возможным направлениям значения максимально возможных остаточных деформации и поляризации, вычисленные на основе формул (5.6)-(5.7), $\varepsilon_{mean}^r = 0,753\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,912P_0$ для орторомбического поликристалла оказались выше соответствующих значений для тетрагонального $\varepsilon_{mean}^r = 0,551\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,831P_0$ и ромбоэдрического $\varepsilon_{mean}^r = 0,637\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,866P_0$ поликристаллов. Причиной этому является бóльшая однородность ориентационного распределения у орторомбического кристалла в силу наличия бóльшего количества направлений локализации максимумов (12 осей), в сравнении с 6 осями локализации у тетрагонального и 8 осями у ромбоэдрического кристаллов.

5.1.1.4 Многофазная смесь

Рассматривается смесь трех фаз:

- тетрагональной, с объемной долей $c_T = \sum_{I=1}^6 c_I$;
- ромбоэдрической, с объемной долей $c_R = \sum_{I=7}^{14} c_I$;
- орторомбической, с объемной долей $c_O = \sum_{I=15}^{26} c_I$.

В соответствии с (2.11) объемные доли фаз удовлетворяют равенству

$$c_T + c_R + c_O = \sum_{I=1}^{26} c_I = 1. \quad (5.8)$$

При наличии нескольких фаз ориентационные зависимости максимально возможной остаточной деформации и поляризации усложняются вследствие необходимости учета зависимости от фазового состава (c_T, c_R) и от параметров материалов отдельных фаз ($\varepsilon_0^T, \varepsilon_0^R, \varepsilon_0^O, P_0^T, P_0^R, P_0^O$). В случае неизменного фазового состава (при фиксированных значениях объемных долей c_T и c_R) в отличие от однофазных случаев с $\varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, \varepsilon_0)$ и $P_n^r(\theta, \varphi, P_0)$ в аргументы рассматриваемых функций добавляются еще по 4 аргумента $\varepsilon_{nn}^r(\theta, \varphi, \varepsilon_0^T, \varepsilon_0^R, \varepsilon_0^O, c_T, c_R)$ и $P_n^r(\theta, \varphi, P_0^T, P_0^R, P_0^O, c_T, c_R)$, что усложняет анализ.

Рассмотрим первоначально случай с *равными для всех фаз параметрами* материала $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = \varepsilon_0^O = \varepsilon_0$ и $P_0^T = P_0^R = P_0^O = P_0$. Ориентационные зависимости максимально возможной относительной остаточной деформации и максимально возможной относительной остаточной поляризации представлены на Рисунке 5.11 для I квадранта кристаллографической системы координат для 4х различных вариантов смесей фаз:

- двухфазная тетрагональная и ромбоэдрическая с равными долями (Т/Р смесь),
- двухфазная тетрагональная и орторомбическая с равными долями (Т/О смесь),
- двухфазная ромбоэдрическая и орторомбическая с равными долями (Р/О смесь),
- трехфазная тетрагональная/ромбоэдрическая/орторомбическая с равными долями (Т/Р/О смесь).

В случае Т/Р смеси ($c_T = 0,5$, $c_R = 0,5$, $c_O = 0$) наблюдается 24 максимума (3 внутренних максимума в I квадранте) ориентационных зависимостей остаточной деформации (также и остаточной поляризации) в направлениях, близких к $\langle 311 \rangle$, и 12 минимумов в направлениях $\langle 011 \rangle$ (Рисунок 5.11а и 5.11б). Важно отметить, что минимальное значение остаточной деформации в смеси оказалось отличным от 0 (см. Таблицу 5.4), в то время как для каждой из фаз оно равнялось 0 (см. Таблицы 5.1 и 5.2). Это оказалось возможным благодаря взаимно дополняющим направлениям поляризации в тетрагональной и ромбоэдрической фазах. Направление максимумов у тетрагонального кристалла $\langle 001 \rangle$ соответствует направлению минимумов у ромбоэдрического кристалла. Направление минимумов у тетрагонального кристалла $\langle 111 \rangle$ соответствует направлению максимумов у ромбоэдрического.

В случае Т/О смеси ($c_T = 0,5$, $c_R = 0$, $c_O = 0,5$) наблюдается 24 максимума (6 максимумов на границе в I квадранте) в направлениях, близких к $\langle 210 \rangle$, и 8 минимумов (1 внутренний минимум в I квадранте) в направлениях $\langle 111 \rangle$ (Рисунок 5.11в и 5.11г). Минимальное значение остаточной деформации для тетрагональной фазы равно 0 в направлениях $\langle 111 \rangle$ в смеси повысилось до $0,25 \varepsilon_0$ (ср. Таблицы 5.1 и 5.4).

В случае Р/О смеси ($c_T = 0$, $c_R = 0,5$, $c_O = 0,5$) наблюдается 24 максимума (3 внутренних максимума в I квадранте) в направлениях, близких к $\langle 221 \rangle$, и 6 минимумов (3 минимума на границе в I квадранте) в направлениях $\langle 001 \rangle$ (Рисунок 5.11д и 5.11е). Минимальное значение остаточной деформации для ромбоэдрической фазы равно 0 в направлениях $\langle 001 \rangle$ в смеси повысилось до $0,125 \varepsilon_0$ (ср. Таблицы 5.2 и 5.4).

В случае Т/Р/О смеси ($c_T = 1/3$, $c_R = 1/3$, $c_O = 1/3$) наблюдается 48 максимумов (6 внутренних максимумов в I квадранте) в направлениях, близких к $\langle 421 \rangle$, и 6 минимумов (3 минимума на границе в I квадранте) в направлениях $\langle 001 \rangle$ (Рисунок 5.11ж и 5.11з). Минимальное значение остаточной деформации для ромбоэдрической фазы равно 0 в направлениях $\langle 111 \rangle$ в смеси повысилось до $0,417 \varepsilon_0$ (ср. Таблицы 5.1 и 5.4).

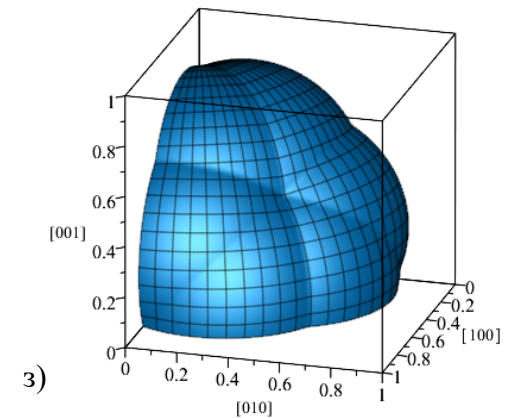
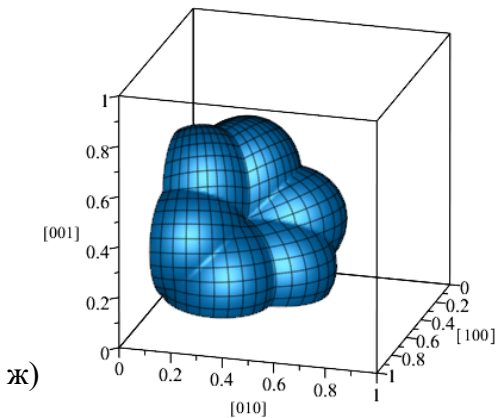
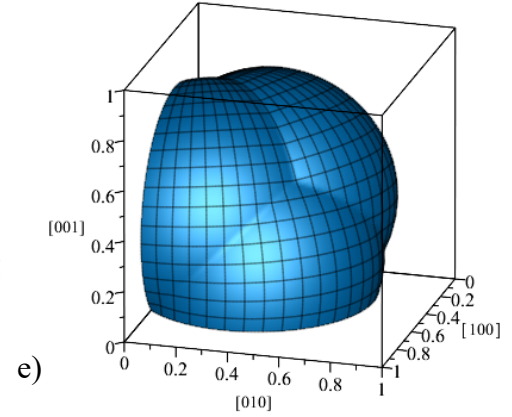
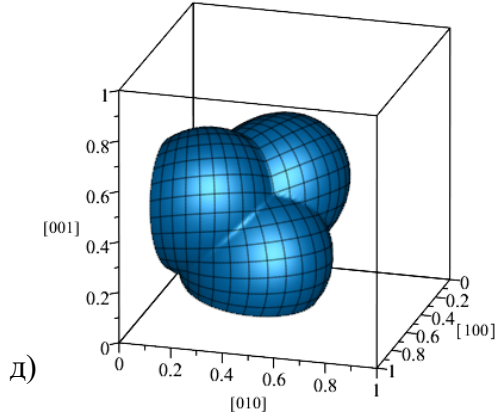
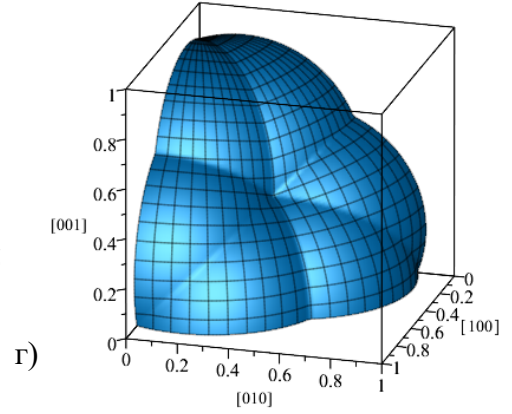
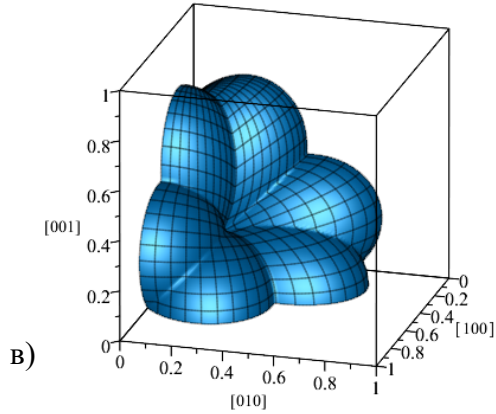
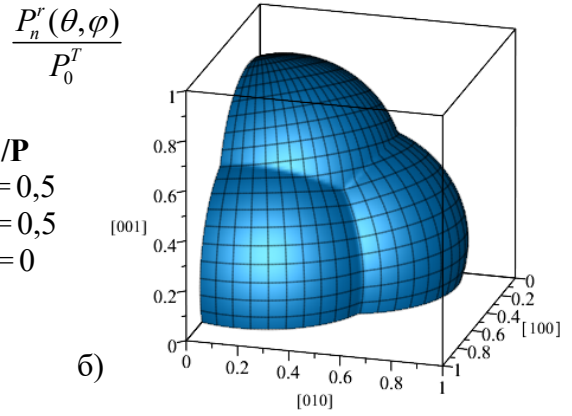
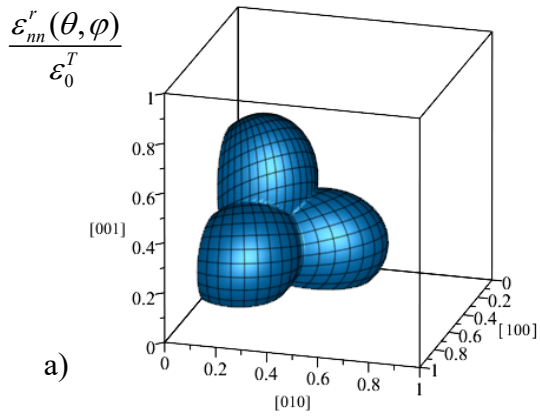


Рисунок 5.11 – Ориентационные зависимости:

а), в), д), ж) максимально возможной относительной остаточной деформации,
 б), г), е), з) максимально возможной относительной остаточной поляризации
 для равномодульных многофазных смесей: а)-б) Т/Р, в)-г) Т/О, д)-е) Р/О, ж)-з) Т/Р/О

Таблица 5.4 – Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для различных многофазных смесей и соответствующие им направления

	c_T	c_R	c_O		Значение	Направление
Т/Р	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\varepsilon_{\max}^r$	$0,683\varepsilon_0$	$\sim \langle 311 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	$0,375\varepsilon_0$	$\langle 011 \rangle$
				$P_{\max}^r$	$0,888P_0$	$\sim \langle 311 \rangle$
				$P_{\min}^r$	$0,762P_0$	$\langle 011 \rangle$
Т/О	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\varepsilon_{\max}^r$	$0,780\varepsilon_0$	$\sim \langle 210 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	$0,250\varepsilon_0$	$\langle 111 \rangle$
				$P_{\max}^r$	$0,924P_0$	$\sim \langle 210 \rangle$
				$P_{\min}^r$	$0,697P_0$	$\langle 111 \rangle$
Р/О	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\varepsilon_{\max}^r$	$0,862\varepsilon_0$	$\sim \langle 221 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	$0,125\varepsilon_0$	$\langle 001 \rangle$
				$P_{\max}^r$	$0,953P_0$	$\sim \langle 221 \rangle$
				$P_{\min}^r$	$0,642P_0$	$\langle 001 \rangle$
Т/Р/О	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\varepsilon_{\max}^r$	$0,703\varepsilon_0$	$\sim \langle 421 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	$0,417\varepsilon_0$	$\langle 001 \rangle$
				$P_{\max}^r$	$0,895P_0$	$\sim \langle 421 \rangle$
				$P_{\min}^r$	$0,762P_0$	$\langle 001 \rangle$

Осредненные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации, вычисленные на основе формул (5.6)-(5.7), представлены в Таблице 5.5 для всех вариантов смесей, а также для удобства сравнения и для чистых фаз. В таблице 5.5 также приведены соответствующие минимальные и максимальные значения.

Таблица 5.5 – Осредненные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для различных однофазных и многофазных композиций

	c_T	c_R	c_O	$\varepsilon_{\min}^r / \varepsilon_0$	$\varepsilon_{\text{mean}}^r / \varepsilon_0$	$\varepsilon_{\max}^r / \varepsilon_0$	$P_{\min}^r / P_0$	P_{mean}^r / P_0	$P_{\max}^r / P_0$
Т	1	0	0	0	0,551	1	0,577	0,831	1
Р	0	1	0	0	0,637	1	0,577	0,866	1
О	0	0	1	0,250	0,753	1	0,707	0,912	1
Т/Р	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0,375	0,594	0,683	0,762	0,849	0,888
Т/О	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	0,250	0,652	0,780	0,697	0,872	0,924
Р/О	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0,125	0,695	0,862	0,642	0,889	0,953
Т/Р/О	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0,417	0,647	0,703	0,762	0,870	0,895

Среди всех рассмотренных в Таблице 5.5 многофазных композиций наибольшие значения осредненных относительных остаточных деформации и поляризации $\varepsilon_{mean}^r / \varepsilon_0 = 0,695$ и $P_{mean}^r / P_0 = 0,889$ наблюдаются для Р/О смеси ($c_T = 0$, $c_R = 1/2$, $c_O = 1/2$).

На практике редко встречается рассмотренный выше идеализированный случай с равными для всех фаз параметрами материала $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = \varepsilon_0^O = \varepsilon_0$ и $P_0^T = P_0^R = P_0^O = P_0$. Например, для PZT керамики вблизи морфотропной границы значения спонтанных деформаций при комнатной температуре для тетрагональной и ромбоэдрической фаз различаются почти в 4 раза $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ и $\varepsilon_0^R = 0,55\%$ [270, 368, 372]. Однако в этом случае наблюдается равенство спонтанных поляризаций $P_0^T = P_0^R = 0,5 \text{ Кл/м}^2$ [242, 368].

Ориентационные зависимости максимально возможной относительной остаточной деформации и максимально возможной относительной остаточной поляризации для случая Т/Р смеси с отличающимися параметрами $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ и $\varepsilon_0^R = 0,55\%$ представлены на Рисунке 5.12 для I квадранта кристаллографической системы координат при 4х различных концентрациях тетрагональной фазы:

- $c_T = 1$, $c_R = 0$, $c_O = 0$,
- $c_T = 0,4$, $c_R = 0,6$, $c_O = 0$,
- $c_T = 0,2$, $c_R = 0,8$, $c_O = 0$,
- $c_T = 0$, $c_R = 1$, $c_O = 0$.

Выбор достаточно малых значений $c_T = 0,4; 0,2; 0$ обусловлен тем, что при больших значениях c_T не наблюдается визуально заметных отличий от случая $c_T = 1$ в форме ориентационных зависимостей для остаточных деформаций.

При уменьшении объемной доли тетрагональной фазы c_T число ориентаций, для которых наблюдаются максимальные остаточные деформации, изменяется от 12 при $c_T = 1$ до 24 при $0 < c_T < 1$ и становится равным 8 при $c_T = 0$. Три изначально ортогональных лепестка, постепенно сближаясь с уменьшением c_T , объединяются в один. Для разномодульной смеси направления максимальных остаточных поляризаций не совпадают с направлениями максимальных остаточных деформаций.

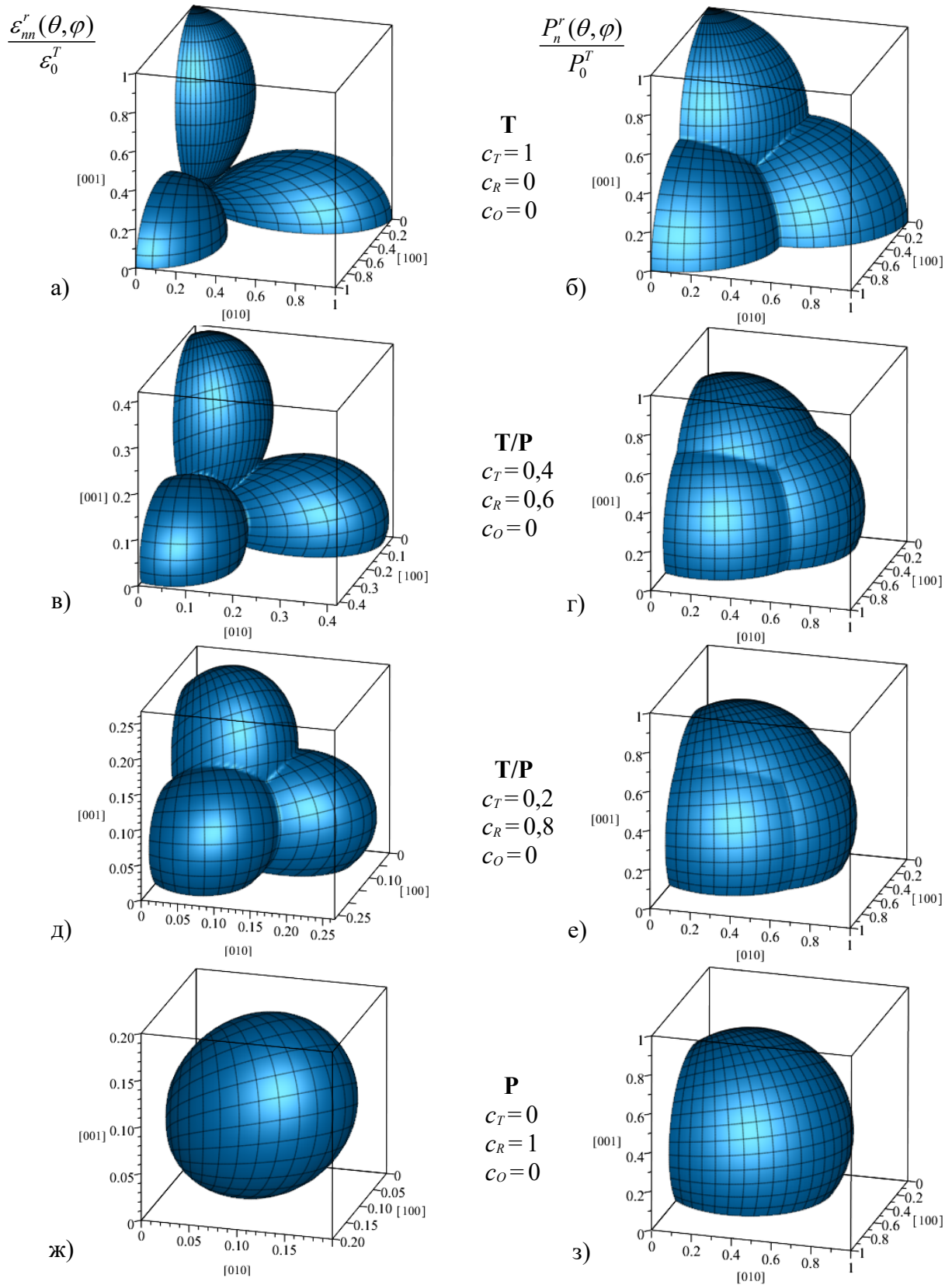


Рисунок 5.12 – Ориентационные зависимости:

а), в), д), ж) максимально возможной относительной остаточной деформации,
 б), г), е), з) максимально возможной относительной остаточной поляризации
 для разномодульной двухфазной смеси: а)-б) $c_T = 1$; в)-г) $c_T = 0,4$; д)-е) $c_T = 0,2$; ж)-з) $c_T = 0$

Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для разномодульной двухфазной смеси представлены в Таблице 5.6.

Таблица 5.6 – Экстремальные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации разномодульной двухфазной смеси и соответствующие им направления

	c_T	c_R	c_O		Значение	Направление
Т/Р $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ $\varepsilon_0^R = 0,55\%$	1	0	0	$\varepsilon_{\max}^r$	1,91 %	$\langle 001 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	0	$\langle 111 \rangle$
				$P_{\max}^r$	0,500 [Кл/м ²]	$\langle 001 \rangle$
				$P_{\min}^r$	0,289 [Кл/м ²]	$\langle 111 \rangle$
	0,4	0,6	0	$\varepsilon_{\max}^r$	0,817 %	$\sim \langle 611 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	0,330 %	$\langle 111 \rangle$
				$P_{\max}^r$	0,446 [Кл/м ²]	$\sim \langle 211 \rangle$
				$P_{\min}^r$	0,386 [Кл/м ²]	$\langle 011 \rangle$
	0,2	0,8	0	$\varepsilon_{\max}^r$	0,563 %	$\sim \langle 522 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	0,316 %	$\langle 011 \rangle$
				$P_{\max}^r$	0,465 [Кл/м ²]	$\sim \langle 322 \rangle$
				$P_{\min}^r$	0,331 [Кл/м ²]	$\langle 001 \rangle$
	0	1	0	$\varepsilon_{\max}^r$	0,55 %	$\langle 111 \rangle$
				$\varepsilon_{\min}^r$	0	$\langle 001 \rangle$
				$P_{\max}^r$	0,500 [Кл/м ²]	$\langle 111 \rangle$
				$P_{\min}^r$	0,289 [Кл/м ²]	$\langle 001 \rangle$

Осредненные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации, вычисленные на основе формул (5.6)-(5.7), а также соответствующие максимальные и минимальные значения представлены в Таблице 5.7 для различных c_T .

Таблица 5.7 – Осредненные значения максимально возможной остаточной деформации и поляризации для разномодульных двухфазных композиций

	c_T	c_R	c_O	$\varepsilon_{\min}^r$ %	$\varepsilon_{\text{mean}}^r$ %	$\varepsilon_{\max}^r$ %	$P_{\min}^r$ [Кл/м ²]	P_{mean}^r [Кл/м ²]	$P_{\max}^r$ [Кл/м ²]
Т/Р $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ $\varepsilon_0^R = 0,55\%$	1	0	0	0	1,052	1,910	0,289	0,416	0,500
	0,8	0,2	0	0,110	0,912	1,531	0,331	0,419	0,465
	0,6	0,4	0	0,220	0,772	1,161	0,375	0,423	0,446
	0,4	0,6	0	0,330	0,631	0,817	0,386	0,426	0,446
	0,2	0,8	0	0,316	0,491	0,563	0,331	0,430	0,465
	0	1	0	0	0,350	0,550	0,289	0,433	0,500

При уменьшении c_T монотонно убывают максимальные и средние значения остаточной деформации $\varepsilon_{\max}^r$ и $\varepsilon_{\text{mean}}^r$, в то время как минимальная остаточная деформация $\varepsilon_{\min}^r$ демонстрирует наличие максимума внутри диапазона изменения c_T при значении, близком к $c_T = 0,4$ (см. Таблицу 5.7). Аналогичный максимум внутри интервала изменения c_T наблюдается и у минимальной остаточной поляризации $P_{\min}^r$.

5.1.2 Учет взаимного влияния кристаллитов в поликристалле на основе реологической модели

Полученные в разделе 5.1.1 осредненные характеристики остаточной деформации и поляризации для поликристалла не учитывают взаимное влияние кристаллитов друг на друга. Это приводит к значительной погрешности в вычислении остаточной деформации и поляризации поликристалла, поскольку оно оказывают существенное влияние на процессы переключения.

Покажем это на основе рассмотрения простейшей реологической (структурной) модели поликристалла (бикристалла), представленной на Рисунке 5.13.

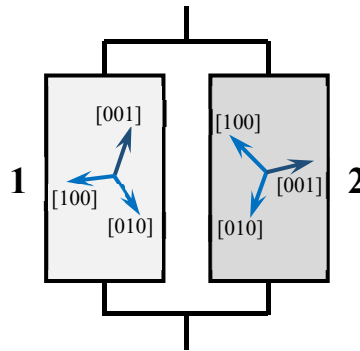


Рисунок 5.13 – Простейшая реологическая модель поликристалла для оценки взаимного влияния кристаллитов

Одномерный вариант модели рассматривался ранее в работе [368].

Условия параллельного соединения элементов определяются уравнениями:

$$\sigma_1 + \sigma_2 = \sigma, \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon, \quad (5.9)$$

$$D_1 + D_2 = D, \quad E_1 = E_2 = E. \quad (5.10)$$

Определяющие уравнения для каждого элемента имеют вид (2.15)-(2.18), (2.34), (2.40). Для простоты введем предположение об изотропии упругих и диэлектрических свойств кристаллов и равенства всех констант материала у 1 и 2 элементов:

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \lambda \mathbf{1} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} + 2\mu(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_1^r) - \mathbf{E} \cdot^3 \mathbf{e}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \lambda \mathbf{1} \text{tr} \boldsymbol{\varepsilon} + 2\mu(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_2^r) - \mathbf{E} \cdot^3 \mathbf{e}, \quad (5.11)$$

где упругие свойства характеризуются упругими модулями Ламе: $\lambda = 2\mu\nu / (1 - 2\nu)$ и μ (модуль сдвига); ν – коэффициент Пуассона.

Основное отличие между элементами 1 и 2 заключается в тензорах остаточных деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}_1^r$ и $\boldsymbol{\varepsilon}_2^r$ и векторах остаточной поляризации $\mathbf{P}_1^r$ и $\mathbf{P}_2^r$. Будем предполагать, что они при одинаковых значениях спонтанных характеристик определяются различными тензорами поворотов локальных осей кристаллитов $\mathbf{R}_1$ и $\mathbf{R}_2$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1^r = \sum_{I=1}^N c_I^1 \mathbf{R}_1 \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r \cdot \mathbf{R}_1^T, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2^r = \sum_{I=1}^N c_I^2 \mathbf{R}_2 \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r \cdot \mathbf{R}_2^T, \quad (5.12)$$

$$\mathbf{P}_1^r = \sum_{I=1}^N c_I^1 \mathbf{R}_1 \cdot \tilde{\mathbf{P}}_I^r, \quad \mathbf{P}_2^r = \sum_{I=1}^N c_I^2 \mathbf{R}_2 \cdot \tilde{\mathbf{P}}_I^r. \quad (5.13)$$

где c_I – концентрация (объемная доля) I -го домена в монокристалле. Конкретные значения постоянных тензоров $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_I^r = \boldsymbol{\varepsilon}_I^S$ и $\tilde{\mathbf{P}}_I^r = \mathbf{P}_I^S$, определяемых значениями спонтанной деформации и поляризации для различных типов кристаллической решетки, представлены в приложении А соотношениями (А.1)-(А.8).

Для простоты ограничимся рассмотрением случая одноосного нагружения: $\boldsymbol{\sigma} = \sigma \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3$ и $\mathbf{E} = E \mathbf{e}_3$, где $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ – ортонормированный базис лабораторной системы координат. Будем предполагать, что и первый, и второй элемент реологической модели являются тетрагональными кристаллами. Кристаллографические оси первого элемента ориентируем вдоль базиса лабораторной системы координат: $\mathbf{e}_{[100]}^1 = \mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_{[010]}^1 = \mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_{[001]}^1 = \mathbf{e}_3$. Тензор поворота в этом случае является единичным тензором $\mathbf{R}_1 = \mathbf{1}$. Кристаллографические оси второго элемента ориентируем так, чтобы ось нагружения $\mathbf{e}_3$ совпадала с направлением $\mathbf{e}_{[111]}^2 = \mathbf{e}_3$: $\mathbf{e}_{[100]}^2 = (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) / \sqrt{2}$, $\mathbf{e}_{[010]}^2 = (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - 2\mathbf{e}_3) / \sqrt{6}$, $\mathbf{e}_{[001]}^2 = (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) / \sqrt{3}$. Тензор поворота определяется равенством $\mathbf{R}_2 = \mathbf{e}_{[100]}^2 \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_{[010]}^2 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_{[001]}^2 \mathbf{e}_3$. Подобный выбор обеспечивает существенное упрощение при решении задачи, поскольку, как показано в разделе 5.1.1.1, для второго элемента

остаточные деформации вдоль оси нагружения будут отсутствовать $\varepsilon_{\langle 111 \rangle}^r = \varepsilon_{\min}^r = 0$. В этом случае эффект взаимного влияния кристаллитов будет наиболее сильным.

Следствием (5.9)₁ и (5.11) получается выражение для тензора деформации реологической модели как функции заданного тензора напряжений и вектора электрического поля, а также вкладов тензоров остаточных деформаций каждого из элементов:

$$\varepsilon = \frac{1}{4\mu} \left(\sigma - \frac{\lambda}{3\lambda + 2\mu} \mathbf{1} \text{tr} \sigma \right) + \frac{\varepsilon_1^r + \varepsilon_2^r}{2} - \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{e} - \frac{\lambda}{3\lambda + 2\mu} \mathbf{1} \text{tr} \mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{e} \right). \quad (5.14)$$

Результирующая остаточная деформация модели, как видно из (5.14), определяется средним значением остаточных деформаций элементов:

$$\varepsilon^r = \frac{\varepsilon_1^r + \varepsilon_2^r}{2}. \quad (5.15)$$

Распределение внутренних напряжений в элементах (микронапряжений) определяется на основе подстановки (5.14) в (5.11):

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \left[\sigma - 2\mu (\varepsilon_1^r - \varepsilon_2^r) \right], \quad \sigma_2 = \frac{1}{2} \left[\sigma + 2\mu (\varepsilon_1^r - \varepsilon_2^r) \right]. \quad (5.16)$$

Процессы переключения и накопления остаточных деформаций в кристаллитах определяются локальными напряжениями в элементах (микронапряжениями) σ_1 и σ_2 . Аналитические решения для описания процессов переключения тетрагонального *монокристалла* при одноосном нагружении представлены в Приложении Б. Остаточная деформация в элементе 1 при одноосном механическом воздействии (растяжении) определяется уравнениями (Б.8), а в элементе 2 при рассматриваемой схеме нагружения (вдоль $\mathbf{e}_{[111]}^2$) процессы переключения не происходят, и остаточная деформация на протяжении всего процесса нагружения остается равной нулю:

$$\varepsilon_1^r = (1 - 6c_1) \varepsilon_3^s, \quad \varepsilon_2^r = \mathbf{0}, \quad (5.17)$$

где скорость изменения концентрации $\dot{c}_1 = -2\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ для реономной модели сегнетоэластического кристалла с порогом переключения (2.40) при растяжении определяется выражением (Б.17), тензор ε_3^s задается выражением (А.2).

Уравнение эволюции для осевой остаточной деформации $\varepsilon_1^r = \mathbf{e}_3 \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_1^r \cdot \mathbf{e}_3 = (1 - 6c_1) \varepsilon_0$, получаемое на основе (5.17) и (Б.17) при условии активного нагружения (при растяжении) $G_1^{1 \rightarrow 3} \geq G_c$, имеет вид:

$$\dot{\varepsilon}_1^r = 12B\varepsilon_0 \left(\frac{G_1^{1 \rightarrow 3}}{G_c} - 1 \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, \quad (5.18)$$

где движущая сила $G_1^{1 \rightarrow 3}$ определяется с учетом (Б.15), (5.16), (5.17) и (А.2) равенством:

$$G_1^{1 \rightarrow 3} = \sigma_1 \cdots \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{1 \rightarrow 3}^S = \frac{3}{4} \sigma \varepsilon_0 - \frac{9}{4} \mu \varepsilon_1^r \varepsilon_0. \quad (5.19)$$

Сравнение полученного выражения (5.19) для модели поликристалла с аналогичным представлением движущей силы для монокристалла (Б.15) указывает на появление в (5.19) второго слагаемого, характеризующего наличие микронапряжений $3\mu\varepsilon_1^r$ вследствие взаимного влияния кристаллитов. По аналогии с теорией пластичности появление в критерии переключения дополнительного слагаемого (вычитаемого), пропорционального ε_1^r , приводит к появлению у модели свойств линейного кинематического (трансляционного) упрочнения. Наиболее ярко указанные свойства проявляются при разгрузке и циклическом нагружении.

Уравнение (5.19) также показывает, что при растяжении бикристалла наличие положительных остаточных деформаций ε_1^r приводит к уменьшению движущей силы в элементе 1, что вызывает ограничивающий или блокирующий эффект процесса переключений вследствие взаимного влияния соседних кристаллитов. Значение движущей силы для свободного (не стесненного соседними кристаллитами) монокристалла в аналогичных условиях нагружения будет больше благодаря отсутствию влияния ε_1^r на σ_1 и $G_1^{1 \rightarrow 3}$.

Следствием условия начала переключений $G_1^{1 \rightarrow 3} = G_c$ на основе (5.19) определяется коэрцитивное напряжение поликристалла в рассматриваемой модели

$$\bar{\sigma}_c = 4G_c / 3\varepsilon_0. \quad (5.20)$$

Оно оказалось в 2 раза больше коэрцитивного напряжения кристаллита (Б.19).

Подстановка (5.19) в (5.18) приводит к дифференциальному уравнению для определения остаточной деформации ε_1^r при *первичном нагружении*:

$$\dot{\varepsilon}_1^r = \alpha (\beta - \varepsilon_1^r)^n (\varepsilon_0 - \varepsilon_1^r)^m, \quad (5.21)$$

где

$$\alpha = 12B\varepsilon_0 \left(\frac{9\mu\varepsilon_0}{4G_c} \right)^n \left(\frac{1}{6C_0\varepsilon_0} \right)^m, \quad \beta = \frac{3\sigma\varepsilon_0 - 4G_c}{9\mu\varepsilon_0}. \quad (5.22)$$

Ограничимся для простоты рассмотрением случая $n = m = 1$. Решение уравнения (5.21) при постоянном заданном значении напряжений σ для начального значения $\varepsilon_1^r(0) = 0$ в случае $n = m = 1$ имеет вид:

$$\varepsilon_1^r(t) = \beta \left[\frac{1 - e^{-\alpha(\varepsilon_0 - \beta)t}}{1 - \frac{\beta}{\varepsilon_0} e^{-\alpha(\varepsilon_0 - \beta)t}} \right]. \quad (5.23)$$

Наибольший интерес представляет максимальное значение остаточной деформации, которое реализуется в квазистатическом нагружении ($t \rightarrow \infty$). Как следует из (5.23) и (5.22)₂, в этом случае при $\beta < \varepsilon_0$ (что эквивалентно $\sigma < \frac{4G_c}{3\varepsilon_0} + 3\mu\varepsilon_0$):

$$\varepsilon_1^r = \beta = \frac{3\sigma\varepsilon_0 - 4G_c}{9\mu\varepsilon_0}. \quad (5.24)$$

Следует отметить, что представленное в (5.24) значение остаточной деформации может быть также получено с учетом (5.19) из условия квазистатического равновесия $G_1^{1 \rightarrow 3} = G_c$.

При $\beta \geq \varepsilon_0$ (что эквивалентно $\sigma \geq \frac{4G_c}{3\varepsilon_0} + 3\mu\varepsilon_0$) меняется знак у показателя экспоненты в решении (5.23). В этом случае следствием (5.23) при $t \rightarrow \infty$ получается

$$\varepsilon_1^r = \varepsilon_0, \quad (5.25)$$

что указывает на наступление состояния насыщения. Таким образом, решение дифференциального уравнения (5.21) при $t \rightarrow \infty$ сходится к меньшей из постоянных, присутствующих в качестве вычитаемого в круглых скобках.

При последующей *разгрузке*, сопровождающейся накоплением остаточных деформаций противоположного знака, выражение для движущей силы $G_1^{3 \rightarrow 1}$, определяющей процесс переключения, отличается от (5.19) только знаком:

$$G_1^{3 \rightarrow 1} = \sigma_1 \cdot \Delta \varepsilon_{3 \rightarrow 1}^S = -\frac{3}{4}\sigma\varepsilon_0 + \frac{9}{4}\mu\varepsilon_1^r\varepsilon_0. \quad (5.26)$$

Дифференциальное уравнение для определения остаточной деформации ε_1^r при разгрузке, получаемое на основе уравнений (Б.27) и (5.26), обладает схожей математической структурой с уравнением (5.21), описывающим первичное нагружение:

$$\dot{\varepsilon}_1^r = -\alpha (\varepsilon_1^r - \gamma)^n (\varepsilon_0 + 2\varepsilon_1^r)^m, \quad (5.27)$$

где

$$\alpha = 12B\varepsilon_0 \left(\frac{9\mu\varepsilon_0}{4G_c} \right)^n \left(\frac{1}{6C_0\varepsilon_0} \right)^m, \quad \gamma = \frac{3\sigma\varepsilon_0 + 4G_c}{9\mu\varepsilon_0}. \quad (5.28)$$

Решение дифференциального уравнения (5.27) при постоянном заданном напряжении σ для начального значения ε_{10}^r в случае $n = m = 1$ имеет вид:

$$\varepsilon_1^r(t) = \gamma \left[\frac{1 - \frac{\varepsilon_0(\gamma - \varepsilon_{10}^r)}{\gamma(\varepsilon_0 + 2\varepsilon_{10}^r)} e^{-\alpha(\varepsilon_0 + 2\gamma)t}}{1 - \frac{2(\gamma - \varepsilon_{10}^r)}{\varepsilon_0 + 2\varepsilon_{10}^r} e^{-\alpha(\varepsilon_0 + 2\gamma)t}} \right]. \quad (5.29)$$

Как следует из анализа выражения (5.29), максимальное значение остаточной деформации после разгрузки до $\sigma = 0$, реализуемое при квазистатическом нагружении ($t \rightarrow \infty$), определяется равенством:

$$\varepsilon_1^r = \gamma = \frac{4G_c}{9\mu\varepsilon_0}. \quad (5.30)$$

Результирующая осевая остаточная деформация для поликристалла после разгрузки определяется следствием уравнений (5.15), (5.30) и (5.17)₂:

$$\varepsilon^r = \frac{2G_c}{9\mu\varepsilon_0}. \quad (5.31)$$

Следует отметить, что идентичный (5.31) результат получается и при рассмотрении случая чисто электрического нагружения $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_3$ с последующей разгрузкой до 0. Значение остаточной деформации при первичном электрическом нагружении, полученное аналогично (5.24), определяется выражением $\varepsilon_1^r = \frac{4(EP_0 - G_c)}{9\mu\varepsilon_0}$.

Как следует из уравнения (5.31), при постоянных значениях движущей силы G_c и модуля сдвига μ , чем больше значение спонтанной поляризации кристаллита

ε_0 , тем меньше результирующая остаточная деформация поликристалла ε^r . Данный эффект объясняется уменьшением коэрцитивного напряжения поликристалла $\bar{\sigma}_c = 4G_c / 3\varepsilon_0$ с ростом ε_0 , что способствует при разгрузке более раннему началу (при более высоком уровне напряжений) накопления остаточных деформаций противоположного знака, которое в результате при разгрузке до $\sigma = 0$ приводит к меньшему уровню результирующих остаточных деформаций (см. Рисунок 5.14). В пределе при стремлении ε_0 к бесконечности поведение материала стремится к линейному (безгистерезисному) с разгрузкой в 0 (показано на Рисунке 5.14 серой штрихпунктирной линией).

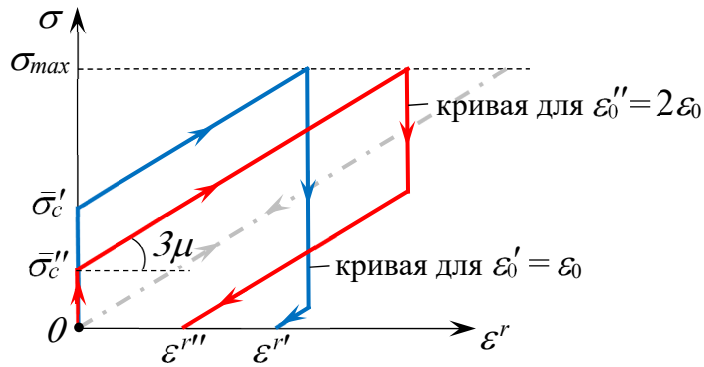


Рисунок 5.14 – Схематическое представление диаграмм нагружение-разгрузка для бикристаллов с двумя различными значениями спонтанной деформации кристаллита ε_0

Установленный при разгрузке эффект $\varepsilon^r \sim 1 / \varepsilon_0$ наблюдается только при достаточно высоких уровнях первичной нагрузки $\sigma_{\max} > 2\bar{\sigma}_c$ (Рисунок 5.15), когда разгрузка сопровождается накоплением остаточных деформаций противоположного первоначальному знака. В случае $\bar{\sigma}_c < \sigma_{\max} < 2\bar{\sigma}_c$ остаточная деформация определяется не (5.31), а (5.24) при $\sigma = \sigma_{\max}$ и с ростом ε_0 увеличивается в соответствии с зависимостью $\varepsilon_1^r = \frac{\sigma_{\max} - 4G_c / 3\varepsilon_0}{3\mu}$ (см. Рисунок 5.15). При $\sigma_{\max} < \bar{\sigma}_c$ остаточных деформаций не наблюдается.

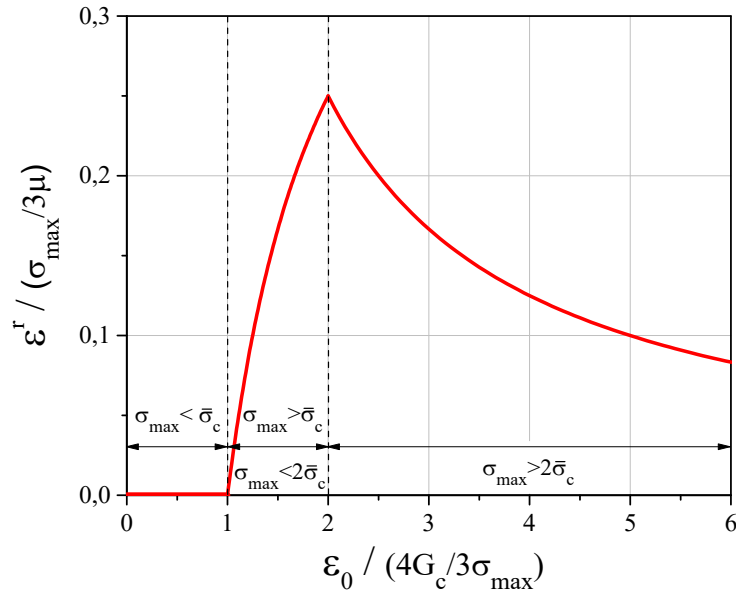


Рисунок 5.15 – Зависимость остаточной деформации поликристалла ε' от спонтанной поляризации кристаллита ε_0 , полученная на основе реологической модели

Остаточная деформация поликристалла ε' , вычисленная с использованием (5.31), определяется отношением коэрцитивного напряжения к утроенному модулю сдвига кристаллита или поликристалла $\varepsilon' = \sigma_c / 3\mu = \bar{\sigma}_c / 3\bar{\mu}$. Очевидно, что это значение много меньше спонтанной поляризации кристаллита ε_0 . Например, для PZT PIC151 с $G_c = 500\,000$ Дж/м³, $E = 144\,000$ МПа, $\nu = 0,31$, $\varepsilon_0 = 1,91\%$ [368] остаточная деформация, рассчитанная по (5.31), $\varepsilon' = 0,0106\%$ (в 180 раз меньше ε_0), для BaTiO₃ с $G_c = 150\,000$ Дж/м³, $E = 115\,000$ МПа, $\nu = 0,32$, $\varepsilon_0 = 0,68\%$ [447] остаточная деформация, рассчитанная по (5.31), $\varepsilon' = 0,0113\%$ (в 60 раз меньше ε_0). Причиной подобного резкого снижения способности накапливать остаточные деформации тетрагональным поликристаллом в сравнении с тетрагональным монокристаллом является взаимное влияние кристаллитов в условиях анизотропии остаточных деформаций кристаллита (наличие направлений нагружения, не вызывающих остаточных деформаций кристаллита), приводящее при разгрузке к ускорению процесса переключений и вследствие этого к потере остаточных деформаций, первоначально накопленных при первичном нагружении.

Наблюдаемые после разгрузки остаточные осевые напряжения в элементах модели определяется на основе подстановки (5.30) и (5.17)₂ в (5.16):

$$\sigma_1 = -\frac{4G_c}{9\varepsilon_0}, \quad \sigma_2 = \frac{4G_c}{9\varepsilon_0}. \quad (5.32)$$

Следует отметить, что уровень абсолютных значений остаточных микронапряжений близок к коэрцитивному напряжению монокристалла (Б.19) $\sigma_1 = -\sigma_2 = -2/3\sigma_c$.

В рассматриваемой бикристаллической тетрагональной модели (Рисунок 5.13) при электрическом воздействии или растяжении возникает положительная остаточная деформация в первом элементе и нулевая во втором. Их неравенство приводит к отрицательному микронапряжению в первом элементе (см. уравнения (5.16)₁ и (5.32)₁) и равному по модулю, но положительному во втором. Таким образом, в силу совместности деформаций элементов модели ограниченная деформационная способность второго элемента инициирует возникновение сжимающих напряжений в первом элементе. При разгрузке отрицательное микронапряжение в первом элементе способствует более раннему началу процесса переключения и более низкому уровню результирующих положительных остаточных деформаций, накопленных на этапе первичного нагружения. Положительные микронапряжения во втором элементе не оказывают влияния на процесс необратимого деформирования модели, поскольку в направлении нагружения/разгрузки для второго кристаллита, соответствующему его локальной ориентации $\langle 111 \rangle$, отсутствует способность приобретать остаточные деформации. Поэтому результирующая остаточная деформация в модели определяется только остаточной деформацией первого элемента.

Возможность обобщения на случай поликристалла рассмотренных особенностей механизма процессов переключения при возникновении микронапряжений вследствие выполнения условия совместности деформаций в бикристалле (двухэлементной реологической модели), упрощенно учитывающей взаимное влияние различно ориентированных кристаллитов в поликристалле, будет проанализирована в следующем разделе.

5.1.3 Оценка взаимного влияния кристаллитов в поликристалле на основе конечно-элементной модели

Использование методов конечно-элементной гомогенизации позволяет повысить точность расчета остаточной деформации и поляризации поликристаллического агрегата за счет прямого учета взаимного влияния кристаллитов друг на друга и произвести проверку гипотез, выдвинутых в предыдущем разделе. В частности, произвести сравнение остаточной деформации поликристалла со спонтанной деформацией кристаллита и проверить гипотезу наличия экстремума в зависимости остаточной деформации поликристалла от спонтанной деформации кристаллита.

Многовариантные вычислительные эксперименты с варьированием параметра ε_0 проводились на элементарном представительном объеме поликристалла в форме куба с разбиением на $3 \times 3 \times 3$ конечных элементов, соответствующих 216 монокристаллам.

Рассматривается электрическое воздействие до 3 МВ/м с последующей разгрузкой до 0, одноосное механическое сжатие до -500 МПа с разгрузкой до 0 и растяжение до 500 МПа с последующей разгрузкой до 0.

В расчетах использовалась микромеханическая реономная модель без порога переключения (2.41). Свойства материала представлены в Таблице 5.8.

Таблица 5.8 – Параметры микромеханической модели материала, используемые в расчетах

Параметр	Символ	Размерность	Величина
Упругие модули	C_{3333}^E	ГПа	117
	C_{1133}^E		53,3
Диэл. проницаемость	κ_{33}^σ	Ф/м	$1,3 \times 10^{-8}$
Пьезоэлектр. модуль	d_{333}	м/В	$3,15 \times 10^{-10}$
Спонт. поляризация и деформация	P_0	Кл/м ²	0,5
	ε_0	%	0,2
Крит. движ. сила	$G_c^{J \rightarrow I}$	В·Кл/м ³	500 000
Коэфф. вязкости	$B^{J \rightarrow I}$	-	1
Показатели степени уравнения эволюции	n	-	10
	m	-	2
Параметр насыщения	C_0	-	0,01

В соответствии с используемой процедурой конечно-элементной гомогенизации макроскопические (для поликристалла) механические и электрические переменные определялись на основе уравнений (2.1)-(2.5).

На Рисунке 5.16 показаны полученные в расчетах зависимости осевой остаточной деформации $\bar{\varepsilon}_z^r$ и поляризации $\bar{P}_z^r$ для тетрагонального поликристалла от спонтанной деформации кристаллита ε_0 при электрическом воздействии. Остаточная деформация демонстрирует наличие *максимума*, который достигается при нагрузке 3 МВ/м при значении $\varepsilon_0 = 0,5\%$, а при последующей разгрузке до 0 при $\varepsilon_0 = 0,35\%$. Значения наблюдаемых максимумов (при нагрузке 3 МВ/м достигает $\max_{\varepsilon_0} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,113\%$, при разгрузке $\max_{\varepsilon_0} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,07\%$) чувствительны к уровню нагрузки и могут быть повышены при увеличении уровня электрического воздействия.

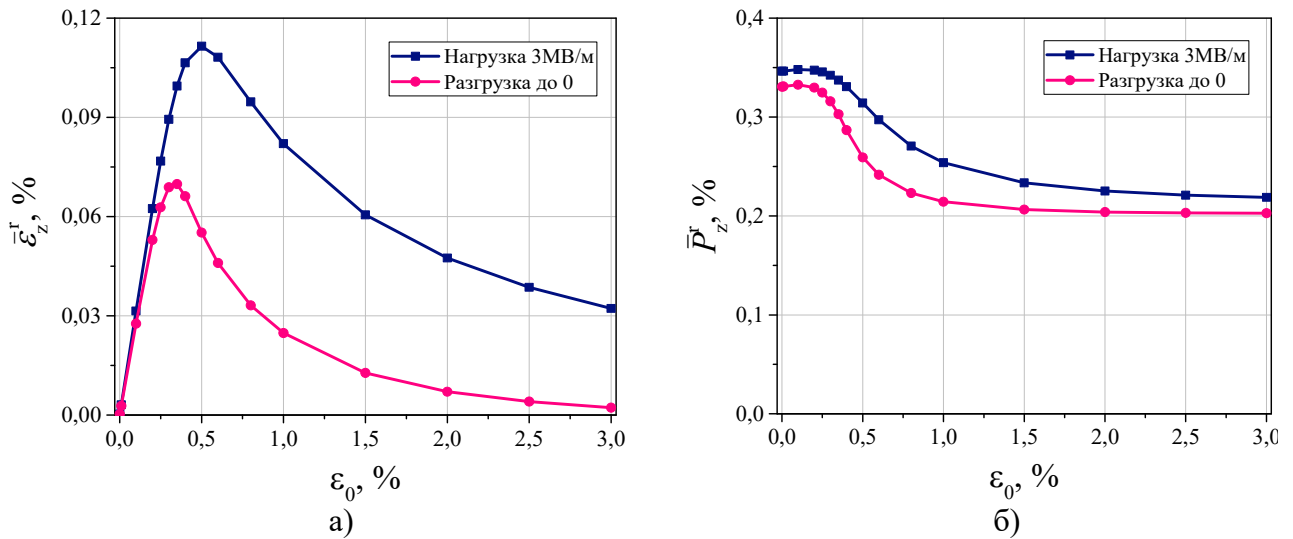


Рисунок 5.16 – Зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации $\bar{P}_z^r$ от спонтанной деформации кристаллита ε_0 при электрическом воздействии 3 МВ/м и последующей разгрузке до 0, полученные на основе метода конечно-элементной гомогенизации

Левее пика на Рисунке 5.16а остаточная деформация поликристалла изменяется пропорционально спонтанной поляризации $\bar{\varepsilon}_z^r \sim \varepsilon_0$. Правее пика остаточная деформация убывает обратно пропорционально спонтанной поляризации $\bar{\varepsilon}_z^r \sim 1/\varepsilon_0$, что было предсказано на основе реологической модели бикристалла (5.31). Осевая

остаточная поляризация $\bar{P}_z^r$ монотонно убывает с ростом ε_0 , стремясь к горизонтальной асимптоте (Рисунок 5.16б).

Кривые нагружения / разгрузки в виде зависимостей осевой деформации и электрического смещения от электрического поля для тетрагонального поликристалла показаны на Рисунках 5.17а и б для трех характерных значений ε_0 (первое $\varepsilon_0 = 0,1\%$ меньше пикового (на Рисунке 5.16а), второе $\varepsilon_0 = 0,35\%$ соответствует пику, третье $\varepsilon_0 = 2\%$ больше пикового). Высота полупетли электромеханического гистерезиса (Рисунок 5.17а) при $\varepsilon_0 = 0,35\%$ является наибольшей. При меньших значениях ε_0 (например, при $\varepsilon_0 = 0,1\%$) росту остаточных деформаций препятствует невысокое значение ε_0 . При бóльших значениях ε_0 (например, при $\varepsilon_0 = 2\%$) росту остаточных деформаций препятствует влияние соседних кристаллитов.

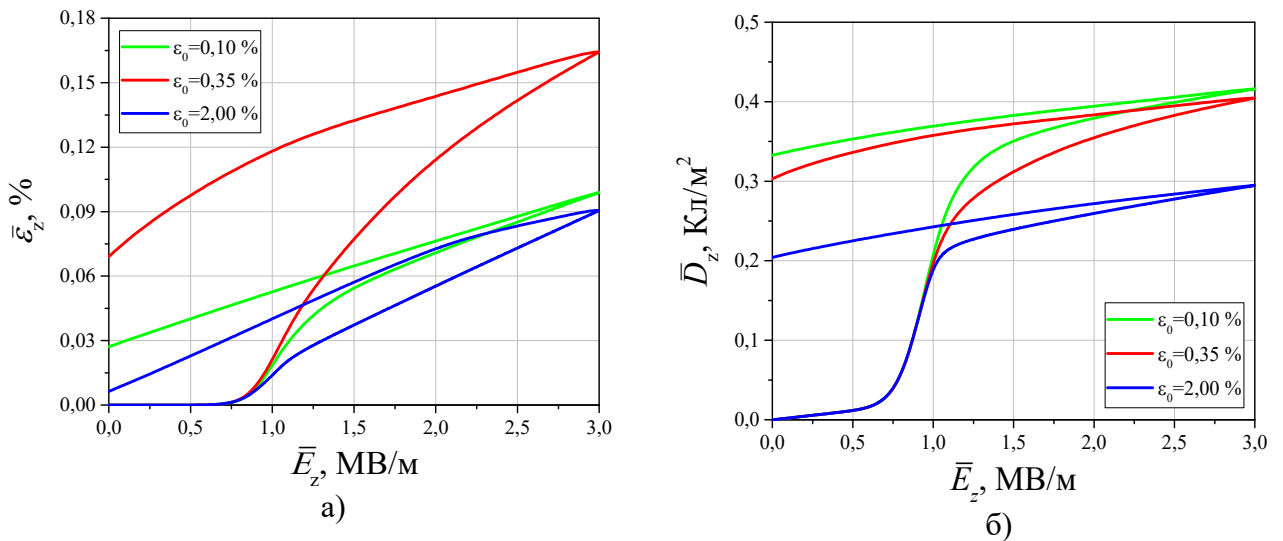


Рисунок 5.17 – Кривые первичного нагружения и разгрузки для
а) деформации поликристалла и б) электрического смещения поликристалла,
полученные на основе метода конечно-элементной гомогенизации

Как видно из Рисунков 5.18а-в, при $\varepsilon_0 = 0,35\%$ при разгрузке наблюдается наименьшая разориентация векторов остаточной поляризации кристаллитов в поликристалле. С дальнейшим ростом ε_0 (например, при $\varepsilon_0 = 2\%$) разориентация векторов остаточной поляризации кристаллитов увеличивается. При этом диапазон изменения значений осевой остаточной поляризации для кристаллитов в поликристалле при $\varepsilon_0 = 0,35\%$ является наименьшим (см. Рисунок 5.18г-е). Таким образом,

при варьировании ε_0 максимальное значение остаточной деформации поликристалла сопровождается минимумом разориентации направлений поляризации и минимумом неоднородности механического и электрического состояний.

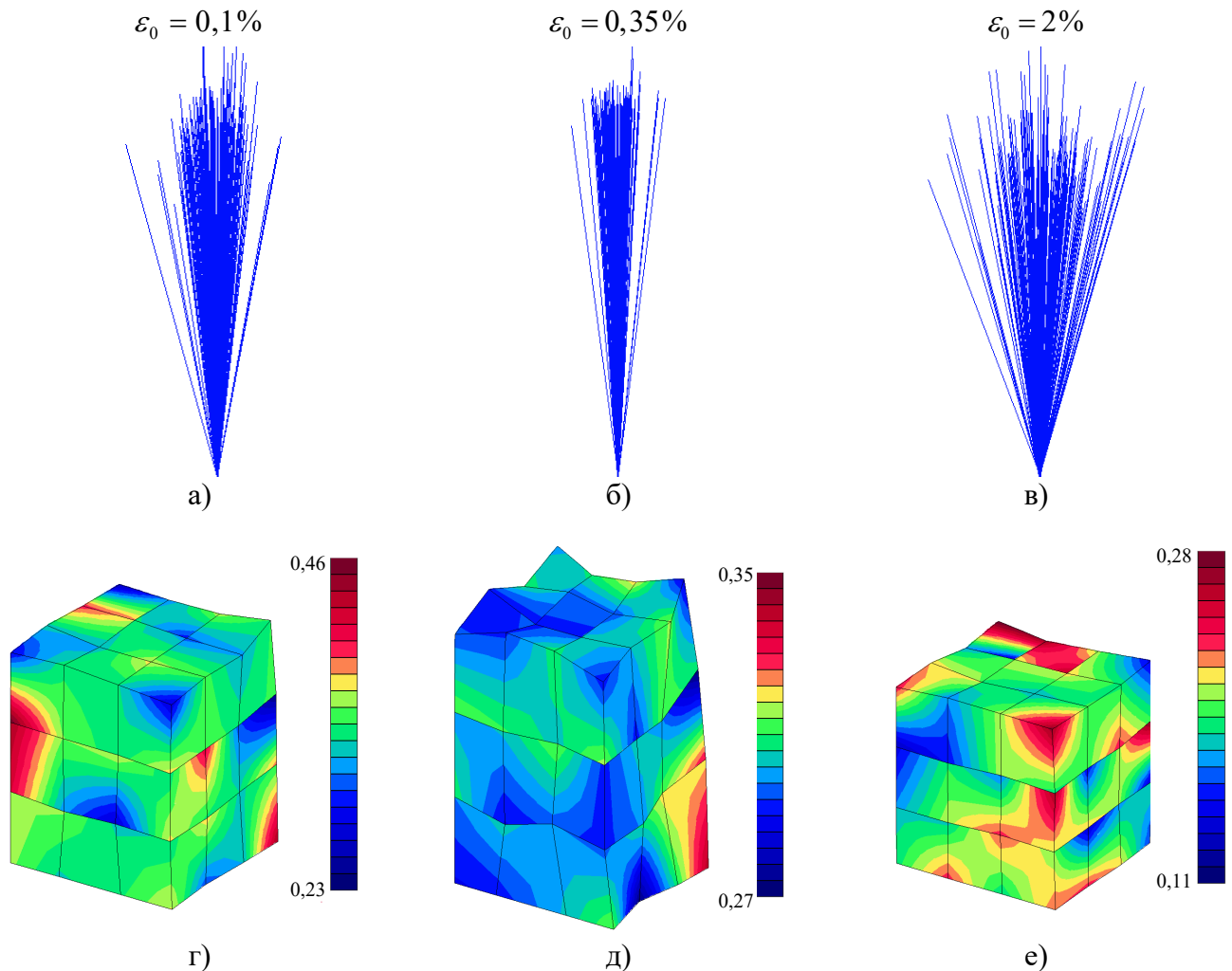


Рисунок 5.18 – Влияние спонтанной поляризации ε_0 на а)-в) разориентацию направлений векторов остаточной поляризации кристаллитов в поликристалле, г)-е) неоднородность поля осевой остаточной поляризации $\bar{P}_z^r$ [Кл/м²] представительного объема поликристалла (для наглядности деформированное состояние увеличено в 400 раз);
а) и г) $\varepsilon_0 = 0,1\%$, б) и д) $\varepsilon_0 = 0,35\%$, в) и е) $\varepsilon_0 = 2\%$

Сравнение поведения тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического поликристаллов (Рисунок 5.19) выявило принципиальное отличие поведения первых двух типов от последнего при больших значениях ε_0 , заключающееся в *уменьшении* остаточных деформаций с ростом ε_0 , в то время как для орторомбиче-

ского поликристалла наблюдается *увеличение* $\bar{\varepsilon}_z^r$ с ростом ε_0 при достаточно больших значениях ε_0 ($\varepsilon_0 > 1\%$). Объяснением этому служит отсутствие у орторомбического кристалла направлений с нулевым значением остаточных деформаций (см. $\varepsilon_{\min}^r$ в Таблице 5.3), в то время как у тетрагонального и ромбоэдрического кристалла такие запирающие направления с нулевыми остаточными деформациями присутствуют (см. $\varepsilon_{\min}^r$ в Таблице 5.1 и 5.2, Рисунки 5.3а и 5.6а).

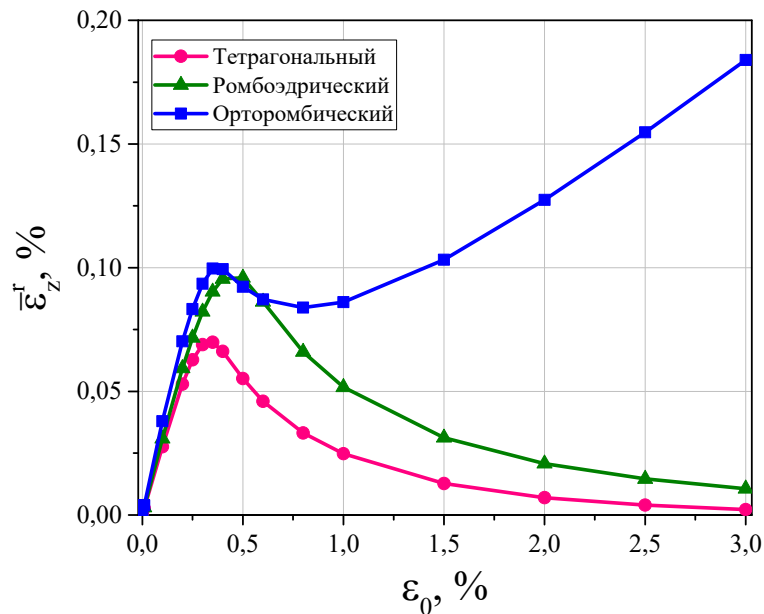


Рисунок 5.19 – Сравнение зависимостей осевой остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ при разгрузке от спонтанной деформации кристаллита ε_0 для тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического поликристаллов

Увеличение уровня остаточных деформаций у орторомбического поликристалла и соответственно все большее отличие от поведения тетрагонального и ромбоэдрического поликристаллов наблюдается (см. Рисунок 5.20) с ростом относительного уровня внедиагональных компонент тензора спонтанных деформаций орторомбического кристалла δ (см. (А.8)). Дополнительная свобода в направлениях деформирования позволяет орторомбическому кристаллиту удовлетворить условиям совместности деформаций с соседними кристаллитами при меньших уровнях микронапряжений. При стремлении δ к 0 исследуемая зависимость $\bar{\varepsilon}_z^r(\varepsilon_0)$ стремится к наблюдаемой у тетрагонального поликристалла. Таким образом, взаимное

влияние соседних кристаллитов, блокирующее развитие остаточных деформаций, у орторомбического поликристалла выражено в наименьшей степени.

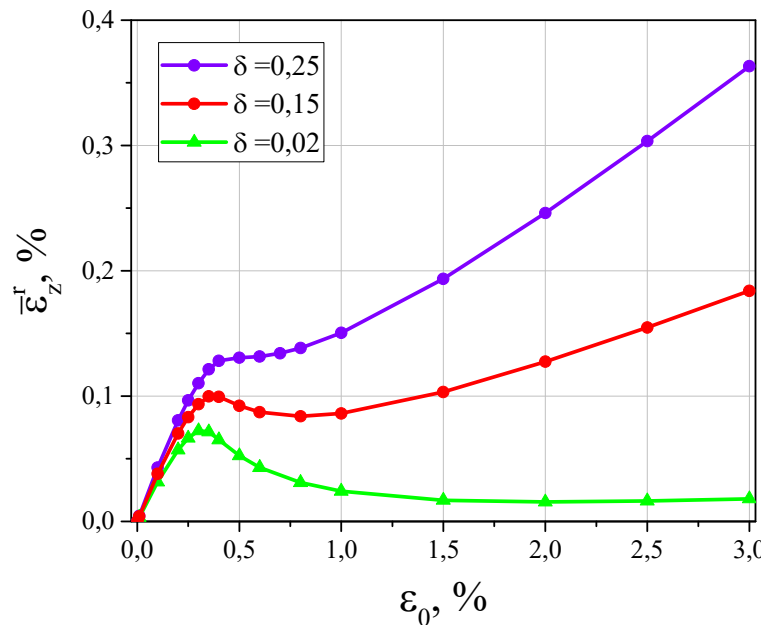


Рисунок 5.20 – Влияние относительного уровня внедиагональных компонент тензора спонтанной деформации орторомбического кристалла δ на зависимость остаточной деформации орторомбического поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ от спонтанной поляризации кристаллита ε_0

Зависимости остаточной деформации поликристалла от спонтанной деформации, аналогичные рассмотренным выше, наблюдаются и при *механическом нагружении*. На Рисунке 5.21 показано сравнение зависимостей осевой остаточной деформации $\bar{\varepsilon}_z^r(\varepsilon_0)$ при разгрузке до 0 для трех вариантов предварительного нагружения: одноосного сжатия до -500 МПа, одноосного растяжения до 500 МПа и электрического воздействия 3 МВ/м. Во всех рассмотренных случаях остаточная деформация после разгрузки демонстрирует наличие максимума. Наибольшее значение $\max_{\varepsilon_0} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,098\%$, соответствующее $\varepsilon_0 = 0,225\%$, достигается при разгрузке после *растяжения*; промежуточное значение $\max_{\varepsilon_0} |\bar{\varepsilon}_z^r| = 0,08\%$ при $\varepsilon_0 = 0,3\%$ реализуется при разгрузке после *сжатия*; самый низкий пик $\max_{\varepsilon_0} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,07\%$ наблюдается при разгрузке после *электрического воздействия* при $\varepsilon_0 = 0,35\%$. Запиковое поведение во всех случаях хорошо аппроксимируется соотношением (5.31).

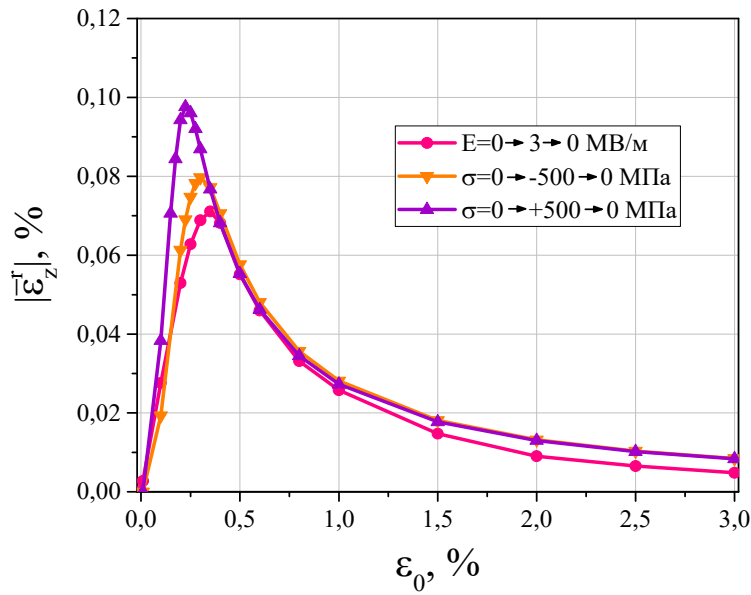


Рисунок 5.21 – Зависимости осевых компонент остаточной деформации поликристалла $\bar{\epsilon}_z^r$ от спонтанной поляризации кристаллита ϵ_0 при разгрузке до 0 после предварительного электрического воздействия до 3 МВ/м, сжатия до -500 МПа, растяжения до 500 МПа, полученные на основе метода конечно-элементной гомогенизации

Полученные во всех конечно-элементных расчетах значения остаточной деформации тетрагонального поликристалла $\bar{\epsilon}_z^r$ оказались значительно меньше спонтанной поляризации кристаллита ϵ_0 . Равенство $\bar{\epsilon}_z^r = \epsilon_0$ наблюдается только у монокристалла (см. Рисунок 5.22). В силу равномерного распределения в пределах телесного угла возможных направлений поляризации максимальная остаточная деформация поликристалла, оцениваемая аналитически осреднением (5.6) по всем возможным направлениям значений максимально возможных остаточных деформаций, равняется $\epsilon_{mean}^r = 0,551\epsilon_0$ (см. Раздел 5.1.1.1). Данная прямая показана на Рисунке 5.22 штрих-пунктирной линией. Однако она оказалась также недостижимой в рассматриваемых вычислительных экспериментах даже на этапе нагрузки (показана на Рисунке 5.22 синей линией). Причиной этому является недостаточно высокий для перевода в состояние насыщения всех кристаллитов уровень воздействия, ограниченное количество кристаллов в поликристалле и взаимное влияние кристаллитов.

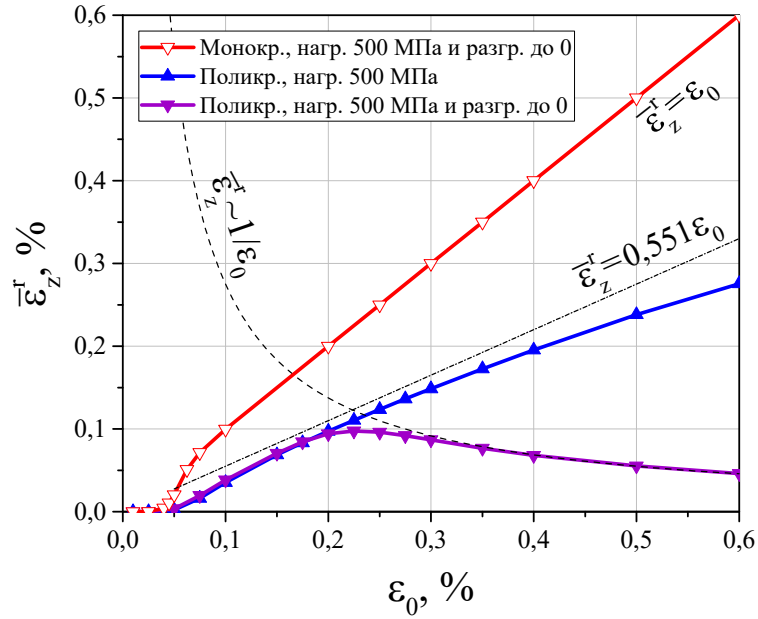


Рисунок 5.22 – Зависимости осевых компонент остаточной деформации поликристалла $\bar{\epsilon}_z^r$ от спонтанной поляризации кристаллита ϵ_0 при растяжении и при разгрузке для тетрагональных монокристалла и поликристалла

Кривая остаточных деформаций при разгрузке (показана на Рисунке 5.22 фиолетовой линией) совпадает с кривой при нагрузке в интервале $0 \leq \epsilon_0 \leq 0,2\%$. При малых ϵ_0 в диапазоне $0 \leq \epsilon_0 \leq 0,05\%$ вообще не происходит процессов переключения ($\sigma_{\max} < \bar{\sigma}_c \sim G_c / \epsilon_0$), и остаточные деформации равны 0 как для поликристалла, так и для монокристалла (см. Рисунок 5.22). В диапазоне $0,05\% \leq \epsilon_0 \leq 0,2\%$ при первичной нагрузке возникают остаточные деформации, а при последующей разгрузке не происходит процессов переключения и изменения остаточной деформации в силу достаточно высокого уровня коэрцитивных напряжений $\sigma_{\max} < 2\bar{\sigma}_c$. При значениях $\epsilon_0 > 0,2\%$ при разгрузке начинается накопление остаточных деформаций обратного первичным знаком, поскольку с ростом ϵ_0 уменьшается $\bar{\sigma}_c \sim G_c / \epsilon_0$ и начинает выполняться условие $\sigma_{\max} > 2\bar{\sigma}_c$, соответствующее на макроуровне условию переключения при кинематическом упрочнении, учитывающем взаимное влияние кристаллитов. При значениях $\epsilon_0 > 0,2\%$ фиолетовая кривая на Рисунке 5.22 приближается к асимп-

тоте $\bar{\varepsilon}_z^r = \frac{2G_c}{9\mu\varepsilon_0}$ (5.31), которая с высокой точностью аппроксимирует уровень остаточных деформаций при разгрузке после предварительного сжатия, растяжения или электрического воздействия.

Как видно из Рисунка 5.22 при разгрузке пиковое значение остаточных деформаций тетрагонального поликристалла $\max_{\varepsilon_0} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,098\%$ достигается при $\varepsilon_0 = 0,225\%$. Для PZT PIC151 с $\varepsilon_0 = 1,91\%$ [368] для тетрагональной фазы рассчитанная остаточная деформация $\bar{\varepsilon}_z^r = 0,0078\%$ будет много меньше (в 12 раз) пикового значения. Следует отметить, что это значение также много меньше (в 32 раза), в сравнении с измеренным в экспериментах на поликристаллической пьезокерамике PZT PIC151 $\varepsilon^r = 0,25\%$ [502], что требует отказа от ограничения рассмотрения только тетрагональной фазы в микромеханической модели. Одним из возможных путей решения указанной проблемы может явиться использование модели с орторомбической решеткой, для которой, как видно из Рисунка 5.19, при $\varepsilon_0 = 1,91\%$ уровень остаточной деформации близок к экспериментальному. Однако недавние эксперименты [299, 461] не подтверждают наличия орторомбической фазы вблизи морфотропной границы у PZT. Одним из альтернативных возможных путей развития микромеханической модели является учет одновременного присутствия тетрагональной и ромбоэдрической фаз, выполненный в следующем разделе.

5.2 Экстремальные свойства композиций различного фазового состава

Прогресс в развитии сегнетопьезокерамических материалов, определивший их широкое распространение на практике, связан с открытием экстремальных значений диэлектрической проницаемости, пьезоэлектрических параметров, остаточной деформации и поляризации у ЦТС (PZT, бинарный твердый раствор цирконата-титаната свинца $(1-x) \text{PbZrO}_3 - x \text{PbTiO}_3$ ($0 < x < 1$)) вблизи морфотропной фазовой границы (МФГ). На фазовой диаграмме «молярная концентрация x – температура T » твердого раствора ЦТС (см. Рисунок 1.11) МФГ разделяет область сегнетоэлектрических фаз на две части: *тетрагональную* фазу (со стороны преобладания Ti) и *ромбоэдрическую* фазу (со стороны преобладания Zr). При комнатной температуре

МФГ проходит в области $x \approx 47 \div 48\%$ [270]. В области концентраций вблизи морфотропного фазового перехода сосуществуют обе структуры. Данные рентгеноструктурного анализа [299, 450] и нейтронографии [483] показали, что при изменении химического состава с ростом x при переходе через МФГ происходит постепенная (в пределах 10% изменения x) смена фазового состава (см. Рисунок 1.12).

Указанные факты свидетельствуют о необходимости учета обеих фаз при формулировке микромеханических моделей для описания адекватного поведения PZT сегнетопьезокерамики вблизи МФГ. Однако в подавляющем большинстве предложенных микромеханических моделей, например в [240, 257, 282, 321, 381, 452] и др., учитывается только тетрагональная фаза. Исключение составляют работы [35, 60, 368, 369, 61, 62, 73, 91, 173, 318, 328, 329]. В данном исследовании на основе результатов вычислительных экспериментов с использованием микромеханической модели с учетом смеси различных фаз анализируется возможность описания появления максимума концентрационных зависимостей.

В разделе 5.1.1.4 на основе простейших аналитических оценок было показано, что для двухфазной Т/Р смеси монокристалла минимальные среди всевозможных направлений остаточная деформация $\varepsilon_{\min}^r$ и поляризация $P_{\min}^r$ демонстрируют наличие максимума внутри диапазона изменения объемной доли тетрагональной фазы c_T при значении, близком к $c_T = 0,4$ (см. Таблицу 5.7). Ослабление ограничений по остаточным деформациям в монокристалле при определенных составах смеси открывает возможность снижения микронапряжений в поликристалле. Целью данного исследования является проверка указанной возможности на основе модели многофазного поликристаллического агрегата, учитывающей взаимное влияние кристаллитов, а также поиск оптимального состава смеси, обеспечивающего максимум остаточной деформации и поляризации.

Многовариантные вычислительные эксперименты, связанные с рассмотрением различных комбинаций тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической фаз (с варьированием соответствующих объемных долей фаз c_T и c_R), прово-

дились на элементарном представительном объеме сегнетопьезокерамического поликристалла в форме куба с разбиением на $3 \times 3 \times 3$ конечных элементов, соответствующих 216 монокристаллам, содержащих 5616 различно ориентированных доменов. В соответствии с используемой процедурой конечно-элементной гомогенизации макроскопические механические и электрические переменные для поликристалла определялись на основе уравнений (2.1)-(2.5).

При проведении анализа рассматривались 3 различных варианта нагружения: электрическое воздействие до 3 МВ/м с последующей разгрузкой до 0, одноосное сжатие до -500 МПа с разгрузкой до 0 и растяжение до 500 МПа с последующей разгрузкой до 0.

В расчетах использовалась микромеханическая модель (2.12)-(2.18) в реономной версии без порога переключения (2.41). Конкретные значения вектора спонтанной поляризации $\mathbf{P}_I^S$ и тензора спонтанной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_I^S$ для различных типов кристаллической решетки и вариантов доменов представлены в приложении А соотношениями (А.1)-(А.8). Используемые в расчетах свойства материала для различных фаз приведены в Таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Параметры микромеханической модели материала, используемые в расчетах

Параметр	Символ	Размерность	Тетрагональная фаза	Ромбоэдрическая фаза	Орт ромбическая фаза
Упругие модули	C_{333}^E C_{1133}^E	ГПа	117 53,3	117 53,3	117 53,3
Диэл. проницаемость	κ_{33}^σ	Ф/м	$1,3 \times 10^{-8}$	$1,3 \times 10^{-8}$	$1,3 \times 10^{-8}$
Пьезоэлектр. модуль	d_{333}	м/В	$3,15 \times 10^{-10}$	$3,15 \times 10^{-10}$	$3,15 \times 10^{-10}$
Спонт. поляризация и деформация	P_0 ε_0	Кл/м ² %	0,5 1,91	0,5 0,55	0,5 0,2
Крит. движ. сила	$G_c^{J \rightarrow I}$	Дж/м ³	500 000	500 000	500 000
Коэфф. вязкости	$B^{J \rightarrow I}$	-	1	1	1
Показатели степени уравнения эволюции	n m	- -	10 2	10 2	10 2
Параметр насыщения	C_0	-	0,01	0,01	0,01
Параметр сдвига	δ	-	-	-	0,25

На Рисунке 5.23 показаны полученные в расчетах зависимости осевой остаточной деформации $\bar{\varepsilon}_z^r$ и поляризации $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы в Т/Р смеси при электрическом воздействии 3 МВ/м и последующей разгрузке до 0. Первоначально спонтанные деформации фаз принимались равными $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 0,5\%$. Остаточная деформация и поляризация демонстрируют наличие максимумов $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,242\%$ и $\max_{c_T} \bar{P}_z^r = 0,396$ Кл/м², которые достигаются как при нагрузке 3 МВ/м, так и при последующей разгрузке до 0 при одинаковом значении $c_T = 0,45$.

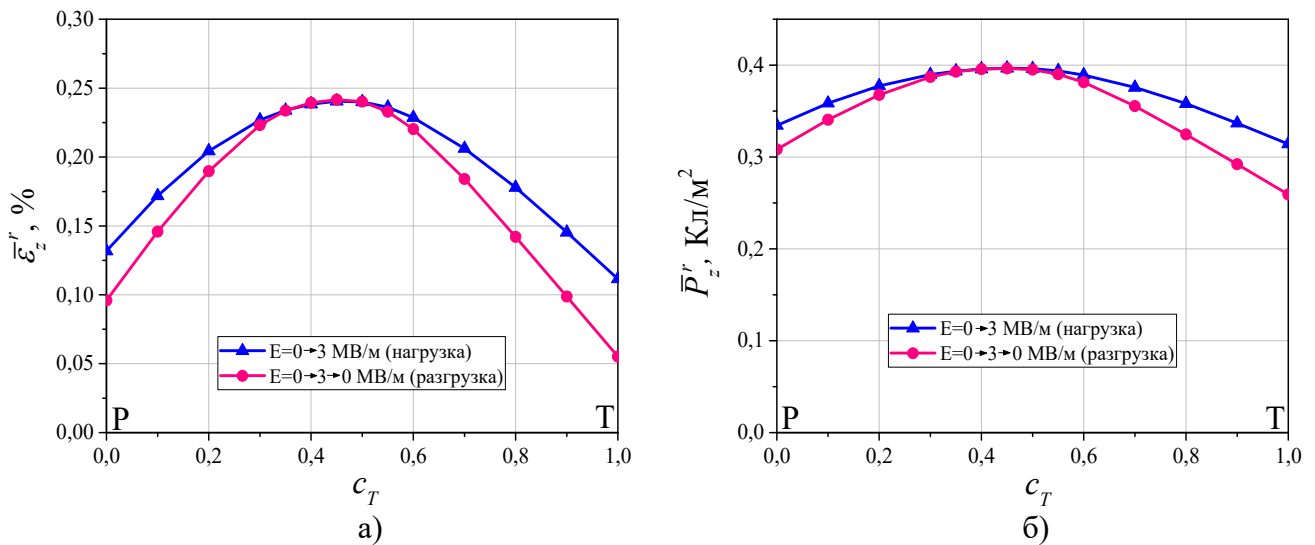


Рисунок 5.23 – Зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации поликристалла $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы c_T в Т/Р смеси при электрическом воздействии 3 МВ/м и последующей разгрузке до 0, полученные на основе метода конечно-элементной гомогенизации

Максимумы на Рисунке 5.23 при нагрузке и разгрузке практически совпадают, что является следствием линейного поведения двухфазной Т/Р смеси с $c_T = 0,45$ при разгрузке (см. Рисунок 5.24). При отклонении c_T от оптимального значения $c_T = 0,45$ возрастает отличие в остаточной деформации и поляризации при нагрузке и разгрузке (Рисунок 5.23). Максимальное отличие наблюдается у тетрагональной фазы.

Сравнение кривых нагружения / разгрузки для тетрагонального ($c_T = 1$) и смешанного тетрагонально-ромбоэдрического ($c_T = 0,45$) поликристаллов показано на Рисунках 5.24а и б. Преимущество смеси в уровне остаточных характеристик наблюдается как при нагрузке, так и при разгрузке. При разгрузке уровень остаточных деформаций у Т/Р смеси с $c_T = 0,45$ в 4,4 раза больше уровня остаточных деформаций

тетрагональной фазы с $c_T = 1$. Следует отметить, что разгрузка поликристалла тетрагональной фазы проходит нелинейно, сопровождаясь накоплением остаточных деформаций обратного знака, а у Т/Р смеси с $c_T = 0,45$ практически линейно, что свидетельствует о наличии в последнем случае относительно низкого уровня микронапряжений и слабого взаимного влияния кристаллитов друг на друга.

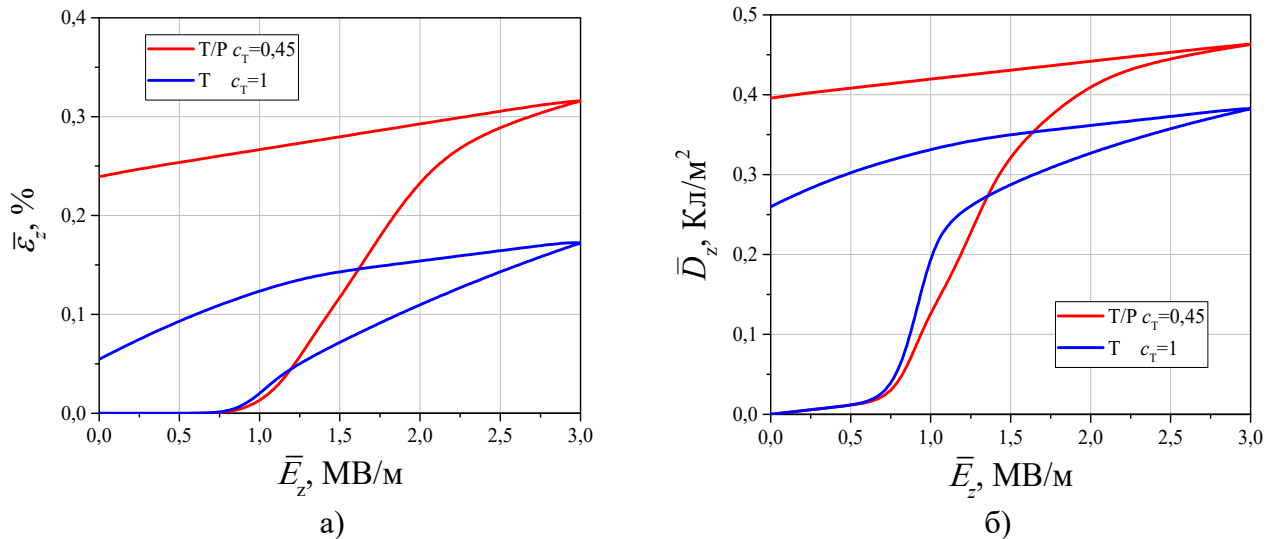


Рисунок 5.24 – Кривые первичного нагружения до 3 МВ/м и разгрузки до 0 для а) деформации поликристалла и б) электрического смещения поликристалла, полученные на основе метода конечно-элементной гомогенизации

Наряду с указанными особенностями Т/Р смесь с $c_T = 0,45$ обладает наименьшей разориентацией векторов остаточной поляризации кристаллитов в поликристалле (см. Рисунок 5.25а-в), что приводит к наиболее высокому среди рассматриваемых композиций смеси уровню остаточной деформации и поляризации. Уровень микронапряжений (напряжений в отдельных кристаллитах) при разгрузке до 0 для Т/Р смеси с $c_T = 0,45$ в сравнении с однофазными Т и Р композициями оказался наименьшим (см. Рисунок 5.25г-е)

Экстремальные свойства остаточной деформации и поляризации у Т/Р смеси при значениях, близких к $c_T = 0,45$, наблюдаются в широком диапазоне нагрузок (Рисунок 5.26). С ростом уровня воздействия эффект преобладания остаточных характеристик смеси с $c_T = 0,45$ в сравнении с монофазными композициями только усиливается.

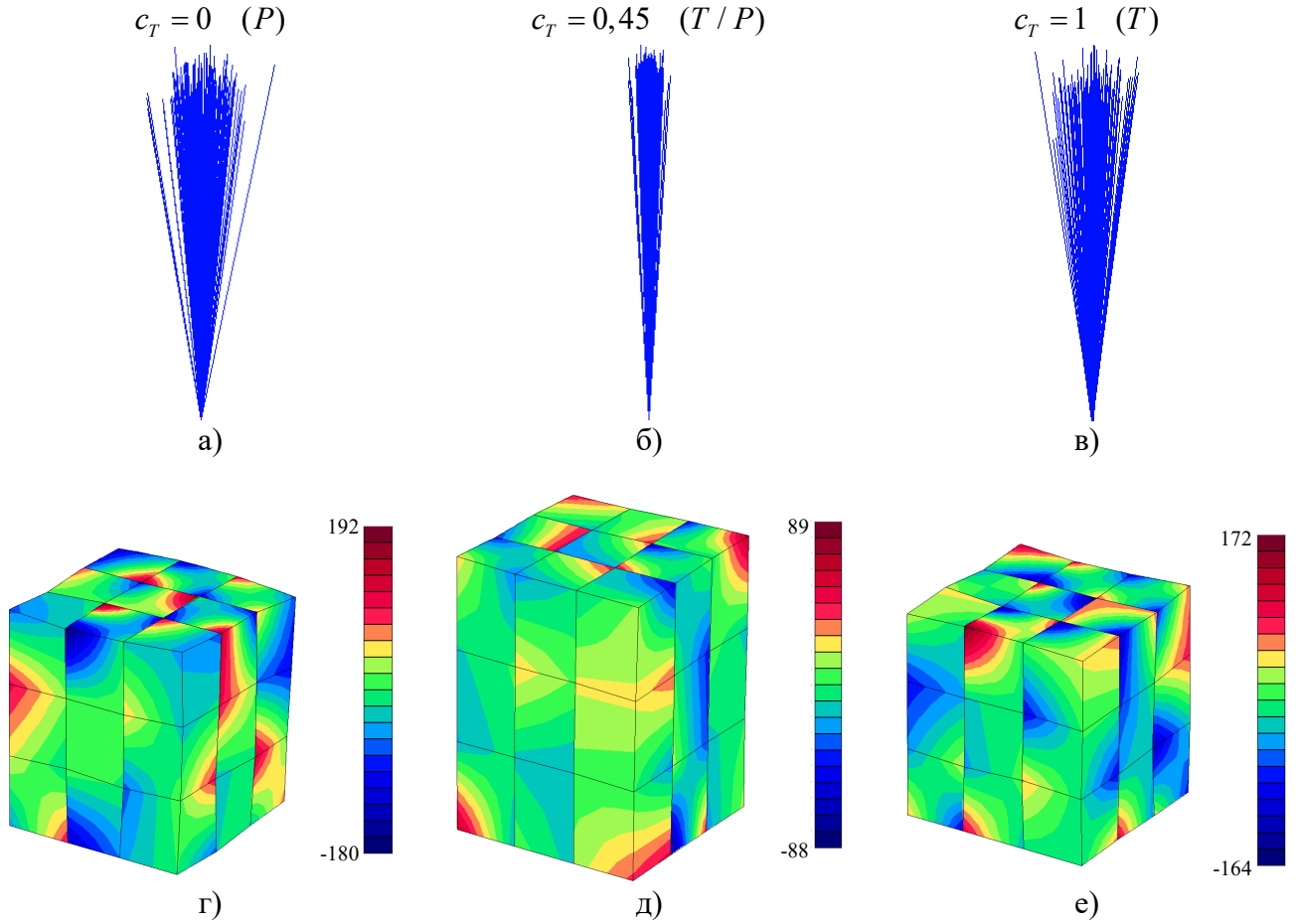


Рисунок 5.25 – Влияние объемной доли тетрагональной фазы в Т/Р смеси на:
а)-в) разориентацию векторов остаточной поляризации кристаллитов в поликристалле;
г)-е) осевые микронапряжения [МПа] (для наглядности деформированное состояние увеличено в 100 раз) при разгрузке до 0 после предварительной нагрузки 3 МВ/м;
а) $c_T = 0$ (ромбоэдрическая фаза), б) $c_T = 0,45$, в) $c_T = 1$ (тетрагональная фаза)

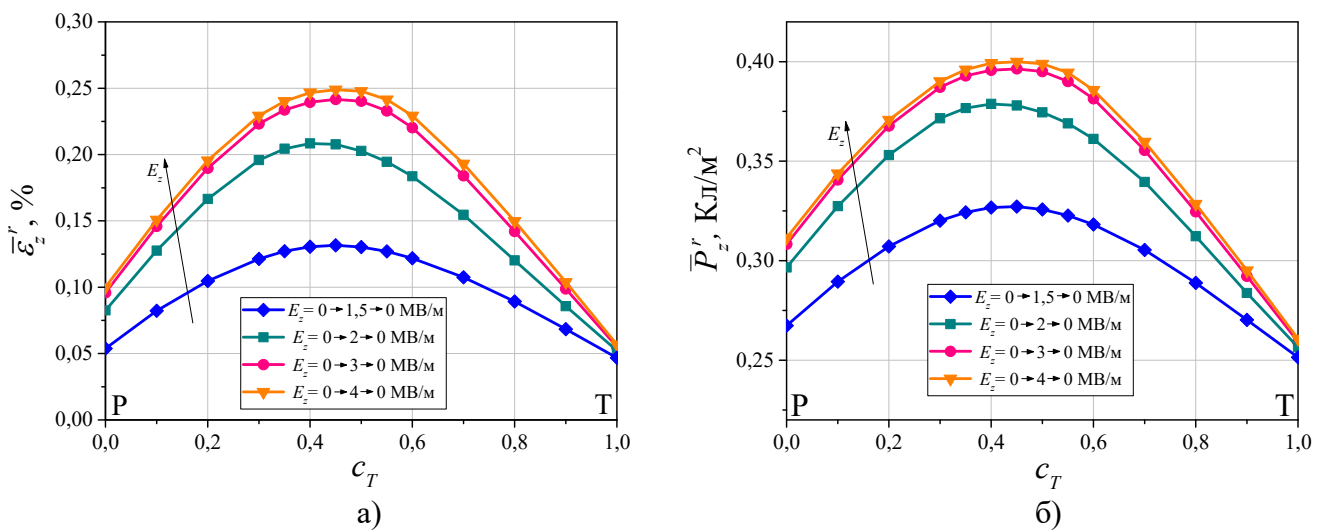


Рисунок 5.26 – Зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации поликристалла $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы c_T в Т/Р смеси при различных уровнях электрического воздействия с последующей разгрузкой до 0

Представленные выше результаты соответствовали простейшему случаю равенства спонтанных деформаций тетрагональной и ромбоэдрической фаз: $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 0,5\%$. Результаты анализа экстремальных свойств остаточной деформации и поляризации у Т/Р смеси при варьировании спонтанных деформаций тетрагональной ε_0^T и ромбоэдрической ε_0^R фаз при разгрузке до 0 показаны на Рисунке 5.27.

Увеличение спонтанной деформации тетрагональной фазы в 2 раза до $\varepsilon_0^T = 1\%$ при сохранении значения спонтанной деформации ромбоэдрической фазы $\varepsilon_0^R = 0,5\%$ приводит к увеличению максимума $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r$ на 14% и его смещению налево до значения $c_T = 0,3$ (см. Рисунок 5.27а). Увеличение спонтанной деформации ромбоэдрической фазы в 2 раза до $\varepsilon_0^R = 1\%$ при сохранении значения спонтанной деформации тетрагональной фазы $\varepsilon_0^T = 0,5\%$ приводит к увеличению максимума $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r$ на 25% и его смещению направо до значения $c_T = 0,57$. Таким образом, увеличение спонтанной деформации одной из фаз приводит к усилению взаимного влияния кристаллитов и понижению уровня остаточных деформаций в области преобладания усиливаемой фазы и к ослаблению взаимного влияния кристаллитов и повышению уровня остаточных деформаций при малых концентрациях усиливаемой фазы.

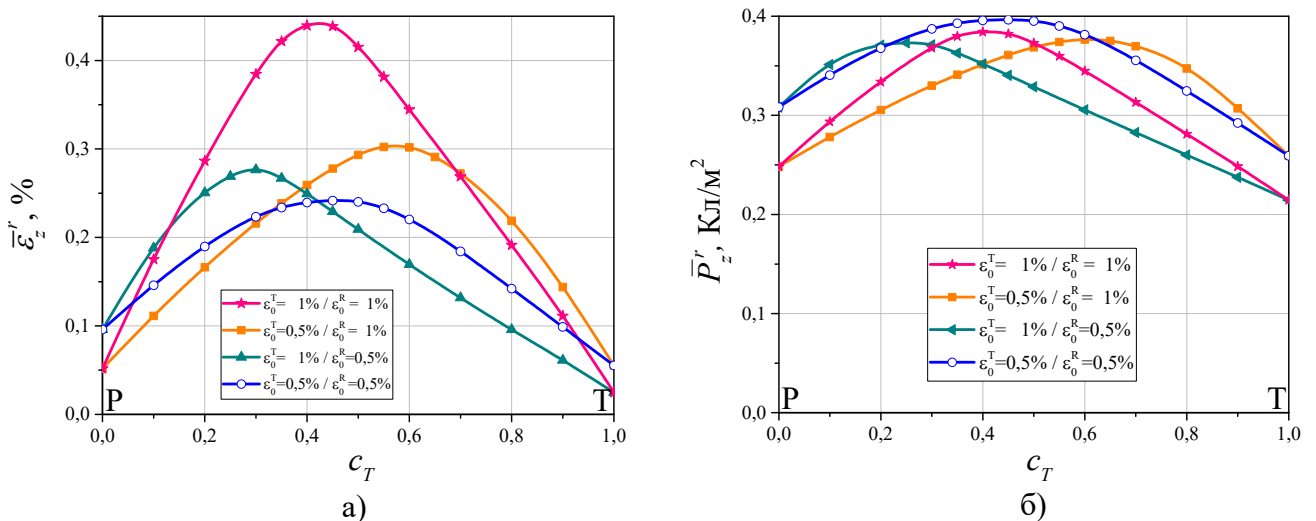


Рисунок 5.27 – Влияние спонтанных деформаций кристаллитов отдельных фаз ε_0^T и ε_0^R на зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы c_T в Т/Р смеси при разгрузке после предварительного электрического воздействия 3 МВ/м

Одновременное увеличение спонтанной деформации тетрагональной и ромбоэдрической фаз в 2 раза до значения $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 1\%$ приводит к увеличению максимума $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r$ на 81% (Рисунок 5.27а) по сравнению с исходным базовым вариантом $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 0,5\%$. Местоположение абсциссы максимума при этом практически не изменяется. С ростом спонтанной деформации эффект преобладания остаточных деформаций смеси в сравнении с монофазными композициями усиливается. Так, в случае $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 1\%$ при разгрузке уровень остаточных деформаций у Т/Р смеси с $c_T = 0,45$ в 18 раз больше уровня остаточных деформаций тетрагональной фазы с $c_T = 1$.

Остаточная поляризация с ростом спонтанной деформации незначительно снижается (Рисунок 5.27б). В рассматриваемом случае при $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 1\%$ максимум $\max_{c_T} \bar{P}_z^r = 0,384 \text{ Кл/м}^2$ лишь на 3% меньше по сравнению с исходным базовым вариантом $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = 0,5\%$ с $\max_{c_T} \bar{P}_z^r = 0,396 \text{ Кл/м}^2$.

При последовательном увеличении значения спонтанной деформации тетрагональной фазы ε_0^T в 2, 4 и 8 раз при фиксированном значении спонтанной деформации ромбоэдрической фазы $\varepsilon_0^R = 0,5\%$ наблюдается предел роста максимума $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r$ (см. Рисунок 5.28а). Максимум $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,263\%$ для случая $\varepsilon_0^T = 4\%$ (при 8-кратном увеличении) уступает максимумам $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,276\%$ для случая $\varepsilon_0^T = 1\%$ (при 2-кратном увеличении) и $\max_{c_T} \bar{\varepsilon}_z^r = 0,298\%$ для случая $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ (при 4-кратном увеличении). Последний вариант параметров ($\varepsilon_0^T = 1,91\%$, $\varepsilon_0^R = 0,55\%$), обеспечивающий наибольший уровень остаточных деформаций среди рассмотренных вариантов спонтанных деформаций, соответствует реальным значениям сегнетопьезокерамики PZT PIC151. Для него пиковое значение достигается при $c_T = 0,17$. При разгрузке уровень остаточных деформаций у поликристалла с $\varepsilon_0^T = 1,91\%$, $\varepsilon_0^R = 0,55\%$ для Т/Р смеси с $c_T = 0,17$ в 38 раз выше уровня остаточных деформаций тетрагональной фазы с $c_T = 1$, для которого $\bar{\varepsilon}_z^r = 0,0078\%$

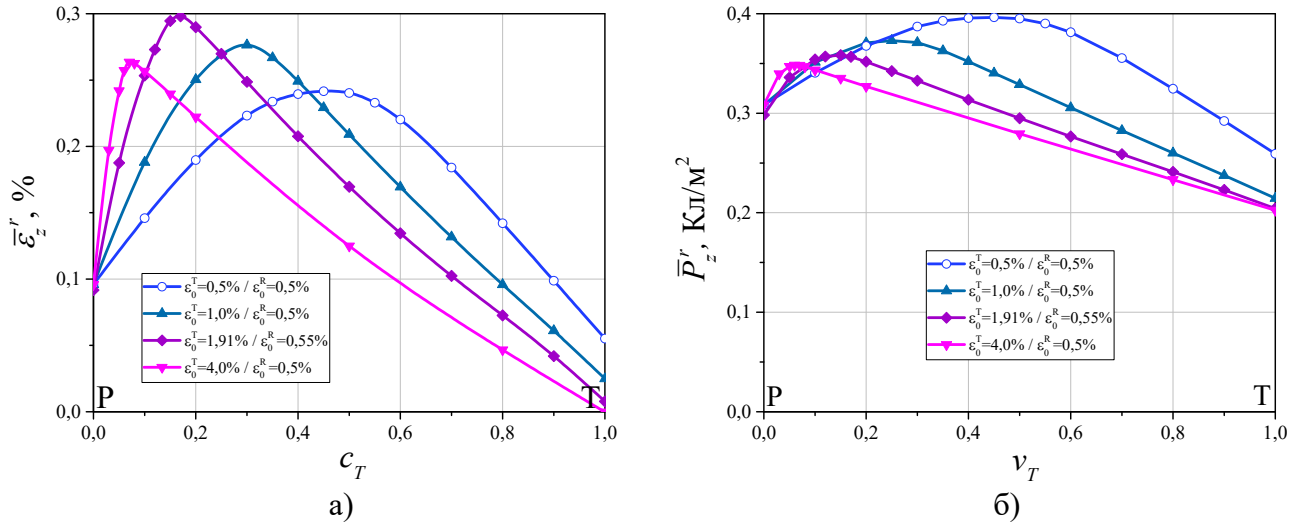


Рисунок 5.28 – Влияние спонтанных деформаций кристаллитов отдельных фаз ϵ_0^T и ϵ_0^R на зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\epsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы c_T в Т/Р смеси при разгрузке после предварительного электрического воздействия 3 МВ/м

Наряду со спонтанной деформацией на уровень остаточных деформаций и поляризацию многофазного поликристалла оказывают влияние спонтанная поляризация (Рисунок 5.29) и пороговое значение движущей силы (Рисунок 5.30).

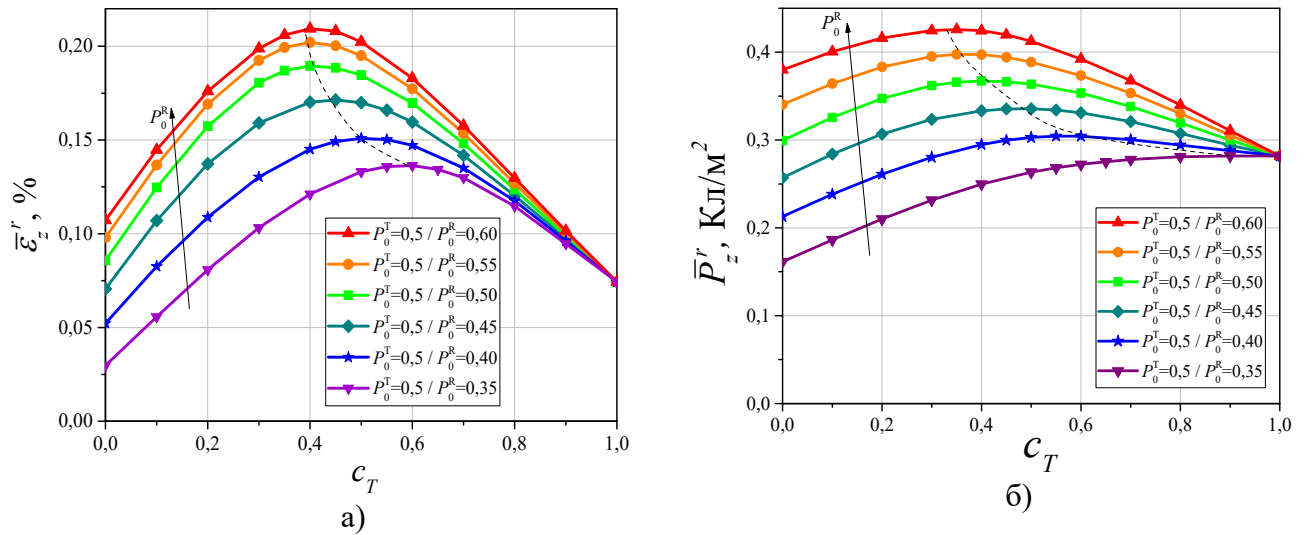


Рисунок 5.29 – Влияние спонтанной поляризации ромбоэдрической фазы P_0^R на зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\epsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации поликристалла $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы c_T в Т/Р смеси при электрическом воздействии 2 МВ/м

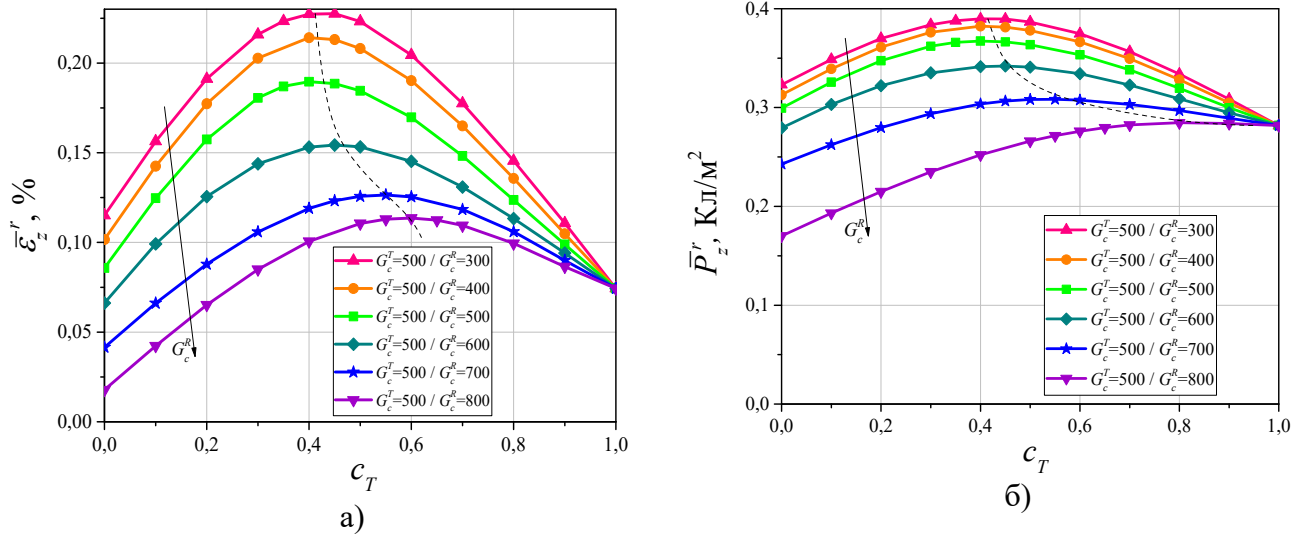


Рисунок 5.30 – Влияние порогового значения движущей силы ромбоэдрической фазы G_c^R на зависимости осевых компонент: а) остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточной поляризации поликристалла $\bar{P}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы c_T в Т/Р смеси при электрическом воздействии 2 МВ/м

Влияние перечисленных выше параметров P_0^R и G_c^R на остаточные характеристики имеет схожий характер: с ростом P_0^R (при постоянном G_c^R) и убыванием G_c^R (при постоянном P_0^R) уменьшается коэрцитивное электрическое поле E_c^R , что приводит к увеличению остаточных деформаций, наиболее заметному при меньших значениях c_T . Максимум при этом смещается влево.

Использование микроструктурной модели тетрагональной/ромбоэдрической смеси ($c_T = 0,17$) с реальными константами материала ($\varepsilon_0^T = 1,91\%$, $\varepsilon_0^R = 0,55\%$, $P_0^T = 0,5 \text{ Кл/м}^2$, $P_0^R = 0,5 \text{ Кл/м}^2$), определенными на основе данных измерения параметров кристаллической решетки, позволяют получить хорошее совпадение с данными экспериментов [502] (см., например, Рисунок 5.31 для поликристаллической пьезокерамики PZT PIC151). Использование однофазных моделей с реальными константами при учете только тетрагональной ($c_T = 1$) или только ромбоэдрической ($c_T = 0$) фазы приводит к заниженным уровням остаточных деформаций (Рисунок 5.31б).

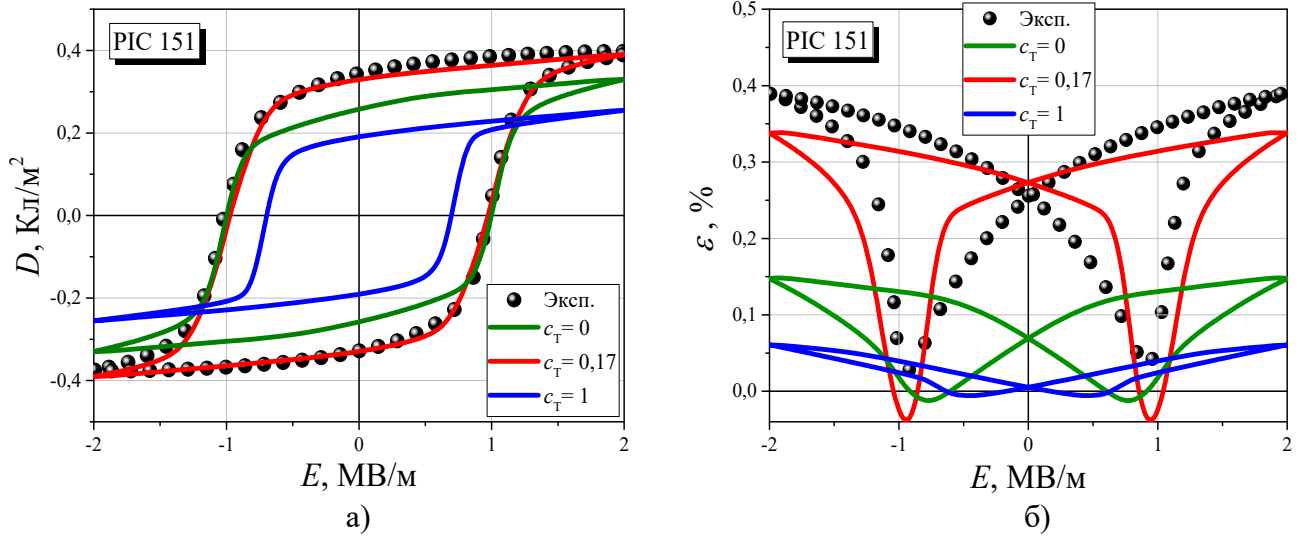


Рисунок 5.31 – Сравнение результатов КЭ расчетов (двухфазная модель Т/Р смеси, однофазные Т и Р модели) с экспериментом [502] для PZT PIC 151:

а) диэлектрический гистерезис, б) электромеханический гистерезис

Результаты вычислительных экспериментов с различными вариантами комбинаций фаз также показали возможность появления максимума концентрационных зависимостей как для Т/Р смеси, так и для Р/О и Р/О смесей (Рисунок 5.32). Экстремальное значение остаточной деформации $\max \bar{\varepsilon}_z^r$ и соответствующее значение оптимальных концентраций фаз c_T и c_R чувствительны к характеристикам, определяющим спонтанные свойства материалов отдельных фаз: $\varepsilon_0^T, \varepsilon_0^R, \varepsilon_0^O, P_0^T, P_0^R, P_0^O$.

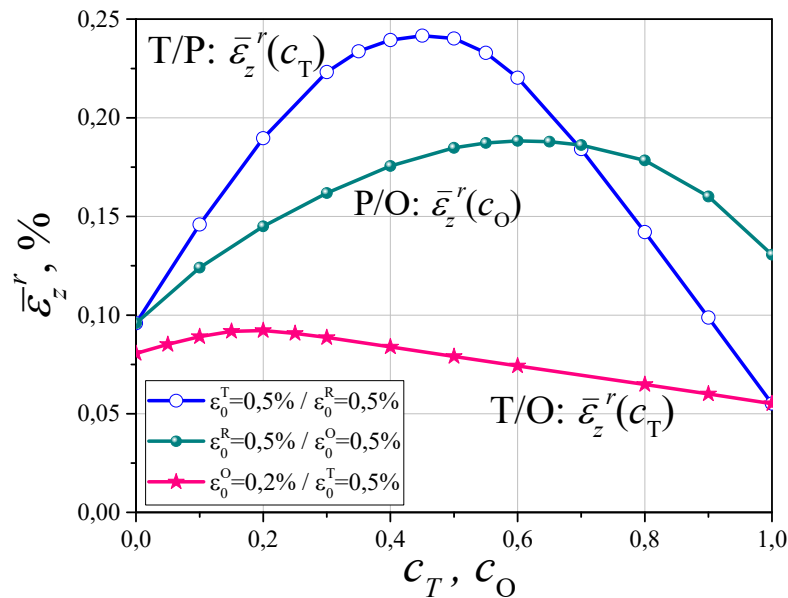


Рисунок 5.32 – Наличие концентрационного максимума в зависимостях осевой компоненты остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ от объемной доли одной из фаз в бинарных Т/Р, Р/О и Т/О смесях при разгрузке до 0 после предварительного электрического воздействия 3 МВ/м

При определенном соотношении параметров максимум исчезает (например, для Т/О-смеси при $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^O = 0,5\%$). При уменьшении ε_0^O максимум появляется (например, для Т/О-смеси при $\varepsilon_0^T = 0,5\%$, $\varepsilon_0^O = 0,2\%$, см. Рисунок 5.32). Детальный анализ влияния комбинаций фаз для бинарных смесей представлен в работе [62].

Влияние фазового состава на остаточную деформацию и поляризацию для *тернарной* Т/Р/О-смеси с одинаковыми спонтанными характеристиками $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = \varepsilon_0^O = 0,5\%$, $P_0^T = P_0^R = P_0^O = 0,5 \text{ Кл/м}^2$ и с $G_c^T = G_c^R = G_c^O = 0,5 \text{ МДж/м}^3$ показано на Рисунке 5.33. Фазовые распределения полей остаточной деформации и поляризации имеют близкий характер. Максимальные значения остаточной деформации и поляризации наблюдаются на Т/Р-границе рассматриваемой области. В окрестности Т и Р фаз наблюдается снижение остаточных характеристик поликристалла вследствие усиления взаимного влияния кристаллитов по причине наличия запирающих (недеформируемых) направлений в тетрагональном и ромбоэдрическом монокристаллах. Следует отметить, что характер представленных на Рисунке 5.33 распределений и местоположение максимумов и минимумов чувствительны к соотношению параметров $\varepsilon_0^T, \varepsilon_0^R, \varepsilon_0^O, P_0^T, P_0^R, P_0^O$.

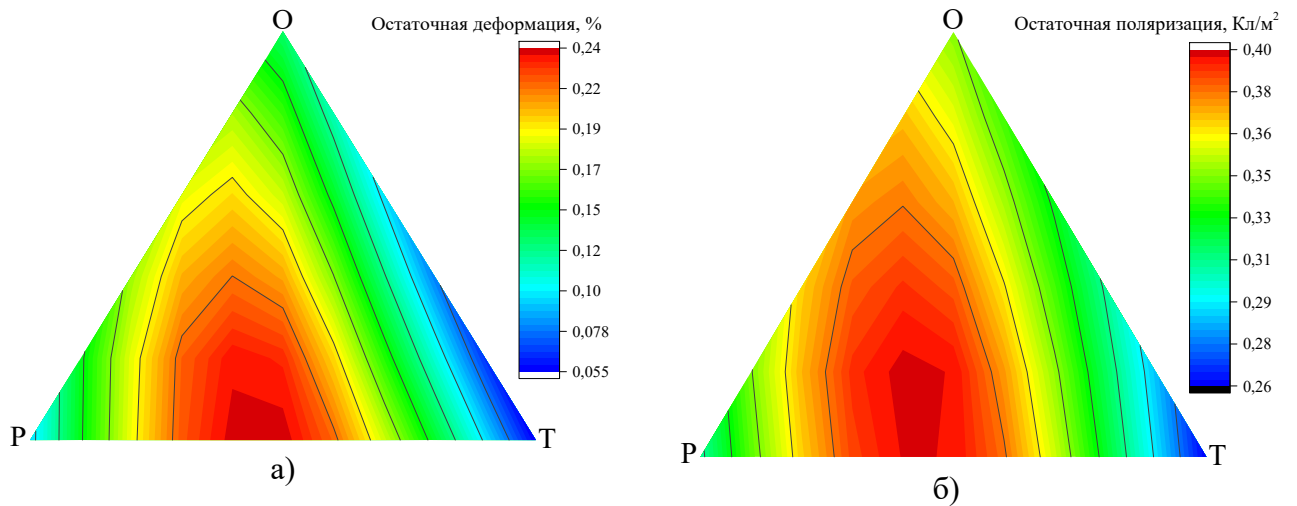


Рисунок 5.33 – Влияние фазового состава тернарной Т/Р/О-смеси на: а) остаточную деформацию поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточную поляризацию поликристалла $\bar{P}_z^r$ (для $\varepsilon_0^T = \varepsilon_0^R = \varepsilon_0^O = 0,5\%$, $P_0^T = P_0^R = P_0^O = 0,5 \text{ Кл/м}^2$, $G_c^T = G_c^R = G_c^O = 0,5 \text{ МДж/м}^3$) при разгрузке до 0 после предварительного электрического воздействия 3 МВ/м

При анализе результатов, представленных на Рисунке 5.33, следует учитывать, что при равенстве $G_c^T = G_c^R = G_c^O$ и $P_0^T = P_0^R = P_0^O$ коэрцитивные поля отдельных фаз будут от-

личаться: $E_c^O = \frac{2}{\sqrt{3}} E_c^R = \sqrt{2} E_c^T$ в силу геометрических особенностей изменения направленной поляризации при переключении. Таким образом, при одинаковой нагрузке наименьшие остаточные деформация и поляризация будут у орторомбического монокристалла. У ромбоэдрического и тетрагонального монокристаллов коэрцитивное поле на 15% и 41% соответственно меньше, что приводит к большим остаточным деформациям и поляризациям при равенстве спонтанных характеристик и движущих сил.

Для построения распределений остаточной деформации и поляризации в пределах фазового треугольника (Рисунок 5.33) были решены 36 краевых задач с различным соотношением фаз. Объемные доли c_T и c_R варьировались с шагом 0,1, а представляющая ординату на Рисунке 5.33 c_O варьировалась с шагом 0,2.

Результаты влияния фазового состава при выборе параметров материала, соответствующих реальным значениям Т и Р фаз для сегнетопьезокерамики PZT вблизи морфотропной фазовой границы (см. [270, с. 137, 368, с. 1798]) со спонтанными характеристиками $\varepsilon_0^T = 1,91\%$, $\varepsilon_0^R = 0,55\%$, $\varepsilon_0^O = 0,2\%$ и $P_0^T = P_0^R = P_0^O = 0,5$ Кл/м², показаны на Рисунке 5.34. Пороговые значения движущих сил выбирались из условия равенства коэрцитивных полей для всех фаз $E_c^O = E_c^R = E_c^T = 0,707$ МВ/м: $G_c^T = 0,5$ МДж/м³, $G_c^P = 0,41$ МДж/м³, $G_c^O = 0,35$ МДж/м³.

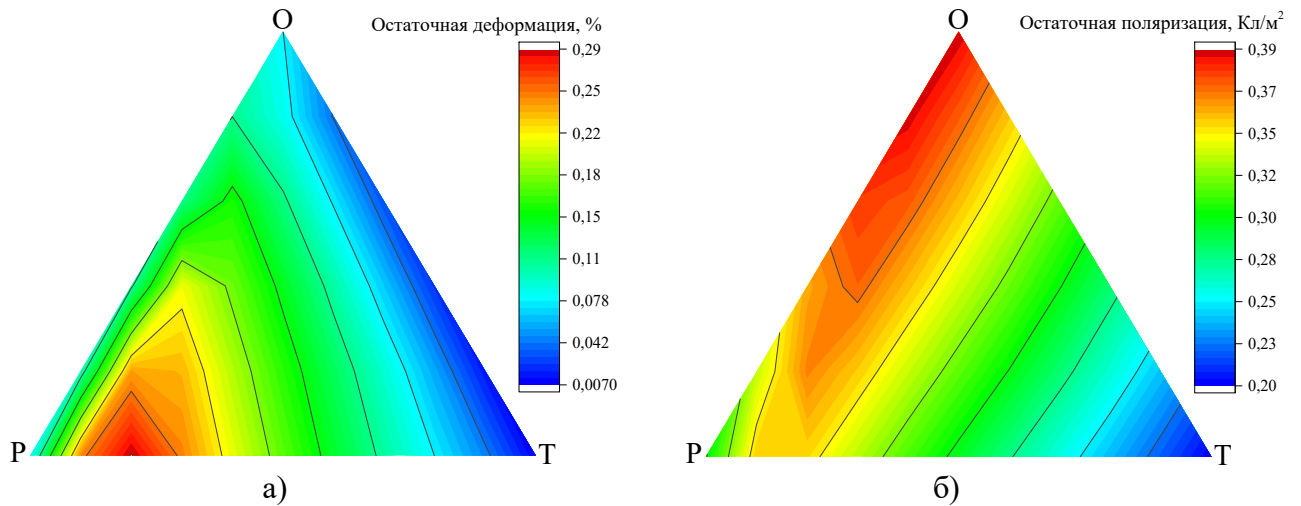


Рисунок 5.34 – Влияние фазового состава тернарной Т/Р/О-смеси на: а) остаточную деформацию поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточную поляризацию поликристалла $\bar{P}_z^r$

(для $\varepsilon_0^T = 1,91\%$, $\varepsilon_0^R = 0,55\%$, $\varepsilon_0^O = 0,2\%$; $P_0^T = P_0^R = P_0^O = 0,5$ Кл/м²;

$G_c^T = 0,5$ МДж/м³, $G_c^P = 0,41$ МДж/м³, $G_c^O = 0,35$ МДж/м³)

при разгрузке до 0 после предварительного электрического воздействия 3 МВ/м

В отличие от случая с равными значениями спонтанных характеристик (см. Рисунок 5.33) в рассматриваемом случае (Рисунок 5.34) максимальные значения остаточной деформации и поляризации наблюдаются при различном соотношении фаз: максимум остаточной деформации достигается при $c_T = 0,17$ и $c_O = 0,0$, а максимум остаточной поляризации при $c_T = 0,0$ и $c_O = 1,0$.

При увеличении спонтанной деформации ортотропной фазы в 10 раз с $\varepsilon_0^O = 0,2\%$ до $\varepsilon_0^O = 2\%$ картина распределения остаточной деформации и поляризации в фазовом треугольнике меняется (ср. Рисунки 5.34 и 5.35). Максимум остаточной деформации смещается вверх на сторону РО, а максимум остаточной поляризации вниз на сторону ТР. Указанные особенности иллюстрируют чувствительность представленных распределений и местоположений максимумов и минимумов к соотношению параметров $\varepsilon_0^T, \varepsilon_0^R, \varepsilon_0^O, P_0^T, P_0^R, P_0^O$ и могут быть использованы при поиске оптимального фазового состава в целях обеспечения наивысших показателей материала.

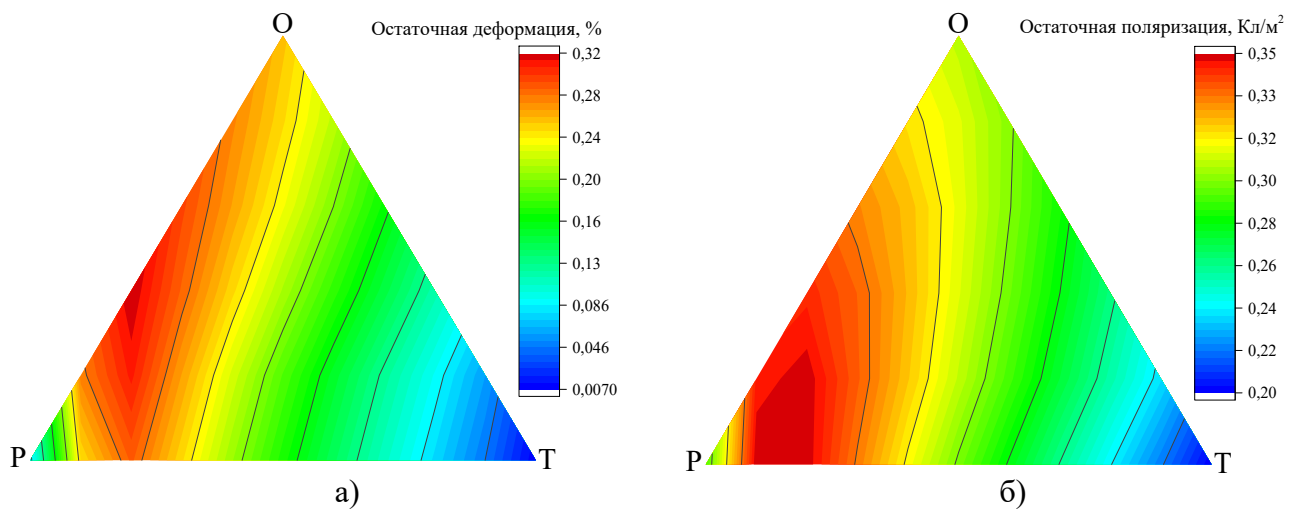


Рисунок 5.35 – Влияние фазового состава тернарной Т/Р/О-смеси на: а) остаточную деформацию поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ и б) остаточную поляризацию поликристалла $\bar{P}_z^r$

(для $\varepsilon_0^T = 1,91\%$, $\varepsilon_0^R = 0,55\%$, $\varepsilon_0^O = 2\%$; $P_0^T = P_0^R = P_0^O = 0,5$ Кл/м²;

$G_c^T = 0,5$ МДж/м³, $G_c^P = 0,41$ МДж/м³, $G_c^O = 0,35$ МДж/м³)

при разгрузке до 0 после предварительного электрического воздействия 3 МВ/м

Представленные выше результаты были получены при электрическом воздействии. Наличие концентрационного максимума в смесях наблюдается также и при *механическом воздействии* (Рисунок 5.36). При значениях спонтанных деформаций $\varepsilon_0^T = 1,91\%$ и $\varepsilon_0^R = 0,55\%$, соответствующих PZT PIC151, наибольшее значение максимума остаточных деформаций достигается при растяжении, наименьшее при сжатии, промежуточное значение при электрическом воздействии. При этом абсциссы максимумов достаточно близки, но не совпадают: $c_T = 0,2$, $0,25$ и $0,17$ соответственно. Отношения максимальных значений остаточной деформации в Т/Р-смеси к остаточной деформации тетрагональной фазы составляет 28, 18 и 38 раз, что указывает на значительное преимущество характеристик смеси в сравнении с монофазными композициями при всех рассмотренных видах внешнего воздействия.

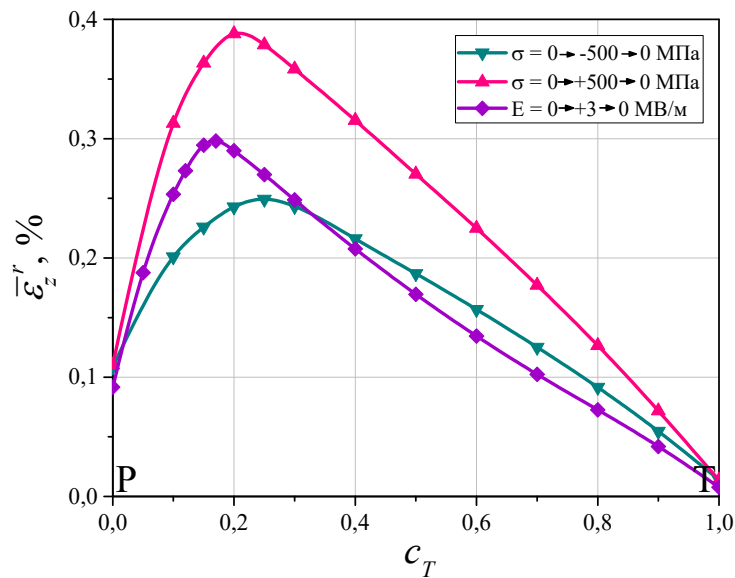


Рисунок 5.36 – Влияние вида внешнего воздействия на зависимость осевой компоненты остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}_z^r$ от объемной доли тетрагональной фазы в Т/Р смеси c_T при разгрузке до 0 после предварительного электрического воздействия до 3 МВ/м, сжатия до -500 МПа, растяжения до 500 МПа

Основными причинами появления концентрационного максимума остаточной деформации и поляризации в смеси являются:

- Увеличение числа направлений в смеси, для которых в монокристалле достигается максимальная остаточная деформация и поляризация, приводящее к более точному выстраиванию направлений поляризации кристаллитов в поликристалле в соответствии с направлением внешнего воздействия;
- Отсутствие направлений в смеси с нулевыми остаточными деформациями в монокристалле приводит к снижению микронапряжений в поликристалле, уменьшению взаимного влияния кристаллитов, что приводит к незначительному изменению остаточной деформации и поляризации при разгрузке.

5.3 Краткие выводы к главе 5

Результаты проведенных многовариантных вычислительных экспериментов для моно- и поли-кристаллических сегнетоэлектрoупругих материалов позволяют сделать следующие выводы:

1. Особенности нелинейного поведения сегнетоэлектрoупругих поликристаллов на макроуровне определяются как свойствами монокристаллов, так и взаимным влиянием последних. В связи с этим, первоначально были получены и проанализированы ориентационные зависимости максимально возможной остаточной деформации $\max_{c_I} \varepsilon_m^r(\theta, \varphi, c_I)$ и поляризации $\max_{c_I} P_n^r(\theta, \varphi, c_I)$ для тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического *монокристаллов*.
2. У тетрагонального и ромбоэдрического монокристаллов существуют *запирающие направления* (8 направлений $\langle 111 \rangle$ у тетрагонального и 6 направлений $\langle 001 \rangle$ у ромбоэдрического), вдоль которых максимальные значения остаточных деформаций равны нулю. У орторомбического монокристалла подобные направления отсутствуют.
3. Осредненные по всем возможным направлениям значения максимально возможных остаточных деформации и поляризации для орторомбического поликристалла $\varepsilon_{mean}^r = 0,753\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,912P_0$ оказались выше соответствующих значений для тетрагонального $\varepsilon_{mean}^r = 0,551\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,831P_0$ и ромбоэдрического $\varepsilon_{mean}^r = 0,637\varepsilon_0$ и $P_{mean}^r = 0,866P_0$ поликристаллов. Причиной этому является бóльшая однородность ориентационного распределения у орторомбического кристалла в

силу наличия бóльшего количества направлений локализации максимумов (12 осей $\langle 011 \rangle$), в сравнении с 6 осями $\langle 001 \rangle$ локализации у тетрагонального и 8 осями $\langle 111 \rangle$ у ромбоэдрического кристалла.

4. Минимальная остаточная деформация и поляризация для разномодульной двухфазной Т/Р-смеси демонстрирует наличие максимума внутри диапазона изменения c_T при значении, близком к $c_T = 0,4$ (см. Таблицу 5.7).
5. Взаимное влияние кристаллитов в поликристалле приводит к значительному *снижению* уровня остаточной деформации поликристалла $\bar{\varepsilon}^r$ в сравнении с остаточной деформацией монокристалла и со спонтанной деформацией ε_0 . Для тетрагонального и ромбоэдрического поликристалла установленное снижение $\bar{\varepsilon}^r$ прогрессирует с ростом ε_0 (см. Рисунок 5.22).
6. Результаты КЭ моделирования нелинейного поведения представительного элемента поликристаллического агрегата сегнетоэлектроругого материала позволили установить наличие *максимума* в зависимости остаточной деформации тетрагонального и ромбоэдрического поликристалла $\bar{\varepsilon}^r$ от спонтанной деформации кристаллита ε_0 . Правее максимума наблюдается зависимость $\bar{\varepsilon}^r \sim 1/\varepsilon_0$, обусловленная взаимным влиянием кристаллитов, прогнозируемая также на основе предложенной простейшей реологической модели, включающей 2 различно ориентированных монокристалла (5.31).
7. Сравнение поведения тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического поликристаллов выявило принципиальное отличие поведения первых двух типов от последнего при больших значениях ε_0 , заключающееся в *уменьшении* остаточных деформаций с ростом ε_0 , в то время как для орторомбического поликристалла наблюдается *увеличение* $\bar{\varepsilon}_z^r$ с ростом ε_0 (см. Рисунок 5.19). Объяснением этому служит отсутствие у орторомбического кристалла направлений с нулевым значением остаточных деформаций (см. $\varepsilon_{\min}^r$ в Таблице 5.3), в то время как у тетрагонального и ромбоэдрического кристалла такие запирающие направления с нулевыми остаточными деформациями присутствуют (см. $\varepsilon_{\min}^r$ в Таблице 5.1).

8. Для тетрагонального и ромбоэдрического поликристалла зависимость $\bar{\varepsilon}^r \sim 1/\varepsilon_0$ наблюдается как при электрическом, так и при механическом нагружении. Она является следствием взаимного влияния кристаллитов и возникновения в поликристалле микронапряжений вследствие наличия у кристаллитов запирающих (необратимо недеформируемых) направлений. При разгрузке микронапряжения способствуют более раннему началу накопления остаточных деформаций противоположного знака, которое в результате при разгрузке до 0 приводит к меньшему уровню результирующих остаточных деформаций (см. Рисунок 5.22). Наличие микронапряжений проявляется на макроуровне в виде эффекта Баушингера с пределом переключений $\bar{\sigma}_c = 4G_c / 3\varepsilon_0$, убывающим с ростом ε_0 .
9. Использование модели с учетом только тетрагональной фазы с реалистическим выбором констант материала (например, для PZT с $\varepsilon_0 = 1,91\%$ [368]) оказывается недостаточным для корректного описания поведения поликристаллической PZT сегнетопьезокерамики. В этом случае прогнозируемое значение остаточной деформации $\bar{\varepsilon}_z^r = 0,0078\%$ будет много меньше (в 32 раза) наблюдаемого в экспериментах значения $\bar{\varepsilon}_z^r = 0,25\%$. Поэтому для адекватного описания поведения PZT сегнетопьезокерамики вблизи морфотропной фазовой границы необходимо использовать модель с ортотропной фазой или двухфазную модель с учетом одновременного присутствия тетрагональной и ромбоэдрической фаз.
10. В настоящее время отсутствует объяснение экстремальных свойств вблизи морфотропной фазовой границы. Применение двухфазной Т/Р микроструктурной модели позволило дать качественное и количественное описание эффекта проявления экстремальных свойств вблизи морфотропной фазовой границы.
11. Результаты вычислительных экспериментов с использованием микроструктурной модели позволяют установить экстремальные свойства трехфазных Т/Р/О композиций различного фазового состава. Введенный подход открывает возможности синтеза сегнетоэлектродупругих материалов с оптимальной структурной организацией вещества путем управления его метастабильными состояниями.

ГЛАВА 6. ОПИСАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРОУПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ УЧЕТЕ НАЛИЧИЯ ДЕФЕКТОВ

В отличие от *идеальных* (бездефектных) кристаллов в *реальных* (дефектосодержащих) кристаллах на процесс поляризации значительное влияние оказывают *точечные дефекты* кристаллической решетки [22, 49, 339, 342, 393, 401, 500, 102, 106, 108, 132, 159, 160, 223, 302]. Многочисленные эксперименты, выполненные на BaTiO_3 [132, 275, 342, 367, 460, 477, 495], PZT [139, 140, 160, 338, 436], PLZT [386], PMS-PZT [191], PMN-PZT [375, 496], PIN-PMN-PT [501], PNZST [487], BNT–BT [337], KNN [286, 475], KNbO_3 [213], TGS [49, 108, 288], показывают, что дефектная структура кристалла определяет процессы формирования и движения доменных границ, размеры и форму гистерезисных кривых, время переключения, диэлектрические и пьезоэлектрические свойства. При взаимодействии доменных границ с дефектами кристалла наблюдается пиннинг [102, 108, 395, 488] - закрепление доменных стенок на дефектах, приводящее к уменьшению их мобильности и формированию устойчивых доменных структур.

В качестве дефектов в сегнетоэлектродупругих материалах рассматриваются акцепторные или донорные легирующие примеси, подвижные вакансии, электроны или дырки [49, 223]. Дефекты могут быть точечными (нульмерными), линейными (одномерными), двух- и трех-мерными; заряженными и нейтральными [22, 49]; полярными и неполярными [49]; пространственно упорядоченными и разориентированными [401]; обладающими легкообращаемой и труднообращаемой поляризацией (замороженные) [121, 401].

Важно отметить, что дефекты кристаллической решетки могут быть как собственными, так и искусственно созданными в процессе выращивания кристалла с помощью введения примесей (легирования) или путем воздействия на кристалл высокоэнергетическими частицами (включая облучение рентгеновскими и γ -лучами, нейтронами и электронами) [4, 108]. Наличие пространственно упорядоченных полярных дефектов заданной концентрации позволяет создать в кристалле внутреннее

смещающее электрическое поле, способствующее сохранению устойчивого монокристаллического состояния [108], достигнуть больших изменений деформации при малом изменении электрического поля в монокристаллах [393] и поликристаллах [495]. Таким образом, открывается возможность управления и целенаправленного изменения электромеханических свойств сегнетоэлектродупругих материалов путем контролируемого создания дефектов структуры, представляющего один из способов доменной инженерии как разновидности технологического инжиниринга. В связи с этим представляют значительный интерес экспериментальные и теоретические исследования влияния дефектов на процессы переключения и движение доменных стенок. Одним из возможных путей исследования является многовариантное моделирование с использованием предложенной микроструктурной модели.

Для кристаллов перовскитной структуры ABO_3 со строгим стехиометрическим составом для каждой из А-, В- и О-подрешеток могут иметь место дефекты по Френкелю (образование вакансии вследствие перемещения атома (иона) из узла кристаллической решетки в междоузлие), а для совокупности подрешеток (наиболее вероятен обмен между А- и В-подрешетками) возникают дефекты по Шоттки (образование вакансии вследствие выхода атома (иона) из объема на поверхность) [22]. В соединениях нестехиометрического состава (при наличии примесей) наиболее распространены дефекты по Шоттки в А- и О-подрешетках [22].

Полярный дефект может быть целенаправленно введен в кристалл, например, путем замены центрального катиона B^{4+} перовскитной структуры ABO_3 (см. Рисунок 6.1) легирующей примесью различной валентности, несовпадающей с B^{4+} . Современная PZT пьезокерамика обязательно содержит либо донорные, либо акцепторные легирующие добавки. *Акцепторная* примесь (замена Ti^{4+} на Cu^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{3+}) делает пьезокерамику более сегнетожесткой в сравнении с нелегированной PZT керамикой, в то время как *донорное* легирование (замена Ti^{4+} на Nb^{5+}) приводит к сегнетомягкой пьезокерамике. Несовпадение заряда акцепторной легирующей добавки и замещаемого иона часто компенсируется близлежащими кислородными вакансиями. Типичные акцептор-центрированные дефектные комплексы включают

нейтральные по заряду $(\text{Cu}_{\text{Ti}}'' - \text{V}_{\text{O}}'')^{\times}$ [195–197], $(\text{Mn}_{\text{Ti}}'' - \text{V}_{\text{O}}'')^{\times}$ [197, 342, 494, 496, 501] и заряженный $(\text{Fe}_{\text{Ti}}'' - \text{V}_{\text{O}}'')^{\cdot}$ [197, 202, 275, 355, 401]. Предполагается, что легированные донорами сегнетоэлектрики компенсируются зарядом благодаря наличию вакансий свинца, например, $(\text{Nb}_{\text{Ti}}^{\cdot} - \text{V}_{\text{Pb}}'')^{\cdot}$ [197, 225, 275, 401]. Выше использована система символических обозначений дефектов по Крёгеру и Винку [33].

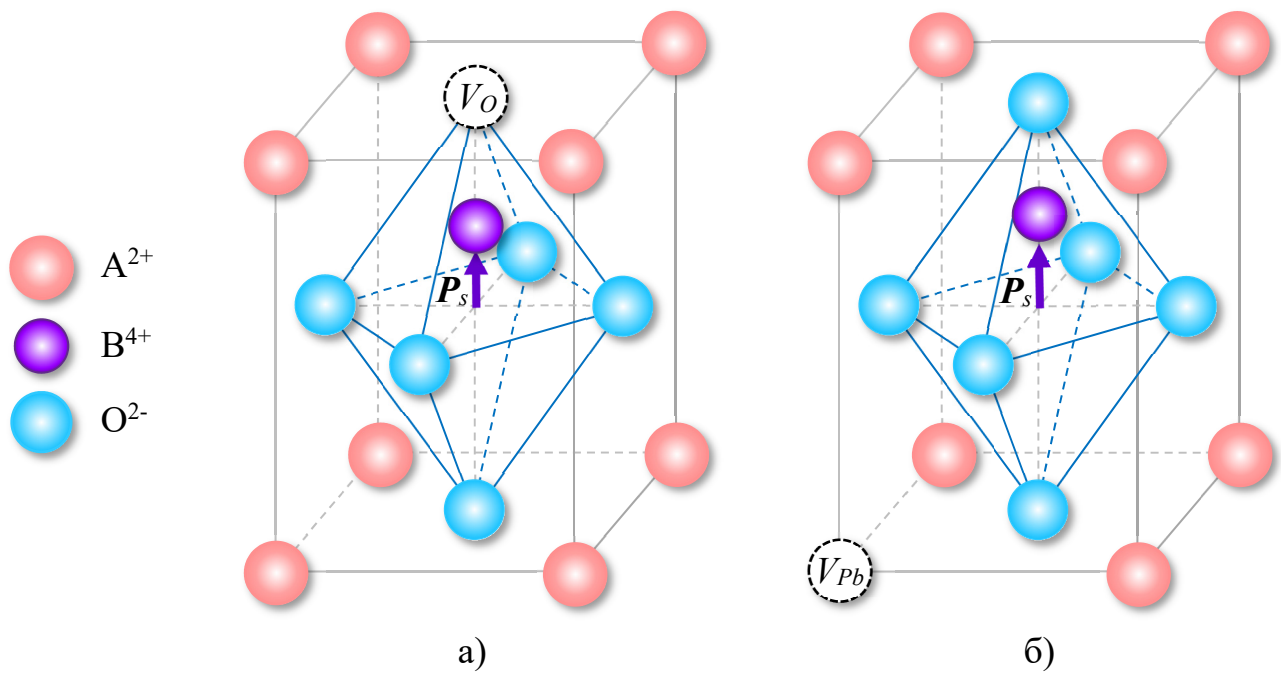


Рисунок 6.1 – Положение компенсирующего дефекта в титанате свинца [401] а) легированном акцептором (кислородная вакансия V_{O} размещается в вершине кислородного октаэдра), б) легированном донором (вакансия свинца V_{Pb} в одной из А-вершин перовскитной структуры ABO_3)

Полярные дефекты оказывают значительное влияние на переключение сегнетоэлектрических доменов и движение доменных стенок посредством электростатического и механического воздействий, доминирующих в локальной кинетике переключения [221]. Упрочнение (сегнетожесткость) и разупрочнение (сегнетомягкость) связаны с легкостью, с которой могут перемещаться доменные стенки, что, в свою очередь, определяется взаимодействием доменных стенок с комплексами дефектов.

В случае *акцепторного* легирования, например, при замещении Ti^{4+} на Cu^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{3+} , отрицательный заряд акцептора компенсируется кислородными вакансиями $(\text{Cu}_{\text{Ti}}'' - \text{V}_{\text{O}}'')^{\times}$. В этом случае полярный дефект оказывается ориентирован вдоль

вектора поляризации [401] (см. Рисунок 6.1а). Стабилизация доменов и доменных стенок внутренним полем смещения, возникающим из-за объемного упорядочения дефектных диполей между акцепторной легирующей примесью и кислородной вакансией, является источником закрепления доменов и доменных стенок, и как следствие этого - упрочнения (сегнетожесткости), характеризуемого повышением коэрцитивного поля [160, 302, 488, 496, 501], возможностью 90° переключения доменов, сопровождающегося значительными деформациями [393, 495].

В случае *донорного* легирования, например при замещении Ti^{4+} на Nb^{5+} , положительный заряд компенсируется не кислородными, а свинцовыми вакансиями $(Nb_{Ti}^{\bullet} - V_{Pb}^{\prime\prime})'$. В этом случае ориентация полярного дефекта не зависит от ориентации вектора поляризации [401] (см. Рисунок 6.1б), что приводит к неупорядоченному (случайному) распределению векторов поляризации дефектов в кристаллите, что в результате облегчает перемещение доменной стенки [225, 401].

Точечные дефекты оказывают существенное влияние также на процессы *деградации* электромеханических свойств [223]. Сегнетопьезокерамика подвержена деградации либо в результате циклического электрического и/или механического воздействия (*усталость* [59, 122, 140, 223, 337–339]), либо с течением времени при отсутствии внешней механической и электрической нагрузки (*старение* [132, 160, 213, 223, 303, 361, 367, 460, 495]). Для указанных процессов также используются термины динамическое и статическое старение [4]. В результате деградации уменьшается диэлектрическая проницаемость, пьезоэлектрические коэффициенты и переключаемый заряд (максимальный уровень остаточной поляризации), что является основным препятствием на пути практического применения в ряде приложений (например, в качестве элементов запоминающих устройств).

Сегнетомягкая пьезокерамика, получаемая путем донорного легирования, демонстрируют гораздо более слабый эффект старения, чем легированная акцептором (сегнетожесткая) пьезокерамика [223].

Основные механизмы усталости и старения имеют схожий характер и непосредственно связаны с наличием и эволюцией *точечных дефектов*. Микроскопические

механизмы, вызывающие усталость и старение сегнетопьезокерамики, не до конца изучены и в настоящее время являются предметом интенсивных исследований. Общим для всех подходов является то, что подвижные заряженные дефекты стабилизируют существующую доменную конфигурацию, создавая внутреннее поле смещения, которое противодействует изменению поляризации при приложении электрического поля. Carl and Härdtl [160] выделили три основных механизма деградации свойств материала: (i) *объемный эффект* (вызванный перераспределением зарядов в объеме элементарной ячейки вследствие возникновения диполя из-за дефекта, образованного, например, акцепторным ионом и кислородной вакансией [132], инъекцией носителей заряда из электродов через диэлектрический зазор [121]), (ii) *доменный эффект* (связан с диффузией заряженных дефектов к доменным стенкам, приводящей к закреплению их позиций [389]), (iii) *эффект интерфейса* (включает диффузию ионов, вакансий или электронов к границам зерен или границам раздела разнородных фаз (электроды, вторые фазы) с образованием слоев пространственного заряда [458], а также возникновение микротрещин в области, близкой к электроду [223]).

Наличие полярных дефектов и электромиграция объемных зарядов приводит к возникновению в сегнетоэлектрострунгом материале медленно релаксирующих внутренних электрических полей (внутреннее объемное экранирование), оказывающих значительное влияние на процессы переключения [121]. Присутствие внутренних электрических полей, которые формируются и релаксируют в течение процесса переключения, приводит к пространственной и временной неоднородности условий переключения, что оказывает существенное влияние на результирующую поляризацию и кинетику доменной структуры [121].

Кривые диэлектрического и электромеханического гистерезисов содержат информацию о дефектах в сегнетоэлектрострунгом материалах, что открывает возможность по форме кривых производить диагностику дефектов [274]. Появление одинаково ориентированных полярных дефектов фиксированной ориентации в моно- и поликристаллах приводит к *смещению петель* гистерезиса [4, 49, 477, 496, 132, 140,

160, 191, 288, 303, 375, 386]. Для упорядоченных в пределах доменов противоположно направленных (антипараллельных) полярных дефектов может наблюдаться *срез петли* (двойная петля) гистерезиса [4, 49, 160, 288, 303, 342, 460]. Возникновение неупорядоченных дефектов, происходящее, например, при введении дефектов в паразлектрической фазе, приводит к изменению коэрцитивного поля и наклона участков петли, связанных с упрочнением, без ее смещения [49, 184].

На Рисунке 6.2 показаны основные характерные варианты гистерезисных петель для дефектосодержащих материалов в сравнении с бездефектными материалами, полученные расчетным путем с использованием предложенной модели сегнетоэлектрoупругого материала с учетом полярных точечных дефектов (см. раздел 2.1.2). Предложенная модель позволяет описать как *смещение* петли диэлектрического $D(E)$ гистерезиса (Рисунок 6.2а), так и ее *срез* (двойная петля гистерезиса) (Рисунок 6.2б). Определение характерных значений внутренних полей (коэрцитивного поля, поля внутреннего смещения) наиболее удобно осуществлять по зависимости $dD/dt(E)$ (см. Рисунки 6.2в и г). Величина dD/dt пропорциональна току, протекающему через пьезоэлемент в момент переключения, который может быть легко измерен в эксперименте. Появление дефектов оказывает влияние на петлю *электро-механического* гистерезиса, приводя к ее смещению (Рисунок 6.2д), изменению размеров и формы (Рисунок 6.2е).

Целью данной главы 6 является систематическое исследование возможностей предложенной модели материала с учетом полярных точечных дефектов при описании реальных моно- и поли-кристаллических сегнетоэлектрoупругих материалов на основе сравнения с результатами эксперимента и параметрического анализа.

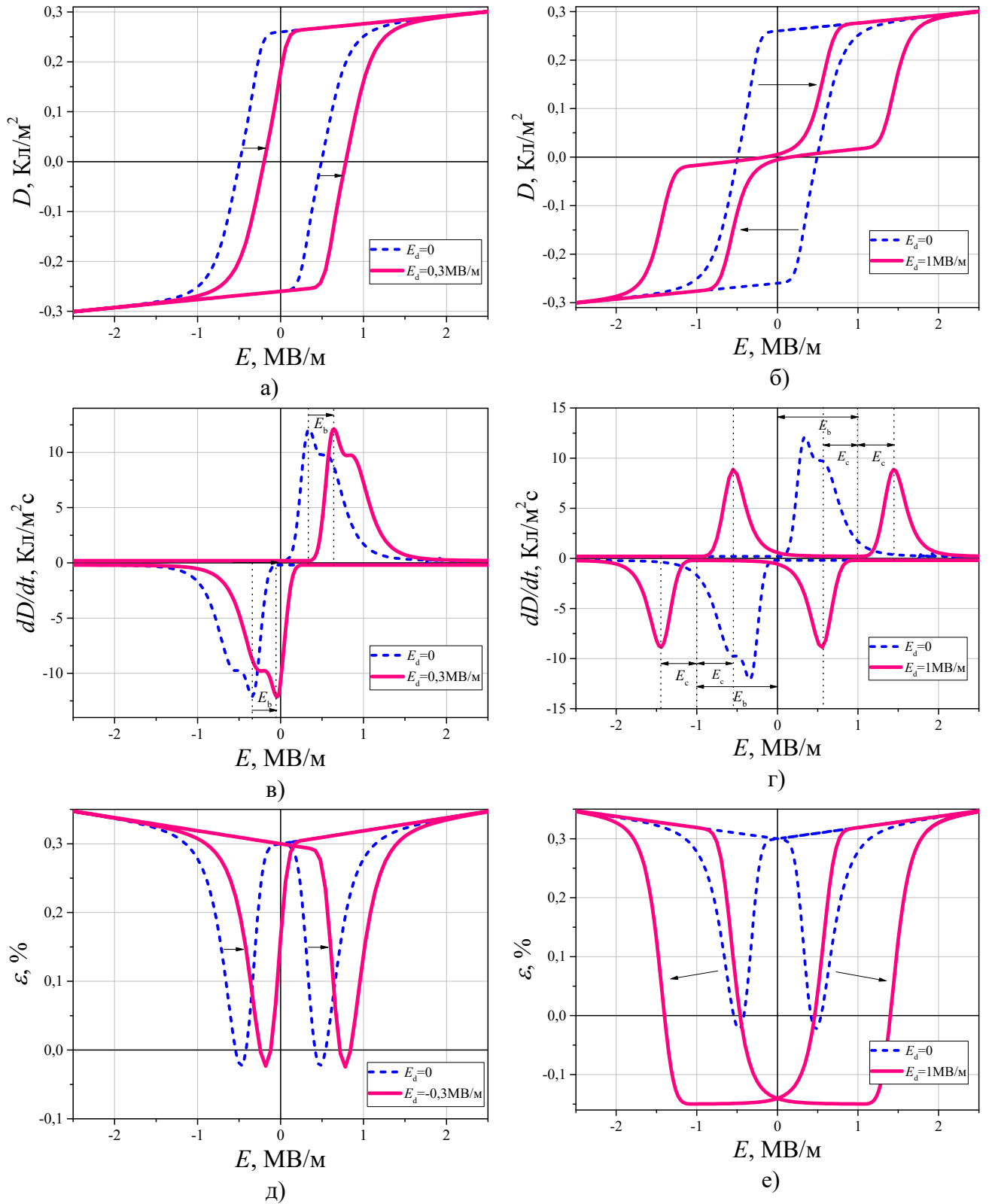


Рисунок 6.2 – Влияние дефектов на а)-б) $D(E)$ -гистерезис, в)-г) $dD/dt(E)$ -гистерезис, д)-е) $\varepsilon(E)$ -гистерезис: а), в), д) смещение (асимметричная петля), б), г), е) срез (двойная петля).

Кривые для бездефектного материала показаны пунктиром,
для материала с дефектами – сплошной линией

6.1 Верификация микроструктурных моделей с учетом дефектов

В целях верификации микроструктурной модели с учетом наличия дефектов произведено сравнение результатов расчета с данными экспериментальных исследований для различных материалов: BaTiO_3 [132, 342, 460], PMS-PZT [191], PMN-PZT [375] и PZT PIC151 [140]. В рассмотрении участвовали поли- и монокристаллические материалы с тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической структурой. При анализе поликристаллических материалов в вычислительных экспериментах использовался представительный объем с разбиением $3 \times 3 \times 3$ элементов, содержащий 216 кристаллитов (Рисунок 4.1г). При проведении расчетов непосредственно сами процессы деградации (старение и усталость) не моделировались. Рассматривалась возможность описания поведения деградированного материала при наличии сформировавшихся полярных точечных дефектов без исследования причин, вызвавших их появление.

На Рисунке 6.3а показано сравнение результатов КЭ моделирования поведения образцов из *поликристаллического* BaTiO_3 , легированного Ni^{2+} (1% *акцепторная* примесь), для дефектосодержащего (*старение* при 45 °C в течение 15 мин) и бездефектного материалов при циклическом электрическом нагружении амплитудой $E_{\text{max}} = 2$ МВ/м и частотой $f = 1$ Гц с результатами экспериментов G. Arlt и H. Neumann [132]. В расчетах использовалась микроструктурная модель материала тетрагональной структуры с неизменяющимися (труднопереключаемыми) полярными дефектами (2.68)-(2.72), (2.84), (2.86) с константами материала для BaTiO_3 с учетом дефектов, приведенными в Таблице 6.1. Значение параметра, характеризующего дефектное состояние материала, выбиралось равным $E_d = -0,22$ МВ/м. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.3а) демонстрируют хорошее совпадение с результатами эксперимента как для дефектного, так и бездефектного материала. Наличие упорядоченных полярных точечных дефектов приводит к возникновению внутреннего поля смещения и, как следствие этого, к униполярности переключения в цикле, то есть к затруднению процесса переключения и повышению ко-

эрцитивного поля при совпадении направления поляризации дефектов с направлением внешнего электрического поля (т. е. при $E < 0$ в рассматриваемом случае $E_d < 0$) и облегчению обратного переключения и уменьшению коэрцитивного поля при противоположном направлении электрического поля (т. е. при $E > 0$). В результате петля гистерезиса для материала с дефектами смещается на величину $|E_d|$ налево ($E_d < 0$) по отношению к центрально симметричной петле гистерезиса бездефектного материала (см. Рисунок 6.3а). Смещение составляет около трети ширины петли диэлектрического гистерезиса или $0,68 E_c$.

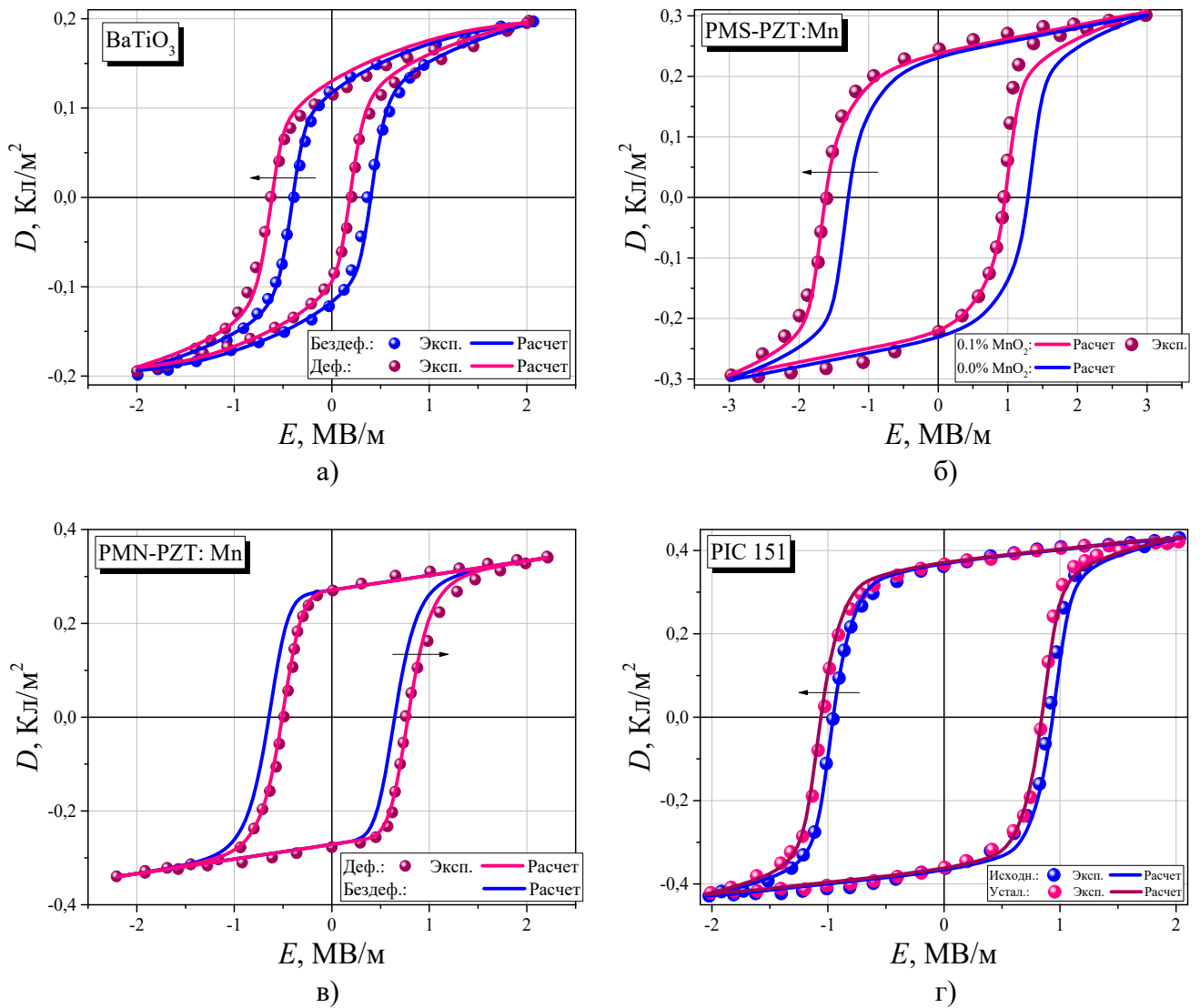


Рисунок 6.3 – Сравнение результатов КЭ расчетов на основе модели материала с учетом полярных дефектов с экспериментами для четырех материалов:

а) BaTiO₃ [132], б) PMS-PZT [191], в) PMN-PZT [375] и г) PZT PIC151 [140]

Таблица 6.1 – Константы материалов, используемых в КЭ расчетах с применением микроструктурной модели с учетом наличия дефектов

Величина	Сим-вол	Ед. измер.	Значение для материала				
			BaTiO ₃	PMS-PZT	PMN-PZT	PIC 151	KTS
Упругие модули	$\tilde{C}_{333}^E$	ГПа	150	126	112	126	–
	$\tilde{C}_{113}^E$		60,0	53,3	108	53,3	–
	$\tilde{C}_{131}^E$		42,9	35,4	69	35,4	0,8
Диэл. проницаемость	$\tilde{\kappa}_{33}^\sigma$	нФ/м	10,7	22,0	30,1	22,0	–
Пьезоэлектр. модуль	$\tilde{d}_{333}$	пм/В	415	315	320	315	–
Спонт. поляризация и деформация	$\tilde{P}_0$	Кл/м ²	0,26	0,36	0,47	0,5/0,5	–
	$\tilde{\varepsilon}_0$	%	0,3	0,3	0,3	1,91/0,55	0,48
Критическая движущая сила	G_c^{90}	МДж/м ³	0,088	0,5	–	0,5	–
	G_c^{71}		–	–	0,26	0,5	–
	G_c^{60}		–	–	–	–	0,003
Показатели степени уравнения эволюции	n	–	4	15	5	12	5
	m		2	2	2	1,5	8
Внутреннее поле смещения	E_d	МВ/м	-0,22	-0,34	+0,146	-0,11	–
	σ_d	МПа	–	–	–	–	+0,005

На Рисунке 6.3б показано сравнение результатов КЭ моделирования поведения образцов из *поликристаллической* керамики Pb(Mn_{1/3}Sb_{2/3})O₃–Pb(Zr,Ti)O₃ (сокращенное наименование PMS–PZT), легированной MnO₂ (0,1% акцепторная примесь Mn²⁺), для дефектосодержащего (после поляризации при 170 °С *старение* при 25 °С в течение 30 дней) материала при циклическом электрическом нагружении амплитудой $E_{\max} = 3$ МВ/м и частотой $f = 1$ Гц с результатами эксперимента G. Du и др. [191]. В расчетах использовалась микроструктурная модель материала тетрагональной структуры с неизменяющимися полярными дефектами (2.68)-(2.72), (2.84), (2.86) с константами материала, указанными в Таблице 6.1. Значение параметра материала, характеризующего дефектное состояние, выбиралось равным $E_d = -0,34$ МВ/м. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.3б) демонстрируют высокую точность при сопоставлении с результатом эксперимента.

Вследствие отрицательного значения E_d петля гистерезиса для материала с дефектами смещается налево. Смещение соответствует величине E_d и составляет 0,13 ширины петли или $0,26 E_c$.

На Рисунке 6.3в показано сравнение результатов моделирования поведения образцов ориентации [001] из *монокристаллического* пьезоэлектрического материала $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ (сокращенное наименование PMN-PZT), легированного Mn^{2+} (1% акцепторная примесь), при циклическом электрическом нагружении амплитудой $E_{\max} = 2,2$ МВ/м и частотой $f = 1$ Гц с результатами экспериментов Н.Т. Он и др. [375]. В расчетах использовалась микроструктурная модель материала *ромбоэдрической* структуры с неизменяющимися дефектами (2.68)-(2.72), (2.84), (2.86) с константами материала, представленными в Таблице 6.1. Дефектное состояние характеризуется величиной $E_d = +0,146$ МВ/м. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.3в) демонстрируют визуальное совпадение с результатами эксперимента. Вследствие положительного значения E_d петля гистерезиса смещается направо по отношению к началу координат. Смещение составляет 0,12 ширины петли или $0,24 E_c$.

На Рисунке 6.3г показано сравнение результатов КЭ моделирования поведения *поликристаллической* керамики $\text{Pb}_{0.99}[\text{Zr}_{0.45}\text{Ti}_{0.47}(\text{Ni}_{0.33}\text{Sb}_{0.67})_{0.08}]\text{O}_3$ (сокращенное наименование PZT PIC151) для материала в исходном состоянии (на 1ом цикле нагружения) и после 10^9 циклов электрического нагружения ($f = 50$ Гц) с результатами эксперимента N. Valke и др. [140]. В расчетах использовалась микроструктурная модель материала тетрагональной/ромбоэдрической смеси (17% / 83%), адекватно описывающая поведение пьезокерамики вблизи морфотропной фазовой границы с учетом дефектов на основе уравнений (2.68)-(2.72), (2.84), (2.86) с константами материала, приведенными в Таблице 6.1. Дефектное состояние характеризуется величиной $E_d = -0,11$ МВ/м. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.3г) демонстрируют хорошее совпадение с результатами эксперимента. Петля гистерезиса для материала с дефектами смещается налево на 0,11 ширины петли или $0,22 E_c$.

Представленные выше результаты с горизонтальным смещением петель гистерезиса получены при использовании микроструктурной модели с *неизменяющимися* дефектами (2.84), (2.86). Аналогичные результаты получаются и при использовании моделей с *изменяющимися* дефектами (2.92)-(2.118). Однако в последнем случае процесс получения решения оказывается более трудоемким. В этом случае необходимо моделировать первоначальную стадию старения, связанную с формированием дефектов. Результаты верификации микроструктурной (2.101)-(2.102), (2.105)-(2.106) и феноменологической (2.114)-(2.118) моделей эволюции дефектов на основе результатов экспериментов Н. Neumann и G. Arlt [367] на поликристаллическом BaTiO_3 , легированном Cr^{3+} (0,5% акцепторная примесь), при 80 °C показаны на Рисунке 6.4. Процесс старения осуществлялся после предварительной поляризации в течение 10^5 с. В расчетах использовались следующие константы микроструктурной модели с тетрагональной структурой: $B^P = 10^{-11}$ Ф/(м·с), $Q^P = 1,15 \cdot 10^7$ м/Ф и $L^P = 3 \cdot 10^6$ м/Ф. Константы феноменологической модели отличаются только значением параметра $B^P = 10^{-10}$ Ф/(м·с). При таком соотношении констант удается добиться максимальной близости прогнозов двух рассмотренных моделей. Наблюдается удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента.

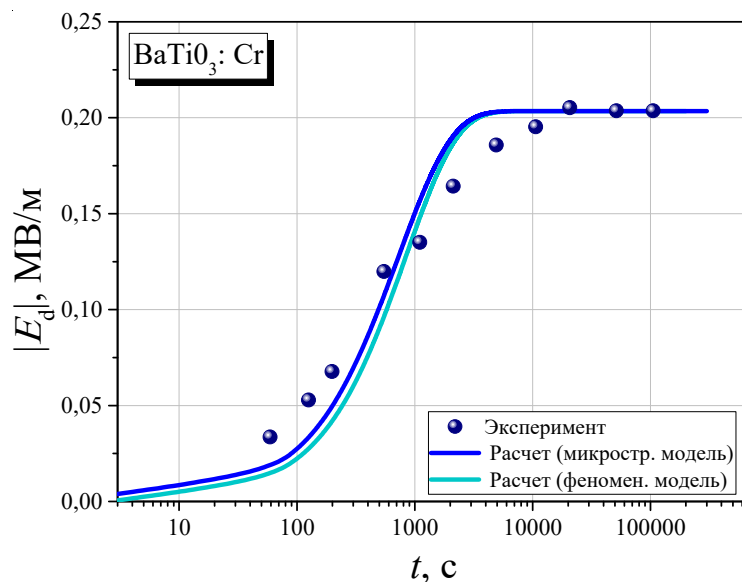


Рисунок 6.4 – Сравнение результатов расчетов эволюции поля смещения при старении с экспериментом [367] для BaTiO_3 (0,5% Cr-допинг)

Представленные на Рисунке 6.4 кривые демонстрируют начальный экспоненциальный рост с последующим переходом в режим насыщения в соответствии с зависимостью $1 - e^{-\frac{t}{\tau^p}}$ (2.121). Аналогичный результат наблюдается при анализе экспериментальных данных в ряде работ (см. Рисунок 5 в [367], Рисунки 2 и 3 в [132], Рисунок 46 и уравнение (6) в [223]). При значительных временах старения наблюдается режим насыщения с асимптотическим значением $|E_d| = (L^p)^2 P_0^r / Q^p$, которое получается следствием уравнений (2.89)₃ и (2.121) при $t \rightarrow \infty$. Для описания поведения материала в этом случае достаточно использования модели неизменяющихся дефектов (2.83)-(2.87). Время релаксации τ^p определяется по кривой эволюции поля смещения как время достижения уровня 0,632 от уровня насыщения $E_d(\tau_p) / E_d(\infty) = 1 - e^{-1} \approx 0,632$. Для феноменологической модели $\tau^p = \frac{1}{B^p Q^p} = 870$ с.

При рассмотрении кривых *электромеханического* гистерезиса для PZT PIC151 точность прогноза модели оказывается несколько ниже (см. Рисунок 6.5), чем для диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.3г). Однако поведение модели корректно отражает все основные тенденции изменения петли гистерезиса при появлении полярных дефектов: ее смещение налево ($E_d = -0,11$ МВ/м < 0), повышение уровня деформаций в правом крыле и понижение в левом.

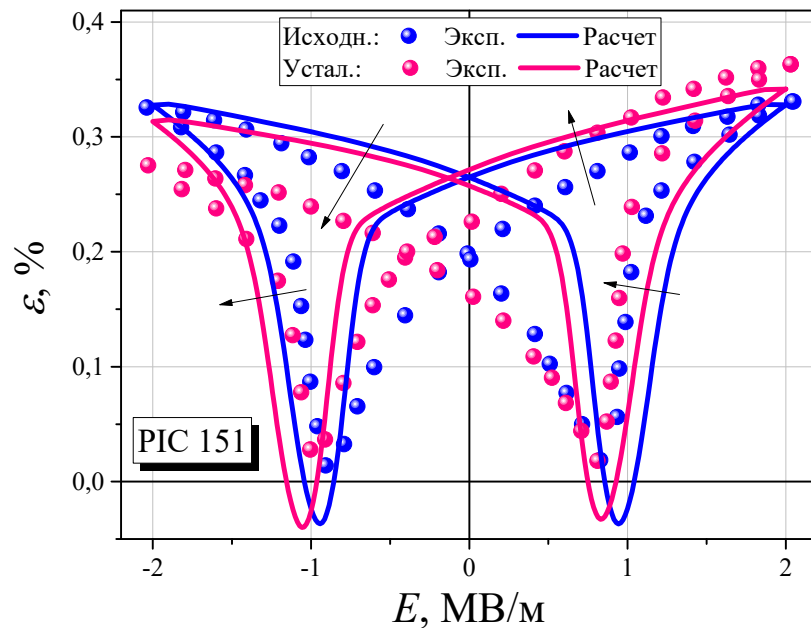


Рисунок 6.5 – Сравнение результатов КЭ расчетов электромеханического гистерезиса на основе модели материала с учетом полярных дефектов с экспериментом [140] для PZT PIC 151

Результаты влияния *кристаллографической ориентации* монокристаллического пьезоэлектрического материала PMN-PZT, легированного Mn^{2+} , на кривые диэлектрического гистерезиса представлены на Рисунке 6.6. Рассматривается циклическое электрическое нагружение амплитудой $E_{max} = 1$ МВ/м и частотой $f = 1$ Гц. Для монокристалла ромбоэдрической структуры высота и ширина петли гистерезиса больше при нагружении вдоль оси $[011]$ в сравнении с нагружением вдоль оси $[001]$. Используемые в расчетах свойства материала PMN-PZT указаны в Таблице 6.1. В обоих случаях нагружения наблюдается смещение петли направо на одинаковую величину (местоположения центров петель совпадают) $E_d = 0,24 E_c$. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.6) демонстрируют удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента Н.Т. Ох и др. [375] как для ориентации нагружения $[001]$, так и для ориентации $[011]$.

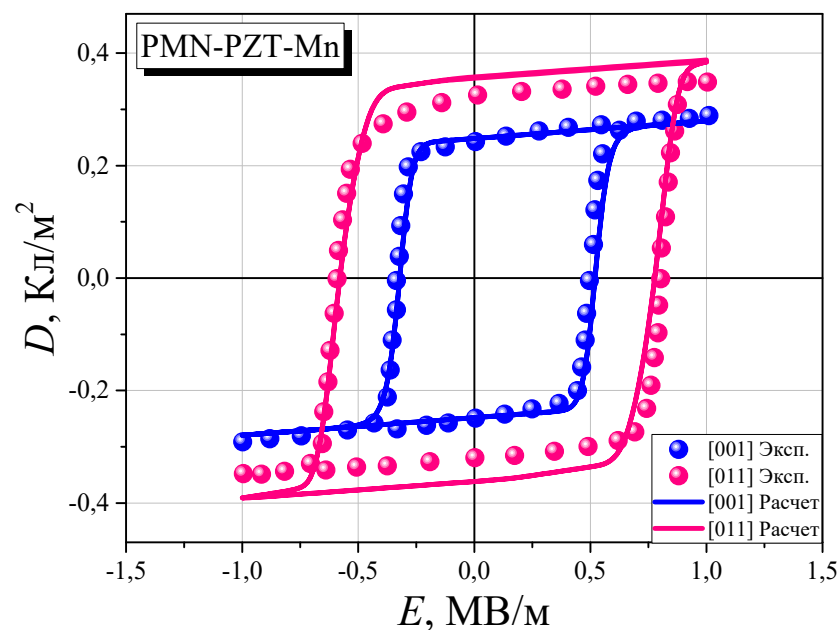


Рисунок 6.6 – Сравнение результатов КЭ расчетов диэлектрического гистерезиса с экспериментом [375] для монокристаллического пьезоэлектрического материала PMN-PZT при нагружении вдоль направлений $[001]$ и $[011]$

Результаты моделирования *двойной петли* гистерезиса и их сравнение с результатами экспериментов Y.Q. Tan и др. [460] на *поликристаллическом* $BaTiO_3$, легированном Cu^{2+} (1% *акцепторная* примесь CuO), для дефектосодержащего (*старение* при 21 °С в течение 24 ч. без предварительной поляризации) материала при циклическом электрическом нагружении амплитудой $E_{max} = 3,5$ МВ/м и частотой

$f = 1$ Гц представлены на Рисунке 6.7, где также для удобства сравнения показаны расчетные и экспериментальные кривые диэлектрического гистерезиса бездефектного материала с одиночной петлей. Отсутствие предварительной поляризации, предшествующей процессу старения, приводит к разупорядоченности направлений полярных дефектов при старении, что вызывает при последующем циклическом нагружении появление двойной петли гистерезиса [460]. В расчетах использовалась микроструктурная модель материала тетрагональной структуры с учетом легкопереключаемых дефектов мгновенной переполаризации (2.122) с константами материала BaTiO_3 , легированного Ni^{2+} , приведенными в Таблице 6.1 за исключением значений $G_c^{90} = 0,035 \text{ МДж/м}^3$, $P_0 = 0,21 \text{ Кл/м}^2$, $n = 1$, $m = 2$. Значение параметра, характеризующего дефектное состояние материала, выбиралось равным $E_d = 1 \text{ МВ/м}$. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.7) демонстрируют удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента как для дефектного, так и бездефектного материала.

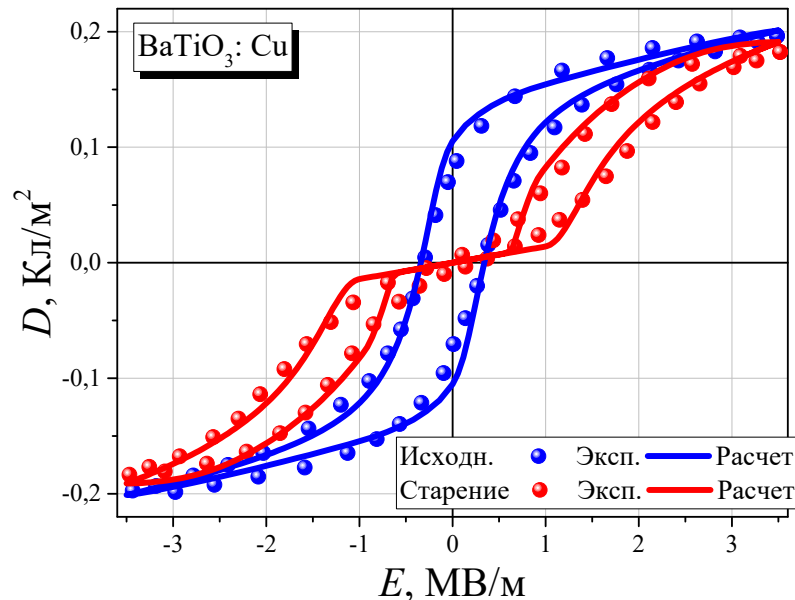


Рисунок 6.7 – Сравнение результатов КЭ расчетов диэлектрического гистерезиса с экспериментом [460] для BaTiO_3 (1% Cu-допинг) в исходном состоянии и после старения без предварительной поляризации

Результаты моделирования диэлектрического и электромеханического гистерезисов при различных длительностях старения и их сравнение с результатами экспериментов R.A. Maier и др. [342] на *монокристаллическом* BaTiO_3 , легированном

Mn^{2+} (0.5% акцепторная примесь), для дефектосодержащего (старение при 21 °C в течение 1, 9 и 134 дней без предварительной поляризации) материала представлены на Рисунке 6.8. Рассматривалось циклическое электрическое нагружение вдоль оси монокристалла [001] амплитудой $E_{\max} = 1,4$ МВ/м и частотой $f = 1$ Гц.

В расчетах использовалась микроструктурная модель монокристаллического материала тетрагональной структуры с учетом легкопереключаемых дефектов мгновенной переполаризации (2.122) с константами материала для BaTiO_3 , легированного Ni^{2+} , приведенными в Таблице 6.1 за исключением значений $G_c^{90} = 0,055$ МДж/м³, $P_0 = 0,17$ Кл/м², $n = 3$, $m = 0,7$. Значение параметра, характеризующего дефектное состояние материала, выбиралось равным $E_d|_{t_{\text{adg}}=1\text{д}} = 0,51$ МВ/м для старения длительностью 1 день, $E_d|_{t_{\text{adg}}=9\text{д}} = 0,64$ МВ/м - длительностью 9 дней, $E_d|_{t_{\text{adg}}=134\text{д}} = 0,8$ МВ/м - длительностью 134 дня. Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.8) демонстрируют хорошее совпадение с результатами эксперимента.

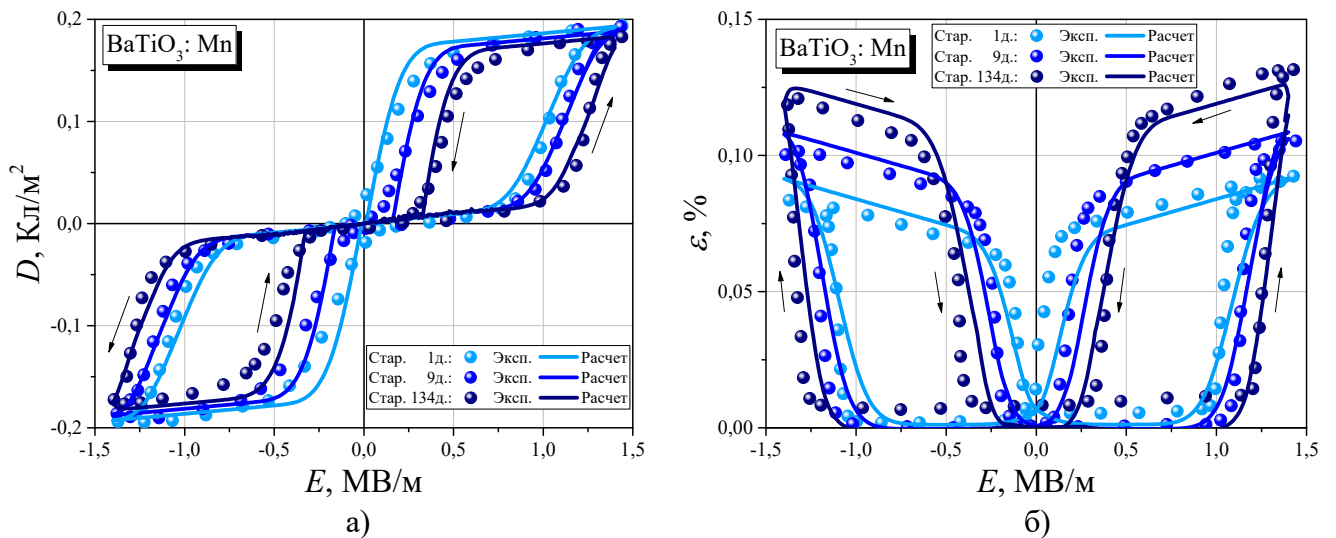


Рисунок 6.8 – Сравнение результатов расчетов с экспериментом [342] для монокристаллического BaTiO_3 (0,5%-Mn-допинг) ориентации [001] при различной длительности старения (1, 9, 134 дня): а) диэлектрический гистерезис, б) электромеханический гистерезис

На Рисунке 6.9 показано сравнение результатов моделирования *механического* гистерезиса для образцов из *монокристаллического* тригидроселенита калия $\text{KH}_3(\text{SeO}_3)_2$, легированного Cr^{3+} (сокращенное наименование KTS), при циклическом механическом нагружении (кручении стержня) амплитудой $\tau_{13} = 0,27$ МПа и

частотой $f = 0,01$ Гц при температуре 206,6 К ($T_c = 211$ К) с результатами экспериментов С.А. Гриднева и Л.А. Шувалова [228]. KTS представляет собой чистый сегнетоэластик, не обладающий сегнетоэлектрическими свойствами. При температуре $T_c = 211$ К у KTS наблюдается структурный фазовый переход II рода (изменение симметрии $mmm \rightarrow m/2$ из орторомбической в моноклинную). В расчетах гистерезиса материала с дефектами в условиях отсутствия старения использовалась модель материала орторомбической структуры с неизменяющимися полярными дефектами (2.83)-(2.87) с константами материала, приведенными в Таблице 6.1. Для моделирования поведения материала после старения использовалась модель легкопереключаемых дефектов мгновенной переполаризации (2.122). Расчетные кривые механического гистерезиса как в условиях отсутствия старения со смещением петли (Рисунок 6.9а), так и в случае старения в течение 120 с со срезом петли (Рисунок 6.9б) демонстрируют удовлетворительное совпадение с результатами эксперимента. Петля гистерезиса для материала без старения смещается направо на величину $\sigma_d = 0,005$ МПа. Смещение составляет около четверти ширины петли гистерезиса или $0,44 \sigma_c$.

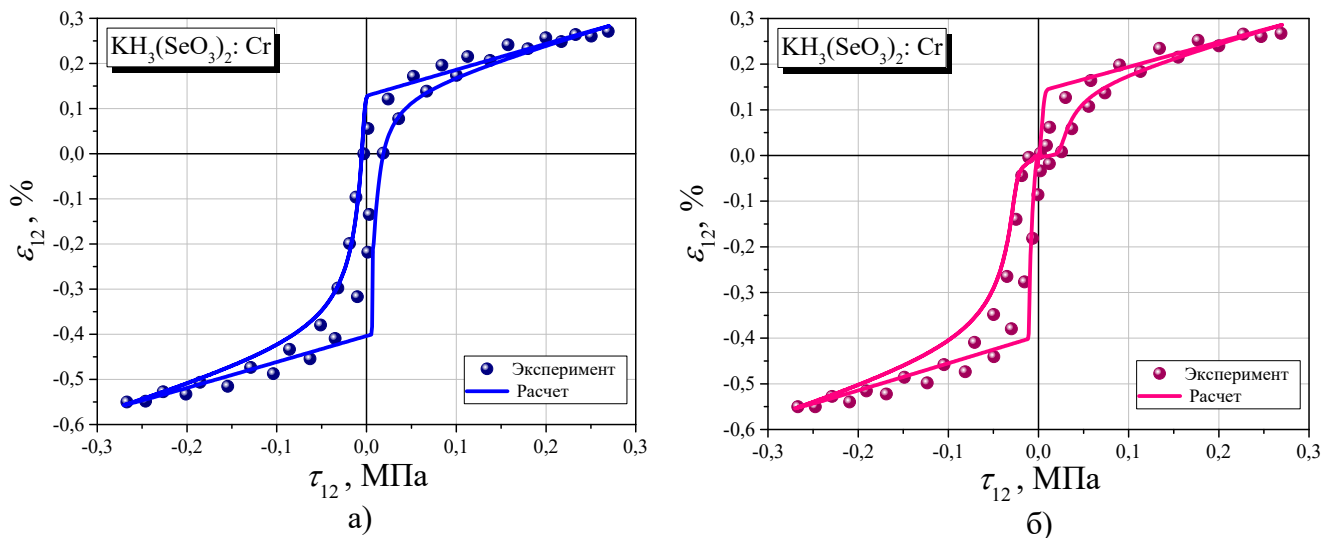


Рисунок 6.9 – Сравнение результатов расчетов механического гистерезиса с экспериментом [228] для монокристаллического $\text{KH}_3(\text{SeO}_3)_2$ (Cr-допинг) ориентации [001]:
а) без старения и б) после старения

На Рисунке 6.10 показано сравнение результатов моделирования *формы поверхности переключения* после предварительной поляризации и последующей разгрузки для образцов из BaTiO_3 и поликристаллической пьезокерамики PZT-5Н с результатами экспериментов [433]. Первичная поляризация производилась для неполяризованных пластин размером $25 \text{ мм} \times 25 \text{ мм} \times 5 \text{ мм}$ до максимального уровня напряженности электрического поля $1,5 \text{ МВ/м}$ для PZT-5Н, $3,25 \text{ МВ/м}$ для BaTiO_3 . После поляризации из пластины под углами $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 150^\circ$ и 180° к направлению поляризации вырезались образцы меньшего размера $5 \text{ мм} \times 5 \text{ мм} \times 1,5 \text{ мм}$, которые подвергались последующему электрическому нагружению до уровня начальной поляризации и определялись кривые переключения для относительных уровней изменения остаточной поляризации $|\Delta P^r|/P_0$: 4%, 12% и 40%.

Моделирование процессов рассматриваемого двухлучевого нагружения на основе КЭ гомогенизации для ЭПО поликристалла с использованием микроструктурной модели *без учета дефектов* (2.12)-(2.42) приводит к существенному количественному отличию от результатов эксперимента (см. Рисунок 6.10). Использование модели *с учетом дефектов* (2.68)-(2.88) позволяет улучшить точность прогнозов (см. Рисунок 6.10, а также [86] для деталей).

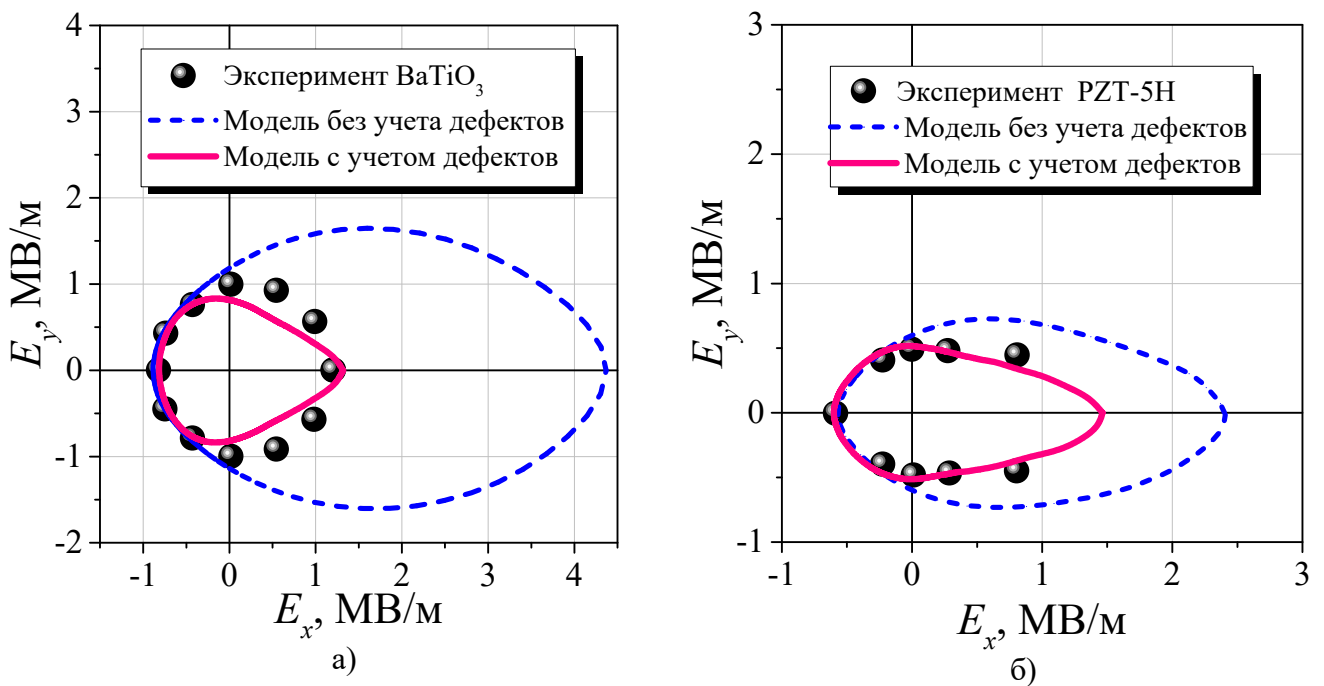


Рисунок 6.10 – Сравнение результатов расчетов формы поверхностей переключений после предварительной поляризации с экспериментальными данными [433] для: а) BaTiO_3 , б) PZT-5Н

6.2 Параметрический анализ для монокристалла

Результаты параметрического анализа, характеризующие чувствительность размеров и формы гистерезисных кривых к варьированию параметров, определяющих дефектное состояние материала, позволяют повысить эффективность процедуры идентификации параметров модели на основе экспериментальных данных.

Внутренние поля смещения σ_d и E_d линейно связаны с деформацией ε^d и поляризацией P^d дефектов (2.88). В случае электрического нагружения в изотропном приближении дефектной структуры внутреннее поле смещения E_d определяется вектором поляризации дефектов P^d и константой материала L^P : $E_d = L^P P^d$ (2.89). При *неизменяющихся* дефектах внутренние поля смещения остаются постоянными в процессе нагружения. В этом случае при электрическом одноосном нагружении дефектное состояние может быть охарактеризовано одной константой E_d . Данная константа определяет величину смещения или среза петли диэлектрического гистерезиса. При *изменяющихся* дефектах эволюция внутреннего поля смещения при электрическом одноосном нагружении определяется 3 константами феноменологической модели B^P , L^P , и Q^P (2.118)₁ или 5 константами микроструктурной модели эволюции дефектов $A^{J \rightarrow I}$, L^P , Q^P , l , q (2.102), (2.106). Следует отметить, что в случае изменяющихся дефектов история изменения электрического поля и поляризации также оказывает влияние на внутреннее поле смещения.

Базовые значения основных параметров материала (близких к монокристаллическому BaTiO₃, легированному Ni²⁺, рассмотренному в Разделе 6.1), относительно которых производилось варьирование, представлены в Таблице 6.2.

Таблица 6.2 – Используемые в многовариантных КЭ расчетах базовые значения варьируемых параметров материала, характеризующих дефектное состояние

Параметры	Символ	Размерность	Значение
Упругие модули	$\tilde{C}_{3333}^E$ $\tilde{C}_{1133}^E$	ГПа	150 60,0
Диэл. проницаемость	$\tilde{\kappa}_{33}^\sigma$	нФ/м	16,3
Пьезоэлектр. модуль	$\tilde{d}_{333}$	пм/В	1900
Спонтанная поляризация	$\tilde{P}_0$	Кл/м ²	0,26
Спонтанная деформация	$\tilde{\varepsilon}_0$	%	0,3
Критич. движущая сила	G_c^{90} G_c^{180}	МДж/м ³	0,088 ∞
Показатели степени уравнения эволюции	n m	- -	4 2
Поле смещения	E_d	МВ/м	0,5
Параметры уравнения эволюции дефектов феноменологической модели	B^P Q^P L^P	Ф/(м·с) м/Ф м/Ф	10^{-9} 10^7 $3 \cdot 10^6$
Параметры уравнения эволюции дефектов микроструктурной модели	B^P Q^P L^P l q	Ф/(м·с) м/Ф м/Ф - -	$9 \cdot 10^{-11}$ 10^7 $3 \cdot 10^6$ 1 1

Результаты представленных ниже многовариантных вычислительных экспериментов получены на основе выполнения расчетов для монокристаллического материала с использованием микроструктурных моделей с учетом наличия как изменяющихся, так и неизменяющихся дефектов. Период цикла нагружения при проведении расчетов соответствовал 1 с, амплитуда циклического электрического нагружения $E_{\max} = 3$ МВ/м.

Влияние поля смещения E_d на диэлектрический и электромеханический гистерезис монокристалла тетрагональной сингонии в случае *неизменяющихся сонаправленных* дефектов (модель (2.84), (2.86), (2.89)), ориентированных вдоль электрического поля, действующего вдоль [001], представлено на Рисунке 6.11. Положительное значение E_d приводит к *смещению* петли гистерезиса направо, отрицательное – налево. Ширина и высота петли, а также ее форма при смещении не меняются. Параметр E_d определяет величину горизонтального смещения центра петли гистерезиса.

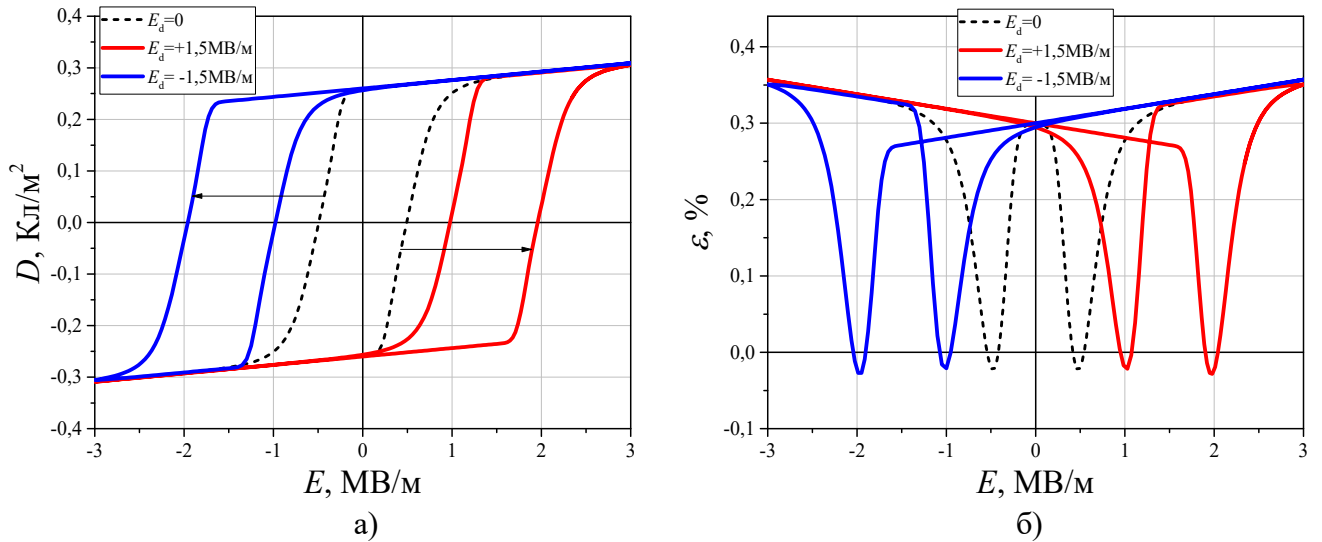


Рисунок 6.11 – Горизонтальное смещение а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса при возникновении в кристалле неизменяющихся сонаправленных дефектов, ориентированных вдоль электрического поля при различных значениях E_d

Выше рассмотрен случай одинаковой ориентации всех дефектов, появление которых приводит к смещению петли гистерезиса. В случае наличия областей с различной ориентацией поляризации дефектов наблюдается искажение формы петли гистерезиса, приводящее к возникновению двойных петель гистерезиса (среза петли). Смещения петли не происходит, если отсутствует проекция осредненного в пределах рассматриваемого объема материала направления поляризации дефектов на направление поля. На Рисунке 6.12 представлены результаты расчетов влияния E_d на гистерезис для монокристалла ориентации $[001]$ в случае *неизменяющихся противоположно направленных скомпенсированных* дефектов. В этом случае, когда поляризация у половины дефектов совпадает с направлением электрического поля ($P^d > 0, E_d > 0$), а оставшаяся половина дефектов имеет противоположное направление поляризации ($P^d < 0, E_d < 0$, см. также в Таблице 6.3 №2), происходит искажение формы петли гистерезиса путем *среза* петли гистерезиса. Суммарное значение поляризаций всех дефектов равняется нулю, поэтому изменения местоположения центра петли гистерезиса в этом случае не наблюдается. Параметр E_d определяет расстояние между центрами верхней и нижней полупетель гистерезиса.

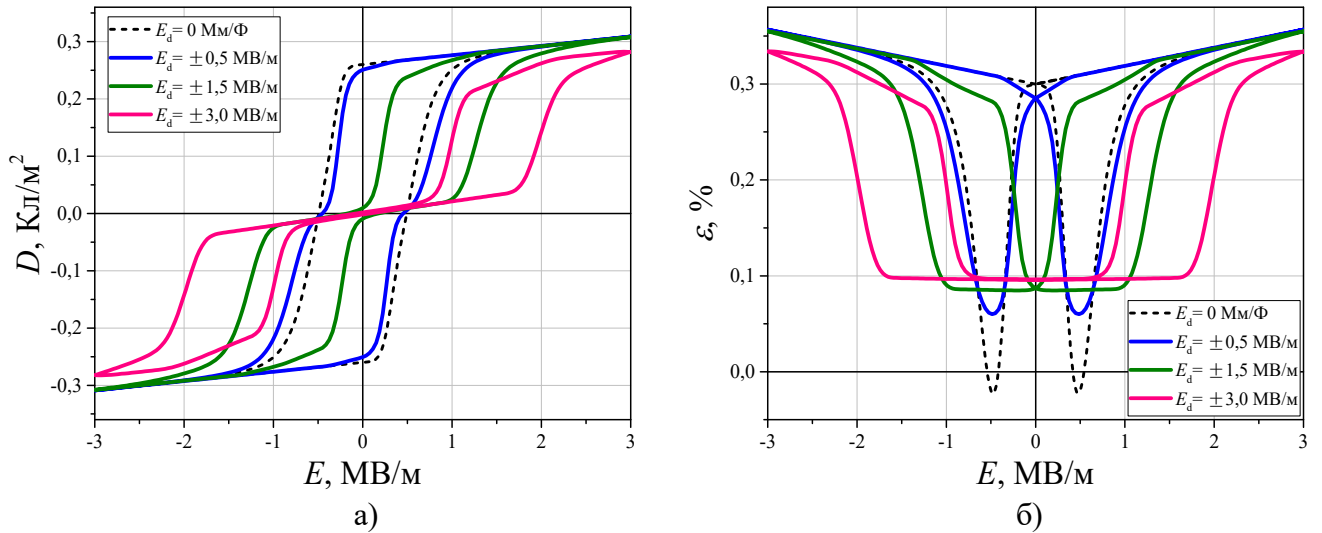


Рисунок 6.12 – Двойная петля (срез) а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса в монокристалле при возникновении неизменяющихся противоположно направленных скомпенсированных дефектов при различных значениях поля смещения E_d

Причиной возникновения среза петли диэлектрического гистерезиса может являться не только наличие противоположно направленных дефектов, ориентированных вдоль электрического поля, но и наличие сонаправленных дефектов, ортогональных полю. Более детально этот вопрос рассмотрен в разделах 0 и 6.5.

Смещение петли гистерезиса в *вертикальном* направлении может быть осуществлено за счет выбора начальных значений объемных долей доменов $c_I, I = \overline{1,6}$ (см. Рисунок 6.13). Выше рассматривались варианты равных начальных объемных долей доменов, например для тетрагонального монокристалла $c_I = \{\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Последовательность перечисления доменов соответствует направлениям $\{[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]\}$ (см. также Рисунок А.1). При увеличении начальной объемной доли домена $[00\bar{1}]$, поляризованного в направлении противоположном полю $[001]$, петля гистерезиса смещается вверх за счет увеличения объема переключаемых доменов с максимальным изменением поляризации. Обратный процесс (смещение петли гистерезиса вниз) происходит при увеличении начальной объемной доли домена $[001]$. При наличии сонаправленных дефектов происходит наложение горизонтального смещения петли гистерезиса на вертикальное смещение, вызванное изменением начальных значений объемных долей доменов, поляризованных вдоль поля.

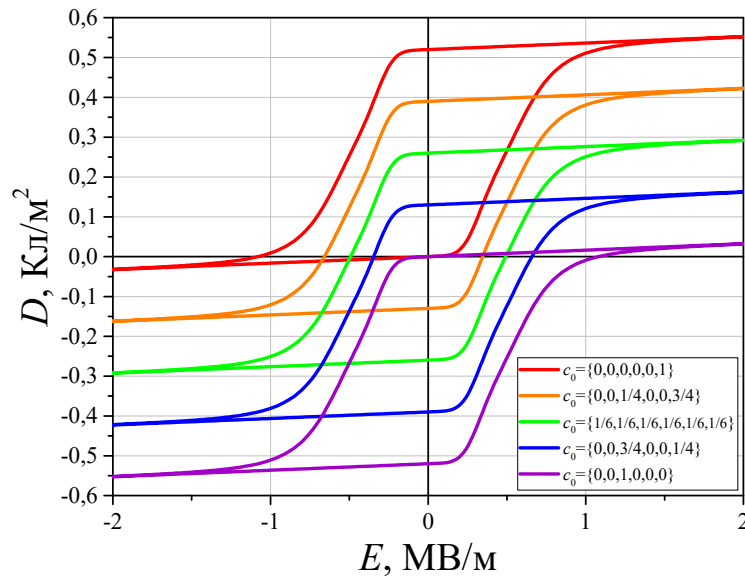


Рисунок 6.13 – Вертикальное смещение диэлектрического гистерезиса при различных начальных значениях объемных долей доменов c_l для бездефектного материала

Ориентация направления электрического поля по отношению к кристаллографическим осям монокристалла оказывает существенное влияние на вид гистерезиса. На Рисунке 6.14 представлены результаты расчетов влияния направления электрического поля (рассмотрены 3 характерных направления нагружения [001], [011], [111]) на диэлектрический гистерезис *тетрагонального* монокристалла как для случая *сонаправленных* дефектов (Рисунок 6.14а), так и для случая *противоположно направленных скомпенсированных* дефектов (Рисунок 6.14б).

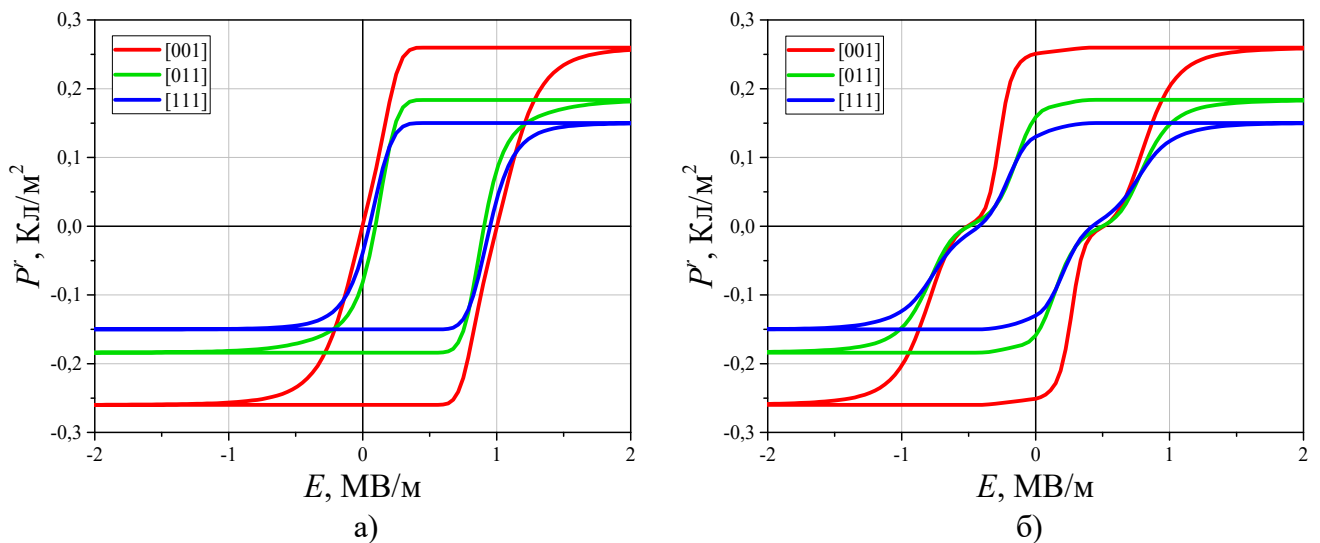


Рисунок 6.14 – Влияние направления воздействия электрического поля по отношению к кристаллографическим осям *тетрагонального* монокристалла на диэлектрический гистерезис при наличии неизменяющихся дефектов, ориентированных вдоль поля:
а) сонаправленные дефекты и б) противоположно направленные скомпенсированные дефекты

Аналогичные результаты исследования влияния направления электрического поля по отношению к кристаллографическим осям *ромбоэдрического* и *орторомбического* монокристаллов на гистерезисы материала с дефектами представлены на Рисунках 6.15 и 6.16 соответственно. Для всех рассмотренных типов кристаллов значение критической движущей силы выбиралось равным $0,088 \text{ МДж/м}^3$, значение спонтанной поляризации соответствовало $0,26 \text{ Кл/м}^2$.

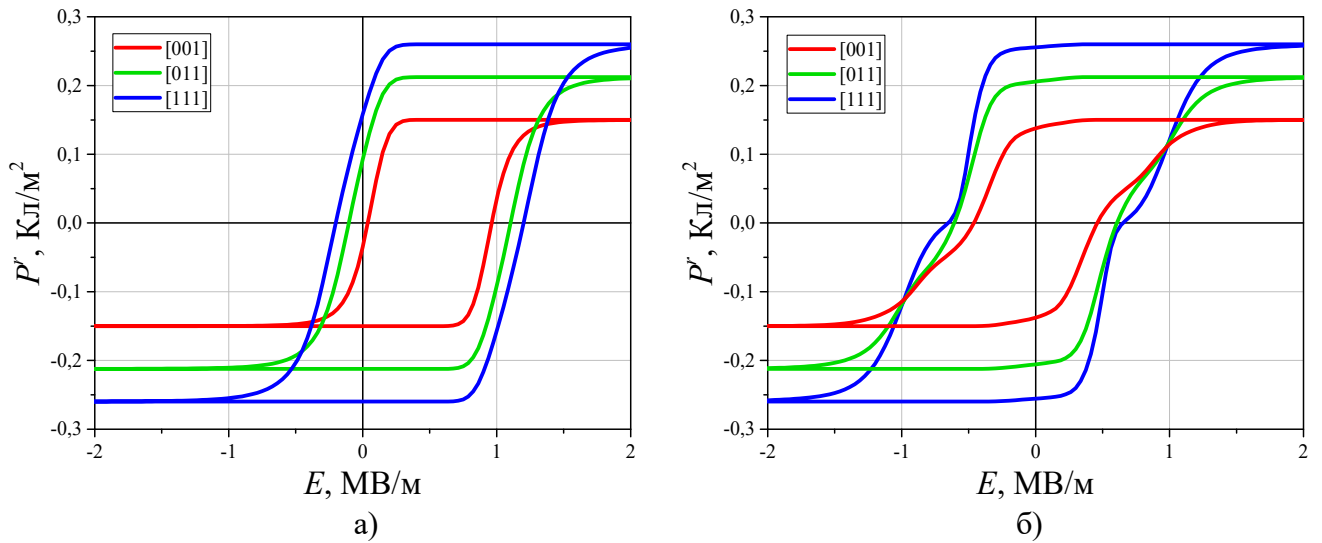


Рисунок 6.15 – Влияние направления воздействия электрического поля по отношению к кристаллографическим осям *ромбоэдрического* монокристалла на диэлектрический гистерезис при наличии неизменяющихся дефектов, ориентированных вдоль поля:

а) сонаправленные дефекты и б) противоположно направленные скомпенсированные дефекты

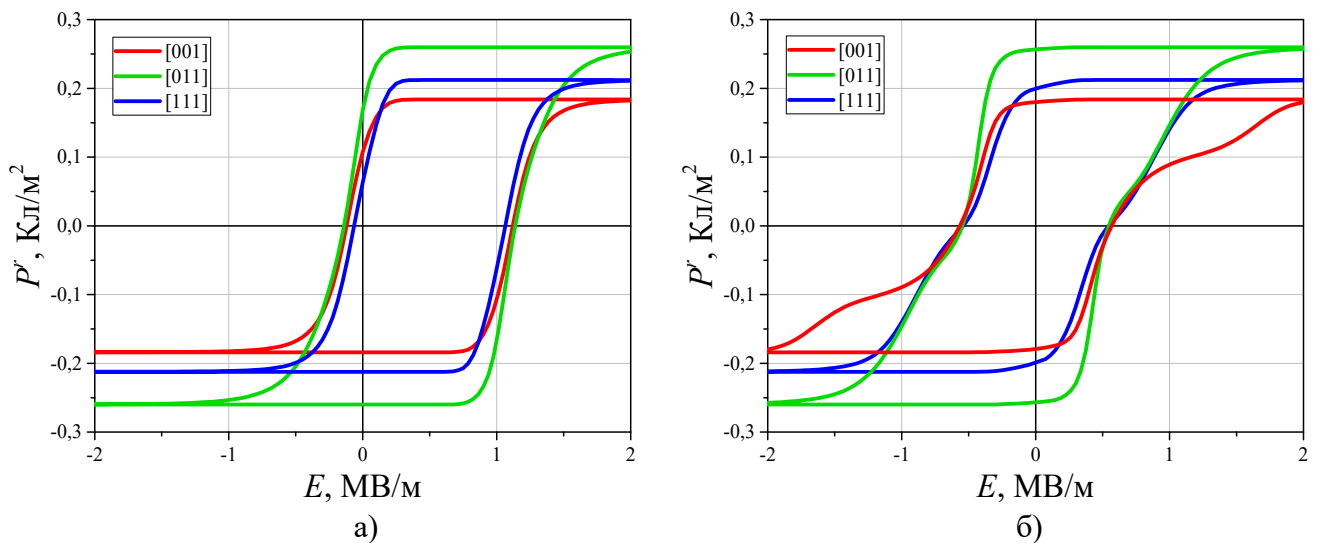


Рисунок 6.16 – Влияние направления воздействия электрического поля по отношению к кристаллографическим осям *орторомбического* монокристалла на диэлектрический гистерезис при наличии неизменяющихся дефектов, ориентированных вдоль поля:

а) сонаправленные дефекты и б) противоположно направленные скомпенсированные дефекты

Для всех рассмотренных типов кристаллов максимальная высота петли гистерезиса наблюдается при нагружении вдоль направления переключения (см. Рисунки 6.14-6.16). Для *тетрагонального* монокристалла максимальная высота и ширина петли гистерезиса достигается при нагружении вдоль направления $[001]$, минимальная вдоль $[111]$. Для *ромбоэдрического* монокристалла максимальная высота и ширина петли гистерезиса достигается при нагружении вдоль направления $[111]$, минимальная вдоль $[001]$. Для *орторомбического* монокристалла максимальная высота петли гистерезиса достигается при нагружении вдоль направления $[011]$, минимальная вдоль $[001]$.

Для всех рассмотренных типов кристаллов при равной величине $E_d = 0,5$ МВ/м наблюдается смещение центра петли диэлектрического гистерезиса на одинаковую величину (см. Рисунки 6.14-6.16).

Представленные выше результаты получены на основе модели с *неизменяющимися* (труднопереключаемыми) дефектами (2.84), (2.86). Данная модель позволяет адекватно описать гистерезисные явления при условии многократного превышения времени переориентации дефекта (2.120) периода цикла нагружения: $\tau^p \gg t_y$. В этих условиях более сложные модели с *изменяющимися* дефектами (2.92)-(2.108) и (2.118) приводят к совпадающим результатам. Для малых или сопоставимых времен переориентации дефекта, а также в условиях сложных программ нагружения необходимо использовать модель с изменяющимися дефектами.

Модель с *изменяющимися дефектами* (2.118) позволяет описать эволюцию поляризации и деформации дефектов, а также динамику изменения полей смещения. На Рисунке 6.17 показано изменение поля смещения E_d при старении в течение 15 мин. в отсутствии поля ($E = 0$) после предварительной поляризации ($P^r \neq 0$). Варьирование параметра Q^p показывает, что с его ростом уменьшается обратно пропорционально уровень абсолютного значения поля смещения в состоянии насыщения $E_d(\infty) \sim 1/Q^p$ (2.112)₂, (2.121)₁ и время релаксации $\tau^p \sim 1/Q^p$. В расчетах использовались следующие значения параметров: $B^p = 10^{-9}$ Ф/(м·с), $L^p = 3 \cdot 10^6$ м/Ф и $P^r = 0,26$ Кл/м².

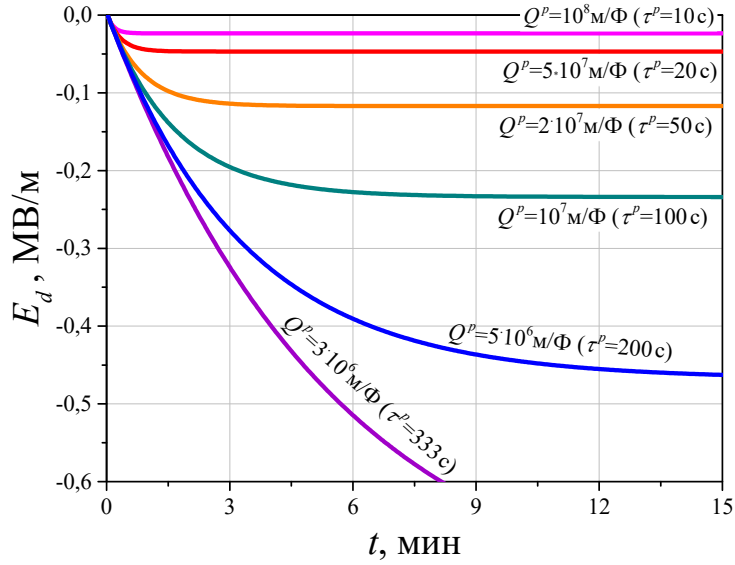


Рисунок 6.17 – Эволюция поля смещения при старении для различных значений параметра Q^P модели монокристалла с изменяющимися дефектами (2.118)

Важно отметить, что представленные на Рисунке 6.17 кривые демонстрируют начальное экспоненциальное убывание с последующим переходом в режим насыщения в соответствии с зависимостью $1 - e^{-\frac{t}{\tau}}$ (2.121). Аналогичный результат наблюдается при анализе экспериментальных данных в работах [367], [132], [223].

Как видно из Рисунка 6.17 при значительных временах старения $t > 5\tau^P$ наблюдается режим насыщения. Для описания поведения материала в этом случае достаточно использования модели неизменяющихся дефектов (2.84), (2.86).

Результаты расчетов эволюции поля смещения при старении для различных значений параметра B^P показывают, что с его ростом уменьшается время релаксации $\tau^P \sim 1/B^P$ (см. Рисунок 6.18). Параметр B^P , в отличие от Q^P , не оказывает влияния на поле смещения в состоянии насыщения при больших временах.

Идентификация трех констант феноменологической модели B^P , L^P и Q^P может быть осуществлена на основе двух опытов с различными уровнями постоянного электрического воздействия (при старении) по кривым эволюции поля смещения, определяемым на основе (2.112)₂, (2.121)₁ $E_d = L^P / Q^P (E - L^P P^r)(1 - e^{-tB^P Q^P})$. Время релаксации $\tau^P = \frac{1}{B^P Q^P}$ (2.120)₁ определяется по кривой эволюции поля смещения как время достижения уровня 0,632 от уровня насыщения $E_d(\tau_p) / E_d(\infty) = 1 - e^{-1} \approx 0,632$.

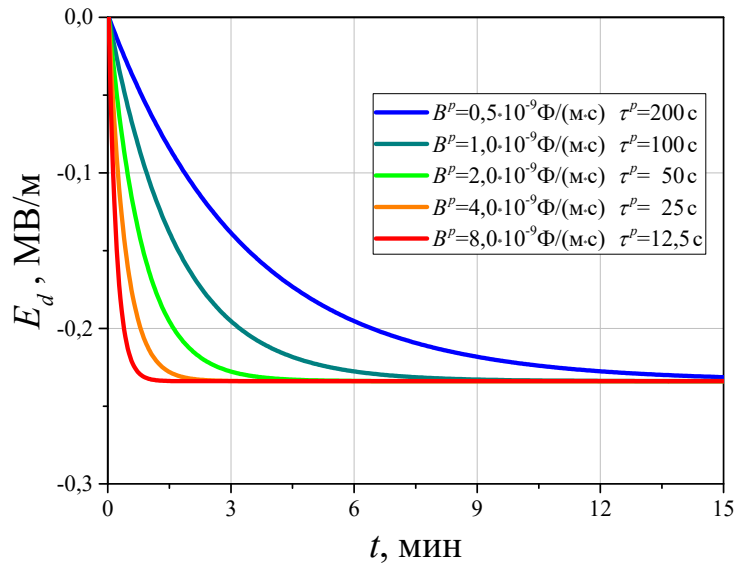


Рисунок 6.18 – Эволюция поля смещения при старении для различных значений параметра B^p модели монокристалла с изменяющимися дефектами (2.118)

Коэффициент L^p в моделях с изменяющимися дефектами оказывает *нелинейное* влияние на величину поля смещения E_d . На Рисунке 6.19 представлены результаты расчетов петель диэлектрического гистерезиса после старения в течение 15 мин при различных значениях параметра L^p . Во избежание громоздкости представления на Рисунке 6.19 показан начальный (несмещенный) гистерезис при $L^p = 0$ и только ниспадающие (левые) ветви гистерезисов при $L^p \neq 0$.

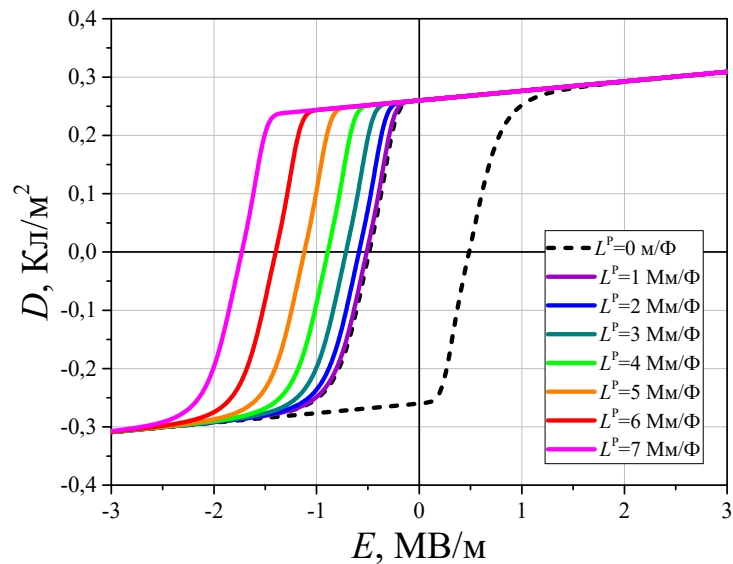


Рисунок 6.19 – Влияние параметра L^p модели монокристалла с изменяющимися дефектами (2.118) на смещение по горизонтали петли диэлектрического гистерезиса

При изменении L^p ширина петли практически не меняется. С ростом L^p наблюдается прогрессирующее смещение петли гистерезиса налево (см. Рисунок 6.19). Величина смещения пропорциональна квадрату L^p : $E_d \sim P_0^r (L^p)^2 / Q^p$.

Формирование поля смещения при старении может происходить как при рассмотренных выше условиях при отсутствии электрического поля за счет наличия предварительной поляризации, так и при наличии электрического поля. На Рисунке 6.20 показаны результаты моделирования петли гистерезиса монокристалла с дефектами после старения в течение 200 с при $E = 0$ МВ/м и $P^r = 0,26$ Кл/м² и при $E = 3$ МВ/м и $P^r = 0,26$ Кл/м². При наличии электрического поля происходит смещение петли гистерезиса направо ($E_d > 0$), в то время как при его отсутствии петля смещается налево ($E_d < 0$). Объяснением этого является то, что в уравнение эволюции поляризации дефектов (2.121)₁ E и P^r входят с разными знаками. При наличии электрического поля процессы формирования поля смещения при $L^p = 3 \cdot 10^6$ м/Ф происходят более интенсивно, и абсолютное значение поля смещения в рассматриваемом случае при наличии электрического поля в 3 раза превышает поле смещения при его отсутствии.

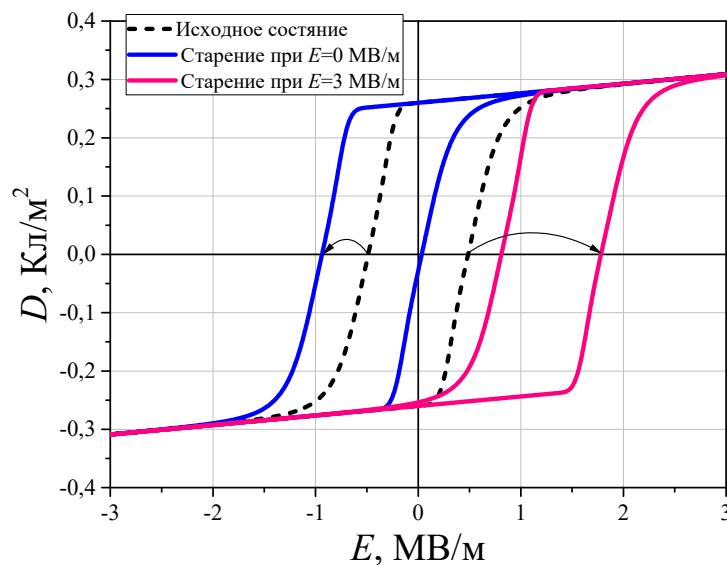


Рисунок 6.20 – Кривые диэлектрического гистерезиса монокристалла с дефектами, инициированными в процессе старения при отсутствии и при наличии электрического поля

Интенсивное циклическое нагружение, вызывающее процессы переключения, для материалов, подвергнутых предварительному старению, может приводить к уменьшению начального поля смещения (деэджинг), сформированного на этапе старения. Указанный эффект наблюдается в экспериментах [160, 367] и может быть предсказан на основе предложенных феноменологической (2.118) и микроструктурной (2.94)-(2.108) моделей эволюции дефектов. На Рисунке 6.21а показаны результаты моделирования изменения поля смещения на этапе старения (первые 15 мин) и при последующем циклическом нагружении, полученные с использованием феноменологической модели (2.118). Как видно из Рисунка 6.21б, местоположение центра петли диэлектрического гистерезиса с ростом числа циклов, постепенно смещаясь направо, стремится к началу координат, где наблюдается стабилизация.

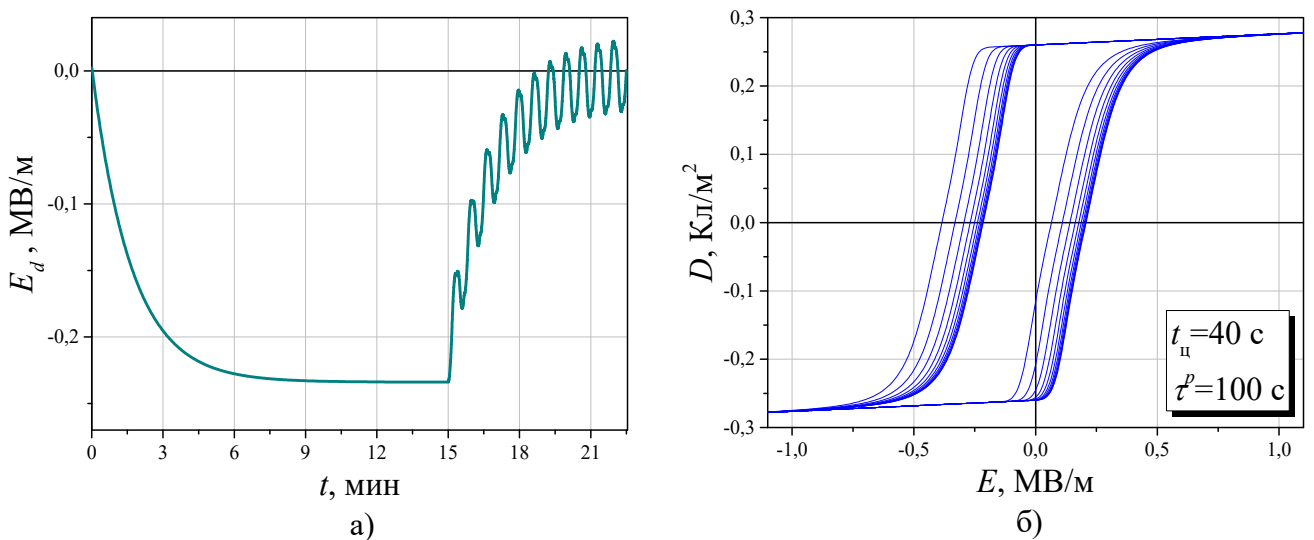


Рисунок 6.21 – Влияние интенсивного циклического нагружения, последующего за этапом старения (длительностью 15мин), на а) поле смещения и б) диэлектрический гистерезис

Процесс уменьшения абсолютного значения поля смещения при циклическом нагружении (релаксация поля смещения) наиболее заметен при периодах цикла нагружения $t_{\text{ц}}$, сравнимых с периодом релаксации τ^p или его превосходящих, когда процессы переориентации дефектов успевают за цикл нагружения оказать заметное влияние на поляризацию дефектов. При малых временах цикла $t_{\text{ц}} \ll \tau^p$ потребуется большое количество циклов для того, чтобы указанный эффект был заметен.

Например, для показанного на Рисунке 6.21б случая с $t_y = 40$ с за 12 циклов практически происходит полный возврат петли гистерезиса в начало координат, в то время как при $t_y = 1$ с за 12 циклов петля гистерезиса визуально не меняет своего местоположения.

При одноосном пропорциональном нагружении прогнозы феноменологической (2.114)-(2.118) и микроструктурной (2.92)-(2.108) моделей эволюции точечных дефектов приводят при соответствующем выборе констант материала к близким результатам. На Рисунке 6.22 показаны результаты сравнения прогнозов феноменологической и микроструктурной моделей эволюции точечных дефектов при старении ($E = 0$ МВ/м и $P^r = 0,26$ Кл/м²) при различных значениях параметра L^P . Наилучшего совпадения между кривыми удастся добиться при следующем соотношении параметров моделей $B_{micro}^P / B_{pheno}^P = 0,09$ и $Q_{micro}^P / Q_{pheno}^P = 1$. Отличие в математических формулировках уравнений эволюции рассматриваемых моделей не позволяет добиться тождественного совпадения решений. В случае феноменологической модели для рассматриваемого режима нагружения решение представляет комбинацию экспоненты и постоянной, а для микроструктурной модели это комбинация нескольких экспонент с различными показателями и постоянной.

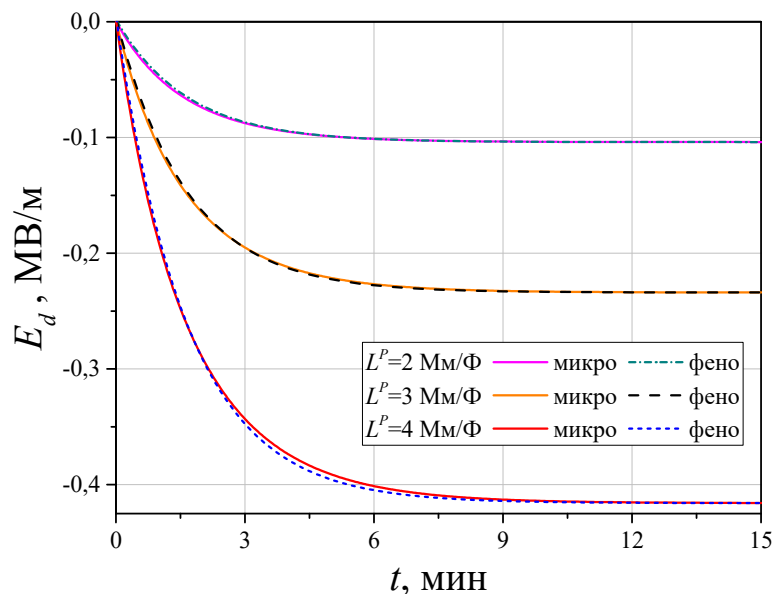


Рисунок 6.22 – Сравнение прогнозов микроструктурной и феноменологической моделей эволюции точечных дефектов в процессе старения при различных значениях параметра L^P

В отличие от феноменологической модели *микроструктурная* модель эволюции дефектов позволяет также описать эффекты смещения и среза петли без необходимости прямого моделирования стадии старения на основе выбора неравных начальных значений объемных долей дефектов возможных дискретных направлений c_I^d , $I = \overline{1,6}$ (см. Рисунок 6.23). Выше при использовании микроструктурной модели рассматривались варианты равных начальных объемных долей дефектов (для тетрагонального монокристалла) $c_I^d = \{\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Последовательность перечисления соответствует направлениям $\{[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]\}$. При увеличении начальной объемной доли дефектов в направлении действия поля $[001]$ (например, $c_I^d = \{0, 0, \frac{3}{4}, 0, 0, \frac{1}{4}\}$) петля гистерезиса смещается направо (Рисунок 6.23а). При увеличении начальной объемной доли дефектов в направлении, ортогональном действию поля (например, в направлении $[100]$ с $c_I^d = \{\frac{3}{4}, 0, 0, \frac{1}{4}, 0, 0\}$), наблюдается срез петли гистерезиса без изменения местоположения центра. Увеличение отклонений от равновесного состояния соответствующих начальных объемных долей дефектов приводит к пропорциональному увеличению величины смещения или среза петли гистерезиса. Из Рисунка 6.23б видно, что при срезе петли диэлектрического гистерезиса наблюдается увеличение высоты петли электромеханического гистерезиса. Формирование неравных начальных объемных долей дефектов может рассматриваться как один из методов доменной инженерии.

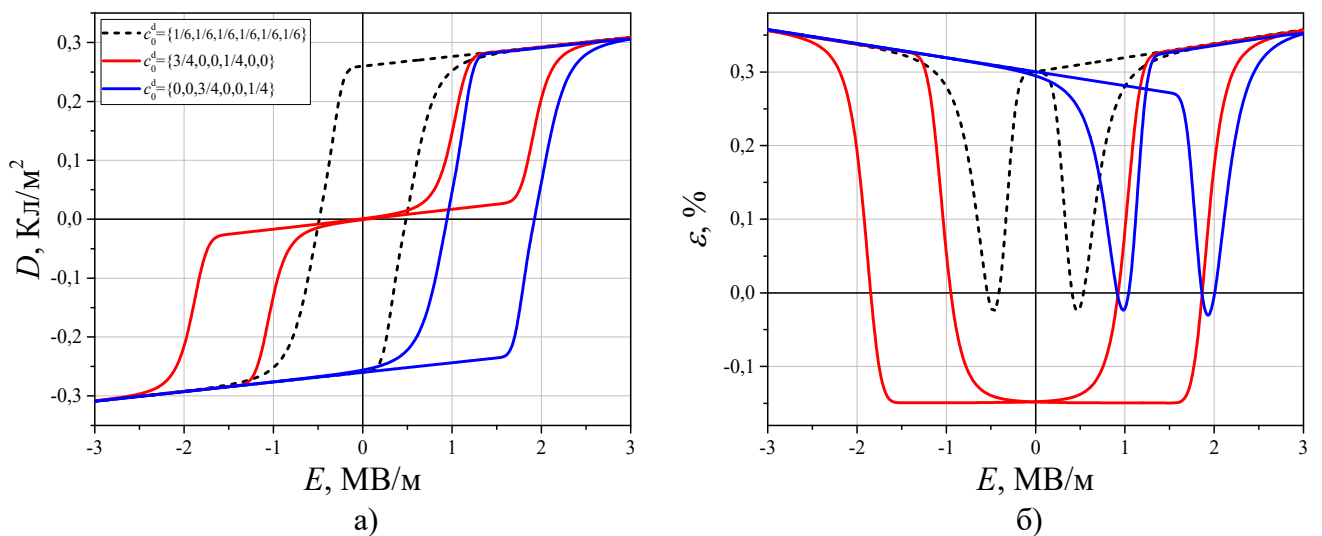


Рисунок 6.23 – Влияние начальных значений объемных долей дефектов возможных дискретных направлений c_I^d на а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Характер влияния параметров микроструктурной модели B^P , L^P и Q^P на кривые старения и диэлектрический гистерезис аналогичен рассмотренному выше случаю феноменологической модели (см. Рисунки 6.17-6.19). Параметры микроструктурной модели l и q (2.106) оказывают влияние на время релаксации кривых старения (Рисунок 6.24), качественно схожее с влиянием параметра B^P (см. Рисунок 6.18). В отличие от параметров L^P и Q^P на уровень насыщения поля смещения и форму гистерезисных кривых параметры l и q не оказывают влияния.

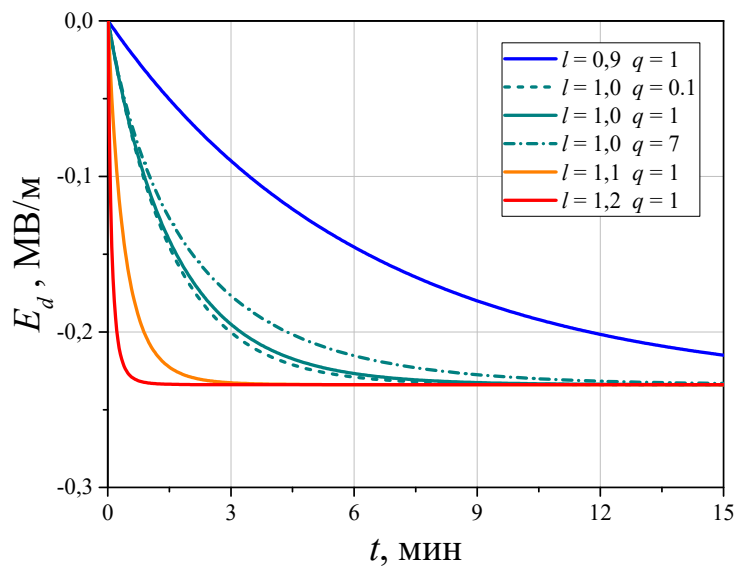


Рисунок 6.24 – Эволюция поля смещения при старении для различных значений параметров l и q микроструктурной модели (2.92)-(2.108) с изменяющимися дефектами

6.3 Параметрический анализ для поликристалла

При анализе чувствительности поведения поликристаллических материалов к варьированию параметров материала в вычислительных экспериментах использовался представительный объем с разбиением $3 \times 3 \times 3$ элементов, содержащий 216 кристаллитов (Рисунок 4.1г). Ориентация кристаллитов генерировалась случайным образом (нормальное распределение в пределах полного телесного угла). Эффективные свойства и гистерезисные кривые поликристалла определялись на основе метода конечно-элементной гомогенизации (2.1)-(2.5). В качестве исходных данных для определения свойств поликристаллического материала задавались константы

для кристаллита. Базовые значения основных параметров кристаллита, относительно которых производилось варьирование, соответствуют используемым в Разделе 6.2 (см. Таблицу 6.1).

Результаты представленных ниже многовариантных вычислительных экспериментов получены на основе выполнения расчетов с использованием микроструктурных моделей с учетом наличия как изменяющихся, так и неизменяющихся дефектов. Период цикла нагружения при проведении расчетов соответствовал 1 с, амплитуда циклического электрического нагружения $E_{\max} = 3$ МВ/м.

Влияние поля смещения E_d на диэлектрический и электромеханический гистерезис поликристалла в случае неизменяющихся сонаправленных дефектов (модель (2.84), (2.86), (2.89)), ориентированных вдоль электрического поля, представлено на Рисунке 6.25. Положительное значение E_d приводит к смещению петли гистерезиса направо, отрицательное – налево. Ширина и высота петли, а также ее форма при смещении практически не меняются. Параметр $E_d = \mathbf{E}_d \cdot \frac{\mathbf{E}}{|\mathbf{E}|} = L^P \mathbf{P}^d \cdot \frac{\mathbf{E}}{|\mathbf{E}|} = L^P P^d$ (2.89)₃ определяет величину горизонтального смещения центра петли гистерезиса. Влияние поля смещения на гистерезис поликристаллического материала аналогично случаю монокристаллического материала (ср. Рисунки 6.25 и 6.11).

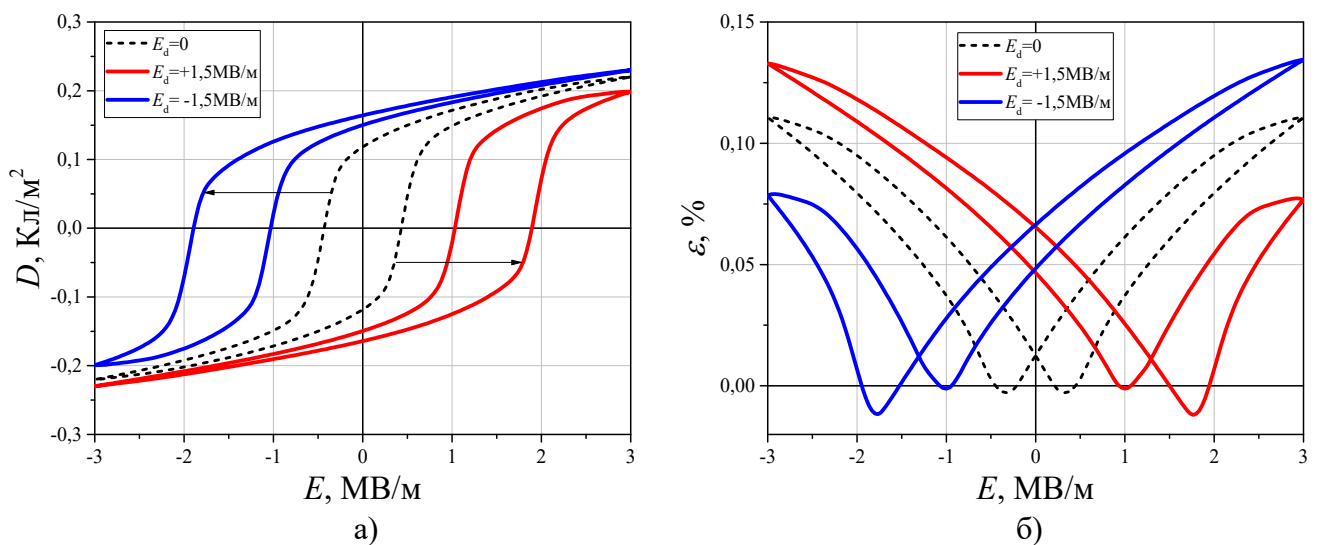


Рисунок 6.25 – Горизонтальное смещение а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса при возникновении в поликристалле неизменяющихся сонаправленных дефектов, ориентированных вдоль электрического поля при различных значениях E_d

В моделях с неизменяющимися дефектами горизонтальное смещение петли гистерезиса *пропорционально* величине поля смещения E_d . На Рисунке 6.26 представлены результаты расчетов петель диэлектрического и электромеханического гистерезиса при значениях $E_d = 0; -0,5; -1,0; -1,5$ МВ/м. Во избежание громоздкости представления на Рисунке 6.26 показан начальный (несмещенный) гистерезис при $E_d = 0$ и только ниспадающие (левые) ветви гистерезисов при $E_d \neq 0$.

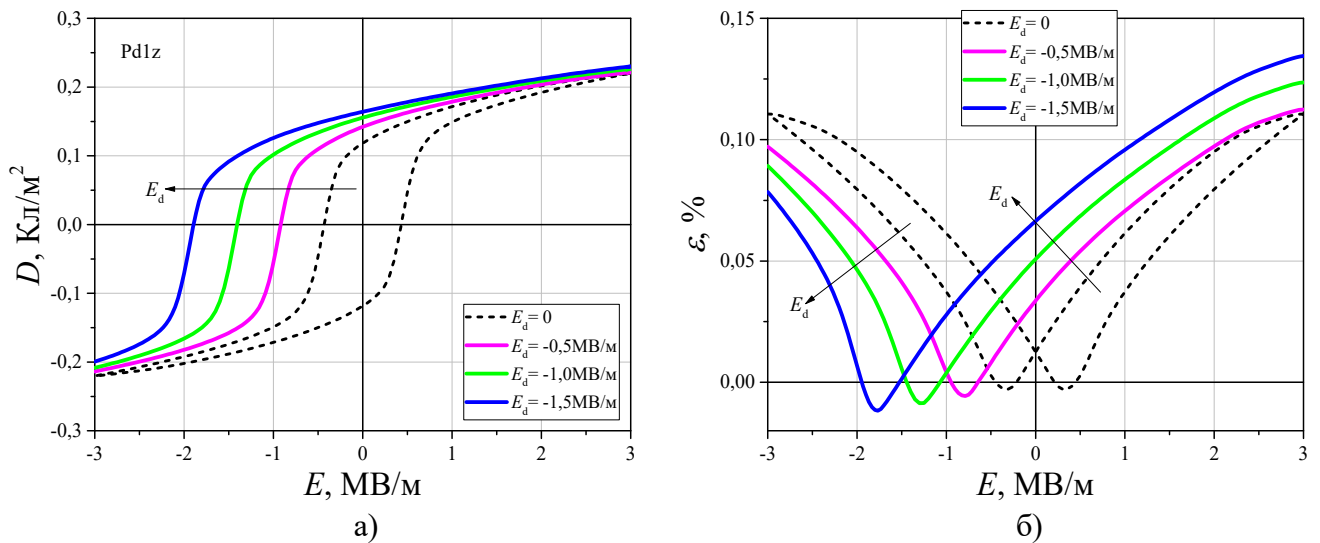


Рисунок 6.26 – Влияние параметра E_d на смещение а) диэлектрического гистерезиса, б) электромеханического гистерезиса в поликристалле с неизменяющимися сонаправленными дефектами, ориентированными вдоль электрического поля

Выше рассматривался случай сонаправленных дефектов, ориентированных вдоль электрического поля ($\mathbf{P}^d \uparrow, \mathbf{E} \uparrow$), приводящий к смещению петли гистерезиса. При возникновении *разориентации* в направлении неизменяющихся дефектов, приводящей к их нулевой суммарной поляризации, реализующейся, например, при выборе направлений поляризации дефектов, совпадающих с кристаллографическими осями кристаллитов, ориентированных случайным образом в поликристаллическом агрегате, эффект смещения гистерезиса исчезает (Рисунок 6.27).

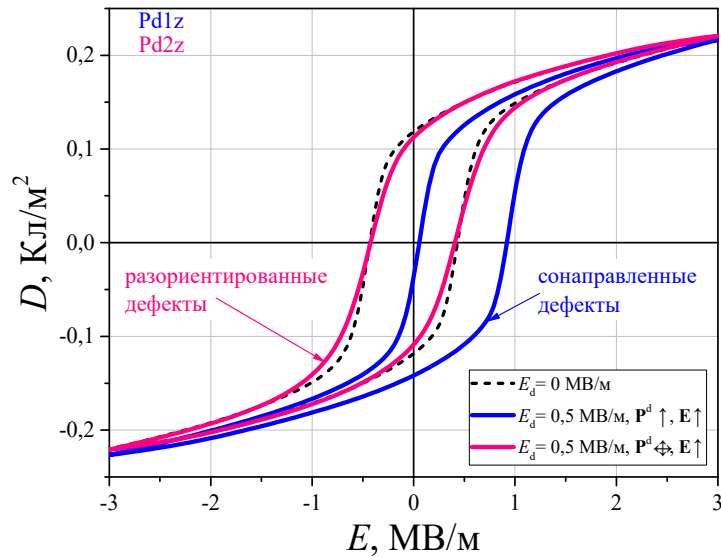


Рисунок 6.27 – Исчезновение эффекта смещения петли диэлектрического гистерезиса поликристаллического материала при возникновении разориентации неизменяющихся скомпенсированных дефектов

Расчеты с использованием микроструктурной модели с неизменяющимися дефектами показали, что для поликристаллического материала, в отличие от монокристаллического, наличие сонаправленных дефектов *ортогональных* полю ($\mathbf{P}^d \rightarrow, \mathbf{E} \uparrow$) или наличие *противоположно направленных* дефектов, ориентированных вдоль электрического поля ($\mathbf{P}^d \uparrow\downarrow, \mathbf{E} \uparrow$), как видно из Рисунка 6.28, не приводит к *срезу* петли диэлектрического гистерезиса (двойной петле гистерезиса). Для монокристаллического материала в рассмотренных случаях наблюдается срез петли диэлектрического гистерезиса (Рисунок 6.12а).

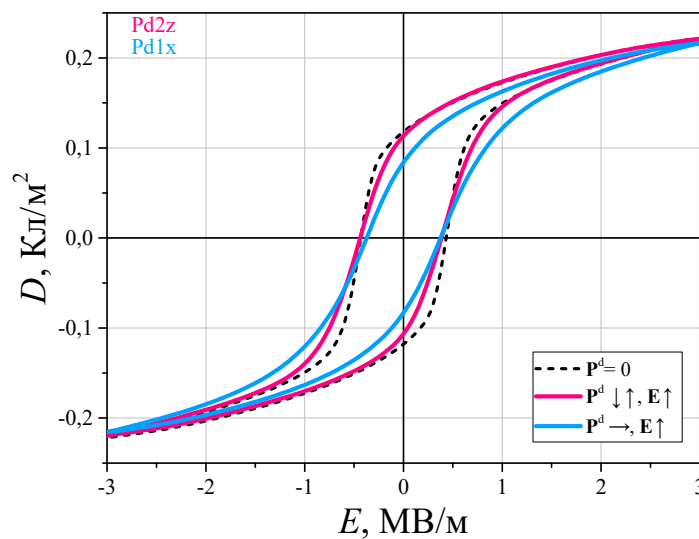


Рисунок 6.28 – Диэлектрический гистерезис поликристаллического материала при наличии неизменяющихся (противоположно направленных вдоль поля или сонаправленных ортогональных полю) скомпенсированных дефектов ($E_d = 0,5$ МВ/м)

С ростом параметра E_d в случае сонаправленных неизменяющихся дефектов, ортогональных полю ($\mathbf{P}^d \rightarrow, \mathbf{E} \uparrow$), или противоположно направленных дефектов, ориентированных вдоль электрического поля ($\mathbf{P}^d \uparrow\downarrow, \mathbf{E} \uparrow$), наблюдается дисторсия петли гистерезиса (уменьшение ширины и высоты петли диэлектрического и механического гистерезисов) (Рисунок 6.29). Срез петли диэлектрического гистерезиса для поликристаллического материала не удастся описать в рамках модели с неизменяющимися дефектами.

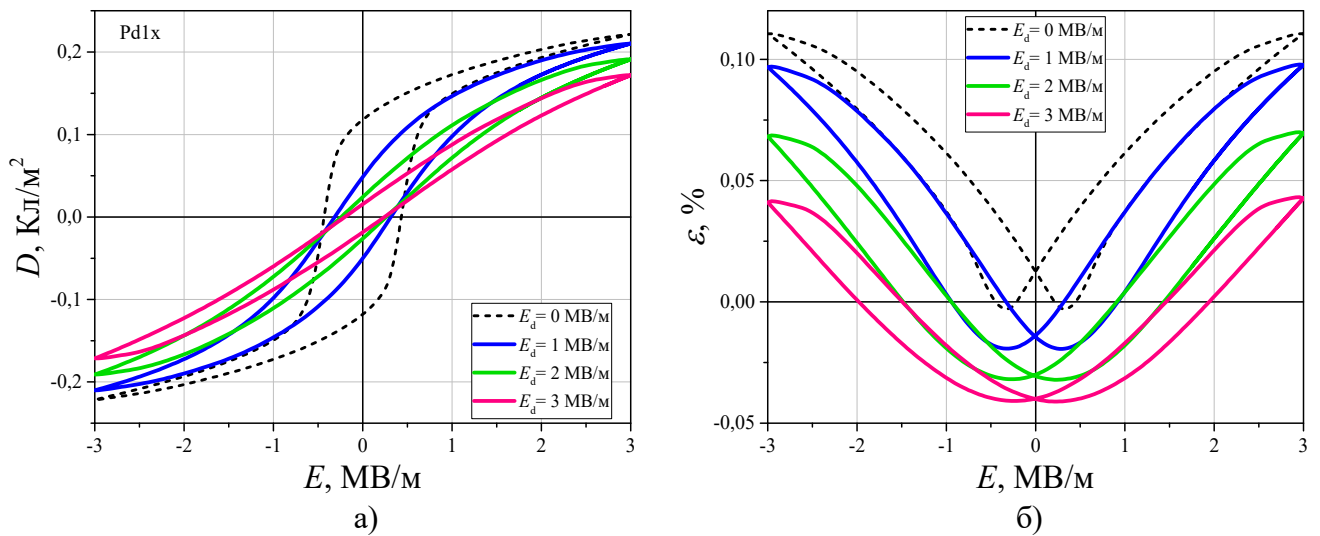


Рисунок 6.29 – Влияние параметра E_d на а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис в поликристалле с неизменяющимися сонаправленными дефектами, ориентированными *ортогонально* электрическому полю

Наблюдаемый в экспериментах (см. [4, 49, 160, 288, 303, 342, 460] и Рисунки 6.7-6.9) *срез* петли диэлектрического гистерезиса для поликристаллического материала удастся описать в рамках модели с *изменяющимися* дефектами. Простейший способ описания связан с использованием феноменологической безэволюционной модели переориентации дефектов (2.122). Как видно из Рисунка 6.30, с увеличением параметра L^P увеличивается величина относительного смещения центров полупетель. Параметр $E_d = L^P P^d$ определяет расстояние между центрами верхней и нижней полупетель гистерезиса.

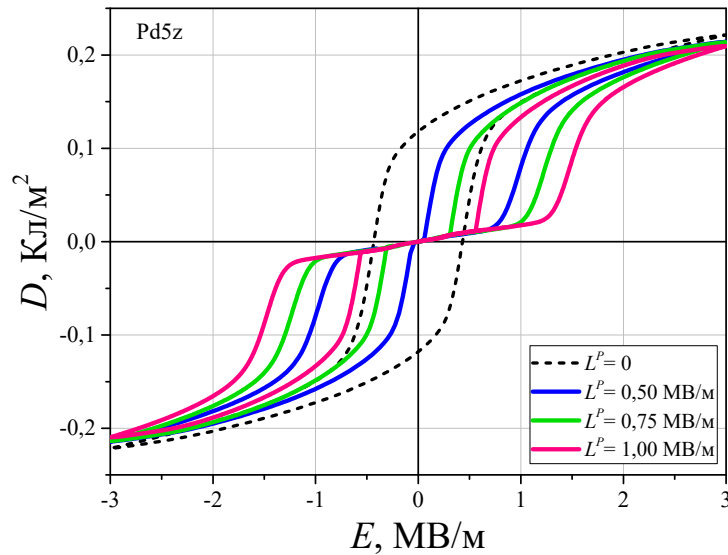


Рисунок 6.30 – Срез петли гистерезиса. Влияние L^P на диэлектрический гистерезис в поликристалле с изменяющимися дефектами для феноменологической безэволюционной модели (2.122)

При использовании феноменологической (2.118) и микроструктурной (2.102), (2.106) эволюционных моделей *изменяющихся* дефектов также удается описать *срез* петли диэлектрического гистерезиса для поликристаллического материала (Рисунок 6.31). С ростом параметра L^P наблюдается увеличение горизонтального рассовмещения верхней (направо) и нижней (налево) полупетель диэлектрического гистерезиса, а также уменьшение их высоты.

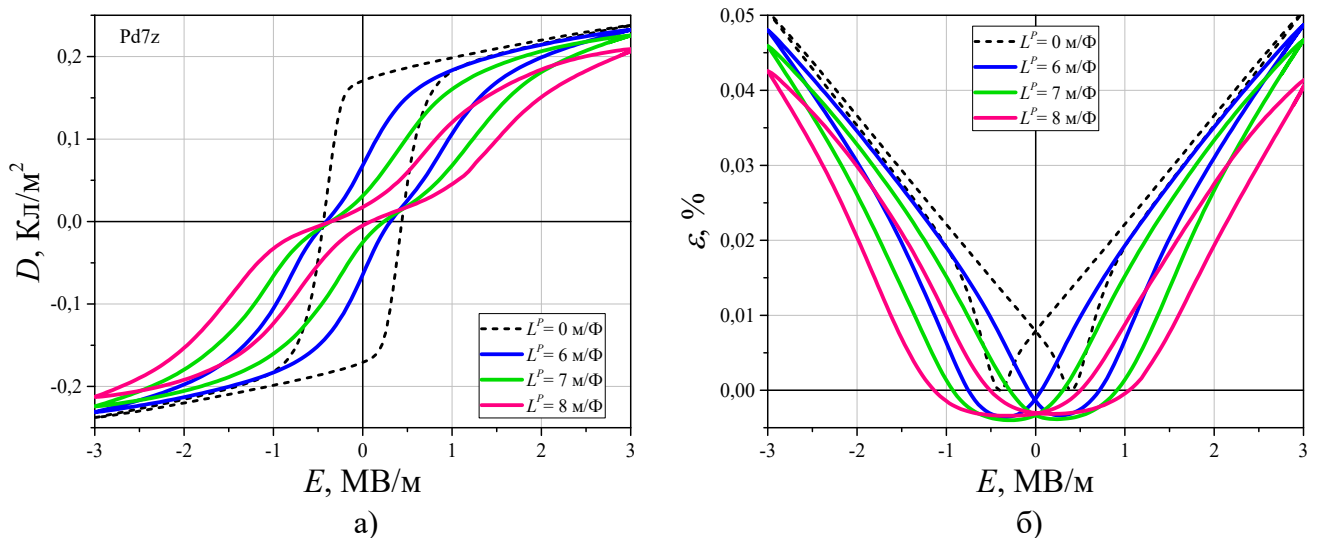


Рисунок 6.31 – Срез петли гистерезиса. Влияние параметра L^P на а) диэлектрический и б) электромеханический гистерезисы поликристалла с изменяющимися дефектами (модель (2.118)), первоначально ориентированными *ортогонально* электрическому полю

На Рисунке 6.31 показаны результаты, соответствующие случаю предварительного нагружения, формирующего дефекты, ортогональные направлению прикладываемого в последствии циклически изменяющегося электрического поля ($\mathbf{P}^d \rightarrow, \mathbf{E} \uparrow$).

Взаимное влияние кристаллитов в поликристалле оказывает существенное влияние на формирование двойной петли гистерезиса. Результаты расчетов представительного объема поликристалла с различными значениями спонтанной деформации кристаллитов ε^s показали, что с ростом ε^s величина среза петли диэлектрического гистерезиса уменьшается (см. Рисунок 6.32) и при достижении определенного значения ε^s эффект среза исчезает. В расчетах использовалось значение параметра $L^p = 7\text{М/Ф}$. Для уменьшения влияния ориентации кристаллитов в расчетах двойных петель гистерезисов, результаты которых показаны на Рисунках 6.31 и 6.32, использовался представительный объем поликристалла с разбиением $4 \times 4 \times 4$ элементов, содержащий 512 кристаллитов.

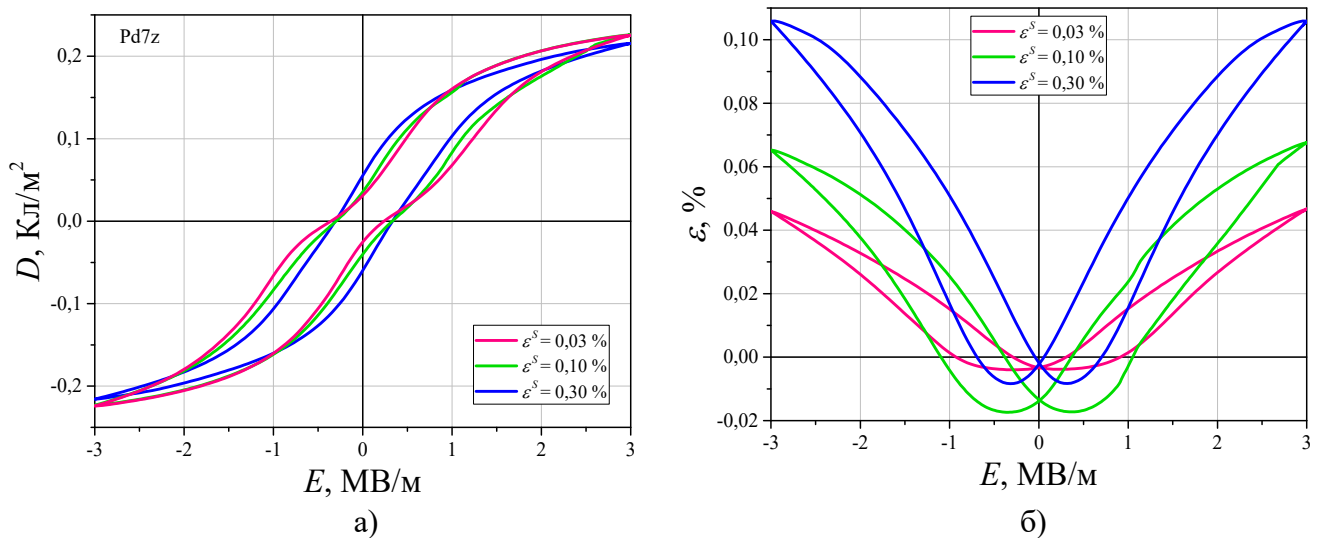
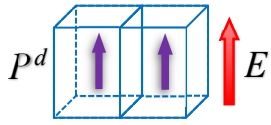
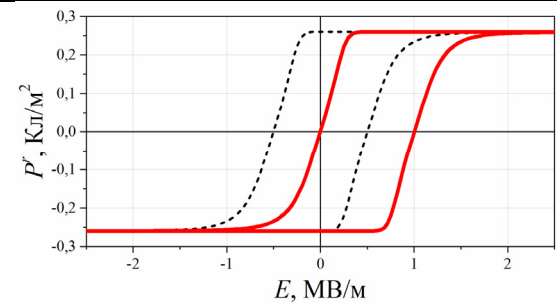
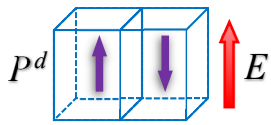
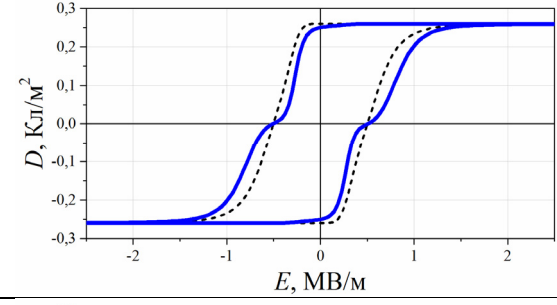
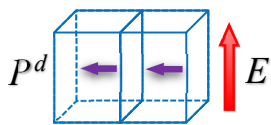
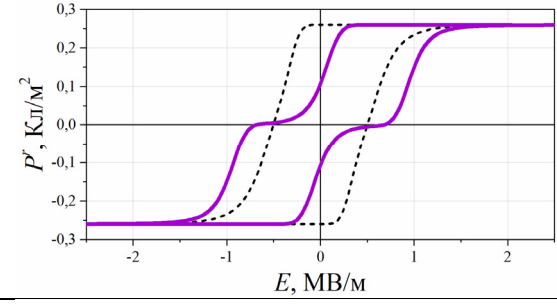
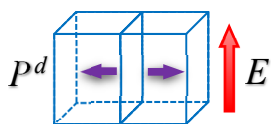
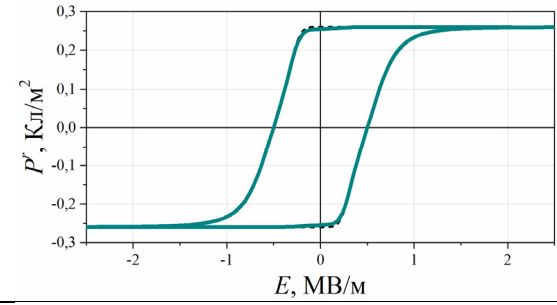
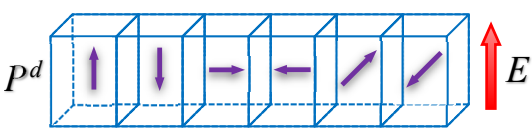
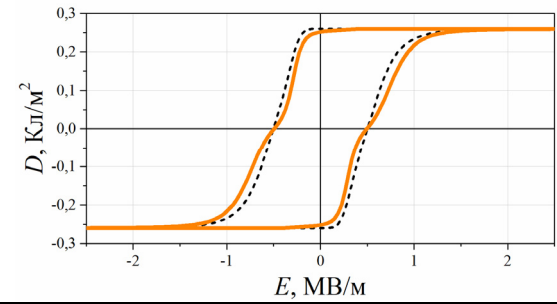


Рисунок 6.32 – Срез петли гистерезиса. Влияние спонтанной деформации кристаллитов ε^s на а) диэлектрический и б) электромеханический гистерезисы поликристалла с изменяющимися дефектами, первоначально ориентированными *ортогонально* электрическому полю

6.4 Влияние ориентации дефектов на форму гистерезиса в монокристаллах

Ориентация направлений поляризации дефектов по отношению к действующему электрическому полю оказывает существенное влияние на вид петли диэлектрического гистерезиса монокристаллов (см. Таблицу 6.3).

Таблица 6.3 – Влияние ориентации полярных дефектов на форму диэлектрического гистерезиса в монокристаллах

№	Ориентация дефектов	Гистерезис
1		
2		
3		
4		
5		

Результаты расчетов с использованием тетрагональной микроструктурной модели монокристалла с неизменяющимися полярными дефектами (2.84), (2.86) показали, что проекция осредненного в пределах рассматриваемого объема материала

направления поляризации дефектов на направление поля определяет горизонтальное *смещение* петли гистерезиса. При нулевой осредненной (скомпенсированной) поляризации дефектов локальная разориентация (пространственная неоднородность) направления поляризации дефектов приводит к искажению формы петли гистерезиса в виде *среза* петли гистерезиса (двойной петли гистерезиса) без изменения местоположения ее центра.

Расчеты производились для монокристалла, характеристики которого приведены в разделе 6.2 в Таблице 6.2. Значение параметра материала, характеризующего дефектное состояние, выбиралось равным $E_d = 0,5 \text{ МВ/м} = E_c$.

В первом из рассмотренных в Таблице 6.3 случаев, когда поляризация всех дефектов совпадает с направлением электрического поля, наблюдается смещение петли направо без искажения ее формы. Гистерезис бездефектного материала показан на графиках в Таблице 6.3 пунктиром. Величина смещения центра петли соответствует значению E_d .

Во втором случае, когда поляризация дефектов у половины доменов совпадает с направлением электрического поля, а оставшаяся половина доменов имеет противоположное направление поляризации дефектов, происходит искажение формы петли гистерезиса путем *среза* петли гистерезиса. Суммарное значение поляризаций всех дефектов равняется нулю, поэтому изменения местоположения центра петли гистерезиса не наблюдается.

Во третьем случае, когда поляризация всех дефектов сонаправлена и ортогональна направлению электрического поля, наблюдается искажение формы петли гистерезиса путем *среза*. Величина относительного смещения верхней половины петли по отношению к нижней половине при равных характеристиках дефектного состояния в этом случае оказалась в 4 раза больше, чем во втором случае. Проекция вектора поляризации дефектов на направление вектора электрического поля равняется нулю, поэтому изменения местоположения центра петли гистерезиса не наблюдается.

Во четвертом случае, когда поляризация противоположно направленных дефектов ортогональна направлению электрического поля, не наблюдается ни смещения, ни искажения формы петли гистерезиса. Взаимно скомпенсированные дефекты ортогональные полю не оказывают влияния на процессы переключения.

Во пятом случае (см. Таблицу 6.3), когда 6 равных групп дефектов ориентированы вдоль 6 направлений возможной поляризации (вдоль ребер элементарной ячейки тетрагонального кристалла), наблюдается искажение формы петли гистерезиса путем *среза*. Величина относительного смещения верхней половины петли по отношению к нижней при равных характеристиках дефектного состояния в этом случае оказалась наименьшей из всех рассмотренных вариантов (ср. с вариантами 2 и 3 из Таблицы 6.3). Это объясняется тем, что вклад в искажение петли дают только дефекты сонаправленные или противоположно направленные полю, доля которых в рассматриваемом случае составляет $1/3$ от общего количества дефектов.

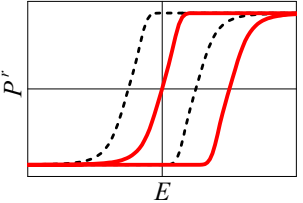
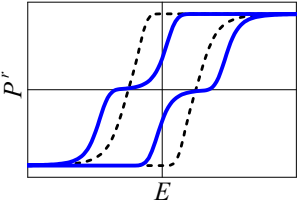
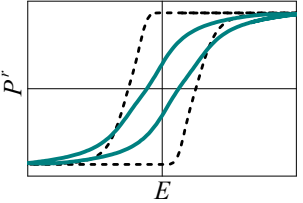
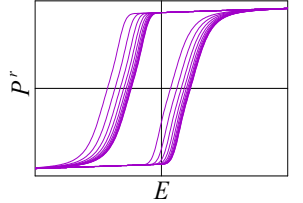
6.5 Способы описания смещения и среза петель гистерезиса монокристалла и поликристалла с дефектами

Введенные модели эволюции точечных полярных дефектов (см. модель с неизменяющимися дефектами (2.84), (2.86) и модели с изменяющимися дефектами (феноменологические эволюционная (2.118), безэволюционная (2.122) и микромеханическая (2.102), (2.106))) обладают различными предсказательными способностями для описания искажений петли гистерезиса (см. Таблицу 6.4). *Смещение* (сдвиг) петли гистерезиса моно- и поликристаллов удастся описать при наличии нескомпенсированной поляризации дефектов в направлении электрического поля ($\mathbf{P}^d \uparrow, \mathbf{E} \uparrow$) при использовании всех моделей, за исключением модели дефектов мгновенной переориентации (2.122) (см. Рисунки 6.19, 6.20, 6.26). Эффект смещения петли гистерезиса наблюдается при ненулевых проекциях осредненных поляризаций дефектов на направление поля.

При использовании модели с неизменяющимися дефектами не удастся описать *срез* петли гистерезиса для поликристаллических материалов. В этом случае наблюдается дисторсия формы петли гистерезиса (см. Таблицу 6.4 и Рисунок 6.29). Модели изменяющихся дефектов обладают наиболее широкими возможностями при описании поведения сегнетоэлектростатических материалов с дефектами и способны описать как смещение петли гистерезиса, так и срез петли диэлектрического гистерезиса (см. Рисунки 6.23, 6.30, 6.31) в определенном диапазоне изменения параметров материала.

Феноменологическая (2.118) и микромеханическая (2.102), (2.106) модели изменяющихся дефектов позволяют описать также явление *дезэджинга*, связанное с уменьшением начального поля смещения при интенсивном циклическом нагружении (см. Рисунок 6.21).

Таблица 6.4 – Возможности моделей эволюции дефектов для описания искажений петли гистерезиса

Искажения петли гистерезиса	Кристалл / Поликристалл	Модель с неизменяющи- мися дефектами		Модели с изменяющимися дефектами				
		феноменолог. (2.84), (2.86)		феноменлог. (2.118)		микромех. (2.102), (2.106)		феноме- нолог. (2.122)
		$P^d \uparrow$ $E \uparrow$	$P^d \rightarrow$ $E \uparrow$	$P^d \uparrow$ $E \uparrow$	$P^d \rightarrow$ $E \uparrow$	$P^d \uparrow$ $E \uparrow$	$P^d \rightarrow$ $E \uparrow$	$P^d \uparrow$ $E \uparrow$
сдвиг 	К	✓	-	✓	-	✓	-	-
	П	✓	-	✓	-	✓	-	-
срез 	К	-	✓	-	✓	-	✓	✓
	П	-	-	-	✓	-	✓	✓
дисторсия 	К	-	-	-	-	-	-	-
	П	-	✓	-	✓	-	✓	-
дезэджинг 	К	-	-	✓	✓	✓	✓	-
	П	-	-	✓	✓	✓	✓	-

6.6 Краткие выводы к главе 6

1. *Точечные дефекты* (акцепторные или донорные легирующие примеси, подвижные вакансии) кристаллической решетки сегнетоэлектрoупругих материалов определяют процессы формирования и движения доменных границ, кинетику доменной структуры, процессы необратимого деформирования и поляризации, размеры и форму гистерезисных кривых, время переключения, диэлектрические и пьезоэлектрические свойства и их деградацию.
2. Появление одинаково ориентированных полярных дефектов в моно- и поликристаллах приводит к *смещению петель гистерезиса*. Для упорядоченных в пределах доменов противоположно направленных (антипараллельных) полярных дефектов может наблюдаться *срез петли (двойная петля) гистерезиса*. Кривые диэлектрического, электромеханического и механического гистерезисов содержат информацию о дефектах в сегнетоэлектрoупругих материалах, что открывает возможность по форме кривых производить *диагностику* дефектов.
3. 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: BaTiO₃, PMS-PZT, PMN-PZT и PZT PIC151 показало *хорошее* соответствие. В рассмотрении участвовали поли- и монокристаллические материалы с тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической структурой.
4. Сравнение результатов расчета *среза петель (двойных петель)* диэлектрического и механического гистерезисов с использованием предложенной микроструктурной модели материала с учетом изменяющихся полярных точечных дефектов с данными экспериментальных исследований для различных материалов: поликристаллического BaTiO₃, легированного Cu²⁺, монокристаллического BaTiO₃, легированного Mn²⁺, монокристаллического тригидроселенита калия KН₃(SeO₃)₂, легированного Cr³⁺, показало *хорошее* соответствие.
5. Микроструктурная модель материала с учетом изменяющихся дефектов демонстрирует способность корректного описания процесса *старения* после предварительной поляризации (см. Рисунок 6.4), а также эффекта *деэйджинга*,

связанного с уменьшением начального поля смещения при интенсивном циклическом нагружении (см. Рисунок 6.21).

6. Получены результаты *параметрического анализа* моделей, характеризующие чувствительность сдвига, размеров, формы гистерезисных кривых и эволюции внутреннего поля смещения к варьированию параметров, определяющих дефектное состояние материала, что позволяет повысить эффективность процедуры *идентификации* параметров.
7. Произведено систематическое исследование *влияние ориентации дефектов* на форму петель гистерезиса (см. Таблицу 6.3). Результаты расчетов с использованием микроструктурной модели монокристалла с неизменяющимися полярными дефектами показали, что проекция осредненного в пределах рассматриваемого объема материала направления поляризации дефектов на направление поля определяет горизонтальное *смещение* петли гистерезиса. При нулевой осредненной (скомпенсированной) поляризации дефектов локальная разориентация (пространственная неоднородность) направления поляризации дефектов приводит к искажению формы петли гистерезиса в виде *среза* петли гистерезиса без изменения местоположения ее центра.
8. Произведено систематическое исследование *предсказательной способности* всех предложенных *моделей эволюции дефектов* при описании явлений смещения и среза петель гистерезиса монокристалла и поликристалла. Предложены рекомендации по выбору адекватной модели эволюции дефектов (см. Таблицу 6.4).
9. Наличие пространственно упорядоченных полярных дефектов заданной концентрации позволяет создать внутреннее смещающее электрическое поле, способствующее сохранению устойчивого монокристаллического состояния, достигнуть больших изменений деформации. Таким образом, открывается возможность управления и целенаправленного изменения электромеханических свойств сегнетоэлектродупругих материалов путем контролируемого создания дефектов структуры, представляющего один из способов *доменной инженерии*.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Интенсивное внедрение на практике сложных смарт систем и элементов конструкций с использованием *сегнетоэлектрoупругих* материалов в качестве рабочих элементов приводит к необходимости анализа их *прочности* и долговечности, а также к повышению точности предсказания *неоднородного* напряженно-деформированного состояния. В связи с этим становятся актуальными разработка уточненных *моделей* деформирования и поляризации сегнетоэлектрoупругого материала и использование эффективных *методов* решения нелинейных связанных краевых задач.
2. На основе анализа обширного экспериментального материала для различных режимов нагружения предложена формулировка *микроструктурной модели* сегнетоэлектрoупругого материала с учетом мультидоменной структуры, многофазного состава, анизотропии свойств, наличия и эволюции полярных точечных дефектов и диссипативного характера движения доменных стенок для описания гистерезисного поведения сегнетоэлектриков/сегнетоэластиков в условиях сложного многоосного комбинированного электрического и/или механического нагружения.
3. Разработана *феноменологическая модель* склерономного сегнетоэлектрoупругого материала с уравнениями эволюции внутренних переменных, получаемыми следствием *принципа максимума диссипации*. Выполнена конкретизация выражений для свободной энергии и функции переключения для *изотропного* и *трансверсально-изотропного* приближений в рамках *теории инвариантов*. Произведена идентификация свободной энергии и функции переключения на основе гомогенизации результатов расчетов с использованием микроструктурной модели.
4. Предложена *векторно-потенциальная вариационная формулировка*, соответствующая принципу виртуальной электромеханической работы, обеспечивающая сходимость итерационных решений нелинейных задач во всем диапазоне нагрузок. Дана оригинальная формулировка граничных условий для векторного потенциала для односвязных и многосвязных областей, обеспечивающих наряду с калибровкой в объеме единственность решения.

5. Развита *метод возвратного отображения* для эффективного интегрирования нелинейных определяющих уравнений эволюционного типа при наличии ограничений. Получена согласованная матрица касательных модулей для обеспечения квадратичной скорости сходимости глобальной итерационной процедуры Ньютона-Рафсона.
6. Разработаны алгоритмы и произведена программная реализация предложенных моделей материала и методов *гомогенизации* в КЭ программном комплексе.
7. Произведена *верификация* предложенных моделей материала, вариационных формулировок, способов задания граничных условий, методов решения нелинейных задач на основе сравнения полученных результатов с аналитическими решениями и результатами экспериментов. Выполнено исследование скорости сходимости численного решения, диапазонов допустимых значений штрафных параметров.
8. Произведен систематический анализ *взаимного влияния* структурных элементов на различных масштабных уровнях. Установлен механизм возникновения в поликристалле *микронапряжений* вследствие наличия у кристаллитов запирающих (необратимо недеформируемых) направлений, приводящих к парадоксальному снижению уровня остаточной деформации поликристалла с ростом спонтанной деформации. Получены результаты анализа ориентационных зависимостей остаточной деформации и поляризации для тетрагонального, ромбоэдрического и орторомбического *монокристаллов*.
9. Предложено количественное описание эффекта экстремальных свойств вблизи *морфотропной фазовой границы*. Предложен подход расчетного определения экстремальных свойств двухфазных и трехфазных смесей, открывающий возможность синтеза сегнетоэлектродупругих материалов с оптимальной структурной организацией вещества путем управления его метастабильными состояниями.
10. Произведено систематическое исследование влияния *ориентации дефектов* на форму петель гистерезиса. Исследованы возможности описания эффектов *смещения* и *среза петель* диэлектрического и электромеханического гистерезисов, процессов *старения* и *деэйджинга* с использованием предложенных микроструктурных моделей с учетом (неизменяющихся или эволюционирующих) полярных точечных дефектов.

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ВЕКТОР СПОНТАННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И ТЕНЗОР СПОНТАННОЙ ДЕФОРМАЦИИ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ДОМЕНОВ МИКРОМЕХАНИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

А.1. Тетрагональный кристалл

6 возможных вариантов доменов с различными ориентациями поляризованной элементарной ячейки $\langle 001 \rangle$ в тетрагональном монокристалле и их нумерация показаны на Рисунке А.1.

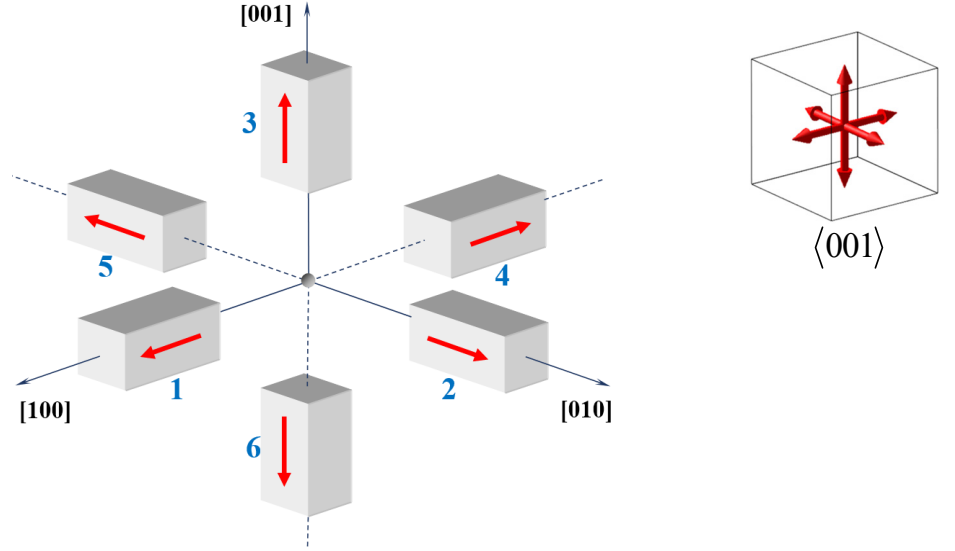


Рисунок А.1 – Варианты возможных ориентаций доменов в тетрагональном кристалле

В тетрагональном кристалле вектор спонтанной поляризации $\mathbf{P}_i^S$ и тензор спонтанной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_i^S$ для 6 вариантов доменов определяются выражениями:

$$\mathbf{P}_1^S = -\mathbf{P}_4^S = \mathbf{e}_{[100]}P_0, \quad \mathbf{P}_2^S = -\mathbf{P}_5^S = \mathbf{e}_{[010]}P_0, \quad \mathbf{P}_3^S = -\mathbf{P}_6^S = \mathbf{e}_{[001]}P_0, \quad (\text{A.1})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1^S = \boldsymbol{\varepsilon}_4^S = \frac{3}{2} \text{dev}(\mathbf{e}_{[100]}\mathbf{e}_{[100]})\varepsilon_0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2^S = \boldsymbol{\varepsilon}_5^S = \frac{3}{2} \text{dev}(\mathbf{e}_{[010]}\mathbf{e}_{[010]})\varepsilon_0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_3^S = \boldsymbol{\varepsilon}_6^S = \frac{3}{2} \text{dev}(\mathbf{e}_{[001]}\mathbf{e}_{[001]})\varepsilon_0. \quad (\text{A.2})$$

В координатном виде в кристаллографической системе координат (с базисом $\mathbf{e}_{[100]}, \mathbf{e}_{[010]}, \mathbf{e}_{[001]}$) вектор спонтанной поляризации и тензор спонтанной деформации как следствие (А.1)-(А.2) определяются выражениями:

$$\mathbf{P}_1^S = -\mathbf{P}_4^S = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} P_0, \quad \mathbf{P}_2^S = -\mathbf{P}_5^S = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} P_0, \quad \mathbf{P}_3^S = -\mathbf{P}_6^S = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix} P_0, \quad (\text{A.3})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1^S = \boldsymbol{\varepsilon}_4^S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \varepsilon_0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2^S = \boldsymbol{\varepsilon}_5^S = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \varepsilon_0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_3^S = \boldsymbol{\varepsilon}_6^S = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \varepsilon_0. \quad (\text{A.4})$$

А.1. Ромбоэдрический кристалл

8 возможных вариантов доменов с различными ориентациями поляризованной элементарной ячейки $\langle 111 \rangle$ в ромбоэдрическом кристалле и их нумерация показаны на Рисунке А.2.

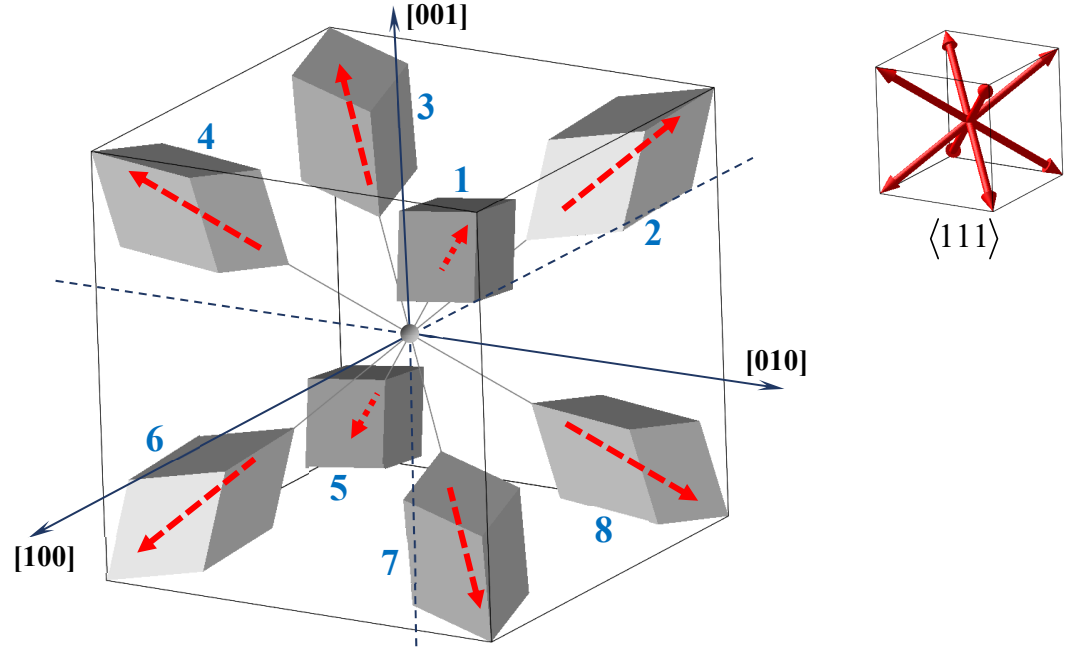


Рисунок А.2 – Варианты возможных ориентаций доменов в ромбоэдрическом кристалле

В ромбоэдрическом кристалле вектор спонтанной поляризации $\mathbf{P}_i^S$ и тензор спонтанной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_i^S$ для 8 вариантов доменов определяются выражениями:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_1^S &= -\mathbf{P}_5^S = \left(+\mathbf{e}_{[100]} + \mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_1^S &= \boldsymbol{\varepsilon}_5^S = \left(+\mathbf{e}_{[100]}\mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[010]}\mathbf{e}_{[001]} + \mathbf{e}_{[001]}\mathbf{e}_{[100]} \right)^S \varepsilon_0, \\
 \mathbf{P}_2^S &= -\mathbf{P}_6^S = \left(-\mathbf{e}_{[100]} + \mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_2^S &= \boldsymbol{\varepsilon}_6^S = \left(-\mathbf{e}_{[100]}\mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[010]}\mathbf{e}_{[001]} - \mathbf{e}_{[001]}\mathbf{e}_{[100]} \right)^S \varepsilon_0, \\
 \mathbf{P}_3^S &= -\mathbf{P}_7^S = \left(+\mathbf{e}_{[100]} - \mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_3^S &= \boldsymbol{\varepsilon}_7^S = \left(-\mathbf{e}_{[100]}\mathbf{e}_{[010]} - \mathbf{e}_{[010]}\mathbf{e}_{[001]} + \mathbf{e}_{[001]}\mathbf{e}_{[100]} \right)^S \varepsilon_0, \\
 \mathbf{P}_4^S &= -\mathbf{P}_8^S = \left(-\mathbf{e}_{[100]} - \mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_4^S &= \boldsymbol{\varepsilon}_8^S = \left(+\mathbf{e}_{[100]}\mathbf{e}_{[010]} - \mathbf{e}_{[010]}\mathbf{e}_{[001]} - \mathbf{e}_{[001]}\mathbf{e}_{[100]} \right)^S \varepsilon_0.
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

В координатном виде в кристаллографической системе координат (с базисом $\mathbf{e}_{[100]}$, $\mathbf{e}_{[010]}$, $\mathbf{e}_{[001]}$) вектор спонтанной поляризации и тензор спонтанной деформации как следствие (А.5) определяются выражениями:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_1^S = -\mathbf{P}_5^S &= \begin{Bmatrix} +1 \\ +1 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\epsilon}_1^S = \boldsymbol{\epsilon}_5^S &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\epsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_2^S = -\mathbf{P}_6^S &= \begin{Bmatrix} -1 \\ +1 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\epsilon}_2^S = \boldsymbol{\epsilon}_6^S &= \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\epsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_3^S = -\mathbf{P}_7^S &= \begin{Bmatrix} +1 \\ -1 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\epsilon}_3^S = \boldsymbol{\epsilon}_7^S &= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\epsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_4^S = -\mathbf{P}_8^S &= \begin{Bmatrix} -1 \\ -1 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{3}}, & \boldsymbol{\epsilon}_4^S = \boldsymbol{\epsilon}_8^S &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\epsilon_0}{2}.
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

А.2. Орторомбический кристалл

12 возможных вариантов доменов с различными ориентациями поляризованной элементарной ячейки $\langle 011 \rangle$ в орторомбическом кристалле и их нумерация показаны на Рисунке А.3.

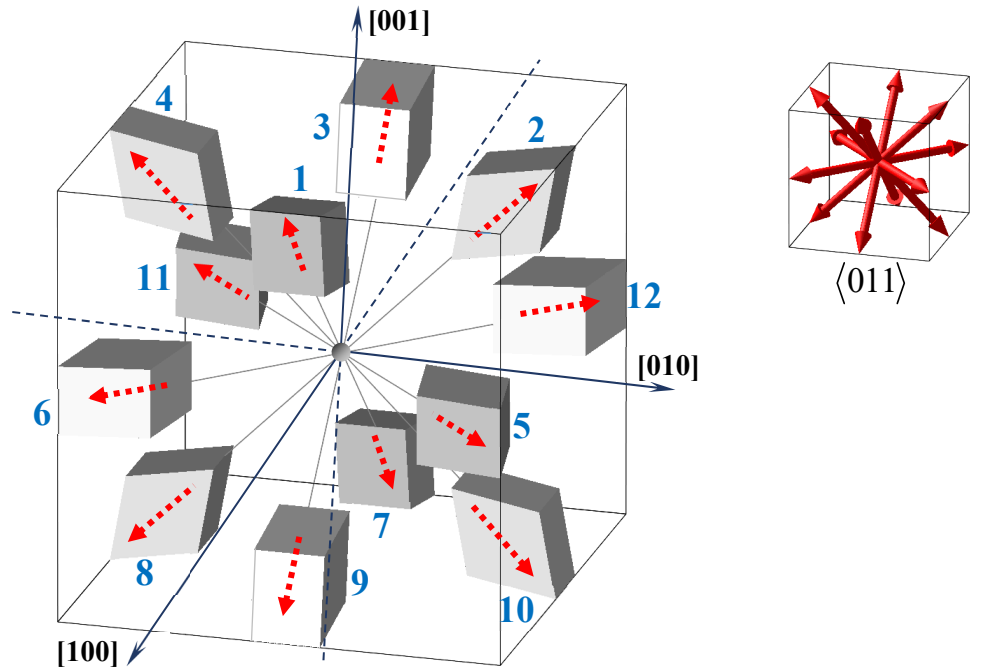


Рисунок А.3 – Варианты возможных ориентаций доменов в орторомбическом кристалле

В орторомбическом кристалле вектор спонтанной поляризации $\mathbf{P}_i^S$ и тензор спонтанной деформации $\boldsymbol{\epsilon}_i^S$ для 12 вариантов доменов определяются выражениями:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_1^S = -\mathbf{P}_7^S &= \left(+\mathbf{e}_{[100]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_1^S = \boldsymbol{\varepsilon}_7^S &= -\frac{2}{3} \text{dev}(\mathbf{e}_{[010]} \mathbf{e}_{[010]}) \varepsilon_0 + (\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[001]})^S \delta_0, \\
 \mathbf{P}_2^S = -\mathbf{P}_8^S &= \left(+\mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_2^S = \boldsymbol{\varepsilon}_8^S &= -\frac{2}{3} \text{dev}(\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[100]}) \varepsilon_0 + (\mathbf{e}_{[010]} \mathbf{e}_{[001]})^S \delta_0, \\
 \mathbf{P}_3^S = -\mathbf{P}_9^S &= \left(-\mathbf{e}_{[100]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_3^S = \boldsymbol{\varepsilon}_9^S &= -\frac{2}{3} \text{dev}(\mathbf{e}_{[010]} \mathbf{e}_{[010]}) \varepsilon_0 - (\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[001]})^S \delta_0, \\
 \mathbf{P}_4^S = -\mathbf{P}_{10}^S &= \left(-\mathbf{e}_{[010]} + \mathbf{e}_{[001]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_4^S = \boldsymbol{\varepsilon}_{10}^S &= -\frac{2}{3} \text{dev}(\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[100]}) \varepsilon_0 - (\mathbf{e}_{[010]} \mathbf{e}_{[001]})^S \delta_0, \\
 \mathbf{P}_5^S = -\mathbf{P}_{11}^S &= \left(+\mathbf{e}_{[100]} + \mathbf{e}_{[010]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_5^S = \boldsymbol{\varepsilon}_{11}^S &= -\frac{2}{3} \text{dev}(\mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]}) \varepsilon_0 + (\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[010]})^S \delta_0, \\
 \mathbf{P}_6^S = -\mathbf{P}_{12}^S &= \left(+\mathbf{e}_{[100]} - \mathbf{e}_{[010]} \right) \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_6^S = \boldsymbol{\varepsilon}_{12}^S &= -\frac{2}{3} \text{dev}(\mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]}) \varepsilon_0 - (\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[010]})^S \delta_0.
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

В координатном виде в кристаллографической системе координат (с базисом $\mathbf{e}_{[100]}$, $\mathbf{e}_{[010]}$, $\mathbf{e}_{[001]}$) вектор спонтанной поляризации и тензор спонтанной деформации как следствие (A.7) определяются выражениями:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_1^S = -\mathbf{P}_7^S &= \begin{Bmatrix} +1 \\ 0 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_1^S = \boldsymbol{\varepsilon}_7^S &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \delta \\ 0 & -2 & 0 \\ \delta & 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{\varepsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_2^S = -\mathbf{P}_8^S &= \begin{Bmatrix} 0 \\ +1 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_2^S = \boldsymbol{\varepsilon}_8^S &= \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \delta \\ 0 & \delta & 1 \end{bmatrix} \frac{\varepsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_3^S = -\mathbf{P}_9^S &= \begin{Bmatrix} -1 \\ 0 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_3^S = \boldsymbol{\varepsilon}_9^S &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\delta \\ 0 & -2 & 0 \\ -\delta & 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{\varepsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_4^S = -\mathbf{P}_{10}^S &= \begin{Bmatrix} 0 \\ -1 \\ +1 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_4^S = \boldsymbol{\varepsilon}_{10}^S &= \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\delta \\ 0 & -\delta & 1 \end{bmatrix} \frac{\varepsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_5^S = -\mathbf{P}_{11}^S &= \begin{Bmatrix} +1 \\ +1 \\ 0 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_5^S = \boldsymbol{\varepsilon}_{11}^S &= \begin{bmatrix} 1 & \delta & 0 \\ \delta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \frac{\varepsilon_0}{2}, \\
 \mathbf{P}_6^S = -\mathbf{P}_{12}^S &= \begin{Bmatrix} +1 \\ -1 \\ 0 \end{Bmatrix} \frac{P_0}{\sqrt{2}}, & \boldsymbol{\varepsilon}_6^S = \boldsymbol{\varepsilon}_{12}^S &= \begin{bmatrix} 1 & -\delta & 0 \\ -\delta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \frac{\varepsilon_0}{2}.
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б. АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ТЕТРАГОНАЛЬНОГО МОНОКРИСТАЛЛА

Б.1. Механическое воздействие

Рассматривается одноосное механическое воздействие (растяжение, сжатие и циклическое нагружение) на тетрагональный монокристалл. Исследуется изменение деформаций при заданной истории нагружения.

При растяжении вдоль оси монокристалла $[001]$ тензор напряжения с единственной ненулевой, линейно изменяющейся во времени компонентой напряжения $\sigma_{[001][001]}$ задается соотношением

$$\sigma(t) = \sigma(t) \mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} = (\dot{\sigma}_0 t + \sigma_0) \mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]}, \quad (\text{Б.1})$$

где константы $\dot{\sigma}_0$ и σ_0 , характеризуют скорость нагружения и начальное напряженное состояние.

В качестве начальных условий концентраций доменов рассматриваются:

$$c_I(0) = \frac{1}{6}, I = 1 \dots 6. \quad (\text{Б.2})$$

При растяжении вдоль $[001]$ домены 1, 2, 4, 5 являются *донорами*, а домены 3 и 6 *акцепторами* (см. Рисунок А.1). При сжатии вдоль $[001]$ ситуация изменяется: домены 3 и 6 становятся *донорами*, а домены 1, 2, 4 и 5 *акцепторами*. В обоих случаях в силу симметрии справедливы равенства:

$$c_1 = c_2 = c_4 = c_5, \quad c_3 = c_6. \quad (\text{Б.3})$$

Таким образом, независимыми будут являться только 2 из 6 концентраций, например c_1 (концентрация доноров) и c_3 (концентрация акцепторов).

Из условия (2.11), являющегося следствием закона сохранения массы

$$\sum_{I=1}^6 c_I = 1, \quad (\text{Б.4})$$

и соотношений (Б.3) следует, что все концентрации доменов могут быть выражены при одноосном нагружении через *один* параметр

$$c_1 = \frac{1}{4}(1 - 2c_3) \quad (\text{Б.5})$$

или

$$c_3 = \frac{1}{2}(1 - 4c_1). \quad (\text{Б.6})$$

Остаточные деформации определяются суммированием вкладов от всех доменов с учетом их концентрации (2.16):

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = \sum_{I=1}^6 c_I \boldsymbol{\varepsilon}_I^S. \quad (\text{Б.7})$$

При одноосном нагружении вдоль [001] выражение (Б.7) с учетом (Б.3), (Б.5) и (Б.6) допускает представление:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = (1 - 6c_1)\boldsymbol{\varepsilon}_3^S = -\frac{1}{2}(1 - 6c_3)\boldsymbol{\varepsilon}_3^S. \quad (\text{Б.8})$$

Остаточная деформация определяется только $\boldsymbol{\varepsilon}_3^S$ и в состоянии насыщения:

$$\text{при растяжении } c_1 \rightarrow 0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^r \rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}_3^S, \quad (\text{Б.9})$$

$$\text{при сжатии } c_3 \rightarrow 0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^r \rightarrow -\frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}_3^S. \quad (\text{Б.10})$$

Скорости остаточных деформаций (2.23) могут быть представлены в виде:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r = \sum_{I=1}^6 \sum_{J=1}^6 \dot{c}^{J \rightarrow I} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{J \rightarrow I}^S. \quad (\text{Б.11})$$

где $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{J \rightarrow I}^S = \boldsymbol{\varepsilon}_I^S - \boldsymbol{\varepsilon}_J^S$.

При одноосном нагружении вдоль [001] выражение (Б.11) упрощается с учетом того, что все процессы переключения могут быть выражены через $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r = 12\dot{c}^{1 \rightarrow 3}\boldsymbol{\varepsilon}_3^S. \quad (\text{Б.12})$$

Скорости изменения концентрации $\dot{c}^1$ и $\dot{c}^3$ определяются через скорость переключения $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ при помощи равенства (2.21):

$$\dot{c}^3 = -2\dot{c}^1 = 4\dot{c}^{1 \rightarrow 3}. \quad (\text{Б.13})$$

Для формулировки уравнений эволюции $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$, которая в соответствии с (Б.13) эквивалентна уравнениям эволюции $\dot{c}^1$ и $\dot{c}^3$, необходимо знать выражение для тензора Шмида $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{1 \rightarrow 3}^S$ и движущей силы $G^{1 \rightarrow 3}$.

Тензор Шмида $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{1 \rightarrow 3}^S$ вычисляется на основе соотношений (А.2):

$$\begin{aligned} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{1 \rightarrow 3}^S &= \boldsymbol{\varepsilon}_3^S - \boldsymbol{\varepsilon}_1^S = \varepsilon_0 \left[\left(\mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} - \frac{1}{2} \mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[100]} - \frac{1}{2} \mathbf{e}_{[010]} \mathbf{e}_{[010]} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[100]} - \frac{1}{2} \mathbf{e}_{[010]} \mathbf{e}_{[010]} - \frac{1}{2} \mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} \right) \right] = \\ &= \frac{3}{2} \varepsilon_0 \left(\mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} - \mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[100]} \right). \end{aligned} \quad (\text{Б.14})$$

Движущая сила $G^{1 \rightarrow 3}$, сопряженная с $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$, определяется равенством (2.34):

$$G^{1 \rightarrow 3} = \boldsymbol{\sigma} \cdots \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{1 \rightarrow 3}^S = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} \cdots \frac{3}{2} \varepsilon_0 \left(\mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} - \mathbf{e}_{[100]} \mathbf{e}_{[100]} \right) = \frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma} \varepsilon_0. \quad (\text{Б.15})$$

Рассмотрим формулировки уравнений эволюции для концентрации и определяющие уравнения для трех вариантов модели материала:

- реономная с введением порога переключения (вязкопластическая);
- реономная без введения порога переключения (вязкоупругая);
- склерономная с введением порога переключения (упругопластическая).

Б.1.1 Реономная модель с порогом переключения

Для реономной модели сегнетоэлектроругого кристалла с порогом переключения (2.40), представляющей собой аналог вязкопластической модели, уравнения эволюции определяются выражениями:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c^{J \rightarrow I}} - 1 \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq G_c^{J \rightarrow I}; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < G_c^{J \rightarrow I}; \end{cases} \quad (\text{Б.16})$$

где индексы пробегают значения: $I = 1, \dots, 6; J = 1, \dots, 6$.

При интегрировании дифференциальных уравнений (Б.16) следует различать две ситуации:

- $\sigma > 0$ - растяжение (или восходящая ветвь гистерезиса);
- $\sigma < 0$ - сжатие (или нисходящая ветвь гистерезиса).

Отличие вызвано различным количеством доменов доноров и акцепторов.

При растяжении ($\sigma > 0$) донорами являются 4 домена с ориентацией c -оси, ортогональной действию нагрузки (1, 2, 4 и 5). В этом случае (Б.16) сводится к

$$\dot{c}^{1 \rightarrow 3} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{1 \rightarrow 3}}{G_c} - 1 \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & G^{1 \rightarrow 3} \geq G_c; \\ 0, & G^{1 \rightarrow 3} < G_c. \end{cases} \quad (\text{Б.17})$$

Во избежание громоздкости решения в дальнейшем ограничимся рассмотрением только 90° -переключений, предполагая, что 180° -переключение реализуется как последовательность двух 90° -переключений. При этом будем считать, что для всех систем 90° -переключений коэффициенты $B^{J \rightarrow I} = B$ и $G_c^{J \rightarrow I} = G_c$ одинаковы.

Окончательно уравнение эволюции (Б.16) с учетом выражения движущей силы $G^{1 \rightarrow 3}$ через напряжение σ (Б.15) и замены $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ на $\dot{c}_1$ на основе (Б.13) приводится к виду:

$$\dot{c}_1 = \begin{cases} -2B \left(\frac{\sigma}{\sigma_c} - 1 \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & \sigma \geq \sigma_c; \\ 0, & \sigma < \sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.18})$$

где введено обозначение

$$\sigma_c = \frac{2G_c}{3\varepsilon_0}. \quad (\text{Б.19})$$

При *пассивном нагружении* ($\sigma < \sigma_c$, $\dot{\sigma} > 0$) решение дифференциального уравнения (Б.18) тривиально $c_1 \equiv c_{10}$, где c_{10} - начальное значение c_1 ($c_1(0) = c_{10}$).

При *активном нагружении* ($\sigma \geq \sigma_c$, $\dot{\sigma} > 0$) решение дифференциального уравнения (Б.18) для произвольной истории нагружения $\sigma(t)$ допускает решение в квадратурах. Ограничимся для определенности случаем линейного изменения напряжений во времени $\sigma(t) = \dot{\sigma}_0 t + \sigma_c$, где $\dot{\sigma}_0 > 0$ - постоянная скорость нагружения. Общее решение обыкновенного дифференциального уравнения (Б.18) зависит от величины показателя функции насыщения m . Для наиболее интересных для практики случаев m решение имеет вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при растяжении)

$$c_1 = \frac{c_{10}}{\left[1 + \left(\frac{t}{\tau_m} \right)^{n+1} c_{10}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}} = \frac{c_{10}}{\left[1 + \left(\frac{\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} c_{10}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}}, \quad (\text{Б.20})$$

$$\tau_m = \left[\left(\frac{\sigma_c}{\dot{\sigma}_0} \right)^n \frac{C_0^m (n+1)}{2B(m-1)} \right]^{\frac{1}{n+1}}; \quad (\text{Б.21})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при растяжении)

$$c_1 = c_{10} e^{-\left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{n+1}} = c_{10} e^{-\left(\frac{\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.22})$$

$$\tau_1 = \left[\left(\frac{\sigma_c}{\dot{\sigma}_0} \right)^n \frac{C_0 (n+1)}{2B} \right]^{\frac{1}{n+1}}. \quad (\text{Б.23})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание c_1 с увеличением времени (ростом напряжений). Скорость убывания характеризуется введенными константами τ_m при $m > 1$ и τ_1 при $m = 1$, определяющими время насыщения.

На Рисунке Б.1 в качестве иллюстрации соотношений (Б.20) и (Б.22) представлены зависимости концентраций доменов доноров c_1 и акцепторов c_3 с ростом напряжения от 0 до 200 МПа при монотонном растяжении в течение 1 с. Параметры материала, использованные в расчетах, представлены в Таблице Б.1. В соответствии с (Б.19) напряжение, при котором начнется переключение, σ_c равняется 66,7 МПа. До достижения σ_c все концентрации 6 доменов остаются постоянными и равными 1/6. При превышении σ_c наблюдается исчерпание концентраций доноров до 0 и рост концентраций акцепторов до 1/2. Анализ показал, что с ростом параметра m замедляется скорость насыщения.

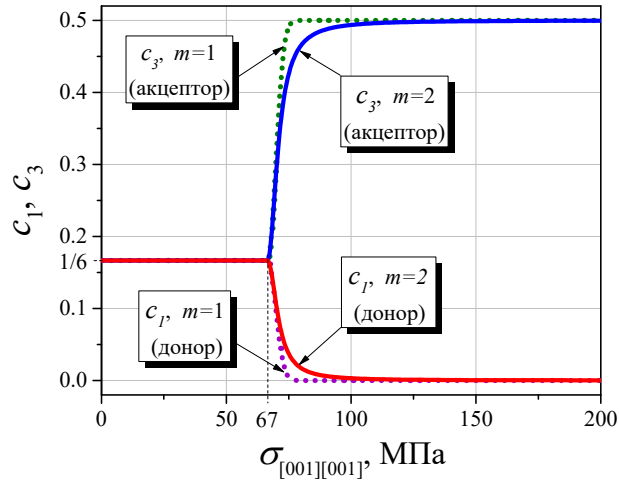


Рисунок Б.1 – Изменение концентраций доменов доноров c_1 и акцепторов c_3 с ростом напряжений при растяжении для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

Таблица Б.1 – Механические параметры реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

E	ГПа	93
ν	-	0,3
ε_0	%	0,5
G_c	Дж/м ³	500 000
B	1/с	100
n	-	1
m	-	1
C_0	-	1/6

Вязкие свойства в модели характеризуются параметром B . Этот параметр определяет характерное время насыщения τ_1 (Б.23) при $m = 1$ или τ_m (Б.21) при $m > 1$. τ_1 представляет собой время релаксации или время, за которое концентрация донора из начального состояния убывает в e раз (см. (Б.22)₁). Чистое время переключения τ_{switch} , которое может быть определено интегрированием (Б.18) для случая $m = 0$ из условия $c_1(\tau_{switch}) = 0$, оказывается много меньше времени насыщения $\tau_{switch} = \tau_1 / 6^{\frac{1}{n+1}}$. Для практики более интересен характерный диапазон напряжений, при котором происходит переключение и насыщение. Исходя из (Б.22)₂, он определяется произведением $\dot{\sigma}_0 \tau_1$, сопоставление которого с рассматриваемым диапазоном изменения нагрузки $\sigma_{max} - \sigma_c$ позволяет оценить возможность параметров модели для описания квазистатических процессов, не чувствительных (или слабочувствительных) к скорости

нагружения ($\dot{\sigma}_0 \tau_1 / (\sigma_{\max} - \sigma_c) \ll 1$). Следствием этого условия получается ограничение на параметр B , позволяющее описывать реономной моделью процессы, *слабочувствительные к скорости нагружения*:

$$B \gg \frac{\dot{\sigma}_0}{\sigma_c} K, \quad (\text{Б.24})$$

где коэффициент K близок к 1 и определяется выражением $K = \frac{C_0(n+1)}{2\left(\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_c} - 1\right)^{n+1}}$ для слу-

чая $m = 1$ и $K = \frac{C_0^m(n+1)}{2(m-1)\left(\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_c} - 1\right)^{n+1}}$ для случая $m > 1$. При $C_0 = 1/6$ и $\sigma_{\max} - \sigma_c \approx \sigma_c$ коэф-

фициенты принимают значения $K = \frac{(n+1)}{12}$ и $K = \frac{(n+1)}{2 \cdot 6^m(m-1)}$ соответственно.

При *растяжении* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{10} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.20)-(Б.23) в (Б.8):

- при $m > 1$ (степенное насыщение при растяжении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} 0, & 0 \leq \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left\{ 1 - \left[1 + \left(\frac{\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{6} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \sigma \geq \sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.25})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при растяжении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} 0, & 0 \leq \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - e^{-\left(\frac{\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}} \right], & \sigma \geq \sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.26})$$

В качестве иллюстрации полученных соотношений (Б.25) и (Б.26) на Рисунке Б.2 показаны зависимости осевой компоненты тензора напряжения $\sigma = \sigma_{[001][001]}$ от осевой компоненты тензора деформаций $\varepsilon = \varepsilon_{[001][001]}$ при растяжении (от 0 до 200 МПа за 1 с) для различных значений параметров m и n . Остальные параметры материала представлены в Таблице Б.1. С ростом параметра m замедляется скорость насыщения. При увеличении параметра n становится более заметным упрочнение материала. Остаточная деформация при насыщении стремится к значению ε_0 .

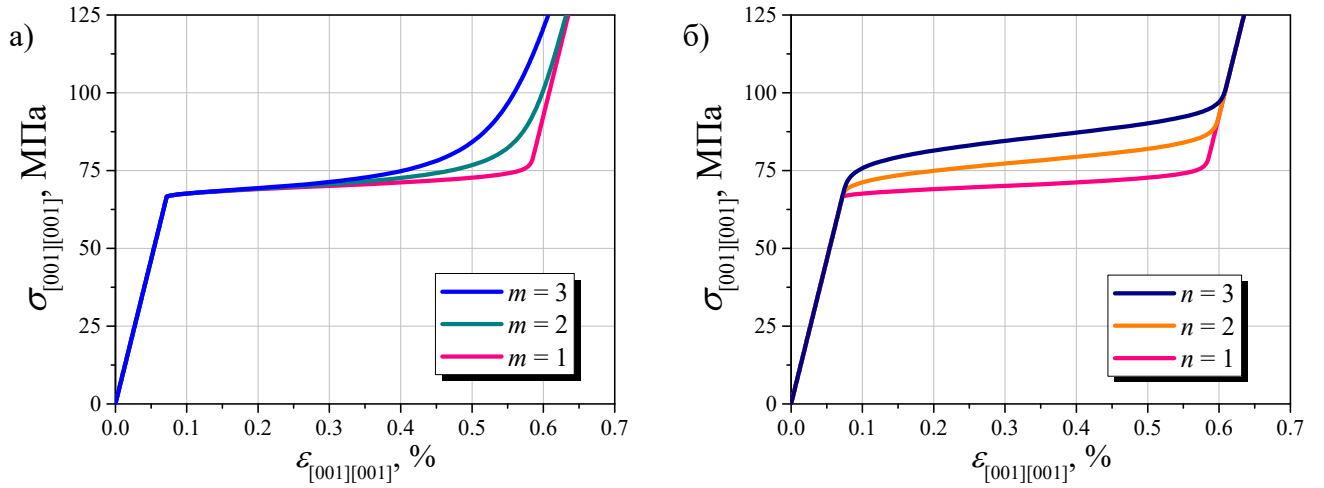


Рисунок Б.2 – Зависимость напряжения от деформации при растяжении для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра: а) m (для $n=1$) и б) n (для $m=1$)

Влияние параметра вязкости B на кривые деформирования показано на Рисунке Б.3. Видно, что с уменьшением вязкости процессы переключения и насыщения размываются. С ростом B кривая деформирования приближается к трилинейной зависимости, характерной для склерономных сегнетоэлектрорупругих материалов.

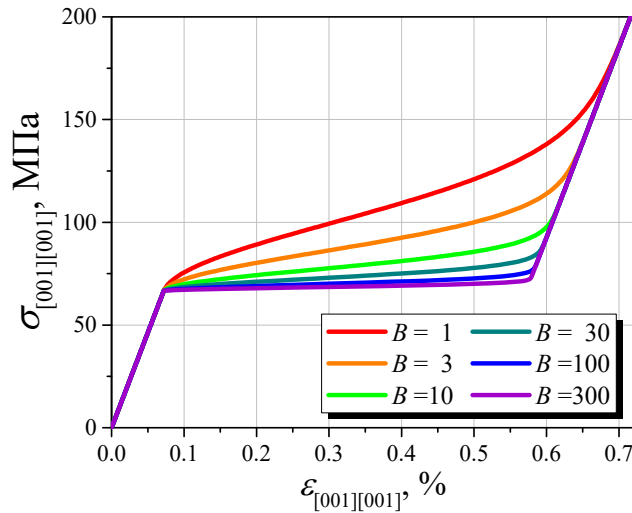


Рисунок Б.3 – Зависимость напряжения от деформации при растяжении для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра B

Визуальная оценка выполнения условия (Б.24) наблюдается, начиная с $B = 100 \text{ с}^{-1}$ (см. Рисунок Б.3), то есть при условии $B / \left(\frac{\dot{\sigma}_0}{\sigma_c} K \right) = 200$. Следует отметить, что идентичное семейство кривых получается при варьировании времени нагружения t при фиксированном B при соблюдении условия $Bt = 100$.

При сжатии ($\sigma < 0$) донорами являются 2 домена с ориентациями c -оси вдоль линии действия нагрузки (3 и 6). В этом случае все уравнения эволюции (Б.16) сводятся к единому представлению:

$$\dot{c}^{3 \rightarrow 1} = \begin{cases} B \left[\frac{G^{3 \rightarrow 1}}{G_c} - 1 \right]^n \left(\frac{c_3}{C_0} \right)^m, & G^{3 \rightarrow 1} \geq G_c; \\ 0, & G^{3 \rightarrow 1} < G_c. \end{cases} \quad (\text{Б.27})$$

Окончательно уравнение эволюции (Б.27) с учетом выражения движущей силы $G^{3 \rightarrow 1} = -G^{1 \rightarrow 3}$ через напряжение σ (Б.15) и замены $\dot{c}^{3 \rightarrow 1}$ на $\dot{c}_3$ на основе (Б.13) приводится к виду:

$$\dot{c}_3 = \begin{cases} -4B \left[-\frac{\sigma}{\sigma_c} - 1 \right]^n \left(\frac{c_3}{C_0} \right)^m, & \sigma \leq -\sigma_c; \\ 0, & \sigma > -\sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.28})$$

При *пассивном нагружении* ($\sigma > -\sigma_c, \dot{\sigma} < 0$) решение дифференциального уравнения (Б.28) тривиально $c_3 \equiv c_{30}$, где c_{30} - начальное значение c_3 ($c_3(0) = c_{30}$).

При *активном нагружении* ($\sigma \leq -\sigma_c, \dot{\sigma} < 0$) решение дифференциального уравнения (Б.28) для произвольной истории нагружения $\sigma(t)$ допускает решение в квадратурах. Для случая линейного изменения напряжений во времени при сжатии $\sigma(t) = -\dot{\sigma}_0 t - \sigma_c$ общее решение обыкновенного дифференциального уравнения (Б.28)₁ имеет вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$c_3 = \frac{c_{30}}{\left[1 + 2 \left(\frac{t}{\tau_m} \right)^{n+1} c_{30}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}} = \frac{c_{30}}{\left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} c_{30}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}}; \quad (\text{Б.29})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при сжатии)

$$c_3 = c_{30} e^{-2 \left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{n+1}} = c_{30} e^{-2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}}. \quad (\text{Б.30})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание c_3 с увеличением времени (уменьшением напряжений). Скорость убывания при сжатии, как и при растяжении, характеризуется константами τ_m (Б.21) и τ_1 (Б.23), определяющими время насыщения.

На Рисунке Б.4 в качестве иллюстрации соотношений (Б.29)-(Б.30) представлены зависимости концентраций доменов доноров c_3 и акцепторов c_1 при монотонном сжатии от 0 до -200 МПа в течение 1 с. В отличие от растяжения (см. Рисунок Б.1), при сжатии насыщение акцепторов происходит до уровня 1/4. При сжатии с ростом параметра m также замедляется скорость насыщения.

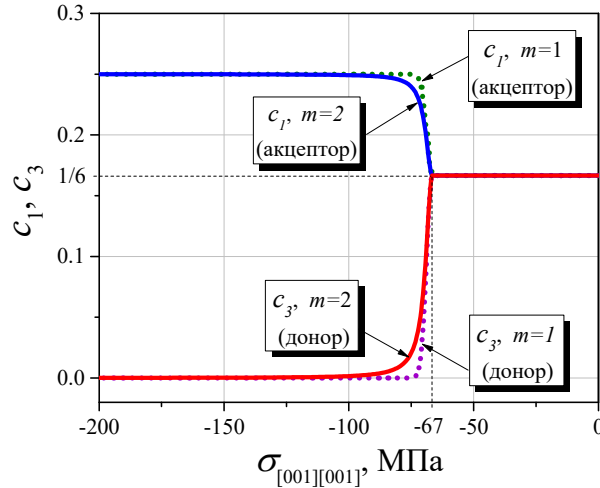


Рисунок Б.4 – Изменение концентраций доменов доноров c_3 и акцепторов c_1 с ростом напряжений при сжатии для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

При *сжатии* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{30} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.29)-(Б.30) в (Б.8) и записано в виде:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} - \begin{cases} 0, & -\sigma_c < \sigma \leq 0; \\ \frac{\varepsilon_0}{2} \left\{ 1 - \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{6} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \sigma \leq -\sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.31})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} - \begin{cases} 0, & -\sigma_c < \sigma \leq 0; \\ \frac{\varepsilon_0}{2} \left[1 - e^{-2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}} \right], & \sigma \leq -\sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.32})$$

При циклическом нагружении происходит поочередная смена доноров и акцепторов на полуциклах:

- на ниспадающей ветви гистерезиса (при сжатии, $\sigma < 0$) донорами являются домены с ориентацией c -оси вдоль линии действия нагрузки (3 и 6);
- на восходящей ветви гистерезиса (при растяжении, $\sigma > 0$) донорами являются домены с ориентацией c -оси, ортогональной нагрузке (1, 2, 4 и 5).

Концентрации доменов при циклическом нагружении могут быть найдены на основе ранее полученных результатов для концентраций при монотонном растяжении (Б.20)-(Б.23) и сжатии (Б.29)-(Б.30). Отличие от ранее рассмотренных случаев заключается только в выборе начальных значений c_{10} и c_{30} . Строгое решение задачи при циклическом нагружении имеет достаточно громоздкий вид, зависящий от всей

предыстории нагружения. Однако если ограничиться рассмотрением циклического нагружения с *глубоким насыщением* (при растяжении $e^{-\left(\frac{\sigma-\sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \ll 1$ и при сжатии $e^{-2\left(\frac{-\sigma-\sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \ll 1$), то решение значительно упрощается. В этом случае на ниспадающей ветви гистерезиса (при сжатии) $c_{30} = \frac{1}{2}$ (следует из решения на предшествующем полуцикле растяжения при наличии 2 доменов равноправных акцепторов), на восходящей ветви гистерезиса (при растяжении) $c_{10} = \frac{1}{4}$ (следует из решения на предшествующем полуцикле сжатия при наличии 4 доменов равноправных акцепторов).

С учетом введенных предположений определяющие уравнения, описывающие петлю гистерезиса при одноосном циклическом нагружении при изменении напряжений от $\sigma_{\min}$ ($\sigma_{\min} < -\sigma_c$) до $\sigma_{\max}$ ($\sigma_{\max} > \sigma_c$), имеют вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при циклическом нагружении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} \varepsilon_0, & \dot{\sigma} < 0, \quad -\sigma_c < \sigma < \sigma_{\max}; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2}\right) \left\{ 1 - 3 \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{2} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} < 0, \quad \sigma_{\min} \leq \sigma \leq -\sigma_c; \\ -\frac{\varepsilon_0}{2}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_{\min} < \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[1 + \left(\frac{\sigma - \sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{4} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_c \leq \sigma \leq \sigma_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.33})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при циклическом нагружении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} \varepsilon_0, & \dot{\sigma} < 0, \quad -\sigma_c < \sigma < \sigma_{\max}; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2}\right) \left[1 - 3e^{-2\left(\frac{-\sigma-\sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \right], & \dot{\sigma} < 0, \quad \sigma_{\min} \leq \sigma \leq -\sigma_c; \\ -\frac{\varepsilon_0}{2}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_{\min} < \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{3}{2} e^{-\left(\frac{\sigma-\sigma_c}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \right], & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_c \leq \sigma \leq \sigma_{\max}. \end{cases} \quad (\text{Б.34})$$

Первые две строки в (Б.33) и (Б.34) описывают ниспадающую ветвь гистерезиса ($\dot{\sigma} < 0$) (кривая ABC на Рисунке Б.5а). Последние две строки описывают восходящую ветвь гистерезиса ($\dot{\sigma} > 0$) (кривая CDA на Рисунке Б.5а). Первая строка соответствует обратимой линейной разгрузке без переключений (что возможно только при глубоком насыщении) (отрезок АВ на Рисунке Б.5а), вторая строка – накоплению отрицательной остаточной осевой деформации при сжатии (кривая ВС на Рисунке Б.5а), третья строка – обратимой линейной разгрузке без переключений

(что возможно только при глубоком насыщении) (отрезок CD на Рисунке Б.5а), четвертая строка – накоплению положительной остаточной осевой деформации при растяжении (кривая DA на Рисунке Б.5а).

В общем случае (при отказе от ограничения глубоким насыщением) уравнения для описания гистерезиса для реономной модели имеют более сложный вид, чем (Б.33) и (Б.34): петля аппроксимируется не 4 ($\sigma_{\max} \rightarrow -\sigma_c \rightarrow \sigma_{\min} \rightarrow \sigma_c \rightarrow \sigma_{\max}$), а 6 частями ($\sigma_{\max} \rightarrow \sigma_c \rightarrow -\sigma_c \rightarrow \sigma_{\min} \rightarrow -\sigma_c \rightarrow \sigma_c \rightarrow \sigma_{\max}$) с различными математическими выражениями на каждой из них, и остаточные деформации начинают зависеть от всей их предыстории в реверсных точках нагружения. Упрощенные формулировки (Б.33) и (Б.34) актуальны для описания квазистатических процессов, не чувствительных (или слабочувствительных) к скорости нагружения. Эффект насыщения, отличающий трансформационную пластичность от традиционной, приводит в ряде случаев к упрощению решения.

Гистерезисные кривые для реономной модели с порогом переключения, полученные на основе уравнений (Б.33) и (Б.34), показаны на Рисунке Б.5 для различных значений параметров m и n . Используемые в расчетах параметры материала представлены в Таблице Б.1. С ростом параметра m замедляется скорость насыщения. При увеличении параметра n становится более заметным упрочнение материала. Следует отметить несимметрию петель гистерезиса относительно оси ординат. Остаточная деформация при растяжении стремится к значению ε_0 , а при сжатии к значению $-\varepsilon_0 / 2$.

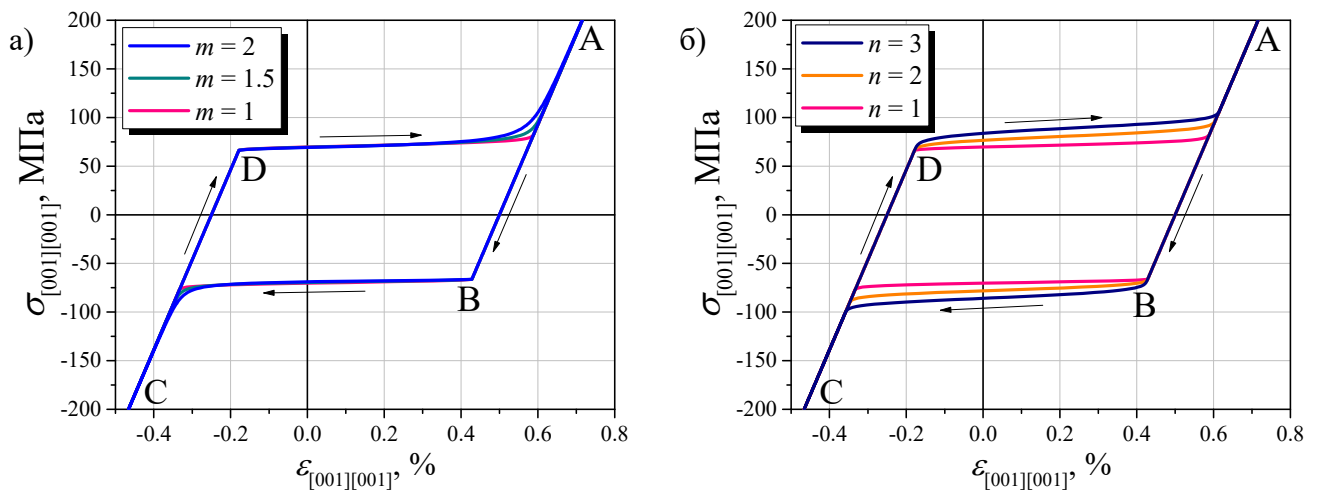


Рисунок Б.5 – Гистерезисные кривые для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра:
а) m (для $n = 1$) и б) n (для $m = 1$)

Гистерезисные кривые при циклическом нагружении с линейно возрастающей амплитудой напряжений от 0 до 290 МПа показаны на Рисунке Б.6. Рассматривалось 7 циклов нагружения с периодом цикла 4 с для каждого. При работе модели в реономном режиме при выборе параметра $B = 1 \text{ с}^{-1}$ наблюдается серия вложенных

петель гистерезиса (см. Рисунок Б.6а). Поведение модели меняется при переходе в склерономный режим при увеличении параметра вязкости до $B = 100 \text{ с}^{-1}$, удовлетворяющего условию (Б.24). В этом случае наблюдается единая стабилизированная петля гистерезиса (см. Рисунок Б.6б).

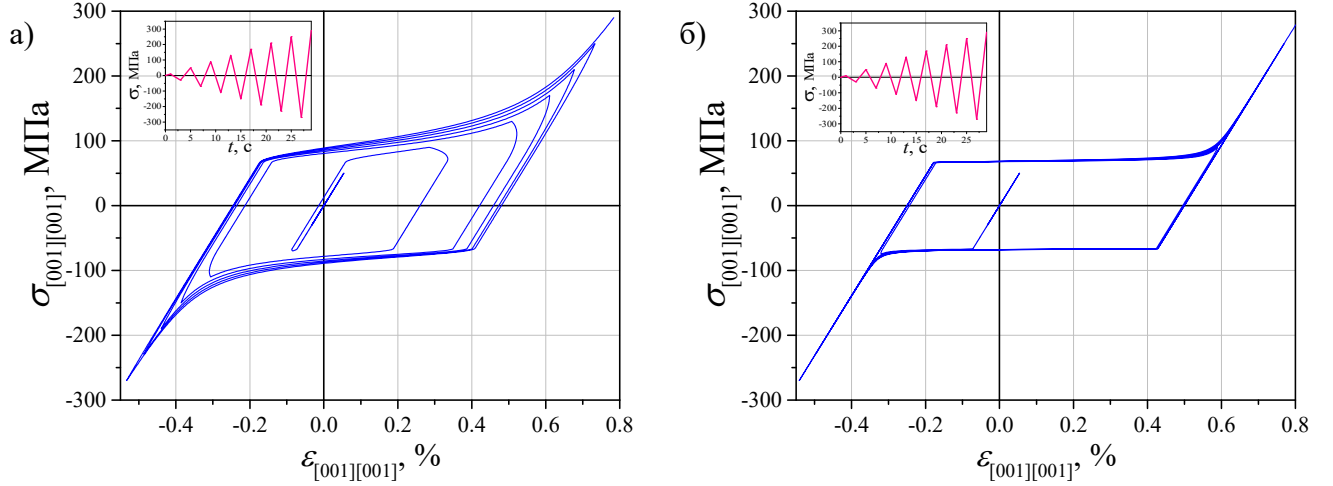


Рисунок Б.6 – Гистерезисные кривые при нагружении с линейно возрастающей амплитудой напряжений для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра вязкости: а) $B = 1 \text{ с}^{-1}$ и б) $B = 100 \text{ с}^{-1}$

Б.1.2 Реономная модель без порога переключения

Для реономной модели сегнетоэлектроругого кристалла без порога переключения (2.41), представляющей собой аналог вязкоупругой модели, уравнения эволюции определяются выражениями:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} B^{J \rightarrow I} \left(\frac{G^{J \rightarrow I}}{G_c} \right)^n \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq 0; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < 0; \end{cases} \quad (\text{Б.35})$$

где индексы пробегает значения: $I = 1, \dots, 6; J = 1, \dots, 6$.

При растяжении ($\sigma > 0$) донорами являются домены с ориентацией c -оси, ортогональной действию нагрузки (1, 2, 4 и 5). В этом случае (Б.35) сводится к

$$\dot{c}^{1 \rightarrow 3} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{1 \rightarrow 3}}{G_c} \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & G^{1 \rightarrow 3} \geq 0; \\ 0, & G^{1 \rightarrow 3} < 0. \end{cases} \quad (\text{Б.36})$$

Окончательно уравнение эволюции (Б.36) с учетом выражения движущей силы $G^{1 \rightarrow 3}$ через напряжение σ (Б.15) и замены $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ на $\dot{c}_1$ на основе (Б.13) приводится к виду:

$$\dot{c}_1 = \begin{cases} -2B \left(\frac{\sigma}{\sigma_c} \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & \sigma \geq 0; \\ 0, & \sigma < 0. \end{cases} \quad (\text{Б.37})$$

Дифференциальное уравнение (Б.37) для произвольной истории нагружения $\sigma(t)$ допускает решение в квадратурах. Для линейного изменения напряжений во времени $\sigma(t) = \dot{\sigma}_0 t$ общее решение обыкновенного дифференциального уравнения (Б.37)₁ с начальным условием $c_1(0) = c_{10}$ имеет вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при растяжении)

$$c_1 = \frac{c_{10}}{\left[1 + \left(\frac{t}{\tau_m} \right)^{n+1} c_{10}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}} = \frac{c_{10}}{\left[1 + \left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} c_{10}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}}. \quad (\text{Б.38})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при растяжении)

$$c_1 = c_{10} e^{-\left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{n+1}} = c_{10} e^{-\left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}}. \quad (\text{Б.39})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание c_1 с увеличением времени (ростом напряжений). Скорость убывания концентрации донора c_1 характеризуется константами τ_m (Б.21) при $m > 1$ и τ_1 (Б.23) при $m = 1$, определяющими время насыщения и совпадающими с аналогами в модели с порогом.

На Рисунке Б.7 в качестве иллюстрации соотношений (Б.38) и (Б.39) представлены зависимости концентраций доменов доноров c_1 и акцепторов c_3 с ростом напряжения от 0 до 200 МПа при монотонном растяжении в течение 1 с. Параметры материала, использованные в расчетах, представлены в Таблице Б.2. Значение параметра n в данной модели должно выбираться достаточно большим ($n \gg 1$). Совпадение с прогнозами модели с порогом достигается при $n \rightarrow \infty$. При значениях $n \geq 10$ зависимость изменения концентраций доменов от напряжений аналогична наблюдаемой в модели с порогом (см. Рисунок Б.2). Основное отличие заключается в отсутствии ярко выраженного начала переключений (отсутствие изломов у наблюдаемых кривых). Эффект влияния параметра m на процесс насыщения аналогичен у обеих моделей: при увеличении m скорость насыщения падает.

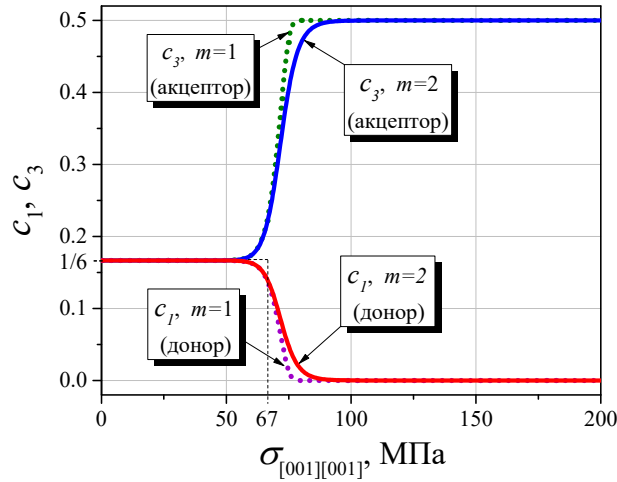


Рисунок Б.7 – Изменение концентраций доменов доноров c_I и акцепторов c_3 с ростом напряжений при растяжении для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения

Таблица Б.2 – Механические параметры реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения

E	ГПа	93
ν	-	0,3
ε_0	%	0,5
G_c	Дж/м ³	500 000
B	1/с	1
n	-	20
m	-	1
C_0	-	1/6

При *растяжении* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{I0} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.38)-(Б.39) в (Б.8):

- при $m > 1$ (степенное насыщение при растяжении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \varepsilon_0 \left\{ 1 - \left[1 + \left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{6} \right)^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}} \right\}; \quad (\text{Б.40})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при растяжении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \varepsilon_0 \left[1 - e^{-\left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}} \right]. \quad (\text{Б.41})$$

На Рисунке Б.8 показаны кривые деформирования при растяжении для различных значений параметров m и n , полученные на основе соотношений (Б.40) и (Б.41).

В качестве нагрузки задавались напряжения, изменяющиеся от 0 до 200 МПа за 1 с. И использованные в расчетах параметры материала указаны в Таблице Б.2. В отличие от модели материала с пределом переключений в рассматриваемом случае модели без предела переключений кривая деформирования описывается единым уравнением. Однако для описания поведения материалов, слабо чувствительных к скорости нагружения, требуется использование в расчетах достаточно большого значения параметра n ($n \gg 1$). Как видно из Рисунка Б.8б, с ростом параметра n на кривой деформирования становятся более резкими переходы к стадиям переключения и насыщения. При этом наклон кривой деформирования на стадии переключения убывает.

Следует отметить, что при больших n на кривых деформирования уровень напряжений, при котором наблюдается интенсивный процесс переключений (формируется близкий к горизонтальному участок), соответствует напряжению $\dot{\sigma}_0 \tau_m$ при $m > 1$ (или $\dot{\sigma}_0 \tau_1$ при $m = 1$), которое в общем случае отличается от σ_c , определяемого (Б.19). Это следует из анализа выражения (Б.40) при $m > 1$ (или (Б.41) при $m = 1$). Однако, пользуясь свойством $\lim_{x \rightarrow \infty} (ax)^{1/x} = 1$ для $a > 0$, можно показать, что

$$\dot{\sigma}_0 \tau_m = \dot{\sigma}_0 \left[\left(\frac{\sigma_c}{\dot{\sigma}_0} \right)^n \frac{C_0^m (n+1)}{2B(m-1)} \right]^{\frac{1}{n+1}} = \sigma_c \left[\frac{\dot{\sigma}_0 C_0^m}{2\sigma_c B(m-1)} (n+1) \right]^{\frac{1}{n+1}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sigma_c \text{ при } m > 1 \text{ и аналогично}$$

$$\dot{\sigma}_0 \tau_1 = \dot{\sigma}_0 \left[\left(\frac{\sigma_c}{\dot{\sigma}_0} \right)^n \frac{C_0 (n+1)}{2B} \right]^{\frac{1}{n+1}} = \sigma_c \left[\frac{\dot{\sigma}_0 C_0}{2\sigma_c B} (n+1) \right]^{\frac{1}{n+1}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sigma_c \text{ при } m = 1.$$

Таким образом, при больших n плато переключений близко к σ_c , однако при конечных n будет наблюдаться его некоторая зависимость от B и $\dot{\sigma}_0$.

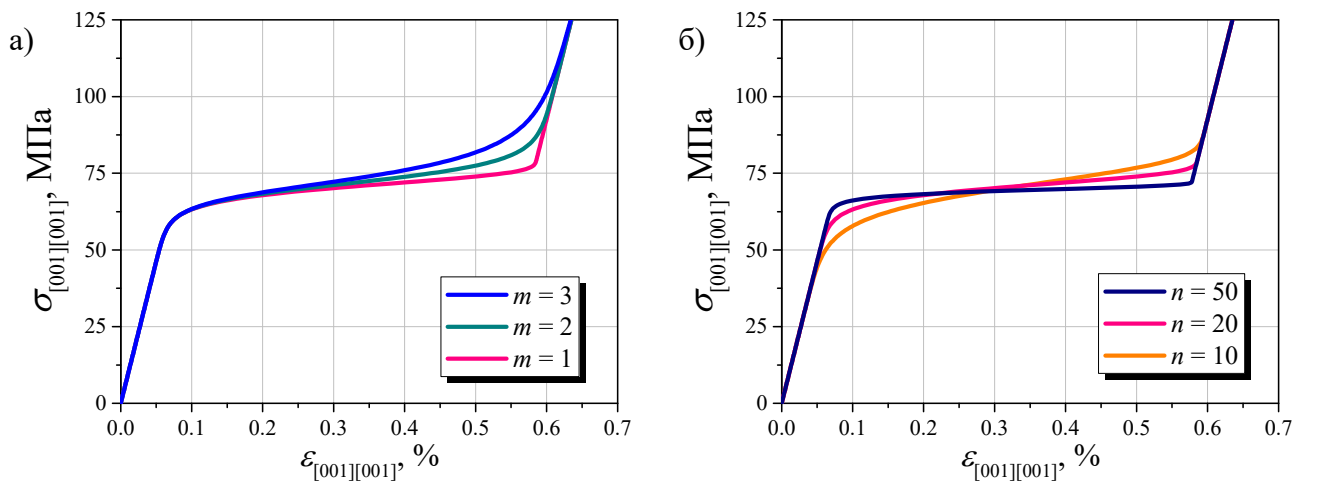


Рисунок Б.8 – Зависимость напряжения от деформации при растяжении для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения при различных значениях параметра: а) m (для $n = 20$) и б) n (для $m = 1$)

Влияние параметра B на кривые деформирования показано на Рисунке Б.9. С ростом параметра B , в отличие от модели с порогом переключения, для которой кривая деформирования приближается к трилинейной зависимости, кривая деформирования для модели без порога сохраняет подобие, демонстрируя понижение уровня переключений. Характер зависимости истинного предела переключений от B имеет вид $\dot{\sigma}_0 \tau_1 \propto \left(\frac{\sigma_c}{B^{1/n}} \right)^{\frac{n}{n+1}}$. Действительно, параметры B и σ_c в данной модели не имеет смысла рассматривать независимо, поскольку в уравнении эволюции (Б.37) параметр B может быть внесен под знак степени второго сомножителя и объединен с σ_c в виде комбинации $\frac{\sigma_c}{B^{1/n}}$, которая определяет истинный предел переключений. Следует отметить, что идентичное семейство кривых получается при варьировании времени нагружения t при фиксированном B при соблюдении условия $Bt = 1$.

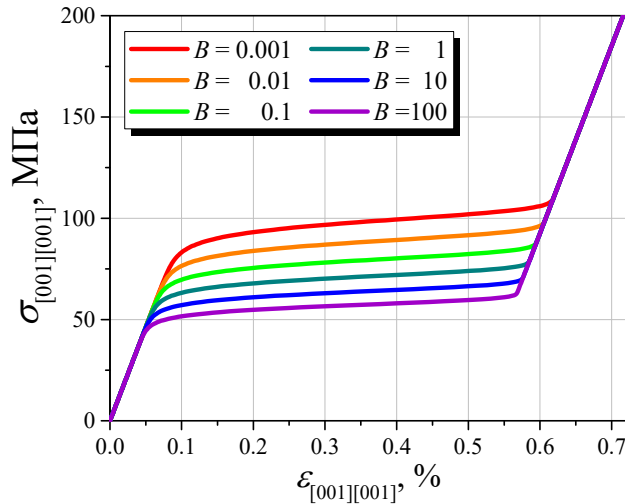


Рисунок Б.9 – Зависимость напряжения от деформации при растяжении для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения при различных значениях параметра B

При сжатии ($\sigma < 0$) донорами являются домены с ориентацией c -оси вдоль линии действия нагрузки (3 и 6). В этом случае (Б.35) сводится к

$$\dot{c}^{3 \rightarrow 1} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{3 \rightarrow 1}}{G_c} \right)^n \left(\frac{c_3}{C_0} \right)^m, & G^{3 \rightarrow 1} \geq 0; \\ 0, & G^{3 \rightarrow 1} < 0. \end{cases} \quad (\text{Б.42})$$

Окончательно уравнение эволюции (Б.42) с учетом выражения движущей силы $G^{3 \rightarrow 1} = -G^{1 \rightarrow 3}$ через напряжение σ (Б.15) и замены $\dot{c}^{3 \rightarrow 1}$ на $\dot{c}_3$ на основе (Б.13) приводится к виду:

$$\dot{c}_3 = \begin{cases} -4B \left(-\frac{\sigma}{\sigma_c} \right)^n \left(\frac{c_3}{C_0} \right)^m, & \sigma \leq 0; \\ 0, & \sigma > 0. \end{cases} \quad (\text{Б.43})$$

Дифференциальное уравнение (Б.43) для произвольной истории нагружения $\sigma(t)$ допускает решение в квадратурах. Для линейного изменения напряжений во времени при сжатии $\sigma(t) = -\dot{\sigma}_0 t$ общее решение дифференциального уравнения (Б.43)₁ с учетом с начального условия $c_3(0) = c_{30}$ имеет вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$c_3 = \frac{c_{30}}{\left[1 + 2 \left(\frac{t}{\tau_m} \right)^{n+1} c_{30}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}} = \frac{c_{30}}{\left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} c_{30}^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}}}; \quad (\text{Б.44})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при сжатии)

$$c_3 = c_{30} e^{-2 \left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{n+1}} = c_{30} e^{-2 \left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}}. \quad (\text{Б.45})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание c_3 с увеличением времени (уменьшением напряжений). Скорость убывания концентрации донора c_3 характеризуется константами τ_m (Б.23) при $m > 1$ и τ_1 (Б.25) при $m = 1$, определяющими время насыщения и совпадающими с аналогами в модели с порогом.

При *сжатии* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{30} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.44)-(Б.45) в (Б.8):

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} - \frac{\varepsilon_0}{2} \left\{ 1 - \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{6} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}; \quad (\text{Б.46})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} - \frac{\varepsilon_0}{2} \left[1 - e^{-2 \left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1} \right)^{n+1}} \right]. \quad (\text{Б.47})$$

При циклическом нагружении происходит поочередная смена доноров и акцепторов на полуциклах.

Концентрации доменов при циклическом нагружении могут быть найдены на основе ранее полученных результатов для концентраций при монотонном растяжении (Б.38)-(Б.39) и сжатии (Б.44)-(Б.45). Отличие от ранее рассмотренных случаев

заключается только в выборе начальных значений c_{10} и c_{30} . Строгое решение задачи при циклическом нагружении имеет достаточно громоздкий вид, зависящий от всей предыстории нагружения. Однако если ограничиться рассмотрением циклического нагружения с *глубоким насыщением* (при растяжении $e^{-\left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \ll 1$ и при сжатии $e^{-2\left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \ll 1$), то решение значительно упрощается. В этом случае на ниспадающей ветви гистерезиса (при сжатии) $c_{30} = \frac{1}{2}$ (следует из решения на предшествующем полупереме растяжения с 2 доменами равноправных акцепторов), на восходящей ветви гистерезиса (при растяжении) $c_{10} = \frac{1}{4}$ (следует из решения на предшествующем полупереме сжатия с 4 доменами равноправных доноров при растяжении).

С учетом введенных предположений определяющие уравнения, описывающие петлю гистерезиса при одноосном циклическом нагружении при изменении напряжений от $\sigma_{\min}$ ($\sigma_{\min} < 0$) до $\sigma_{\max}$ ($\sigma_{\max} > 0$), имеют вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при циклическом нагружении)
$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} \varepsilon_0, & \dot{\sigma} < 0, \quad 0 < \sigma < \sigma_{\max}; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2}\right) \left\{ 1 - 3 \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{2} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} < 0, \quad \sigma_{\min} \leq \sigma \leq 0; \\ -\frac{\varepsilon_0}{2}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_{\min} < \sigma < 0; \\ \varepsilon_0 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[1 + \left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_m} \right)^{n+1} \left(\frac{1}{4} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} > 0, \quad 0 \leq \sigma \leq \sigma_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.48})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при циклическом нагружении)
$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} \varepsilon_0, & \dot{\sigma} < 0, \quad 0 < \sigma < \sigma_{\max}; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2}\right) \left[1 - 3e^{-2\left(\frac{-\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \right], & \dot{\sigma} < 0, \quad \sigma_{\min} \leq \sigma \leq 0; \\ -\frac{\varepsilon_0}{2}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_{\min} < \sigma < 0; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{3}{2}e^{-\left(\frac{\sigma}{\dot{\sigma}_0 \tau_1}\right)^{n+1}} \right], & \dot{\sigma} > 0, \quad 0 \leq \sigma \leq \sigma_{\max}. \end{cases} \quad (\text{Б.49})$$

Первые две строки в (Б.48) и (Б.49) описывают ниспадающую ветвь гистерезиса ($\dot{\sigma} < 0$) (кривая ABC на Рисунке Б.10а). Последние две строки описывают восходящую ветвь гистерезиса ($\dot{\sigma} > 0$) (кривая CDA на Рисунке Б.10а). Первая строка соответствует

обратимой линейной разгрузке без переключений (что возможно только при глубоком насыщении, в противном случае будет происходить накопление остаточных деформаций, приводящее к нелинейной зависимости $\sigma(\varepsilon)$) (отрезок АВ на Рисунке Б.10а), вторая строка – накоплению отрицательной остаточной осевой деформации при сжатии (кривая ВС на Рисунке Б.10а), третья строка – обратимой линейной разгрузке без переключений (что возможно только при глубоком насыщении) (отрезок CD на Рисунке Б.10а), четвертая строка – накоплению положительной остаточной осевой деформации при растяжении (кривая DA на Рисунке Б.10а).

Гистерезисные кривые для реономной модели без порога переключения, полученные на основе уравнений (Б.48) и (Б.49), показаны на Рисунке Б.10. Используемые в расчетах параметры материала представлены в Таблице Б.2. С ростом параметра m замедляется скорость насыщения. При увеличении параметра n становится более заметным упрочнение материала. Следует отметить несимметрию петель гистерезиса относительно оси ординат. Остаточная деформация при растяжении стремится к значению ε_0 , а при сжатии к значению $-\varepsilon_0/2$.

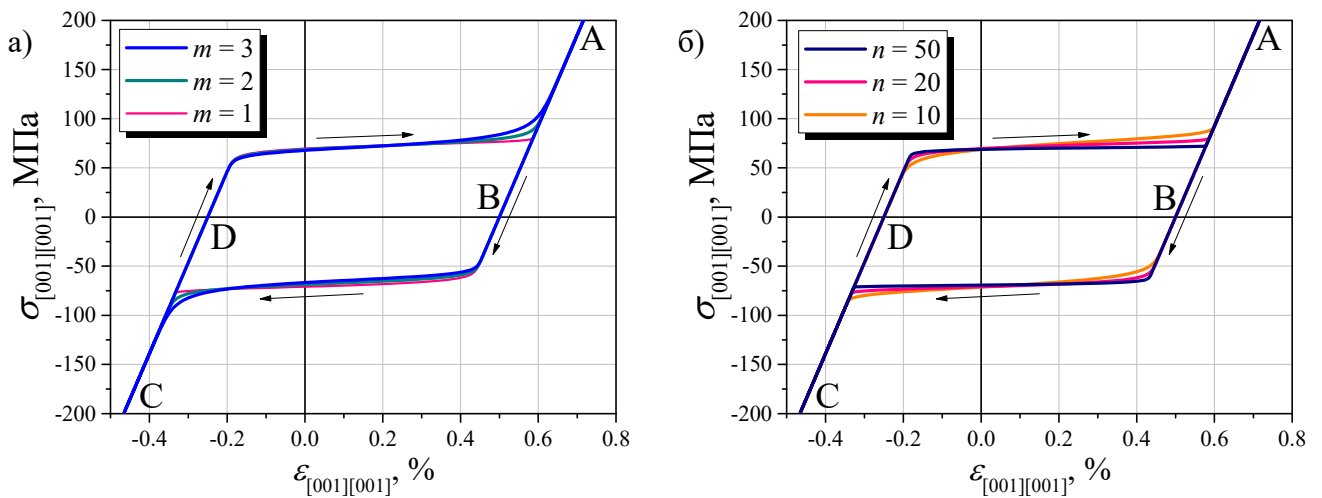


Рисунок Б.10 – Гистерезисные кривые для реономной модели тетрагонального кристалла без порога переключения при различных значениях параметра: а) m (для $n=20$) и б) n (для $m=1$)

Гистерезисные кривые при циклическом нагружении с линейно возрастающей амплитудой напряжений от 0 до 290 МПа показаны на Рисунке Б.11. Рассматривалось 7 циклов нагружения с периодом цикла 4 с для каждого. При работе модели в реономном режиме при выборе параметра $n=3$ наблюдается серия вложенных петель гистерезиса (см. Рисунок Б.11а). Поведение модели меняется при переходе в склерономный режим при увеличении показателя степени функции переключения до $n=20$. В этом случае наблюдается единая стабилизированная петля гистерезиса (см. Рисунок Б.11б).

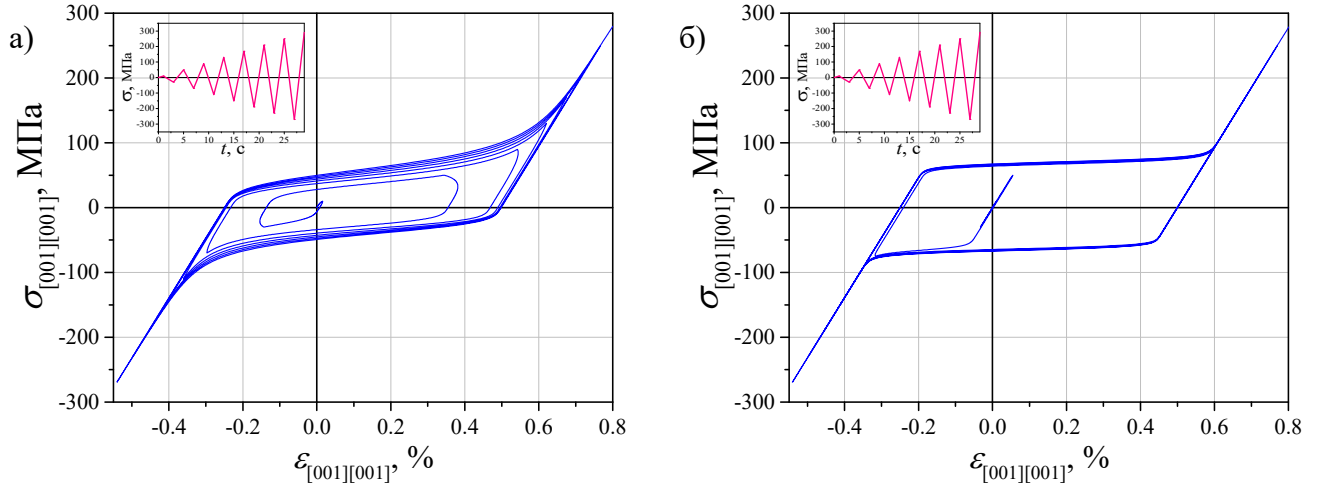


Рисунок Б.11 – Гистерезисные кривые при нагружении с линейно возрастающей амплитудой напряжений для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения при различных значениях показателя степени: а) $n = 3$ и б) $n = 20$

Б.1.3 Склерономная модель с порогом переключения

Для склерономной модели сегнетоэлектроупругого кристалла с порогом переключения (2.42), представляющей собой аналог упругопластической модели, уравнения эволюции определяются выражениями:

$$\dot{c}^{J \rightarrow I} = \begin{cases} \frac{1}{H^{J \rightarrow I}} \dot{G}^{J \rightarrow I} \left(\frac{c_J}{C_0} \right)^m, & G^{J \rightarrow I} \geq G_c^{J \rightarrow I}; \\ 0, & G^{J \rightarrow I} < G_c^{J \rightarrow I}; \end{cases} \quad (\text{Б.50})$$

где индексы пробегает значения: $I = 1, \dots, 6$; $J = 1, \dots, 6$.

При растяжении ($\sigma > 0$) донорами являются домены с ориентацией c -оси, ортогональной действию нагрузки (1, 2, 4 и 5), а акцепторами домены с ориентацией c -оси вдоль действия нагрузки (3 и 6). В этом случае (Б.50) сводится к

$$\dot{c}^{1 \rightarrow 3} = \begin{cases} \frac{1}{H} \dot{G}^{1 \rightarrow 3} \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & G^{1 \rightarrow 3} \geq G_c; \\ 0, & G^{1 \rightarrow 3} < G_c. \end{cases} \quad (\text{Б.51})$$

Окончательно уравнение эволюции (Б.51) с учетом выражения движущей силы $G^{1 \rightarrow 3}$ через напряжение σ (Б.15) и замены $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ на $\dot{c}_1$ на основе (Б.13) приводится к виду:

$$\dot{c}_1 = \begin{cases} -\frac{3}{H} \dot{\sigma} \varepsilon_0 \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & \sigma \geq \sigma_c; \\ 0, & \sigma < \sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.52})$$

Общее решение обыкновенного дифференциального уравнения (Б.52) с начальным условием $c_1(0) = c_{10}$ имеет вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при растяжении)

$$c_1 = \begin{cases} c_{10} \left[1 + \left(\frac{\sigma - \sigma_c}{H_m} \right) c_{10}^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}}, & \sigma \geq \sigma_c; \\ c_{10}, & \sigma < \sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.53})$$

$$H_m = \frac{HC_0^m}{3(m-1)\varepsilon_0}; \quad (\text{Б.54})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при растяжении)

$$c_1 = \begin{cases} c_{10} e^{-\left(\frac{\sigma - \sigma_c}{H_1}\right)}, & \sigma \geq \sigma_c; \\ c_{10}, & \sigma < \sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.55})$$

$$H_1 = \frac{HC_0}{3\varepsilon_0}. \quad (\text{Б.56})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание c_1 с ростом напряжений. Наклон кривых $c_1(\sigma)$ в начале переключений равен со знаком минус введенным константам H_m и H_1 . Склерономный характер решений (Б.53) и (Б.55) проявляется в независимости решения от скорости нагружения.

На Рисунке Б.12 в качестве иллюстрации соотношений (Б.53) и (Б.55) представлены зависимости концентраций доменов доноров c_1 и акцепторов c_3 (связанных с c_1 соотношением (Б.6)) от напряжений при монотонном растяжении. Параметры материала, использованные в расчетах, представлены в Таблице Б.3. В соответствии с (Б.19) напряжение, при котором начнется переключение, σ_c равняется 66,7 МПа. В интервале от 0 до σ_c все концентрации б доменов остаются постоянными и равными 1/6. При превышении σ_c наблюдается уменьшение концентраций доноров до 0 и рост концентраций акцепторов до 1/2. Анализ показал, что с ростом параметра m замедляется скорость насыщения.

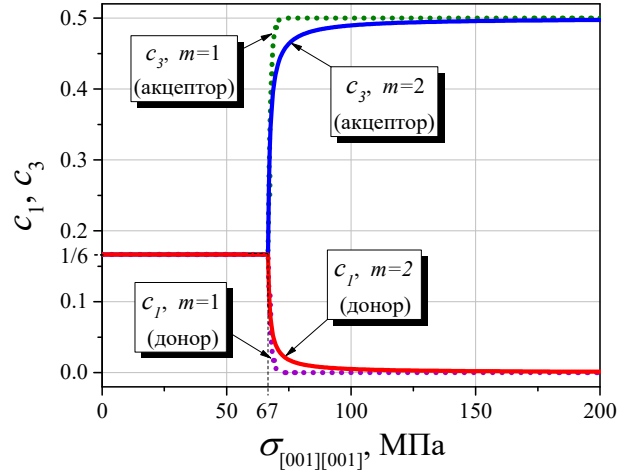


Рисунок Б.12 – Изменение концентраций доменов доноров c_1 и акцепторов c_3 с ростом напряжений при растяжении для склерономной модели тетрагонального монокристалла

Таблица Б.3 – Механические параметры склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

E	ГПа	93
ν	-	0,3
ε_0	%	0,5
G_c	Дж/м ³	500 000
H	МПа	100 000
m	-	1
C_0	-	1/6

При *растяжении* из натурального состояния в условиях начального равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{I0} = \frac{1}{6}$, $I=1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.53)-(Б.56) в (Б.8):

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} 0, & 0 \leq \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left\{ 1 - \left[1 + \left(\frac{\sigma - \sigma_c}{H_m} \right) \left(\frac{1}{6} \right)^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}} \right\}, & \sigma \geq \sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.57})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при растяжении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} 0, & 0 \leq \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - e^{-\left(\frac{\sigma - \sigma_c}{H_1} \right)} \right], & \sigma \geq \sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.58})$$

В качестве иллюстрации полученных соотношений (Б.57) и (Б.58) на Рисунке Б.13 показаны зависимости напряжения от деформации при растяжении для различных значений параметров m и H . С ростом параметра m замедляется скорость

насыщения. Остаточная деформация при насыщении стремится к значению ε_0 . При увеличении параметра H становится более заметным упрочнение материала.

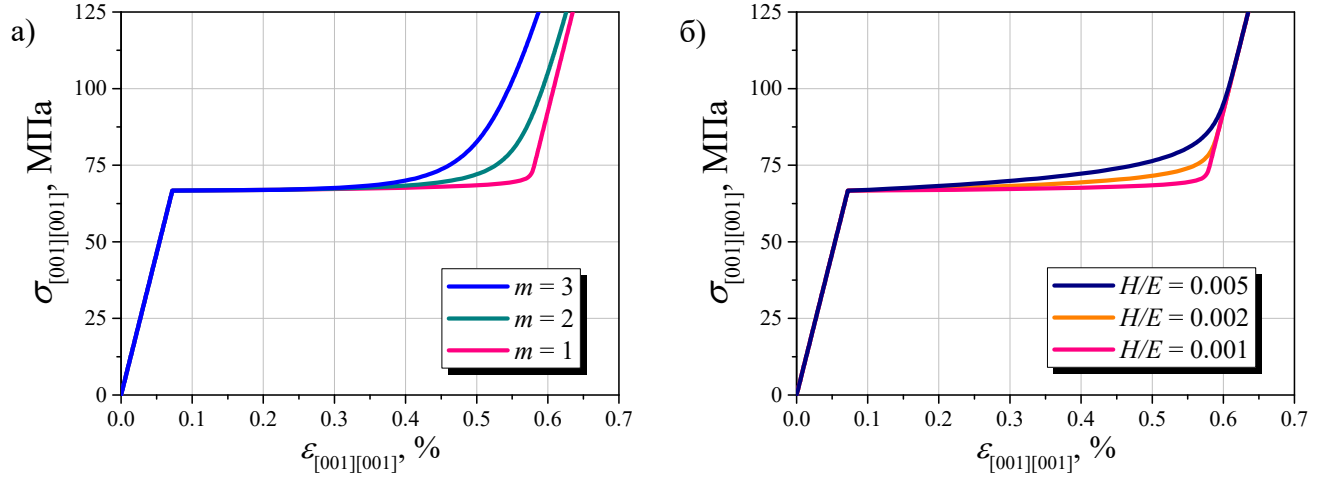


Рисунок Б.13 – Зависимость напряжения от деформации при растяжении для склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра: а) m (для $H/E=0.001$) и б) H (для $m=1$)

При сжатии ($\sigma < 0$) донорами являются домены с ориентацией c -оси вдоль линии действия нагрузки (3 и 6). В этом случае все уравнения эволюции (Б.50) сводятся к единому представлению:

$$\dot{c}^{3 \rightarrow 1} = \begin{cases} \frac{1}{H} \dot{G}^{3 \rightarrow 1} \left(\frac{c_3}{C_0} \right)^m, & G^{3 \rightarrow 1} \geq G_c; \\ 0, & G^{3 \rightarrow 1} < G_c. \end{cases} \quad (\text{Б.59})$$

Окончательно уравнение эволюции (Б.59) с учетом выражения движущей силы $G^{3 \rightarrow 1} = -G^{1 \rightarrow 3}$ через напряжение σ (Б.15) и замены $\dot{c}^{3 \rightarrow 1}$ на $\dot{c}_3$ на основе (Б.13) приводится к виду:

$$\dot{c}_3 = \begin{cases} -\frac{6}{H} \dot{\sigma} \varepsilon_0 \left(\frac{c_3}{C_0} \right)^m, & \sigma \leq -\sigma_c; \\ 0, & \sigma > -\sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.60})$$

Общее решение обыкновенного дифференциального уравнения (Б.60) с начальным условием $c_3(0) = c_{30}$ имеет вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$c_3 = \begin{cases} c_{30} \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{H_m} \right) c_{30}^{m-1} \right]^{-\frac{1}{m-1}}, & \sigma \leq -\sigma_c; \\ c_{30}, & \sigma > -\sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.61})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при сжатии)

$$c_3 = \begin{cases} c_{30} e^{-2\left(\frac{-\sigma-\sigma_c}{H_1}\right)}, & \sigma \leq -\sigma_c; \\ c_{30}, & \sigma > -\sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.62})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание c_3 с уменьшением напряжений. Константы H_m и H_1 при сжатии оказались совпадающими с аналогами при растяжении (см. (Б.54) и (Б.56)).

При *сжатии* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{30} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.61)-(Б.62) в (Б.8):

- при $m > 1$ (степенное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} - \begin{cases} 0, & -\sigma_c < \sigma \leq 0; \\ \frac{\varepsilon_0}{2} \left\{ 1 - \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma-\sigma_c}{H_m} \right) \left(\frac{1}{6} \right)^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}} \right\}, & \sigma \leq -\sigma_c; \end{cases} \quad (\text{Б.63})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при сжатии)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} - \begin{cases} 0, & -\sigma_c < \sigma \leq 0; \\ \frac{\varepsilon_0}{2} \left[1 - e^{-2\left(\frac{-\sigma-\sigma_c}{H_1}\right)} \right], & \sigma \leq -\sigma_c. \end{cases} \quad (\text{Б.64})$$

При циклическом нагружении происходит поочередная смена доноров и акцепторов на полуциклах.

Концентрации доменов при циклическом нагружении могут быть найдены на основе ранее полученных результатов для концентраций при монотонном растяжении (Б.53)-(Б.56) и сжатии (Б.61)-(Б.62). Отличие от ранее рассмотренных случаев растяжения и сжатия заключается только в выборе начальных значений c_{10} и c_{30} . Строгое решение задачи при циклическом нагружении имеет достаточно громоздкий вид, зависящий от всей предыстории нагружения. Однако если ограничиться рассмотрением циклического нагружения с *глубоким насыщением* (для $m = 1$ при растяжении $e^{-\left(\frac{\sigma-\sigma_c}{H_1}\right)} \ll 1$ и при сжатии $e^{-2\left(\frac{-\sigma-\sigma_c}{H_1}\right)} \ll 1$), то решение значительно упрощается. В этом случае на ниспадающей ветви гистерезиса (при сжатии) $c_{30} = \frac{1}{2}$, на восходящей ветви гистерезиса (при растяжении) $c_{10} = \frac{1}{4}$.

С учетом введенных предположений определяющие уравнения, описывающие петлю гистерезиса при одноосном циклическом нагружении при изменении напряжений от $\sigma_{\min}$ ($\sigma_{\min} < -\sigma_c$) до $\sigma_{\max}$ ($\sigma_{\max} > \sigma_c$), имеют вид:

- при $m > 1$ (степенное насыщение при циклическом нагружении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} \varepsilon_0 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[1 + \left(\frac{\sigma_{\max} - \sigma_c}{H_m} \right) \left(\frac{1}{4} \right)^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} < 0, \quad -\sigma_c < \sigma < \sigma_{\max}; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2} \right) \left\{ 1 - 3 \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{H_m} \right) \left(\frac{1}{2} \right)^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} < 0, \quad \sigma_{\min} \leq \sigma \leq -\sigma_c; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2} \right) \left\{ 1 - 3 \left[1 + 2 \left(\frac{-\sigma_{\min} - \sigma_c}{H_m} \right) \left(\frac{1}{2} \right)^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_{\min} < \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[1 + \left(\frac{\sigma - \sigma_c}{H_m} \right) \left(\frac{1}{4} \right)^{m-1} \right]^{\frac{1}{m-1}} \right\}, & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_c \leq \sigma \leq \sigma_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.65})$$

- при $m = 1$ (линейное насыщение при циклическом нагружении)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \begin{cases} \varepsilon_0 \left[1 - \frac{3}{2} e^{-\left(\frac{\sigma_{\max} - \sigma_c}{H_1} \right)} \right], & \dot{\sigma} < 0, \quad -\sigma_c < \sigma < \sigma_{\max}; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2} \right) \left[1 - 3 e^{-2 \left(\frac{-\sigma - \sigma_c}{H_1} \right)} \right], & \dot{\sigma} < 0, \quad \sigma_{\min} \leq \sigma \leq -\sigma_c; \\ \left(-\frac{\varepsilon_0}{2} \right) \left[1 - 3 e^{-2 \left(\frac{-\sigma_{\min} - \sigma_c}{H_1} \right)} \right], & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_{\min} < \sigma < \sigma_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{3}{2} e^{-\left(\frac{\sigma - \sigma_c}{H_1} \right)} \right], & \dot{\sigma} > 0, \quad \sigma_c \leq \sigma \leq \sigma_{\max}. \end{cases} \quad (\text{Б.66})$$

Первые две строки в (Б.65) и (Б.66) описывают ниспадающую ветвь гистерезиса ($\dot{\sigma} < 0$) (кривая ABC на Рисунке Б.14а). Последние две строки описывают восходящую ветвь гистерезиса ($\dot{\sigma} > 0$) (кривая CDA на Рисунке Б.14а). Первая строка соответствует обратимой линейной разгрузке без переключений (отрезок AB на Рисунке Б.14а), вторая строка – накоплению отрицательной остаточной осевой деформации при сжатии (кривая BC на Рисунке Б.14а), третья строка – обратимой линейной нагрузке без переключений (отрезок CD на Рисунке Б.14а), четвертая строка – накоплению положительной остаточной деформации при растяжении (кривая DA на Рисунке Б.14а).

Гистерезисные кривые при симметричном нагружении в пределах от -200 МПа до +200 МПа для склерономной модели с порогом переключения, полученные на основе уравнений (Б.65) и (Б.66), показаны на Рисунке Б.14 для различных значений параметров m и H . Используемые в расчетах параметры материала представлены в Таблице Б.3. С ростом параметра m замедляется скорость насыщения. При увеличении параметра H становится более заметным упрочнение материала. Следует отметить несимметрию петель гистерезиса относительно оси ординат. Остаточная деформация при растяжении стремятся к значению ε_0 , а при сжатии к значению $-\varepsilon_0/2$.

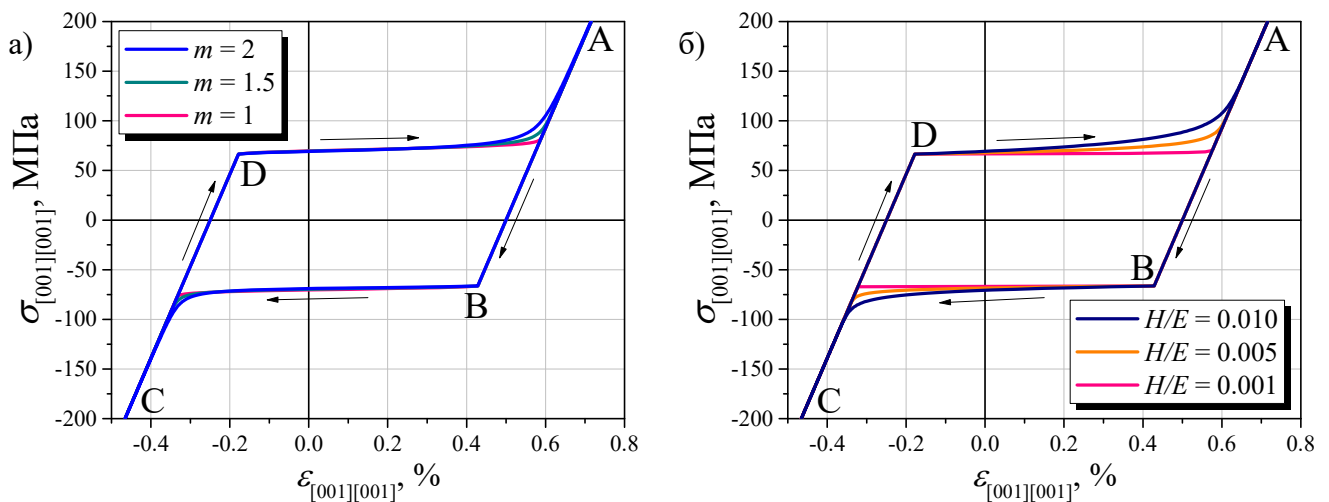


Рисунок Б.14 – Гистерезисные кривые для склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра:
а) m (для $H/E = 0,001$) и б) H (для $m = 1$)

Сравнение гистерезисных кривых для трех рассмотренных выше моделей: реономной с пределом переключений (Б.34), реономной без предела (Б.49) и склерономной модели (Б.66) показано на Рисунке Б.15. Наблюдается хорошее совпадение результатов при выборе значений параметров моделей из Таблиц Б.1-Б.3. Полученный результат указывает на эквивалентность рассматриваемых математических моделей сегнетоэлектростатического материала при описании механического гистерезиса при одноосном квазистатическом нагружении (для процессов, слабчувствительных к скорости нагружения).

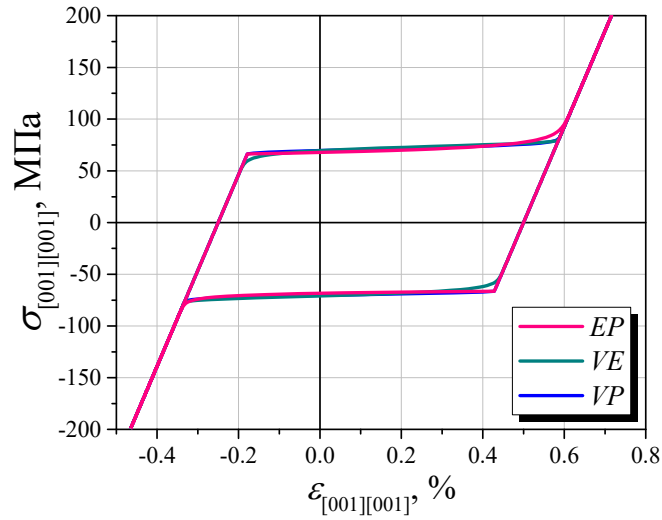


Рисунок Б.15 – Сравнение гистерезисных кривых: для реономной модели с пределом переключений (VP), реономной без предела (VE) и склерономной модели (EP)

Б.2. Электрическое воздействие

Рассматривается электрическое воздействие (монотонное и циклическое нагружение) на тетрагональный монокристалл. Исследуется кинетика доменной структуры, изменение вектора электрической индукции (электрического смещения) при заданной истории изменения вектора напряженности электрического поля.

Предполагается, что вектор напряженности электрического поля направлен вдоль оси монокристалла $[001]$ и изменяется линейно во времени:

$$\mathbf{E}(t) = E(t)\mathbf{e}_{[001]} = (\dot{E}_0 t + E_0)\mathbf{e}_{[001]}, \quad (\text{Б.67})$$

где константы $\dot{E}_0$ и E_0 характеризуют скорость нагружения и начальное состояние.

При воздействии электрическим полем вдоль $[001]$ домен 6 (с противоположным направлением ориентации) является *донором* для доменов 1, 2, 4, 5, которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 3, который является единственным финальным *акцептором* (см. Рисунок А.1). При изменении направления электрического поля на противоположное роли доменов 3 и 6 меняются. В обоих случаях в силу симметрии справедливы равенства:

$$c_1 = c_2 = c_4 = c_5. \quad (\text{Б.68})$$

Таким образом, независимыми будут являться только 3 из 6 концентраций, например, c_1 (концентрация доноров, поляризованных ортогонально полю), c_6 (концентрация донора, поляризованного противоположно полю) и c_3 (концентрация акцептора, поляризованного сонаправленно с электрическим полем).

Из условия (Б.4) с учетом (Б.68) следует

$$4c_1 + c_3 + c_6 = 1. \quad (\text{Б.69})$$

Тензор остаточной деформации ϵ^r и вектор остаточной поляризации $\mathbf{P}^r$ определяются суммированием вкладов от всех доменов с учетом их концентрации в общем случае на основе уравнений (2.16) и (2.17). При действии электрического поля вдоль оси [001] получаются упрощенные представления только через спонтанную деформацию акцептора ϵ_3^S и спонтанную поляризацию акцептора $\mathbf{P}_3^S$:

$$\epsilon^r = (1 - 6c_1)\epsilon_3^S, \quad (\text{Б.70})$$

$$\mathbf{P}^r = (c_3 - c_6)\mathbf{P}_3^S. \quad (\text{Б.71})$$

В состоянии насыщения справедливы следующие предельные значения:

$$\text{при: } E > 0: \quad c_1 \rightarrow 0, c_3 \rightarrow 1, c_6 \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \mathbf{P}^r \rightarrow \mathbf{P}_3^S, \epsilon^r \rightarrow \epsilon_3^S, \quad (\text{Б.72})$$

$$\text{при: } E < 0: \quad c_1 \rightarrow 0, c_3 \rightarrow 0, c_6 \rightarrow 1 \quad \text{и} \quad \mathbf{P}^r \rightarrow -\mathbf{P}_3^S, \epsilon^r \rightarrow \epsilon_3^S. \quad (\text{Б.73})$$

При воздействии электрического поля вдоль оси [001] ($E > 0$) тензор скорости остаточных деформаций $\dot{\epsilon}^r$ и вектор скорости остаточной поляризации $\dot{\mathbf{P}}^r$, вычисленные на основе (2.23) и (2.24), допускают упрощенные представления:

$$\dot{\epsilon}^r = 6(\dot{c}^{1 \rightarrow 3} - \dot{c}^{6 \rightarrow 1})\epsilon_3^S, \quad (\text{Б.74})$$

$$\dot{\mathbf{P}}^r = 4(\dot{c}^{1 \rightarrow 3} + \dot{c}^{6 \rightarrow 1})\mathbf{P}_3^S. \quad (\text{Б.75})$$

Скорости изменения концентрации $\dot{c}^3$ и $\dot{c}^6$ определяются через скорости переключения $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ и $\dot{c}^{6 \rightarrow 1}$ при помощи равенства (2.21):

$$\dot{c}^3 = 4\dot{c}^{1 \rightarrow 3}, \quad (\text{Б.76})$$

$$\dot{c}^6 = -4\dot{c}^{6 \rightarrow 1}, \quad (\text{Б.77})$$

$$\dot{c}^1 = \dot{c}^{6 \rightarrow 1} - \dot{c}^{1 \rightarrow 3}. \quad (\text{Б.78})$$

В качестве начальных условий концентраций доменов рассматриваются:

$$c_I(0) = \frac{1}{6}, I = 1 \dots 6. \quad (\text{Б.79})$$

Векторы Шмида $\Delta \mathbf{P}_{1 \rightarrow 3}^S$ и $\Delta \mathbf{P}_{6 \rightarrow 1}^S$ вычисляются на основе соотношений (А.1):

$$\Delta \mathbf{P}_{1 \rightarrow 3}^S = \mathbf{P}_3^S - \mathbf{P}_1^S = P_0 (\mathbf{e}_{[001]} - \mathbf{e}_{[100]}), \quad (\text{Б.80})$$

$$\Delta \mathbf{P}_{6 \rightarrow 1}^S = \mathbf{P}_1^S - \mathbf{P}_6^S = P_0 (\mathbf{e}_{[001]} + \mathbf{e}_{[100]}).$$

Движущие силы $G^{1 \rightarrow 3}$ и $G^{6 \rightarrow 1}$, сопряженные с $c^{1 \rightarrow 3}$ и $c^{6 \rightarrow 1}$, определяются на основе (2.34) и при электрическом воздействии вдоль [001] имеют простую форму представления:

$$G^{1 \rightarrow 3} = \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{P}_{1 \rightarrow 3}^S = E \mathbf{e}_{[001]} \cdot P_0 (\mathbf{e}_{[001]} - \mathbf{e}_{[100]}) = EP_0, \quad (\text{Б.81})$$

$$G^{6 \rightarrow 1} = \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{P}_{6 \rightarrow 1}^S = E \mathbf{e}_{[001]} \cdot P_0 (\mathbf{e}_{[001]} + \mathbf{e}_{[100]}) = EP_0.$$

Рассмотрим формулировки уравнений эволюции для концентраций и определяющие уравнения для трех вариантов модели материала:

- реономная с введением порога переключения (вязкопластическая);
- реономная без введения порога переключения (вязкоупругая);
- склерономная с введением порога переключения (упругопластическая).

Б.2.1 Реономная модель с порогом переключения

Для реономной модели сегнетоэлектрорупругого кристалла с порогом переключения, представляющей собой аналог вязкопластической модели, уравнения эволюции определяются выражениями (Б.16).

В случае $E > 0$ при воздействии электрическим полем вдоль оси [001] домен 6 является *донором* для 4х доменов 1, 2, 4 и 5 с ориентациями c -оси, ортогональной действию нагрузки, которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 3, который является единственным финальным *акцептором* с ориентацией c -оси вдоль действия поля (см. Рисунок А.1). В этом случае (Б.16) сводится к двум независимым уравнениям

$$\dot{c}^{1 \rightarrow 3} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{1 \rightarrow 3}}{G_c} - 1 \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & G^{1 \rightarrow 3} \geq G_c; \\ 0, & G^{1 \rightarrow 3} < G_c; \end{cases} \quad (\text{Б.82})$$

$$\dot{c}^{6 \rightarrow 1} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{6 \rightarrow 1}}{G_c} - 1 \right)^n \left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m, & G^{6 \rightarrow 1} \geq G_c; \\ 0, & G^{6 \rightarrow 1} < G_c. \end{cases} \quad (\text{Б.83})$$

Полученные уравнения могут быть преобразованы путем выражения движущих сил $G^{1 \rightarrow 3}$ и $G^{6 \rightarrow 1}$ через EP_0 (Б.81) и замены $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ и $\dot{c}^{6 \rightarrow 1}$ на $\dot{c}_1$ и $\dot{c}_6$ на основе (Б.13) к виду:

$$\dot{c}_1 = \begin{cases} B \left(\frac{E}{E_c} - 1 \right)^n \left[\left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m - \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m \right], & E \geq E_c; \\ 0, & E < E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.84})$$

$$\dot{c}_6 = \begin{cases} -4B \left(\frac{E}{E_c} - 1 \right)^n \left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m, & E \geq E_c; \\ 0, & E < E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.85})$$

где введено обозначение

$$E_c = \frac{G_c}{P_0}. \quad (\text{Б.86})$$

В отличие от случая механического нагружения поиск решения при электрическом воздействии оказался более сложным. Число независимых концентраций возросло до двух, и система для их определения оказалась связанной.

При *пассивном нагружении* ($E < E_c$, $\dot{E} > 0$) решения системы дифференциальных уравнений (Б.84)-(Б.85) тривиальны: $c_1 \equiv c_{10}$ и $c_6 \equiv c_{60}$, где c_{10} и c_{60} - соответствующие начальные значения концентраций c_1 и c_6 .

При *активном нагружении* ($E \geq E_c$, $\dot{E} > 0$) решение в общем виде системы нелинейных дифференциальных уравнений (Б.84)-(Б.85) имеет громоздкий вид. Ограничимся случаем $m=1$, допускающим простое решение в компактном виде. Для определенности также ограничимся случаем линейного изменения электрического поля во времени $E(t) = \dot{E}_0 t + E_c$. С учетом введенных предположений система (Б.84)-(Б.85) при активном нагружении принимает вид:

$$\begin{cases} \dot{c}_1 = -B \left(\frac{E_0}{E_c} t \right)^n \left(\frac{c_1 - c_6}{C_0} \right), \\ \dot{c}_6 = -4B \left(\frac{E_0}{E_c} t \right)^n \left(\frac{c_6}{C_0} \right). \end{cases} \quad (\text{Б.87})$$

Избавиться от связанности в системе (Б.87) можно, введя в рассмотрение вместо c_1 линейную комбинацию $c_1 + \frac{1}{3}c_6$:

$$\begin{cases} \left(c_1 + \frac{1}{3}c_6 \right)' = -\frac{B}{C_0} \left(\frac{E_0}{E_c} t \right)^n \left(c_1 + \frac{1}{3}c_6 \right), \\ \dot{c}_6 = -4\frac{B}{C_0} \left(\frac{E_0}{E_c} t \right)^n c_6. \end{cases} \quad (\text{Б.88})$$

Каждое из уравнений системы (Б.88) может быть независимо проинтегрировано. Окончательно решение для концентраций имеет вид:

$$c_1 = \left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60} \right) e^{-\left(\frac{t}{\tau} \right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60} e^{-4\left(\frac{t}{\tau} \right)^{n+1}} = \left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60} \right) e^{-\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0 \tau} \right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60} e^{-4\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0 \tau} \right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.89})$$

$$c_6 = c_{60} e^{-4\left(\frac{t}{\tau} \right)^{n+1}} = c_{60} e^{-4\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0 \tau} \right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.90})$$

$$c_3 = 1 - 4 \left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60} \right) e^{-\left(\frac{t}{\tau} \right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{60} e^{-4\left(\frac{t}{\tau} \right)^{n+1}} = 1 - 4 \left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60} \right) e^{-\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0 \tau} \right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{60} e^{-4\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0 \tau} \right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.91})$$

где введено обозначение

$$\tau = \left[\left(\frac{E_c}{\dot{E}_0} \right)^n \frac{C_0 (n+1)}{B} \right]^{\frac{1}{n+1}}. \quad (\text{Б.92})$$

Для доменов доноров наблюдается монотонное убывание концентраций c_1 и c_6 с увеличением времени (ростом электрического поля). Скорости убывания характеризуются введенной константой τ . В выражении c_1 (Б.89) присутствуют медленная $e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}}$ и быстрая $e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}}$ составляющие. В выражении c_6 (Б.90) присутствует только быстрая $e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}}$ составляющая. Концентрация акцептора c_3 , вычисленная на основе c_1 и c_6 по (Б.69), монотонно возрастает.

На Рисунке Б.16, в качестве иллюстрации соотношений (Б.89)-(Б.91), представлено изменение концентраций доменов доноров c_1 , c_6 и акцептора c_3 с ростом электрического поля от 0 до 2 МВ/м за 1 с. Параметры материала, использованные в расчетах, представлены в Таблице Б.4. В соответствии с (Б.86) напряженность электрического поля E_c , при которой начнется переключение, равняется 1 МВ/м. До достижения E_c концентрации 6 доменов остаются постоянными и равными 1/6. При превышении E_c наблюдается исчерпание концентраций доноров до 0 и рост концентрации акцептора до 1. В силу наличия медленной составляющей в выражении c_1 (Б.89) процессы переключения в доменах 1, 2, 4, 5 отстают по отношению к процессам переключения в домене 6.

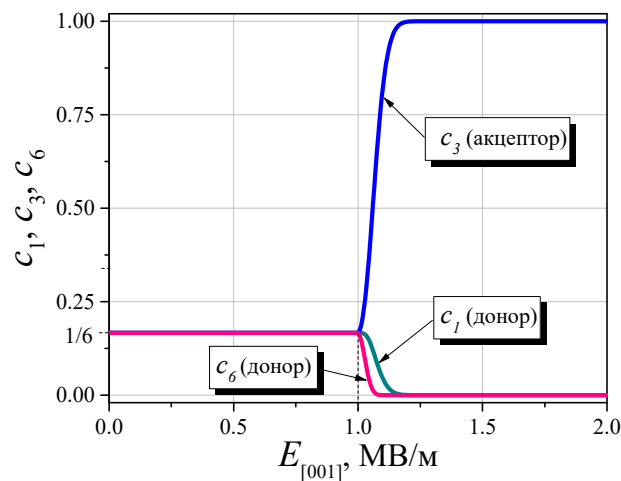


Рисунок Б.16 – Изменение концентраций доменов доноров c_1 , c_6 и акцептора c_3 с ростом напряженности электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

Таблица Б.4 – Электромеханические параметры реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

κ	Ф/м	2,32
d_{33}^0	м/В	$3,15 \cdot 10^{-10}$
P_0	Кл/м ²	0,5
ε_0	%	0,5
G_c	Дж/м ³	500 000
B	1/с	100
n	-	1
m	-	1
C_0	-	1/6

Вязкие свойства в модели характеризуются параметром B . Этот параметр определяет характерное *время насыщения* τ (Б.92). Величина $\tau/4$ представляет собой также время релаксации или время, за которое концентрация быстрого донора c_6 убывает из начального состояния в e раз (см. (Б.90)₁). Характерный диапазон изменения электрического поля, при котором происходит переключение и насыщение, определяется произведением $\dot{E}_0 \tau$, сопоставление которого с рассматриваемым диапазоном изменения нагрузки $E_{\max} - E_c$ позволяет оценить возможность параметров модели для описания квазистатических процессов, не чувствительных (или слабо чувствительных) к скорости нагружения ($\dot{E}_0 \tau / (E_{\max} - E_c) \ll 1$). Следствием этого условия получается ограничение на параметр B , позволяющее описывать реономной моделью процессы, *слабо чувствительные к скорости электрического воздействия*:

$$B \gg \frac{\dot{E}_0}{E_c} K, \quad (\text{Б.93})$$

где коэффициент K близок к 1 и определяется выражением $K = \frac{C_0(n+1)}{\left(\frac{E_{\max}}{E_c} - 1\right)^{n+1}}$. При

$$C_0 = 1/6 \text{ и } E_{\max} - E_c \approx E_c \text{ параметр } K = \frac{C_0(n+1)}{\left(\frac{E_{\max}}{E_c} - 1\right)^{n+1}} \text{ принимает значение } K = \frac{(n+1)}{6}.$$

При *нагружении* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{10} = c_{60} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомые определяющие уравнения для монокристалла, связывающие осевую компоненту тензора деформаций $\varepsilon = \varepsilon_{[001][001]}$ и

осевую компоненту вектора электрической индукции $D = D_{[001]}$ с осевой компонентой вектора электрического поля $E = E_{[001]}$, могут быть получены на основе подстановки (Б.89)-(Б.91) в (Б.70)-(Б.71):

$$\varepsilon = d_{33}E + \begin{cases} 0, & 0 \leq E < E_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{4}{3} e^{-\left(\frac{E-E_c}{E_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3} e^{-4\left(\frac{E-E_c}{E_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & E \geq E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.94})$$

$$D = \kappa E + \begin{cases} 0, & 0 \leq E < E_c; \\ P_0 \left[1 - \frac{8}{9} e^{-\left(\frac{E-E_c}{E_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{9} e^{-4\left(\frac{E-E_c}{E_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & E \geq E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.95})$$

Следует отметить, что параметр d_{33} для монокристалла в соответствии с (2.18) не является постоянным и зависит от изменения концентраций. В рассматриваемом случае нагружения вдоль оси $[001]$ $d_{33} = d_{33}^0 (c_3 - c_6) = d_{33}^0 P^r / P_0$, откуда с учетом (Б.90)-(Б.91) следует

$$d_{33} = \begin{cases} 0, & 0 \leq E < E_c; \\ d_{33}^0 \left[1 - \frac{8}{9} e^{-\left(\frac{E-E_c}{E_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{9} e^{-4\left(\frac{E-E_c}{E_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & E \geq E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.96})$$

В качестве иллюстрации полученных определяющих соотношений (Б.94)-(Б.95) на Рисунке Б.17 показаны зависимости осевой деформации и электрического смещения от электрического поля (увеличивающегося от 0 до 2 МВ/м за 1 с) для различных значений параметра n . Остальные параметры материала представлены в Таблице Б.4. Деформации отсутствуют ниже $E_c = 1 \text{ МВ/м}^2$ вследствие особенности зависимости d_{33} от поля (Б.96). Электрическое смещение при $E < E_c$ изменяется пропорционально напряженности электрического поля E , поскольку параметр κ является постоянным и ненулевым во всем диапазоне изменения нагрузки. При увеличении параметра n становится более заметным упрочнение материала, и процесс насыщения замедляется. Остаточная осевая деформация и остаточная поляризация при насыщении стремятся к значениям ε_0 и P_0 соответственно.

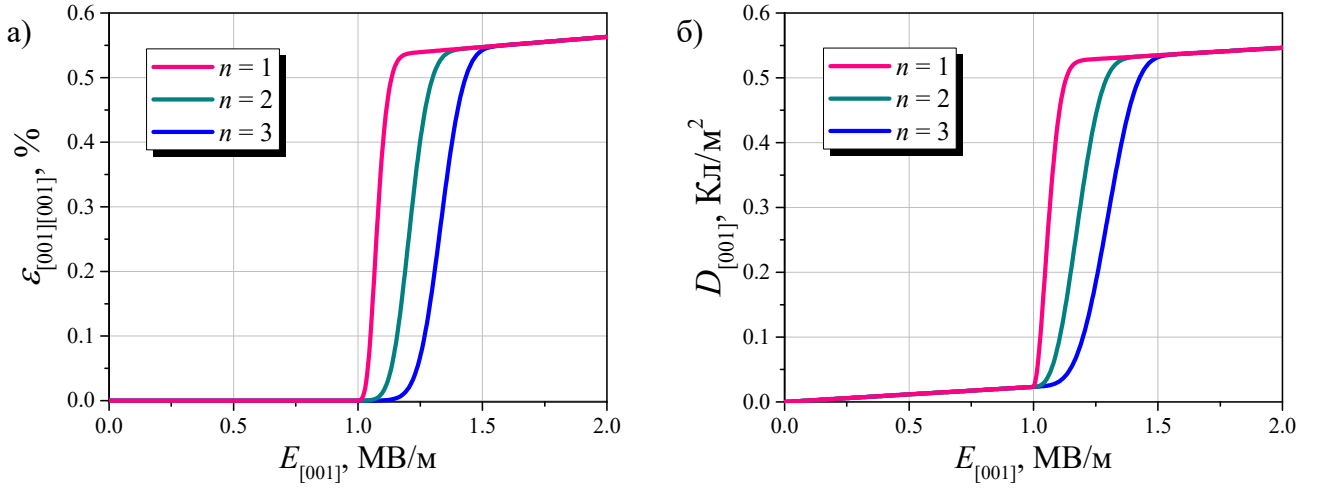


Рисунок Б.17 – Зависимости а) деформации и б) электрического смещения от электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра n

Влияние параметра вязкости B на кривые деформирования показано на Рисунке Б.18. Видно, что с уменьшением вязкости процессы переключения и насыщения размываются. С ростом B кривая деформирования приближается к трилинейной зависимости, характерной для склерономных сегнетоэлектродупругих материалов. Визуальная оценка выполнения условия (Б.93) наблюдается, начиная с $B = 100 \text{ с}^{-1}$, то есть при условии $B / \left(\frac{\dot{E}_0}{E_c} K \right) = 75$. Следует отметить, что идентичное семейство кривых получается при варьировании времени нагружения t при фиксированном B при соблюдении условия $Bt = 100$.

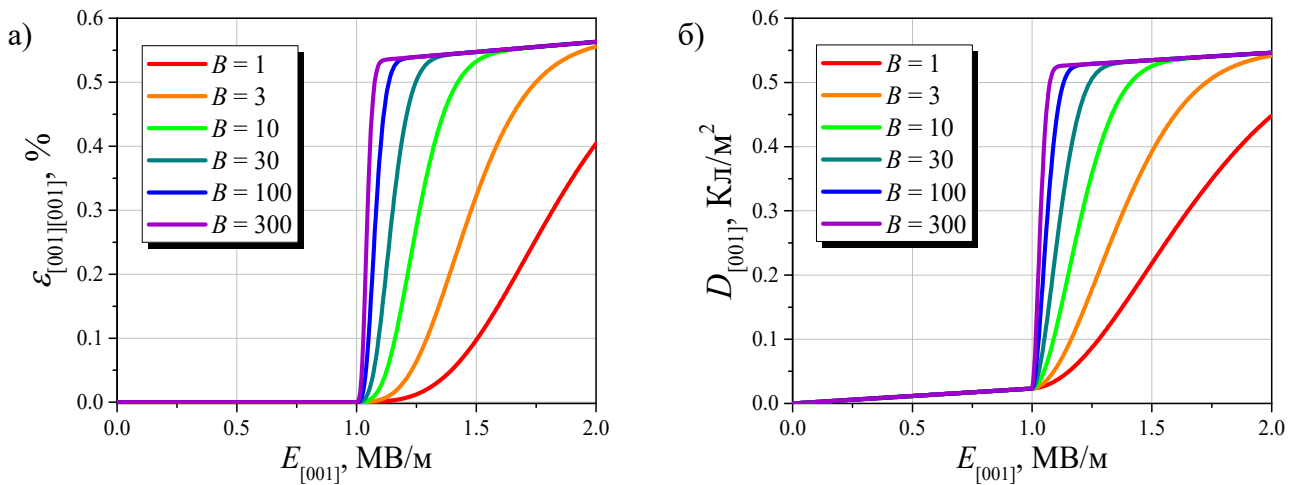


Рисунок Б.18 – Зависимости а) деформации и б) электрического смещения от электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра B

В случае $\dot{E} < 0$ при воздействии электрическим полем в направлении, противоположном оси [001], домен 3 является *донором* для 4х доменов 1, 2, 4 и 5 (с ориентациями c -оси, ортогональной действию нагрузки), которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 6, который является единственным финальным *акцептором*. В этом случае при линейном изменении электрического поля во времени $E(t) = -\dot{E}_0 t - E_c$ будут справедливы все ранее написанные соотношения для концентраций (Б.89)-(Б.91) с заменой индексов у доменов 6 и 3:

$$c_1 = (c_{10} + \frac{1}{3}c_{60})e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = (c_{10} + \frac{1}{3}c_{60})e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.97})$$

$$c_3 = c_{30}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = c_{30}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.98})$$

$$c_6 = 1 - 4\left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{30}\right)e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{30}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = 1 - 4\left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{30}\right)e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{30}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}. \quad (\text{Б.99})$$

В этом случае в условиях первоначального равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{10} = c_{60} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.97)-(Б.99) в (Б.70)-(Б.71):

$$\varepsilon = d_{33}E - \begin{cases} 0, & -E_c < E \leq 0; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & E \leq -E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.100})$$

$$D = \kappa E - \begin{cases} 0, & -E_c < E \leq 0; \\ P_0 \left[1 - \frac{8}{9}e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{9}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & E \leq -E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.101})$$

При циклическом нагружении происходит поочередная смена доноров и акцепторов доменов 3 и 6 на полуциклах:

- на ниспадающей ветви гистерезиса ($\dot{E} < 0$) донорами являются домен 3 и все домены с ориентацией c -оси, ортогональной действию нагрузки (1, 2, 4 и 5), в роли акцептора выступает домен 6;
- на восходящей ветви гистерезиса ($\dot{E} > 0$) донорами являются домен 6 и все домены с ориентацией c -оси, ортогональной действию нагрузки (1, 2, 4 и 5), в роли акцептора выступает домен 3.

Концентрации доменов при циклическом нагружении могут быть найдены на основе ранее полученных результатов для концентраций при $\dot{E} > 0$ (Б.89)-(Б.91) и $\dot{E} < 0$ (Б.97)-(Б.99). Отличие от ранее рассмотренных случаев заключается только в

выборе начальных значений c_{10} , c_{30} и c_{60} . Строгое решение задачи при циклическом нагружении имеет достаточно громоздкий вид, зависящий от всей предыстории нагружения. Однако если ограничиться рассмотрением циклического нагружения с глубоким насыщением ($e^{-\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \ll 1$ при $\dot{E} > 0$ и $e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \ll 1$ при $\dot{E} < 0$), то решение значительно упрощается. В этом случае на ниспадающей ветви гистерезиса ($\dot{E} < 0$) $c_{30} = 1$, $c_{10} = c_{60} = 0$ (следует из решения на предшествующем полуцикле с одним акцептором), на восходящей ветви гистерезиса ($\dot{E} > 0$) $c_{60} = 1$, $c_{10} = c_{30} = 0$ (следует из решения на предшествующем полуцикле с одним акцептором).

С учетом введенных предположений определяющие уравнения, описывающие электромеханический и диэлектрический гистерезис при одноосном циклическом нагружении при изменении электрического поля от $E_{\min}$ ($E_{\min} < -E_c$) до $E_{\max}$ ($E_{\max} > E_c$), имеют вид:

$$\varepsilon = d_{33}E + \begin{cases} \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{E_{\max}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{E_{\max}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad -E_c < E < E_{\max}; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad E_{\min} \leq E \leq -E_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{-E_{\min}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{E_{\min}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad E_{\min} < E < E_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad E_c \leq E \leq E_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.102})$$

$$D = \kappa E + \begin{cases} P_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{E_{\max}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3}e^{-4\left(\frac{E_{\max}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad -E_c < E < E_{\max}; \\ (-P_0) \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad E_{\min} \leq E \leq -E_c; \\ (-P_0) \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{-E_{\min}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3}e^{-4\left(\frac{E_{\min}-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad E_{\min} < E < E_c; \\ P_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3}e^{-4\left(\frac{E-E_c}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad E_c \leq E \leq E_{\max}. \end{cases} \quad (\text{Б.103})$$

Первые две строки в каждом выражении (Б.102) и (Б.103) описывают ниспадающую ветвь гистерезиса ($\dot{E} < 0$) (кривая ABCD на Рисунке Б.19а). Последние две

строки описывают восходящую ветвь гистерезиса ($\dot{E} > 0$) (кривая DEFA на Рисунке Б.19а). Первая строка соответствует обратимой линейной разгрузке без переключений (отрезок АВ на Рисунке Б.19а), вторая строка – накоплению отрицательной остаточной поляризации при действии электрического поля в направлении, противоположном [001] (кривая BCD на Рисунке Б.19а), третья строка – обратимой линейной разгрузке без переключений (отрезок DE на Рисунке Б.19а), четвертая строка – накоплению положительной остаточной поляризации при действии электрического поля в направлении оси [001] (кривая EFA на Рисунке Б.19а).

Гистерезисные кривые для реономной модели с порогом переключения, полученные на основе уравнений (Б.102) и (Б.103), показаны на Рисунке Б.19 для различных значений параметра n . Используемые в расчетах остальные параметры материала представлены в Таблице Б.4. При увеличении параметра n становится более заметным упрочнение материала. Кривая диэлектрического гистерезиса обладает центральной симметрией относительно начала координат: $D(-E) = -D(E)$. Остаточная поляризация при $\dot{E} > 0$ стремится к $+P_0$, а при $\dot{E} < 0$ к $-P_0$. Кривая электромеханического гистерезиса обладает осевой симметрией относительно оси ординат: $\varepsilon(-E) = \varepsilon(E)$. Остаточная осевая деформация при насыщении и при $\dot{E} > 0$, и при $\dot{E} < 0$ стремится к значению ε_0 .

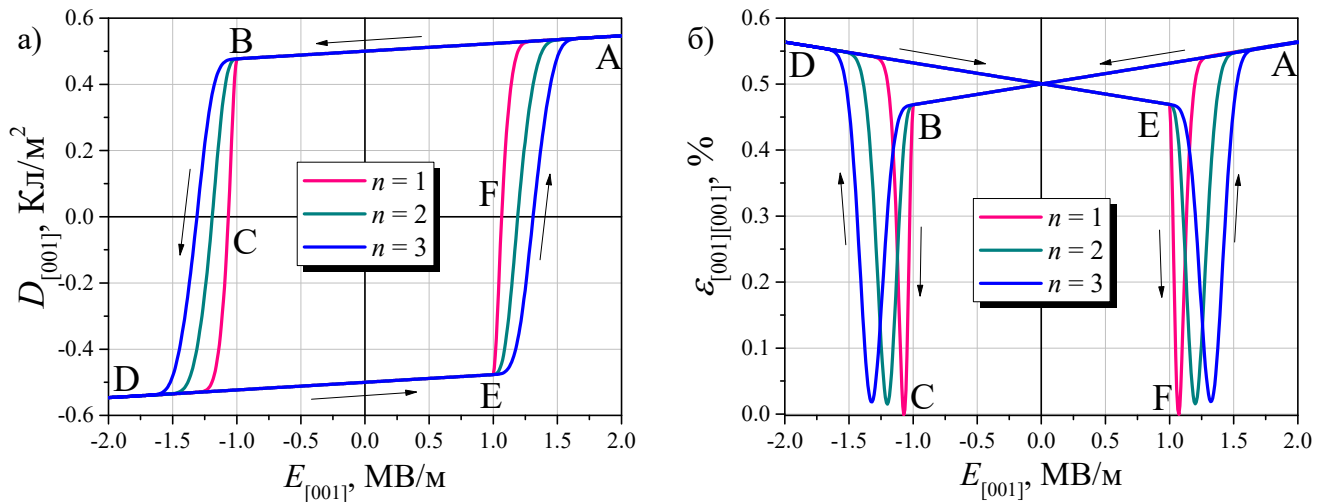


Рисунок Б.19 – Гистерезисные кривые для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра n :
 а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Кривая электромеханического гистерезиса (в форме бабочки) обладает двумя локальными минимумами (точки С и F на Рисунке Б.19б). Минимум остаточной деформации ε^r находится из условия обращения в ноль ее производной

$\frac{d}{dE} \left[1 - 2e^{-\left(\frac{\pm E - E_c}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{\pm E - E_c}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} \right] \varepsilon_0 = 0$ (см. (Б.102)). Абсциссы и ордината двух локаль-

ных минимумов остаточной деформации определяются равенствами:

$$E_{1,2} = \arg \min_E \varepsilon^r(E) = \pm \left[E_c + \left(\frac{\ln 4}{3} \right)^{\frac{1}{n+1}} \dot{E}_0 \tau \right], \quad (\text{Б.104})$$

$$\varepsilon_{1,2}^r = \min_E \varepsilon^r(E) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{3}{2\sqrt[3]{4}} \right). \quad (\text{Б.105})$$

Локализация абсцисс минимумов достаточно близка к $\pm E_c$. В случае $n=1$ имеем $E_{1,2} = \pm 1,0555 E_c$. При этом $\varepsilon_{1,2}^r = 0,05506 \varepsilon_0$. Следует отметить, что полученные результаты для остаточной деформации не могут быть непосредственно использованы для оценки минимумов полной деформации, поскольку в соответствии с (Б.102) на нее оказывает влияние еще слагаемое $d_{33}E$. Однако для рассматриваемых параметров материала и режима нагружения его влияние незначительно.

Гистерезисные кривые при циклическом нагружении с линейно возрастающей амплитудой напряженности электрического поля от 0 до 2,90 МВ/м показаны на Рисунках Б.20 и Б.21. Рассматривалось 7 циклов нагружения с постоянным периодом цикла равным 4 с. При работе модели в реономном режиме при выборе параметра $B = 1 \text{ с}^{-1}$ наблюдается серия вложенных петель гистерезиса (см. Рисунки Б.20а и Б.21а). Поведение модели меняется при переходе в склерономный режим при увеличении параметра вязкости до $B = 100 \text{ с}^{-1}$, удовлетворяющего условию (Б.93). В этом случае наблюдается единая стабилизированная петля гистерезиса (см. Рисунки Б.20б и Б.21б).

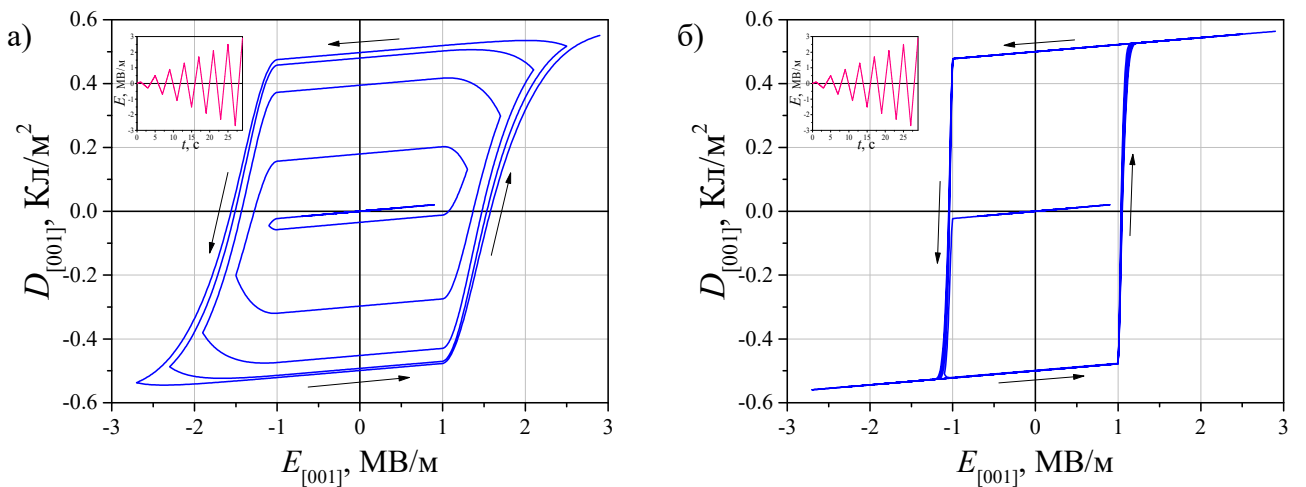


Рисунок Б.20 – Кривые диэлектрического гистерезиса при нагружении с линейно возрастающей амплитудой электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра вязкости: а) $B = 1 \text{ с}^{-1}$ и б) $B = 100 \text{ с}^{-1}$

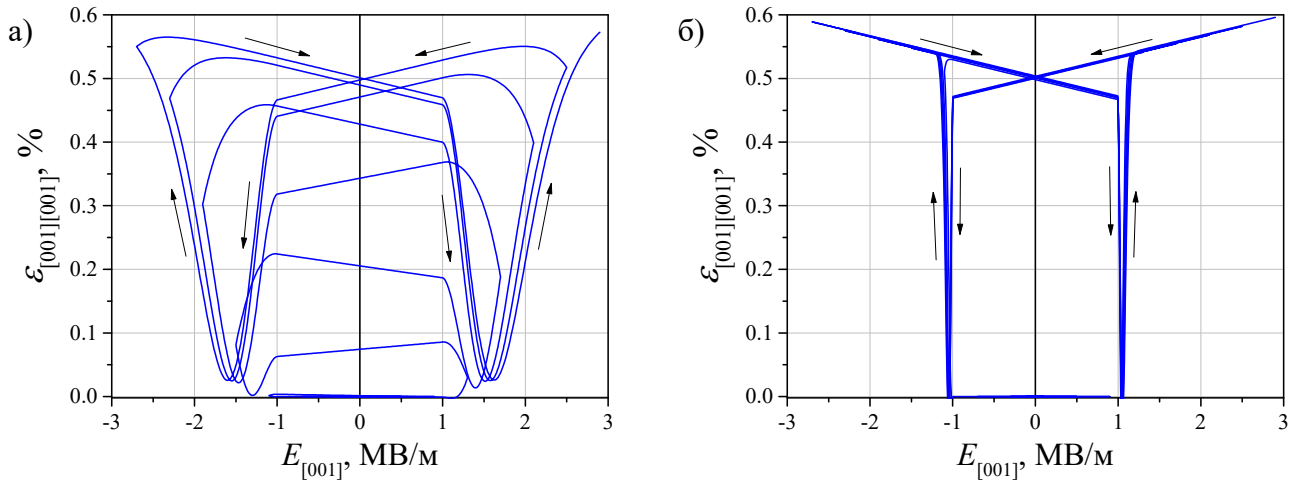


Рисунок Б.21 – Кривые электромеханического гистерезиса при нагружении с линейно возрастающей амплитудой электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра вязкости: а) $B = 1 \text{ c}^{-1}$ и б) $B = 100 \text{ c}^{-1}$

Б.2.2 Реономная модель без порога переключения

Для реономной модели сегнетоэлектроупругого кристалла без порога переключения, представляющей собой аналог вязкоупругой модели, уравнения эволюции определяются выражениями (Б.35).

В случае $E > 0$ при воздействии электрическим полем вдоль оси [001] домен 6 является *донором* для 4х доменов 1, 2, 4 и 5, которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 3, являющегося единственным финальным *акцептором* (см. Рисунок А.1). В этом случае (Б.35) сводится к двум независимым уравнениям

$$\dot{c}^{1 \rightarrow 3} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{1 \rightarrow 3}}{G_c} \right)^n \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & G^{1 \rightarrow 3} \geq 0; \\ 0, & G^{1 \rightarrow 3} < 0; \end{cases} \quad (\text{Б.106})$$

$$\dot{c}^{6 \rightarrow 1} = \begin{cases} B \left(\frac{G^{6 \rightarrow 1}}{G_c} \right)^n \left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m, & G^{6 \rightarrow 1} \geq 0; \\ 0, & G^{6 \rightarrow 1} < 0. \end{cases} \quad (\text{Б.107})$$

Полученные уравнения могут быть преобразованы путем выражения движущих сил $G^{1 \rightarrow 3}$ и $G^{6 \rightarrow 1}$ через EP_0 (Б.81) и замены $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ и $\dot{c}^{6 \rightarrow 1}$ на $\dot{c}_1$ и $\dot{c}_6$ на основе (Б.13) к виду:

$$\dot{c}_1 = \begin{cases} B \left(\frac{E}{E_c} \right)^n \left[\left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m - \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m \right], & E \geq 0; \\ 0, & E < 0; \end{cases} \quad (\text{Б.108})$$

$$\dot{c}_6 = \begin{cases} -4B \left(\frac{E}{E_c} \right)^n \left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m, & E \geq 0; \\ 0, & E < 0; \end{cases} \quad (\text{Б.109})$$

где E_c определяется (Б.86).

В отличие от случая механического нагружения поиск решения при электрическом воздействии оказался более сложным. Число независимых концентраций возросло до двух, и система для их определения оказалась связанной.

Решение системы нелинейных дифференциальных уравнений (Б.108)-(Б.109) в общем виде имеет громоздкий вид. Ограничимся случаем $m = 1$ при линейном изменении электрического поля во времени $E(t) = \dot{E}_0 t$. С учетом введенных предположений решение системы (Б.108)-(Б.109) имеет вид:

$$c_1 = (c_{10} + \frac{1}{3}c_{60})e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = (c_{10} + \frac{1}{3}c_{60})e^{-\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.110})$$

$$c_6 = c_{60}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = c_{60}e^{-4\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.111})$$

$$c_3 = 1 - 4\left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60}\right)e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = 1 - 4\left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60}\right)e^{-\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.112})$$

где введенная константа размерности времени τ определяется уравнением (Б.92). Полученные решения имеют математическую структуру аналогичную (Б.89)-(Б.91) для модели с порогом переключения. Отличие заключается в том, что для рассматриваемой модели без порога переключения время отсчитывается от начала нагружения $E = 0$, в то время как для ранее рассматриваемой модели с порогом переключения время отсчитывается от момента достижения порога переключения $E = E_c$.

На Рисунке Б.22 в качестве иллюстрации соотношений (Б.110)-(Б.112) представлено изменение концентраций доменов доноров c_1 , c_6 и акцептора c_3 с ростом электрического поля от 0 до 2 МВ/м за 1 с. Параметры материала, использованные в расчетах, представлены в Таблице Б.5. Значение параметра n в данной модели должно выбираться достаточно большим ($n \gg 1$). В силу наличия медленной составляющей

в выражении c_1 (Б.110) процессы переключения в доменах 1, 2, 4, 5 запаздывают по отношению к процессам в домене 6 с быстрой составляющей в c_6 (Б.111).

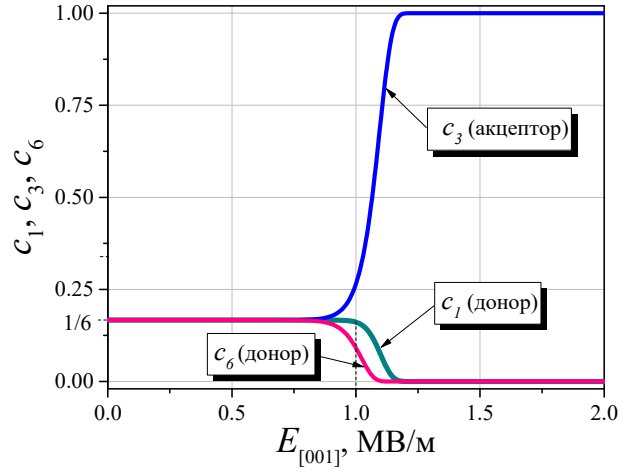


Рисунок Б.22 – Изменение концентраций доменов доноров c_1 , c_6 и акцептора c_3 с ростом напряженности электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения

Таблица Б.5 – Электромеханические параметры реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения

κ	Ф/м	2,32
d_{33}^0	м/В	$3,15 \cdot 10^{-10}$
P_0	Кл/м ²	0,5
ε_0	%	0,5
G_c	Дж/м ³	500 000
B	1/с	1
n	-	20
m	-	1
C_0	-	1/6

При *нагрузении* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{10} = c_{60} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) определяющие уравнения для тетрагонального монокристалла, связывающие осевую компоненту тензора деформаций $\varepsilon = \varepsilon_{[001][001]}$ и осевую компоненту вектора электрической индукции $D = D_{[001]}$ с осевой компонентой вектора электрического поля $E = E_{[001]}$, могут быть получены на основе подстановки (Б.110)-(Б.112) в (Б.70)-(Б.71):

$$\varepsilon = d_{33}E + \varepsilon_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{E}{E_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}e^{-4\left(\frac{E}{E_0\tau}\right)^{n+1}} \right], \quad (\text{Б.113})$$

$$D = \kappa E + P_0 \left[1 - \frac{8}{9}e^{-\left(\frac{E}{E_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{9}e^{-4\left(\frac{E}{E_0\tau}\right)^{n+1}} \right]. \quad (\text{Б.114})$$

На Рисунке Б.23 показаны зависимости осевой деформации и электрического смещения от электрического поля (увеличивающегося от 0 до 2 МВ/м за 1 с) для различных значений параметра n . Остальные параметры материала представлены в Таблице Б.5. Для описания поведения материалов, слабо чувствительных к скорости нагружения, требуется использование в расчетах достаточно больших значений параметра n ($n \gg 1$). Как видно из Рисунка Б.23, с ростом n на кривой деформирования и поляризации становятся более резкими переходы к стадиям переключения и насыщения.

Влияние параметра B на кривые деформирования и поляризации показано на Рисунке Б.24. С ростом параметра B , в отличие от модели с порогом переключения, для которой кривые деформирования и поляризации приближаются к трилинейной зависимости, кривые для модели без порога сохраняют подобие, демонстрируя понижение уровня переключений.

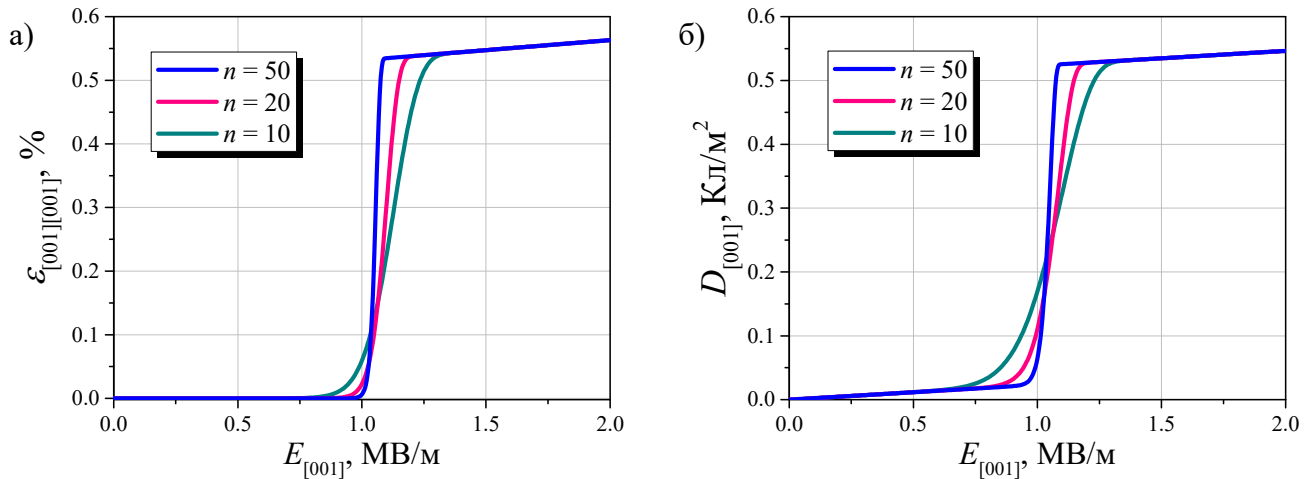


Рисунок Б.23 – Зависимости а) деформации и б) электрического смещения от электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения при различных значениях параметра n

Параметры B и E_c в рассматриваемой модели не могут рассматриваться независимо, поскольку в уравнениях эволюции (Б.108)-(Б.109) параметр B может быть внесен под знак степени функции переключения (второго сомножителя) и объединен с E_c в виде комбинации E_c / B^n , которая представляет собой истинный предел переключений, наблюдаемый в виде близкой к вертикальной ветви кривых на Рисунке Б.24. Следует отметить, что идентичное семейство кривых получается при варьировании времени нагружения t при фиксированном B при соблюдении условия $Bt=1$.

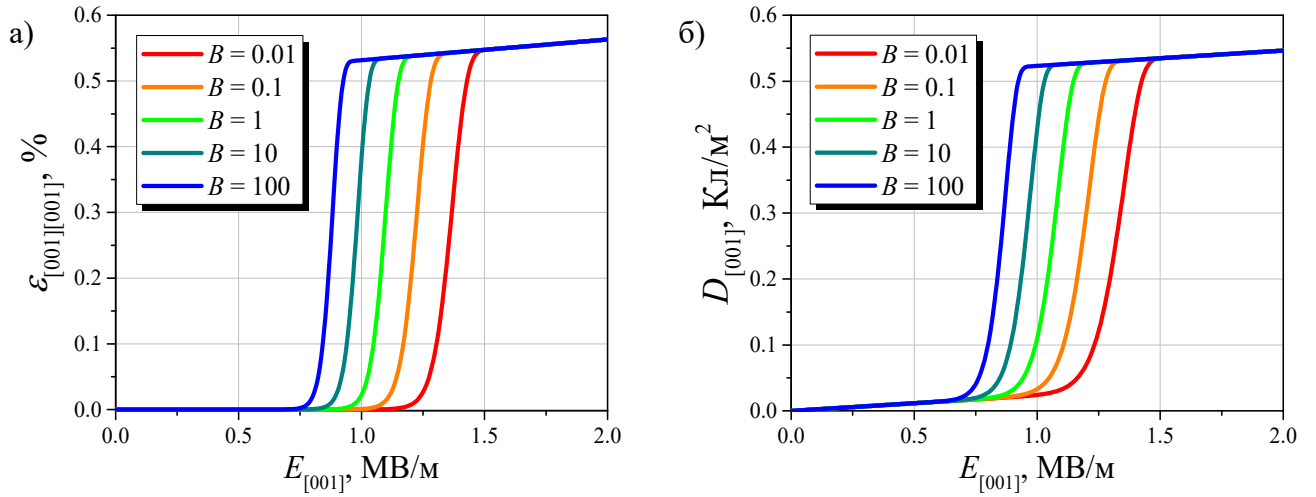


Рисунок Б.24 – Зависимости а) деформации и б) электрического смещения от электрического поля для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения при различных значениях параметра B

В случае $E < 0$ при воздействии электрическим полем в направлении, противоположном оси [001], домен 3 является *донором* для 4х доменов 1, 2, 4 и 5, которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 6, который является единственным финальным *акцептором*. В этом случае при линейном изменении электрического поля во времени $E(t) = -\dot{E}_0 t$ будут справедливы все ранее написанные соотношения для концентраций (Б.110)-(Б.112) с заменой индексов у доменов 6 и 3:

$$c_1 = \left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60}\right)e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = \left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60}\right)e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.115})$$

$$c_3 = c_{30}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = c_{30}e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}, \quad (\text{Б.116})$$

$$c_6 = 1 - 4\left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{30}\right)e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{30}e^{-4\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n+1}} = 1 - 4\left(c_{10} + \frac{1}{3}c_{30}\right)e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}c_{30}e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}}. \quad (\text{Б.117})$$

В этом случае в условиях первоначального равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{10} = c_{60} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.115)-(Б.117) в (Б.70)-(Б.71):

$$\varepsilon = d_{33}E - \varepsilon_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + \frac{1}{3}e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], \quad (\text{Б.118})$$

$$D = \kappa E - P_0 \left[1 - \frac{8}{9}e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{1}{9}e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right]. \quad (\text{Б.119})$$

При циклическом нагружении происходит поочередная смена статуса донора и акцептора для доменов 3 и 6 на полуциклах. Концентрации доменов при циклическом нагружении могут быть найдены на основе ранее полученных результатов для концентраций при $\dot{E} > 0$ (Б.110)-(Б.112) и $\dot{E} < 0$ (Б.115)-(Б.117). Отличие от ранее рассмотренных случаев монотонного нагружения заключается только в выборе начальных значений c_{10} , c_{30} и c_{60} . Строгое решение задачи при циклическом нагружении имеет достаточно громоздкий вид, зависящий от всей предыстории нагружения. Однако если ограничиться рассмотрением циклического нагружения с *глубоким насыщением* ($e^{-\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \ll 1$ при $\dot{E} > 0$ и $e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \ll 1$ при $\dot{E} < 0$), то решение значительно упрощается. В этом случае на ниспадающей ветви гистерезиса ($\dot{E} < 0$) $c_{30} = 1$, $c_{10} = c_{60} = 0$, на восходящей ветви гистерезиса ($\dot{E} > 0$) $c_{60} = 1$, $c_{10} = c_{30} = 0$.

С учетом введенных предположений определяющие уравнения, описывающие электромеханический и диэлектрический гистерезис при одноосном циклическом нагружении при изменении поля от $E_{\min}$ ($E_{\min} < 0$) до $E_{\max}$ ($E_{\max} > 0$), имеют вид:

$$\varepsilon = d_{33}E + \begin{cases} \varepsilon_0, & \dot{E} < 0, \quad 0 < E < E_{\max}; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad E_{\min} \leq E \leq 0; \\ \varepsilon_0, & \dot{E} > 0, \quad E_{\min} < E < 0; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad 0 \leq E \leq E_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.120})$$

$$D = \kappa E + \begin{cases} P_0, & \dot{E} < 0, \quad 0 < E < E_{\max}; \\ (-P_0) \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3}e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad E_{\min} \leq E \leq 0; \\ -P_0, & \dot{E} > 0, \quad E_{\min} < E < 0; \\ P_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3}e^{-4\left(\frac{E}{\dot{E}_0\tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad 0 \leq E \leq E_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.121})$$

Первые две строки в каждом из выражений (Б.120) и (Б.121) описывают ниспадающую ветвь гистерезиса ($\dot{E} < 0$) (кривая ABCD на Рисунке Б.25а). Последние две строки описывают восходящую ветвь гистерезиса ($\dot{E} > 0$) (кривая DEFA на Рисунке Б.25а). Первая строка соответствует обратимой линейной разгрузке без пере-

ключений (что возможно только при глубоком насыщении) (отрезок АВ на Рисунке Б.25а), вторая строка – накоплению отрицательной остаточной осевой деформации при сжатии (кривая BCD на Рисунке Б.25а), третья строка – обратимой линейной разгрузке без переключений (что возможно только при глубоком насыщении) (отрезок DE на Рисунке Б.25а), четвертая строка – накоплению положительной остаточной осевой деформации при растяжении (кривая EFA на Рисунке Б.25а).

Гистерезисные кривые для реономной модели без порога переключения, полученные на основе уравнений (Б.120) и (Б.121), показаны на Рисунке Б.25 для различных значений параметра n . Используемые в расчетах остальные параметры материала представлены в Таблице Б.5. При увеличении параметра n становится более заметным упрочнение материала. Кривая диэлектрического гистерезиса обладает центральной симметрией относительно начала координат: $D(-E) = -D(E)$. Остаточная поляризация при $\dot{E} > 0$ стремится к $+P_0$, а при $\dot{E} < 0$ к $-P_0$. Кривая электромеханического гистерезиса обладает осевой симметрией относительно оси ординат: $\varepsilon(-E) = \varepsilon(E)$. Остаточная осевая деформация при насыщении и при $\dot{E} > 0$ и при $\dot{E} < 0$ стремится к значению ε_0 .

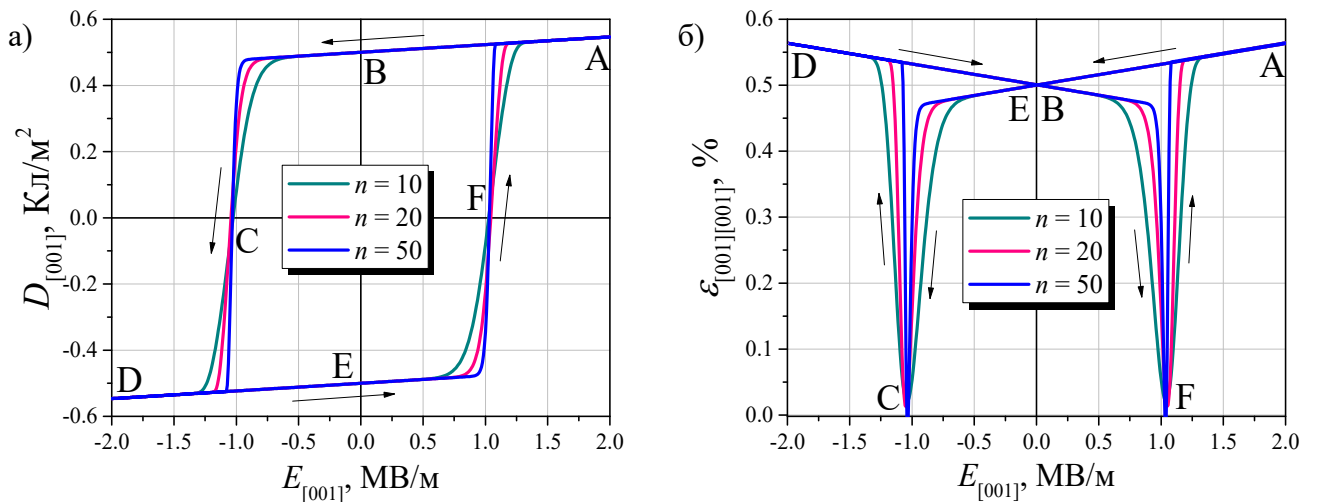


Рисунок Б.25 – Гистерезисные кривые для реономной модели тетрагонального монокристалла без порога переключения при различных значениях параметра n :
 а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Кривая электромеханического гистерезиса (в форме бабочки) обладает двумя локальными минимумами (точки С и F на Рисунке Б.25б). Минимум остаточной деформации ε^r находится из условия обращения в ноль ее производной

$$\frac{d}{dE} \left[1 - 2e^{-\left(\frac{\pm E}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} + 2e^{-4\left(\frac{\pm E}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} \right] \varepsilon_0 = 0 \quad (\text{см. (Б.120)}). \quad \text{Абсциссы и ордината двух локальных}$$

минимумов остаточной деформации определяются равенствами:

$$E_{1,2} = \arg \min_E \varepsilon^r(E) = \pm \left(\frac{\ln 4}{3} \right)^{\frac{1}{n+1}} \dot{E}_0 \tau, \quad (\text{Б.122})$$

$$\varepsilon_{1,2}^r = \min_E \varepsilon^r(E) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{3}{2\sqrt[n]{4}} \right). \quad (\text{Б.123})$$

Локализация абсцисс минимумов достаточно близка к $\pm E_c$. В случае $n = 20$ имеем $E_{1,2} = \pm 1,0575 E_c$. При этом $\varepsilon_{1,2}^r = 0,05506 \varepsilon_0$. Следует отметить, что полученные результаты для остаточной деформации не могут быть непосредственно использованы для оценки минимумов полной деформации, поскольку в соответствии с (Б.120) на нее оказывает влияние еще слагаемое $d_{33}E$. Однако для рассматриваемых параметров материала и режима нагружения его влияние незначительно.

Гистерезисные кривые при циклическом нагружении с линейно возрастающей амплитудой напряженности электрического поля от 0 до 2,90 МВ/м показаны на Рисунках Б.26 и Б.27. Рассматривалось 7 циклов нагружения с постоянным периодом цикла равным 4 с. При работе модели в реономном режиме ($n = 3$) наблюдается серия вложенных петель гистерезиса (см. Рисунки Б.26а и Б.27а). Поведение модели меняется при переходе в склерономный режим ($n = 20$). В этом случае наблюдается единая стабилизированная петля гистерезиса (см. Рисунки Б.26б и Б.27б).

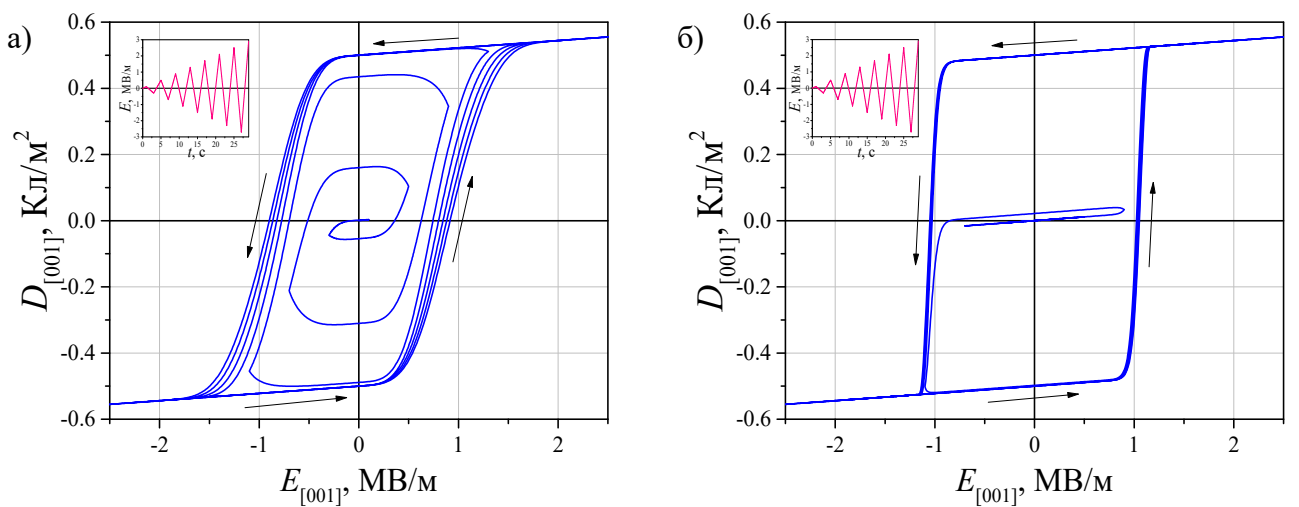


Рисунок Б.26 – Кривые диэлектрического гистерезиса при нагружении с линейно возрастающей амплитудой электрического поля для реономной модели без порога переключения при различных значениях параметра n : а) $n = 3$ и б) $n = 20$

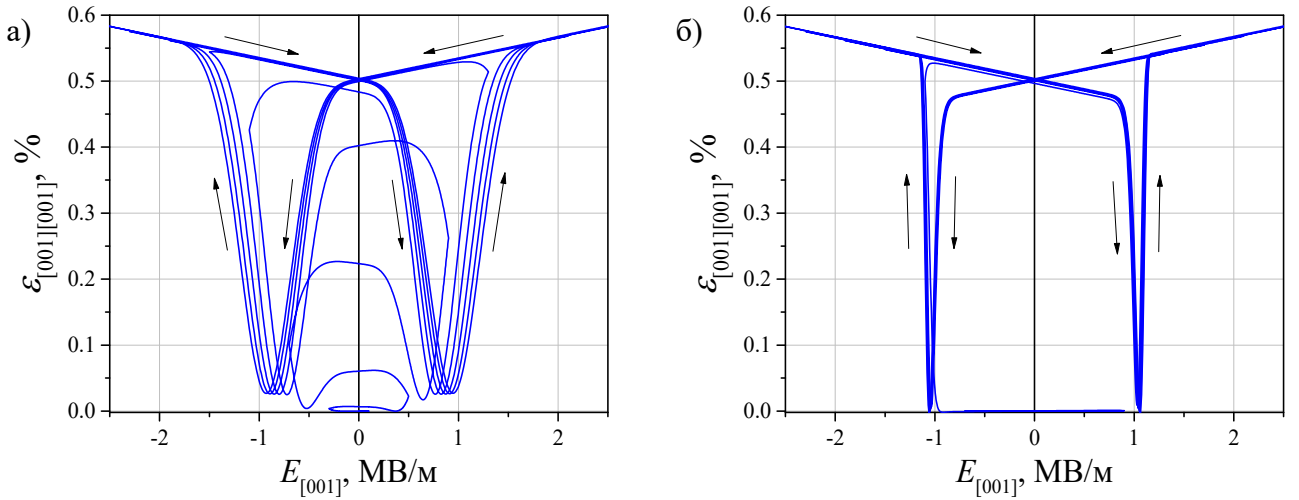


Рисунок Б.27 – Кривые электромеханического гистерезиса при нагружении с линейно возрастающей амплитудой электрического поля для реономной модели без порога переключения при различных значениях параметра n : а) $n = 3$ и б) $n = 20$

Б.2.3 Склерономная модель с порогом переключения

Для склерономной модели сегнетоэлектрорупругого кристалла с порогом переключения, представляющей собой аналог упругопластической модели, уравнения эволюции определяются выражениями (Б.50).

В случае $E > 0$ при воздействии электрическим полем вдоль оси [001], как и для реономных моделей, домен 6 является *донором* для 4х доменов 1, 2, 4 и 5, которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 3, являющегося единственным финальным *акцептором* (см. Рисунок А.1). В этом случае все многообразие (Б.50) сводится к двум независимым уравнениям

$$\dot{c}^{1 \rightarrow 3} = \begin{cases} \frac{1}{H} \dot{G}^{1 \rightarrow 3} \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m, & G^{1 \rightarrow 3} \geq G_c; \\ 0, & G^{1 \rightarrow 3} < G_c; \end{cases} \quad (\text{Б.124})$$

$$\dot{c}^{6 \rightarrow 1} = \begin{cases} \frac{1}{H} G^{6 \rightarrow 1} \left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m, & G^{6 \rightarrow 1} \geq G_c; \\ 0, & G^{6 \rightarrow 1} < G_c. \end{cases} \quad (\text{Б.125})$$

Полученные уравнения могут быть преобразованы путем выражения движущих сил $G^{1 \rightarrow 3}$ и $G^{6 \rightarrow 1}$ через EP_0 (Б.81) и замены $\dot{c}^{1 \rightarrow 3}$ и $\dot{c}^{6 \rightarrow 1}$ на $\dot{c}_1$ и $\dot{c}_6$ на основе (Б.13) к виду:

$$\dot{c}_1 = \begin{cases} \frac{P_0 \dot{E}}{H} \left[\left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m - \left(\frac{c_1}{C_0} \right)^m \right], & E \geq E_c; \\ 0, & E < E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.126})$$

$$\dot{c}_6 = \begin{cases} -4 \frac{P_0 \dot{E}}{H} \left(\frac{c_6}{C_0} \right)^m, & E \geq E_c; \\ 0, & E < E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.127})$$

В отличие от случая механического нагружения поиск решения при электрическом воздействии оказался более сложным. Число независимых концентраций возросло до двух, и система для их определения оказалась связанной.

Решение системы нелинейных дифференциальных уравнений (Б.126)-(Б.127) в общем виде имеет громоздкий вид. Ограничимся случаем $m = 1$. С учетом этого предположения решение системы (Б.126)-(Б.127) для c_1 и c_6 , а также полученное на их основе с помощью (Б.69) выражение для c_3 , имеет вид:

$$c_1 = \begin{cases} (c_{10} + \frac{1}{3}c_{60})e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} - \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)}, & E \geq E_c; \\ c_{10}, & E < E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.128})$$

$$c_6 = \begin{cases} c_{60}e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)}, & E \geq E_c; \\ c_{60}, & E < E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.129})$$

$$c_3 = \begin{cases} 1 - 4(c_{10} + \frac{1}{3}c_{60})e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} + \frac{1}{3}c_{60}e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)}, & E \geq E_c; \\ 1 - 4c_{10} - c_{60}, & E < E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.130})$$

$$H_1 = \frac{HC_0}{P_0}. \quad (\text{Б.131})$$

Во всех случаях наблюдается монотонное убывание концентраций доноров c_1 и c_6 с ростом электрического поля. Наклон кривых $c_1(E)$, $c_3(E)$ и $c_6(E)$ в начале переключений определяется введенной константой H_1 . Склерономный характер решений (Б.128)-(Б.130) проявляется в независимости решения от скорости нагружения.

На Рисунке Б.28 в качестве иллюстрации соотношений (Б.128)-(Б.130) представлено изменение концентраций доменов доноров c_1 , c_6 и акцептора c_3 с ростом электрического поля от 0 до 2 МВ/м. Параметры материала, использованные в расчетах, представлены в Таблице Б.6. До достижения E_c концентрации 6 доменов остаются постоянными и равными начальному значению 1/6. При превышении E_c наблюдается исчерпание концентраций доноров до 0 и рост концентрации акцептора до 1. В силу наличия медленной составляющей $e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)}$ в выражении c_1 (Б.128) начальный наклон кривой $c_1(E)$ меньше, чем у кривой $c_6(E)$, описываемой только быстрой составляющей $e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)}$ (Б.129).

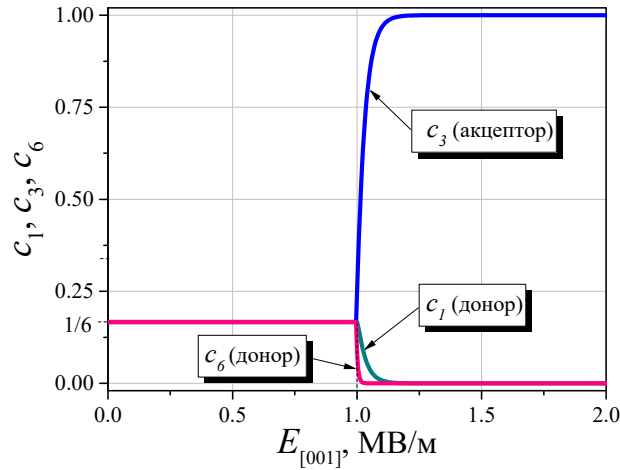


Рисунок Б.28 – Изменение концентраций доменов доноров C_1 , C_6 и акцептора C_3 с ростом напряженности электрического поля для склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

Таблица Б.6 – Электромеханические параметры склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения

κ	Ф/м	2,32
d_{33}^0	м/В	$3,15 \cdot 10^{-10}$
P_0	Кл/м ²	0,5
ε_0	%	0,5
G_c	Дж/м ³	500 000
H	Дж/м ³	100 000
m	-	1
C_0	-	1/6

При *нагрузении* из натурального состояния в условиях равноприсутствия всех доменов ($c_I(0) = c_{10} = c_{60} = \frac{1}{6}$, $I = 1, \dots, 6$) определяющие уравнения для тетрагонального монокристалла, связывающие осевую компоненту тензора деформаций $\varepsilon = \varepsilon_{[001][001]}$ и осевую компоненту вектора электрической индукции $D = D_{[001]}$ с осевой компонентой вектора электрического поля $E = E_{[001]}$, могут быть получены на основе подстановки (Б.128)-(Б.130) в (Б.70)-(Б.71):

$$\varepsilon = d_{33}E + \begin{cases} 0, & 0 \leq E < E_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{4}{3}e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} + \frac{1}{3}e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} \right], & E \geq E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.132})$$

$$D = \kappa E + \begin{cases} 0, & 0 \leq E < E_c; \\ P_0 \left[1 - \frac{8}{9}e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} - \frac{1}{9}e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} \right], & E \geq E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.133})$$

На Рисунке Б.29 показаны зависимости осевой деформации (Б.132) и электрического смещения (Б.133) от электрического поля, увеличивающегося от 0 до 2 МВ/м, для различных значений параметра H . Остальные параметры материала представлены в Таблице Б.6. Остаточная деформация при насыщении стремится к значению ε_0 . При увеличении параметра H становится более заметным упрочнение материала и уменьшение скорости насыщения.

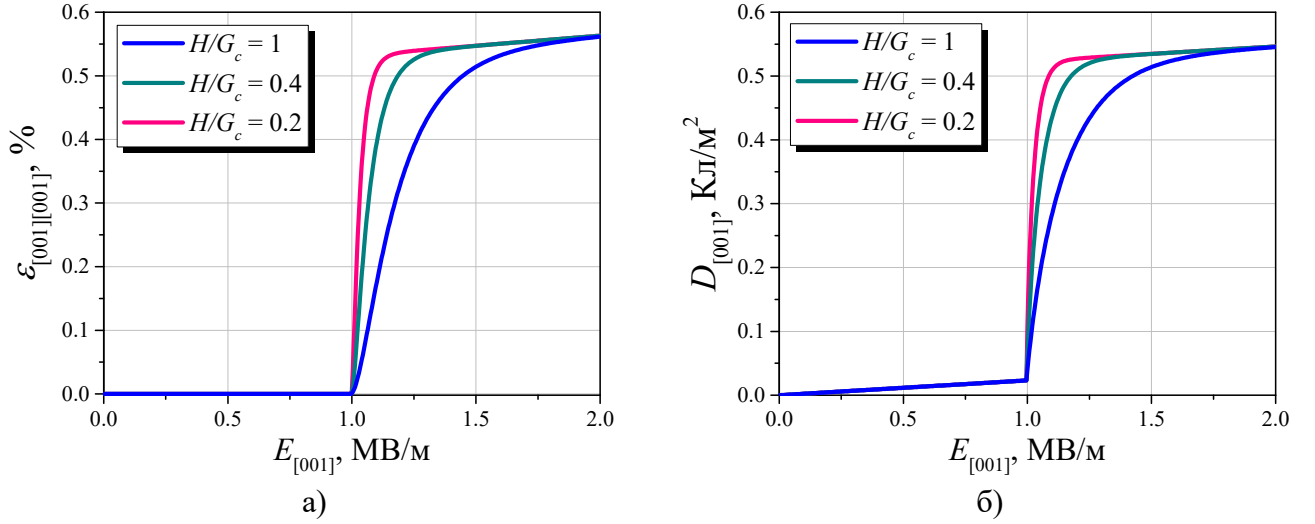


Рисунок Б.29 – Зависимости а) деформации и б) электрического смещения от электрического поля для склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра H

В случае $E < 0$ при воздействии электрическим полем в направлении, противоположном оси $[001]$, домен 3 является *донором* для 4х доменов 1, 2, 4 и 5, которые, в свою очередь, также являются *донорами* для домена 6, являющегося единственным финальным *акцептором*. В этом случае будут справедливы все ранее написанные соотношения для концентраций (Б.128)-(Б.130) с заменой индексов у доменов 6 и 3:

$$c_1 = \begin{cases} (c_{10} + \frac{1}{3}c_{30})e^{-\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} - \frac{1}{3}c_{30}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)}, & E \leq -E_c; \\ c_{10}, & -E_c < E \leq 0; \end{cases} \quad (\text{Б.134})$$

$$c_3 = \begin{cases} c_{30}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)}, & E \leq -E_c; \\ c_{30}, & -E_c < E \leq 0; \end{cases} \quad (\text{Б.135})$$

$$c_6 = \begin{cases} 1 - 4(c_{10} + \frac{1}{3}c_{30})e^{-\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} + \frac{1}{3}c_{30}e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)}, & E \leq -E_c; \\ 1 - 4c_{10} - c_{30}, & -E_c < E \leq 0. \end{cases} \quad (\text{Б.136})$$

В условиях первоначального равноприсутствия всех доменов ($c_i(0) = c_{10} = c_{60} = \frac{1}{6}$, $i = 1, \dots, 6$) искомое определяющее уравнение может быть получено на основе подстановки (Б.134)-(Б.136) в (Б.70)-(Б.71):

$$\varepsilon = d_{33}E + \begin{cases} 0, & -E_c < E \leq 0; \\ \varepsilon_0 \left[1 - \frac{4}{3} e^{-\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} + \frac{1}{3} e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} \right], & E \leq -E_c; \end{cases} \quad (\text{Б.137})$$

$$D = \kappa E - \begin{cases} 0, & -E_c < E \leq 0; \\ P_0 \left[1 - \frac{8}{9} e^{-\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} - \frac{1}{9} e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} \right], & E \leq -E_c. \end{cases} \quad (\text{Б.138})$$

При циклическом нагружении происходит поочередная смена статуса донора и акцептора для доменов 3 и 6 на полуциклах. Концентрации доменов при циклическом нагружении могут быть найдены на основе ранее полученных результатов для концентраций при $E > 0$ (Б.128)-(Б.130) и $E < 0$ (Б.134)-(Б.136). Отличие от ранее рассмотренных случаев монотонного нагружения заключается только в выборе начальных значений c_{10} , c_{30} и c_{60} . Строгое решение задачи при циклическом нагружении имеет достаточно громоздкий вид, зависящий от всей предыстории нагружения. Однако если ограничиться рассмотрением циклического нагружения с *глубоким насыщением* ($e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} \ll 1$ при $\dot{E} > 0$ и $e^{-\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} \ll 1$ при $\dot{E} < 0$), то решение значительно упрощается. В этом случае на ниспадающей ветви гистерезиса ($\dot{E} < 0$) $c_{30} = 1$, $c_{10} = c_{60} = 0$, на восходящей ветви гистерезиса ($\dot{E} > 0$) $c_{60} = 1$, $c_{10} = c_{30} = 0$.

С учетом введенных предположений определяющие уравнения, описывающие электромеханический и диэлектрический гистерезис при одноосном циклическом нагружении при изменении электрического поля от $E_{\min}$ ($E_{\min} < 0$) до $E_{\max}$ ($E_{\max} > 0$), имеют вид:

$$\varepsilon = d_{33}E + \begin{cases} \varepsilon_0, & \dot{E} < 0, \quad -E_c < E < E_{\max}; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} + 2e^{-4\left(\frac{-E-E_c}{H_1}\right)} \right], & \dot{E} < 0, \quad E_{\min} \leq E \leq -E_c; \\ \varepsilon_0, & \dot{E} > 0, \quad E_{\min} < E < E_c; \\ \varepsilon_0 \left[1 - 2e^{-\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} + 2e^{-4\left(\frac{E-E_c}{H_1}\right)} \right], & \dot{E} > 0, \quad E_c \leq E \leq E_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.139})$$

$$D = \kappa E + \begin{cases} P_0, & \dot{E} < 0, \quad -E_c < E < E_{\max}; \\ (-P_0) \left[1 - \frac{4}{3} e^{-\left(\frac{-E}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3} e^{-4\left(\frac{-E}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} < 0, \quad E_{\min} \leq E \leq -E_c; \\ -P_0, & \dot{E} > 0, \quad E_{\min} < E < E_c; \\ P_0 \left[1 - \frac{4}{3} e^{-\left(\frac{E}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} - \frac{2}{3} e^{-4\left(\frac{E}{\dot{E}_0 \tau}\right)^{n+1}} \right], & \dot{E} > 0, \quad E_c \leq E \leq E_{\max}; \end{cases} \quad (\text{Б.140})$$

Первые две строки в каждом из выражений (Б.139) и (Б.140) описывают ниспадающую ветвь гистерезиса ($\dot{E} < 0$) (кривая ABCD на Рисунке Б.30а). Последние две строки описывают восходящую ветвь гистерезиса ($\dot{E} > 0$) (кривая DEFA на Рисунке Б.30а). Первая строка соответствует обратимой линейной разгрузке без переключений (отрезок АВ на Рисунке Б.30а), вторая строка – накоплению отрицательной остаточной осевой деформации при сжатии (кривая BCD на Рисунке Б.30а), третья строка – обратимой линейной разгрузке без переключений (отрезок DE на Рисунке Б.30а), четвертая строка – накоплению положительной остаточной осевой деформации при растяжении (кривая EFA на Рисунке Б.30а).

Гистерезисные кривые для склерономной модели с порогом переключения, полученные на основе уравнений (Б.139) и (Б.140), показаны на Рисунке Б.30 для различных значений параметра H . Используемые в расчетах остальные параметры материала представлены в Таблице Б.6. При увеличении параметра H становится более заметным упрочнение материала. Кривая диэлектрического гистерезиса обладает центральной симметрией относительно начала координат: $D(-E) = -D(E)$. Остаточная поляризация при $\dot{E} > 0$ стремится к $+P_0$, а при $\dot{E} < 0$ к $-P_0$. Кривая электромеханического гистерезиса обладает осевой симметрией относительно оси ординат: $\varepsilon(-E) = \varepsilon(E)$. Остаточная осевая деформация при насыщении и при $\dot{E} > 0$ и при $\dot{E} < 0$ стремится к значению ε_0 .

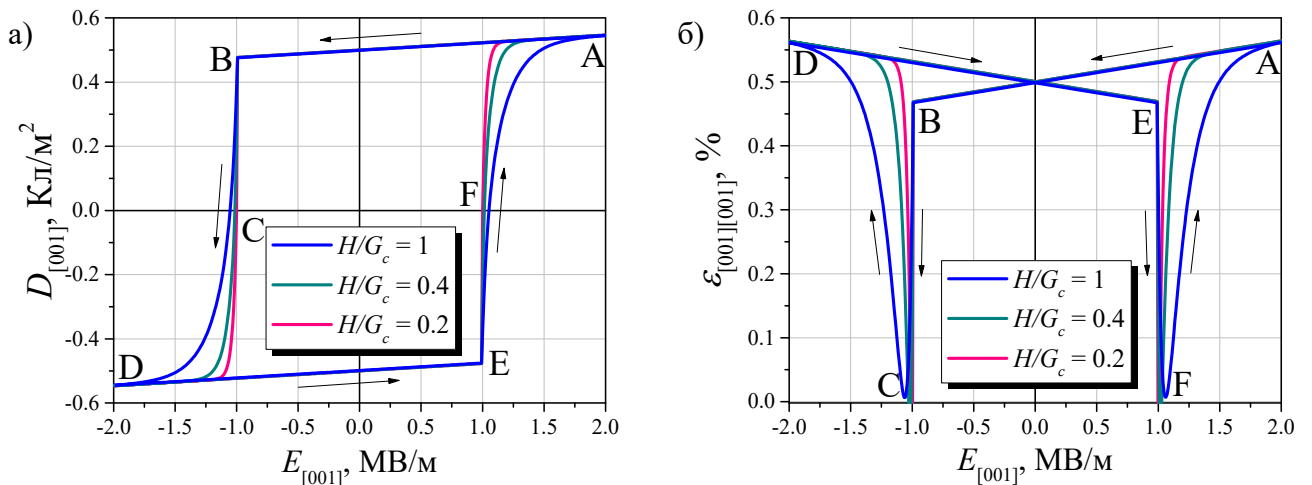


Рисунок Б.30 – Гистерезисные кривые для склерономной модели тетрагонального монокристалла с порогом переключения при различных значениях параметра H :
а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Кривая электромеханического гистерезиса (в форме бабочки) обладает двумя локальными минимумами (точки С и F на Рисунке Б.30б). Минимум остаточной деформации ε^r находится из условия обращения в ноль ее производной $\frac{d}{dE} \left[1 - 2e^{-\left(\frac{\pm E - E_c}{H_1}\right)} + 2e^{-4\left(\frac{\pm E - E_c}{H_1}\right)} \right] \varepsilon_0 = 0$ (см. (Б.139)). Абсциссы и ордината двух локальных минимумов остаточной деформации определяются равенствами:

$$E_{1,2} = \arg \min_E \varepsilon^r(E) = \pm \left[E_c + H_1 \left(\frac{\ln 4}{3} \right) \right], \quad (\text{Б.141})$$

$$\varepsilon_{1,2}^r = \min_E \varepsilon^r(E) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{3}{2\sqrt[3]{4}} \right). \quad (\text{Б.142})$$

Локализация абсцисс минимумов достаточно близка к $\pm E_c$. В случае $H = 100000$ имеем $E_{1,2} = \pm 1,0154 E_c$. При этом $\varepsilon_{1,2}^r = 0,05506 \varepsilon_0$. Следует отметить, что полученные результаты для остаточной деформации не могут быть непосредственно использованы для оценки минимумов полной деформации, поскольку в соответствии с (Б.139) на нее оказывает влияние еще слагаемое $d_{33}E$. Однако для рассматриваемых параметров материала и режима нагружения его влияние незначительно.

Сравнение гистерезисных кривых для трех рассмотренных выше моделей: реономной с пределом переключений (Б.34), реономной без предела (Б.49) и склерономной модели (Б.66) показано на Рисунке Б.31. Наблюдается хорошее совпадение результатов при выборе значений параметров моделей из Таблиц Б.4-Б.6. Полученный результат указывает на эквивалентность рассматриваемых математических моделей сегнетоэлектрорукого материала при описании механического гистерезиса при одноосном квазистатическом нагружении для процессов, слабочувствительных к скорости нагружения.

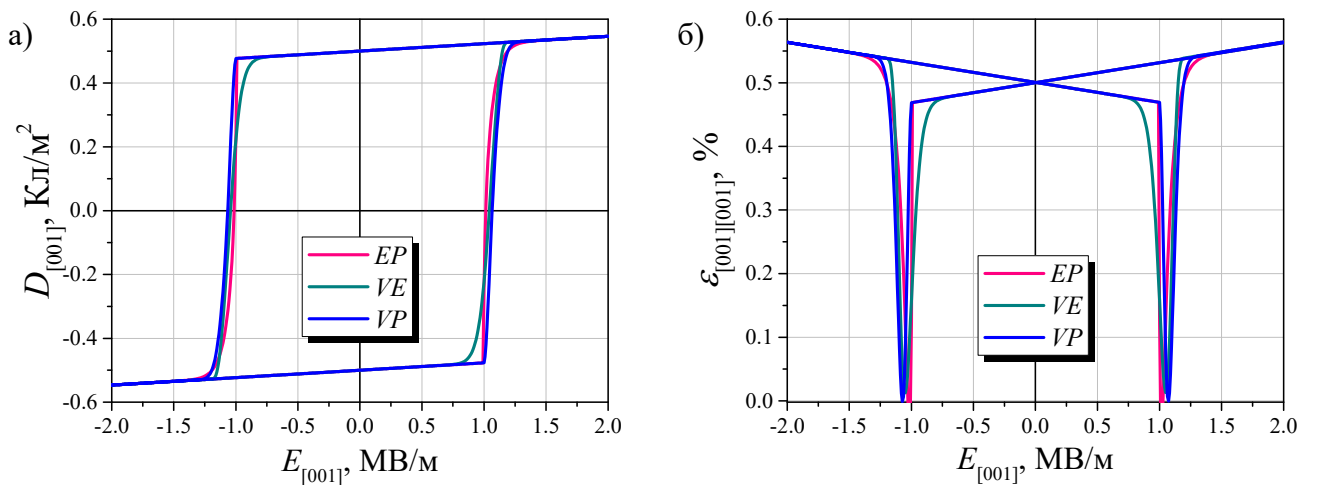


Рисунок Б.31 – Сравнение гистерезисных кривых: для реономной модели с пределом переключений (VP), реономной без предела (VE) и склерономной модели (EP):
 а) диэлектрический гистерезис и б) электромеханический гистерезис

Б.3. Выводы

Для всех рассмотренных моделей сегнетоэлектростроупругого монокристаллического материала при произвольной истории механического или электрического нагружения могут быть получены решения в *квадратурах*.

Аналитические решения для концентраций, деформаций и поляризации для всех рассмотренных систем нелинейных дифференциальных уравнений эволюции при линейно изменяющихся во времени нагрузках представляют собой линейные комбинации *константы и экспонент от степенных функций* от напряжения или электрического поля.

Аналитические решения при *механическом* нагружении имеют более простой вид в сравнении с *электрическим* воздействием, благодаря несвязанности системы уравнений эволюции, что есть прямое следствие отличий в кинетике доменных переключений. При одноосном механическом нагружении вдоль оси монокристалла [001] наблюдаются только две группы равноправных доменов: доноры и акцепторы, в то время как при одноосном электрическом воздействии вдоль оси [001] возникают три группы доменов: донор, акцептор и домены смешанного типа, работающие одновременно и как донор, и как акцептор.

При одноосном воздействии вдоль оси монокристалла [001] тензор остаточной деформации ϵ^r определяется только концентрацией доменов с c -осью, ортогональной направлению нагрузки, c_1 и спонтанной деформацией доменов с c -осью, ориентированной вдоль направления нагрузки ϵ_3^s . Вектор остаточной поляризации P^r определяется разностью концентраций доменов с c -осью, ориентированной вдоль направления нагрузки, $c_3 - c_6$ и спонтанной поляризацией доменов с c -осью, ориентированной вдоль направления нагрузки P_3^s .

Кривая механического гистерезиса монокристалла не обладает симметрией. Остаточная деформация при растяжении стремится к значению $+\epsilon_0$, а при сжатии к значению $-\epsilon_0/2$. Отличие в поведении вызвано различием в количестве акцепторов при растяжении (их 2) и сжатии (их 4). Кривая диэлектрического гистерезиса обладает центральной симметрией относительно начала координат: $D(-E) = -D(E)$. Остаточная поляризация при насыщении при $E > 0$ стремится к $+P_0$, а при $E < 0$ к $-P_0$. Кривая электромеханического гистерезиса обладает осевой симметрией относительно оси ординат: $\epsilon(-E) = \epsilon(E)$. Остаточная осевая деформация при насыщении и при $E > 0$, и при $E < 0$ стремится к значению $+\epsilon_0$.

Аппроксимационных возможностей каждой из трех рассматриваемых моделей сегнетоэлектростроупругого материала достаточно для описания слабочувствительных к скорости нагружения процессов первичной поляризации, а также механического, диэлектрического и электромеханического гистерезисов.

Полученные аналитические решения были использованы при тестировании разрабатываемого программного обеспечения: системы интегрирования определяющих уравнений CES v.4.7 и КЭ программного комплекса PANTOCRATOR v.7.20.

ПРИЛОЖЕНИЕ В. АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ ВЕКТОРНОГО ПОТЕНЦИАЛА В ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДЕ С ОДНОРОДНЫМ ПОЛЕМ

Рассматривается прямоугольный параллелепипед (кубоид) с длинами ортогональных ребер a , b и c . Для определения трех компонент векторного потенциала ψ на основе заданного в каждой точке параллелепипеда постоянного вектора электрического смещения $\mathbf{D}_0 = kD_0$ (направлен вдоль оси z) при помощи уравнения $\mathbf{D} = -\nabla \times \psi$ (3.5) в декартовых координатах имеем систему уравнений:

$$\begin{aligned} D_x &= \partial_z \psi_y - \partial_y \psi_z = 0, \\ D_y &= \partial_x \psi_z - \partial_z \psi_x = 0, \\ D_z &= \partial_y \psi_x - \partial_x \psi_y = D_0, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

где символ $\partial_x f$ используется для обозначения частной производной $\frac{\partial f}{\partial x}$.

Хорошо известными, допускающими непосредственную проверку, простейшими решениями системы уравнений (B.1) являются три варианта ([118] стр. 279):

$$\psi_x = D_0 y, \quad \psi_y = 0, \quad \psi_z = 0; \quad (\text{B.2})$$

$$\psi_x = 0, \quad \psi_y = -D_0 x, \quad \psi_z = 0; \quad (\text{B.3})$$

$$\psi_x = \frac{1}{2} D_0 y, \quad \psi_y = -\frac{1}{2} D_0 x, \quad \psi_z = 0. \quad (\text{B.4})$$

Линейная комбинация (B.2) и (B.3) также образует однопараметрическое семейство решений:

$$\psi_x = \left(\frac{1}{2} + \beta\right) D_0 y, \quad \psi_y = \left(-\frac{1}{2} + \beta\right) D_0 x, \quad \psi_z = 0, \quad (\text{B.5})$$

которые в компактных векторных обозначениях допускают представление:

$$\psi = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{D}_0 + \beta \nabla(xy). \quad (\text{B.6})$$

Решение (B.2) следует из (B.5) при $\beta = \frac{1}{2}$, (B.3) при $\beta = -\frac{1}{2}$ и (B.4) при $\beta = 0$.

Важно отметить, что решения (B.2)-(B.5) удовлетворяют условию кулоновской калибровки (3.16):

$$\nabla \cdot \psi = \partial_x \left[\left(\frac{1}{2} + \beta\right) D_0 y \right] + \partial_y \left[\left(-\frac{1}{2} + \beta\right) D_0 x \right] \equiv 0. \quad (\text{B.7})$$

Однако линейное решение (B.6) не удовлетворяет одному из вариантов калибровочного граничного условия (3.24)₂

$$\mathbf{n} \cdot \psi|_S = 0. \quad (\text{B.8})$$

Будем искать возможное решение, удовлетворяющее (B.8), в виде:

$$\boldsymbol{\psi} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{D}_0 + \beta \nabla(xy) + \bar{\boldsymbol{\psi}}. \quad (\text{B.9})$$

Для $\bar{\boldsymbol{\psi}}$ следствием (B.1) и (B.9) имеем $\nabla \times \bar{\boldsymbol{\psi}} = 0$ и следствием (B.7) и (B.9) имеем $\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}} = 0$ в объеме V и $\mathbf{n} \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}}|_S = -\mathbf{n} \cdot [\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{D}_0 + \beta \nabla(xy)]$ на боковых поверхностях. С учетом $\nabla \times \bar{\boldsymbol{\psi}} = 0$ решение $\bar{\boldsymbol{\psi}}$ можно искать в виде:

$$\bar{\boldsymbol{\psi}} = \nabla \Phi, \quad (\text{B.10})$$

для которого следствием $\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\psi}} = 0$ скалярная функция $\Phi = \Phi(x, y)$ должна быть решением уравнения Лапласа:

$$\Delta \Phi = 0 \quad (\text{B.11})$$

и удовлетворять гр. условиям $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = -\mathbf{n} \cdot [\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{D}_0 + \beta \nabla(xy)]$ или в координатной форме:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_{x=\pm \frac{a}{2}} = (\frac{1}{2} + \beta) D_0 y, \quad \left. \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_{y=\pm \frac{b}{2}} = (-\frac{1}{2} + \beta) D_0 x. \quad (\text{B.12})$$

Решение двумерного уравнения Лапласа (B.11) в декартовых координатах может быть найдено с помощью метода разделения переменных с использованием предположения $\Phi(x, y) = X(x)Y(y)$, которое после преобразований приводит к

$$\Phi = -\frac{4(\frac{1}{2} + \beta) D_0 b^2}{\pi^3} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \text{ нечет})}}^{\infty} \frac{sh \frac{\pi n x}{b}}{n^3 ch \frac{\pi n a}{2b}} \sin \frac{\pi n y}{b} - \frac{4(-\frac{1}{2} + \beta) D_0 a^2}{\pi^3} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \text{ нечет})}}^{\infty} \frac{sh \frac{\pi n y}{a}}{n^3 ch \frac{\pi n b}{2a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \quad (\text{B.13})$$

и выражениям для компонент векторного потенциала, следующих из выражений (B.9), (B.10) и (B.13):

$$\begin{aligned} \psi_x &= (\frac{1}{2} + \beta) D_0 y - \frac{4(\frac{1}{2} + \beta) D_0 b}{\pi^2} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \text{ нечет})}}^{\infty} \frac{ch \frac{\pi n x}{b}}{n^2 ch \frac{\pi n a}{2b}} \sin \frac{\pi n y}{b} - \frac{4(-\frac{1}{2} + \beta) D_0 a}{\pi^2} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \text{ нечет})}}^{\infty} \frac{sh \frac{\pi n y}{a}}{n^2 ch \frac{\pi n b}{2a}} \cos \frac{\pi n x}{a}, \\ \psi_y &= (-\frac{1}{2} + \beta) D_0 x - \frac{4(\frac{1}{2} + \beta) D_0 b}{\pi^2} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \text{ нечет})}}^{\infty} \frac{sh \frac{\pi n x}{b}}{n^2 ch \frac{\pi n a}{2b}} \cos \frac{\pi n y}{b} - \frac{4(-\frac{1}{2} + \beta) D_0 a}{\pi^2} \sum_{\substack{n=1 \\ (n \text{ нечет})}}^{\infty} \frac{ch \frac{\pi n y}{a}}{n^2 ch \frac{\pi n b}{2a}} \sin \frac{\pi n x}{a}, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\psi_z = 0.$$

Наличие решения (B.14) доказывает возможность использования граничного условия (B.8).

ПРИЛОЖЕНИЕ Г. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О РАДИАЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЦИЛИНДРА

Рассматривается нелинейная краевая задача о радиальной поляризации начально неполяризованного бесконечно длинного полого цилиндра. Задача решается в предположении об изотропных свойствах сегнетоэлектрического материала. В качестве граничных условий рассматриваются: заданный на внутренней цилиндрической поверхности радиуса a постоянный потенциал $\varphi|_{r=a} = \bar{\varphi} > 0$ и нулевой потенциал $\varphi|_{r=b} = 0$ на внешней боковой поверхности радиуса b .

В осесимметричном случае вектор электрического смещения допускает представление $\mathbf{D} = \mathbf{e}_r D_r(r)$, и уравнение Гаусса $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ упрощается до обыкновенного дифференциального уравнения $1/r(rD_r)' = 0$, имеющего общее решение:

$$D_r = \frac{C}{r}, \quad (\text{Г.1})$$

где r - радиальная координата, $\mathbf{e}_r$ - соответствующий единичный базисный вектор цилиндрической системы координат, C - постоянная интегрирования.

Интегрирование определяющих уравнений феноменологической модели сегнетоэлектрического материала (2.136)₂, (2.168), (2.143)₂, (2.156) приводит к соотношениям:

$$D_r = \begin{cases} \kappa E_r, & |\mathbf{E}| \leq E_0, \\ \kappa E_r + P_r^r, & |\mathbf{E}| \geq E_0, \end{cases} \quad (\text{Г.2})$$

$$P_r^r = |\mathbf{P}^r| = P_0 \cdot \begin{cases} 1 - \left[1 + \frac{m^e - 1}{H^e P_0} (|\mathbf{E}| - E_0) \right]^{-\frac{1}{m^e - 1}}, & m^e \neq 1, \\ 1 - e^{-\frac{|\mathbf{E}| - E_0}{H^e P_0}}, & m^e = 1, \end{cases} \quad (\text{Г.3})$$

где E_r и P_r^r - радиальные компоненты вектора электрического поля $\mathbf{E} = \mathbf{e}_r E_r(r)$ и вектора поляризации $\mathbf{P}^r = \mathbf{e}_r P_r^r(r)$, E_0 - коэрцитивное поле, P_0 - поляризация при насыщении. Уравнения $|\mathbf{E}| = E_r$ и $|\mathbf{P}^r| = P_r^r$ верны для рассматриваемого случая $\bar{\varphi} > 0$. Частный случай определяющего уравнения (Г.3) при $m^e = 2$ рассмотрен в [350].

При дополнительном предположении малого насыщения $|\mathbf{P}^r| \ll P_0$ или эквивалентного условия $|\mathbf{E}| - E_0 \ll H^e P_0$ уравнения (Г.2)-(Г.3) могут быть упрощены:

$$D_r = \begin{cases} \kappa E_r, & |\mathbf{E}| \leq E_0, \\ \kappa E_r + \frac{|\mathbf{E}| - E_0}{H^e}, & |\mathbf{E}| \geq E_0. \end{cases} \quad (\Gamma.4)$$

Определяющее уравнение (Г.4) не зависит от констант материала m^e и P_0 в противоположность определяющим уравнениям (Г.2)-(Г.3).

Подстановка (Г.1) и $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$ (с учетом $\varphi = \varphi(r)$ и $\varphi'(r) = d\varphi/dr < 0$) в (Г.4) приводит к дифференциальным уравнениям:

$$\begin{cases} -\kappa \varphi' = \frac{C}{r}, & -\varphi' \leq E_0, \\ -\kappa \varphi' + \frac{-\varphi' - E_0}{H^e} = \frac{C}{r}, & -\varphi' \geq E_0. \end{cases} \quad (\Gamma.5)$$

Граничные условия в задаче $\varphi(a) = \varphi_0$ и $\varphi(b) = 0$. На внешнем радиусе зоны переключений r_f потенциал φ должен быть непрерывным и должно выполняться условие переключения. Таким образом, мы получаем решения дифференциальных уравнений (Г.5) для *скалярного потенциала* в виде:

$$\varphi = \begin{cases} \bar{\varphi} \left(1 - \frac{\ln r/a}{\ln b/a}\right), & \bar{\varphi} \leq \varphi_* & \text{(без перекл.)} \\ -E_0 r_f \ln r/b, & \varphi_* \leq \bar{\varphi} \leq \varphi_{**}, \quad r \geq r_f \\ \bar{\varphi} - \frac{E_0}{\kappa H^e + 1} \left(r - a + \kappa H^e r_f \ln r/a\right), & \varphi_* \leq \bar{\varphi} \leq \varphi_{**}, \quad r \leq r_f \\ \bar{\varphi} \left(1 - \frac{\ln r/a}{\ln b/a}\right) - \frac{E_0(b-a)}{\kappa H^e + 1} \left(\frac{r-a}{b-a} - \frac{\ln r/a}{\ln b/a}\right), & \bar{\varphi} \geq \varphi_{**} & \text{(полн. перекл.)} \end{cases} \quad (\Gamma.6)$$

где $\varphi_* = E_0 a \ln b/a$ соответствует началу процесса переключения, при значении потенциала $\varphi_{**} = \frac{E_0}{\kappa H^e + 1} (b - a + b \kappa H^e \ln b/a)$ зона переключения полностью охватывает все поперечное сечение цилиндра. Внешний радиус зоны переключения r_f определяется как решение нелинейного алгебраического уравнения

$$\frac{E_0}{\kappa H^e + 1} \left(r_f - a + r_f \kappa H^e \ln \frac{b}{a} - r_f \ln \frac{r_f}{b} \right) = \bar{\varphi}. \quad (\Gamma.7)$$

Электрическое поле $E_r = -\varphi'$ определяется дифференцированием (Г.6)

$$E_r = \begin{cases} \frac{\bar{\varphi}}{r \ln b / a}, & \bar{\varphi} \leq \varphi_* & (\text{без перекл.}) \\ E_0 \frac{r_f}{r}, & \varphi_* \leq \bar{\varphi} \leq \varphi_{**}, \quad r \geq r_f \\ E_0 \frac{r_f}{r} \frac{\kappa H^e}{\kappa H^e + 1} + \frac{E_0}{\kappa H^e + 1}, & \varphi_* \leq \bar{\varphi} \leq \varphi_{**}, \quad r \leq r_f \end{cases} \quad (\text{часть перекл.}) \quad (\text{Г.8})$$

$$\left[\frac{1}{r \ln b / a} \left[\bar{\varphi} - \frac{E_0(b-a)}{\kappa H^e + 1} \right] + \frac{E_0}{\kappa H^e + 1}, \quad \bar{\varphi} \geq \varphi_{**} \right. \quad (\text{полн. перекл.})$$

Электрическое смещение D_r в соответствии с (Г.4) и (Г.8) определяется выражениями:

$$D_r = \begin{cases} \frac{\kappa \bar{\varphi}}{r \ln b / a}, & \bar{\varphi} \leq \varphi_*, & (\text{без перекл.}) \\ E_0 \frac{r_f}{r}, & \varphi_* \leq \bar{\varphi} \leq \varphi_{**} & (\text{часть перекл.}) \\ \frac{1}{r H^e \ln b / a} \left[\bar{\varphi} (\kappa H^e + 1) - E_0(b-a) \right], & \bar{\varphi} \geq \varphi_{**} & (\text{полн. перекл.}) \end{cases} \quad (\text{Г.9})$$

Векторный потенциал вида $\Psi = \mathbf{e}_\theta \psi_\theta(r, z) = \mathbf{e}_\theta C \frac{z}{r}$ удовлетворяет (Г.1), условию калибровки $\nabla \cdot \Psi = 0$ и граничным условиям $\mathbf{n} \cdot \Psi|_S = 0$. В соответствии с (Г.9) для ψ_θ справедливы выражения:

$$\psi_\theta = \begin{cases} \frac{z \kappa \bar{\varphi}}{r \ln b / a}, & \bar{\varphi} \leq \varphi_*, & (\text{без перекл.}) \\ E_0 z \frac{r_f}{r}, & \varphi_* \leq \bar{\varphi} \leq \varphi_{**} & (\text{часть перекл.}) \\ \frac{z}{r H^e \ln b / a} \left[\bar{\varphi} (\kappa H^e + 1) - E_0(b-a) \right], & \bar{\varphi} \geq \varphi_{**} & (\text{полн. перекл.}) \end{cases} \quad (\text{Г.10})$$

При низких уровнях нагрузки $\bar{\varphi} < \varphi_* = E_0 a \ln b / a$ переключения отсутствуют, и частным случаем (Г.6)-(Г.10) получаются решения для *линейного диэлектрика*:

$$\varphi = \bar{\varphi} \frac{\ln b / r}{\ln b / a}, \quad (\text{Г.11})$$

$$E_r = \frac{\bar{\varphi}}{r \ln b / a}, \quad E_\theta = E_z = 0, \quad (\text{Г.12})$$

$$D_r = \frac{\kappa \bar{\varphi}}{r \ln b / a}, \quad D_\theta = D_z = 0, \quad (\text{Г.13})$$

$$\psi_\theta = \frac{z \kappa \bar{\varphi}}{r \ln b / a}, \quad \psi_r = \psi_z = 0. \quad (\text{Г.14})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Д. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ЦИЛИНДРЕ В ОДНОРОДНОМ ПОЛЕ

Решение электростатической задачи о цилиндре с диэлектрической проницаемостью κ_i , заключенном в другой диэлектрик с диэлектрической проницаемостью κ_e под действием однородного параллельного внешнего электрического поля E_∞ , рассмотрено для скалярного потенциала в работах [69, 105]. Целью данного исследования является получение решения для векторного потенциала.

Как следует из соотношений $\mathbf{D} = \kappa \mathbf{E}$, $\mathbf{D} = -\nabla \times \boldsymbol{\psi}$ (3.5) и $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$ (3.3), векторный потенциал $\boldsymbol{\psi}$ связан со скалярным потенциалом φ уравнением

$$\nabla \times \boldsymbol{\psi} = \kappa \nabla \varphi. \quad (\text{Д.1})$$

Электрический скалярный потенциал φ в задаче о диэлектрическом цилиндре радиуса R , помещенном в изначально однородное внешнее поле E_∞ , направленное вдоль оси y , определяется уравнениями [69, с. 175, 105, с. 74]:

$$\varphi = \begin{cases} -2E_\infty \frac{\kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} y, & \sqrt{x^2 + y^2} \leq R, \\ -E_\infty y + E_\infty \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} \frac{yR^2}{x^2 + y^2}, & \sqrt{x^2 + y^2} \geq R. \end{cases} \quad (\text{Д.2})$$

Потенциал внутри цилиндра описывает постоянное электрическое поле, параллельное приложенному дальнему полю E_∞ . Вне цилиндра потенциал эквивалентен приложенному полю E_∞ плюс полю, индуцированному цилиндром.

Предположим, что векторный потенциал рассматриваемой двумерной задачи допускает представление $\boldsymbol{\psi} = \mathbf{k} \psi_z(x, y)$, тогда следствием (Д.1) имеем:

$$\begin{cases} \partial_x \psi_z = -\kappa \partial_y \varphi, \\ \partial_y \psi_z = \kappa \partial_x \varphi. \end{cases} \quad (\text{Д.3})$$

Подстановка выражений (Д.2) в уравнения (Д.3) приводит к двум системам:

$$\text{при } \sqrt{x^2 + y^2} \leq R : \quad \begin{cases} \partial_x \psi_z = \kappa_i 2E_\infty \frac{\kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i}, \\ \partial_y \psi_z = 0, \end{cases} \quad (\text{Д.4})$$

$$\text{при } \sqrt{x^2 + y^2} \geq R : \quad \begin{cases} \partial_x \psi_z = \kappa_e E_\infty - \kappa_e E_\infty \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} R^2 \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \partial_y \psi_z = -\kappa_e E_\infty \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} R^2 \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}. \end{cases} \quad (\text{Д.5})$$

Интегрирование уравнений (Д.4) и (Д.5) приводит к решению задачи для ψ_z :

$$\psi_z = \begin{cases} 2E_\infty \frac{\kappa_e}{1 + \kappa_e / \kappa_i} x, & \sqrt{x^2 + y^2} \leq R, \\ \kappa_e E_\infty x + \kappa_e E_\infty \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} \frac{xR^2}{x^2 + y^2}, & \sqrt{x^2 + y^2} \geq R. \end{cases} \quad (\text{Д.6})$$

Дифференцированием выражений потенциалов (Д.6) или (Д.2) получаются решения задачи для электрического поля и электрического смещения:

$$\frac{E_x}{E_\infty} = \begin{cases} 0, & \sqrt{x^2 + y^2} \leq R, \\ 2 \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} \frac{R^2 xy}{(x^2 + y^2)^2}, & \sqrt{x^2 + y^2} \geq R, \end{cases} \quad (\text{Д.7})$$

$$\frac{E_y}{E_\infty} = \begin{cases} 2 \frac{\kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i}, & \sqrt{x^2 + y^2} \leq R, \\ 1 + \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} \frac{R^2 (x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, & \sqrt{x^2 + y^2} \geq R, \end{cases} \quad (\text{Д.8})$$

$$\frac{D_x}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} 0, & \sqrt{x^2 + y^2} \leq R, \\ 2 \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} \frac{R^2 xy}{(x^2 + y^2)^2}, & \sqrt{x^2 + y^2} \geq R, \end{cases} \quad (\text{Д.9})$$

$$\frac{D_y}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} 2 \frac{1}{1 + \kappa_e / \kappa_i}, & \sqrt{x^2 + y^2} \leq R, \\ 1 + \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + \kappa_e / \kappa_i} \frac{R^2 (y^2 - x^2)}{(x^2 + y^2)^2}, & \sqrt{x^2 + y^2} \geq R. \end{cases} \quad (\text{Д.10})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Е. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СФЕРЕ В ОДНОРОДНОМ ПОЛЕ

Решение электростатической задачи о сфере с диэлектрической проницаемостью κ_i , погруженной в диэлектрик с диэлектрической проницаемостью κ_e под действием однородного параллельного внешнего электрического поля E_∞ , рассмотрено для скалярного потенциала в работах [28, 110]. Целью данного исследования является получение решения для векторного потенциала.

Векторный потенциал Ψ связан со скалярным потенциалом φ уравнением (Д.1). Электрический скалярный потенциал φ в задаче о диэлектрической сфере радиуса R , помещенной в изначально однородное внешнее поле E_∞ , направленное вдоль положительной оси z , определяется уравнениями [28, с. 136, 110, с. 187]:

$$\varphi = \begin{cases} -3E_\infty \frac{\kappa_e / \kappa_i}{1 + 2\kappa_e / \kappa_i} z, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq R, \\ -E_\infty z + E_\infty \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + 2\kappa_e / \kappa_i} \frac{zR^3}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}}, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \geq R. \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

Потенциал внутри сферы описывает постоянное электрическое поле, параллельное приложенному дальнему полю E_∞ . Вне сферы потенциал эквивалентен приложенному полю E_∞ плюс полю электрического диполя, ориентированного по оси z с моментом $\mathbf{p} = \mathbf{k} \kappa_e E_\infty \frac{1 - \kappa_e / \kappa_i}{1 + 2\kappa_e / \kappa_i} R^3$. СП диполя можно переписать как

$$\varphi_{dipole} = \frac{1}{\kappa_e} \mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r^3} = -\frac{1}{\kappa_e} \mathbf{p} \cdot \nabla r^{-1}, \quad (\text{E.2})$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Использование тождеств $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ и $\Delta r^{-1} = 0$ позволяет доказывать равенство $\nabla \times (\mathbf{p} \times \nabla r^{-1}) = \mathbf{p}(\nabla \cdot \nabla r^{-1}) - \nabla r^{-1}(\nabla \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{p}\Delta r^{-1} - \nabla(\mathbf{p} \cdot \nabla r^{-1}) = \kappa_e \nabla \varphi_{dipole}$, следствием которого и (Д.1) получается выражение для векторного потенциала диполя:

$$\Psi_{dipole} = \mathbf{p} \times \nabla r^{-1} = \mathbf{p} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3}. \quad (\text{E.3})$$

Градиент произвольной скалярной функции может быть добавлен к правой части (E.3), но мы им пренебрежем, поскольку он не влияет на поле $\mathbf{D}$. Комбинируя выражение векторного потенциала для однородного поля (B.4) с (E.3), окончательно получаем решение с векторным потенциалом:

$$\frac{\psi}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} 3 \frac{1}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{k}, & r \leq R, \\ \left(1 + 2 \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3}{r^3} \right) \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{k}, & r \geq R, \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

или в координатной форме:

$$\frac{\psi_x}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} 3 \frac{1}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{1}{2} y, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq R, \\ \left(1 + 2 \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \right) \frac{1}{2} y, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \geq R, \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

$$\frac{\psi_y}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} -3 \frac{1}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{1}{2} x, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq R, \\ - \left(1 + 2 \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \right) \frac{1}{2} x, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \geq R, \end{cases} \quad (\text{E.6})$$

$$\frac{\psi_z}{\kappa_e E_\infty} = 0. \quad (\text{E.7})$$

На основе выражений потенциалов (E.1) или (E.4) следует решение задачи для вектора электрического поля и вектора электрического смещения:

$$\frac{\mathbf{E}}{E_\infty} = \begin{cases} 3 \frac{\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \mathbf{k}, & r \leq R, \\ \left(1 - \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3}{r^3} \right) \mathbf{k} + 3 \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3 z}{r^5} \mathbf{r}, & r \geq R, \end{cases} \quad (\text{E.8})$$

$$\frac{\mathbf{D}}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} 3 \frac{1}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \mathbf{k}, & r \leq R, \\ \left(1 - \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3}{r^3} \right) \mathbf{k} + 3 \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3 z}{r^5} \mathbf{r}, & r \geq R, \end{cases} \quad (\text{E.9})$$

или в координатной форме для z-компонент:

$$\frac{E_z}{E_\infty} = \begin{cases} 3 \frac{\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i}, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq R, \\ 1 + \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3 (2z^2 - x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}}, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \geq R, \end{cases} \quad (\text{E.10})$$

$$\frac{D_z}{\kappa_e E_\infty} = \begin{cases} 3 \frac{1}{1+2\kappa_e/\kappa_i}, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq R, \\ 1 + \frac{1-\kappa_e/\kappa_i}{1+2\kappa_e/\kappa_i} \frac{R^3 (2z^2 - x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}}, & \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \geq R. \end{cases} \quad (\text{E.11})$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Акопян В.А., Паринов И.В., Истомина И.А. Пьезогенераторы – новое перспективное направление малой энергетики // RELGA. 2011. Т. 227, № 9. С. 121–127.
2. Астарита Д., Марруччи Д. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. Москва: Мир, 1978. 309 с.
3. Бардзокас Д.И., Зобнин А.И., Сеник Н.А., Фильштинский М.Л. Математическое моделирование в задачах механики связанных полей. Т.1: Введение в теорию термопьезоэлектричества. Москва: URSS, 2010. 311 с.
4. Барфут Д., Тейлор Д. Полярные диэлектрики и их применения. Москва: Мир, 1981. 526 с.
5. Белоконов А.В., Скалиух А.С. Об определяющих соотношениях в трехмерных моделях поляризации // Математическое моделирование систем и процессов. 2008. № 16. С. 10–16.
6. Белоконов А.В., Скалиух А.С. Математическое моделирование необратимых процессов поляризации. Ростов-на-Дону: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 325 с.
7. Бенин А.В., Семенов А.С., Семенов С.Г., Мельников Б.Е. Математическое моделирование процесса разрушения сцепления арматуры с бетоном. Часть 1. Модели с учетом несплошности соединения // Инженерно-строительный журнал. 2013. Т. 40, № 5. С. 86–99.
8. Бессон Ж., Каэто Ж., Шабош Ж.Л., Форест С. Нелинейная механика материалов / ред. Л.Б. Гецов, Б.Е. Мельников, А.С. Семенов, СПб: Изд-во Политехн. университета, 2010. 398 с.
9. Блинов Л.М., Фридкин В.М., Палто С.П. [и др.] Двумерные сегнетоэлектрики // Успехи физических наук. 2000. Т. 170, № 3. С. 247–262.
10. Бобцов А.А., Бойков В.И., Быстров С.В., Григорьев В.В. Исполнительные устройства и системы для микроперемещений. Санкт-Петербург: СПб ГУ ИТМО, 2011. 131 с.
11. Бондарь В.С. Решение нелинейных задач сложного нагружения оболочек вращения // Расчёты на прочность и жёсткость. Межвуз. сб. Москва: Мосстанкин, 1982. С. 85–95.
12. Бондарь В.С. Неупругость. Варианты теории. Москва: Физматлит, 2004. 144 с.
13. Быховский Э.Б., Смирнов Н.В. Об ортогональном разложении пространства вектор-функций, квадратично суммируемых по заданной области, и операторах векторного анализа // Тр. МИАН СССР. 1960. Т. 59. С. 5–36.
14. Вакуленко А.А. О связях между напряжениями и деформациями в неупругих средах // ДАН СССР. 1958. Т. 118, № 4. С. 3–35.
15. Гецов Л.Б., Михайлов В.Е., Семенов А.С. [и др.] Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Часть 2. Монокристаллические материалы // Газотурбинные технологии. 2011. Т. 101, № 8. С. 18–25.
16. Гецов Л.Б., Михайлов В.Е., Семенов А.С., Семенов С.Г., Михайлов А.Л. Современные нормы прочности стационарных ГТУ // Газотурбинные технологии. 2013. Т. 119, № 8. С. 24–29.
17. Гецов Л.Б., Рыбников А.И., Семенов А.С. Сопротивление термической усталости жаропрочных сплавов // Теплоэнергетика. 2009. № 5. С. 51–58.
18. Гинзбург В.Л. О диэлектрических свойствах сегнетоэлектриков и титаната бария // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1945. Т. 15, № 12. С. 739–749.
19. Гинзбург В.Л. Теория сегнетоэлектрических явлений // Успехи физических наук. 1949. Т. 38, № 4. С. 490–525.
20. Гинзбург В.Л. Фазовые переходы в сегнетоэлектриках (несколько исторических замечаний) // Успехи физических наук. 2001. Т. 171, № 10. С. 1091–1097.
21. Гладкий В.В., Кириков В.А., Нехлюдов С.В., Иванова Е.С., Шубникова А.В. Релаксация поляризации в сегнетоэлектрическом кристалле с различными состояниями доменной структуры и поверхности // Физика твердого тела. 1997. Т. 39, № 11. С. 2046–2052.
22. Головнин В.А., Каплунов И.А., Малышкина О.В., Педько Б.Б., Мовчикова А.А. Физические

основы, методы исследования и практическое применение пьезоматериалов. Москва: Техносфера, 2016. 272 с.

23. Горохов М.Ю., Семенов А.С., Мельников Б.Е. Рациональный выбор величины параметра штрафа при конечно-элементном решении контактных задач // Математическое моделирование в механике сплошных сред. Методы граничных и конечных элементов. Труды XXI Межд. конф. / ред. В.А. Постнов, Санкт-Петербург, 2005. С. 190–198.

24. Гриднев С.А. Сегнетоэластики - новый класс кристаллических твердых тел // Соросовский образовательный журнал. 2000. Т. 6, № 8. С. 100–107.

25. Гриднев С.А. Сегнетоэластические кристаллы: основные свойства, влияние дефектов // Природа. 2002. № 6. С. 22–29.

26. Гринченко В.Т., Улитко А.Ф., Шульга Н.А. Механика связанных полей в элементах конструкций. Т.5. Электроупругость. 1989. 280 с.

27. Грищенко А.И., Семенов А.С., Семенов С.Г., Мельников Б.Е. Влияние структурных параметров кладки на эффективные упругие свойства и прочность // Инженерно-строительный журнал. 2014. Т. 49, № 5. С. 95–106.

28. Джексон Д. Классическая электродинамика. Москва: Мир, 1965. 703 с.

29. Друккер Д. О постулате устойчивости материала в механике сплошной среды // Механика. 1964. № 3. С. 115–128.

30. Желудев И.С. Физика кристаллических диэлектриков. Москва: Наука, 1968. 461 с.

31. Жилин П.А. Рациональная механика сплошных сред. Санкт-Петербург, 2012. 584 с.

32. Захаров М.А., Кукушкин С.А., Осипов А.В. Теория переключения многоосных сегнето-электриков (основные стадии) // Физика твердого тела. 2005. Т. 47, № 4. С. 673–678.

33. Зуев А.Ю. Дефекты и свойства перспективных оксидных материалов. Екатеринбург, 2008. 64 с.

34. Иванов В.Н., Рабкин Л.М. Переключаемая часть поляризации сегнетокерамики при импульсной эмиссии электронов // Журнал технической физики. 2000. Т. 70, № 12. С. 43–46.

35. Ивашов И.В., Семенов А.С. Моделирование гистерезисных явлений в бесвинцовых сегнето-электроэластиках при наличии орторомбической фазы // Мат. Научн. форума с межд. участием. Неделя науки СПбПУ / ред. Я.А. Гатаулин, Санкт-Петербург, 2015. С. 75–78.

36. Ильюшин А.А. О связи между напряжениями и малыми деформациями в механике сплошных сред // Прикладная математика и механика. 1954. Т. 18, № 6. С. 641–666.

37. Ильюшин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. Москва: Изд-во АН СССР, 1963. 271 с.

38. Ильюшин А.А. Механика сплошной среды. Москва: Изд-во МГУ, 1990. 310 с.

39. Инденбом В.Л., Чернышева М.Л. Индивидуальные характеристики доменов сегнетовой соли // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1958. Т. 22, № 12. С. 1469–1473.

40. Кадашевич Ю.И. О различных вариантах тензорно-линейных соотношений в теории пластичности // Исследования по упругости и пластичности. 1967. № 6. С. 39–45.

41. Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ. 3-е изд., Москва: Наука, 1984. 750 с.

42. Катанаха Н.А., Гецов Л.Б., Данюшевский И.А., Семенов А.С. Ресурс гибов высокотемпературных паропроводов // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 2013. Т. 178, № 3. С. 82–94.

43. Катанаха Н.А., Семенов А.С., Гецов Л.Б. Долговечность гибов высокотемпературных паропроводов в условиях длительной эксплуатации // Теплоэнергетика. 2015. № 4. С. 32–42.

44. Классен-Неклюдова М.В., Чернышева М.А., Штенберг А.А. О реальном строении кристаллов сегнетовой соли // ДАН СССР. 1948. Т. 63, № 5. С. 527–530.

45. Ключников В.Д. Физико-математические основы прочности и пластичности. Москва: Изд-во МГУ, 1994. 189 с.

46. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов // Изв. АН СССР. Сер.

Мат. 1937. Т. 1, № 3. С. 355–359.

47. Красносельский М.А., Покровский А.В. Системы с гистерезисом. Москва: Наука, 1983. 271 с.
48. Кукушкин С.А., Осипов А.В. Термодинамика и кинетика начальных стадий переключения в сегнетоэлектриках // Физика твердого тела. 2001. Т. 43, № 1. С. 80–87.
49. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. Москва: Мир, 1981. 736 с.
50. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1937. Т. 7, № 627. С. 234–252.
51. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. II // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1937. Т. 7, № 627. С. 253–261.
52. Ландау Л.Д. Собрание трудов / ред. Е.М. Лифшиц, Москва: Наука, 1969.
53. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. Москва: Наука, 1982. 620 с.
54. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 616 с.
55. Ландау Л.Д., Халатников И.М. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода // Докл. Акад. наук СССР. 1954. Т. 96, № 3. С. 469–472.
56. Ле-Захаров С.А., Семенов А.С. Гипергеометрическая аппроксимация свободной энергии ферроэлектродупругого материала С.-Петербург: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. С. 50–52.
57. Ле-Захаров С.А., Семенов А.С. Реологические модели сегнетоэлектродупругих материалов // XXXVIII Неделя науки СПбПУ. Мат. межд. научно-практич. конф. Ч. V. С.-Петербург, 2009. С. 67–68.
58. Ле-Захаров С.А., Семенов А.С., Мельников Б.Е. Моделирование нелинейного поведения сегнетоэлектродупругих материалов при сложном электромеханическом нагружении с использованием реологических моделей // Морские интеллектуальные технологии. 2011. № 3. С. 87–91.
59. Леманов В.В., Ярмаркин В.К. Поле деполяризации и усталость сегнетоэлектрических тонких пленок // Физика твердого тела. 1996. № 8. С. 2482–2492.
60. Лобанов С.М., Семенов А.С. Моделирование нелинейного поведения бессвинцовых пьезо-керамик в различных сегнетоэлектрических фазах // Труды 6 межд. молодежн. симпозиума «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов» Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2017. С. 81–84.
61. Лобанов С.М., Семенов А.С. Конечное-элементное моделирование гистерезисного поведения бессвинцовых сегнетоэлектриков при циклическом нагружении вблизи морфотропных фазовых границ // Труды 8 Межд. Междисциплинар. Молодежн. симпоз. «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов» Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2019. С. 296–300.
62. Лобанов С.М., Семенов А.С. Конечное-элементный анализ влияния параметров кристаллической решетки на экстремальные свойства двухфазных сегнетоэлектродупругих материалов // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. Лучшие доклады. Санкт-Петербург: ПОЛИТЕХПРЕСС, 2019. С. 180–185.
63. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. Москва: Наука, 1980. 512 с.
64. Максвелл Д.К. Динамическая теория электромагнитного поля // Избранные сочинения по теории электромагнитного поля. Москва: ГИТТЛ, 1952. С. 251–316.
65. Максвелл Д.К. О физических силовых линиях // Избранные сочинения по теории электромагнитного поля Москва: ГИТТЛ, 1952. С. 107–177.
66. Мельников Б.Е., Семенов А.С., Семенов С.Г. Комплексный анализ прочности корпуса судового редуктора // Современные проблемы ресурса материалов и конструкций. Труды III школы-семинара, Москва, «МАМИ» / ред. В.С. Бондарь, Москва, 2009. С. 148–157.
67. Мельников Б.Е., Семенов А.С., Семенов С.Г. Многомодельный анализ упругопластического деформирования материалов и конструкций. Современное состояние // Труды Центрального научно-исследовательского института им. акад. А.Н. Крылова. 2010. Т. 337, № 53. С. 85–92.

68. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред. Москва: Мир, 1991. 560 с.
69. Морс Ф.М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Москва: Ин. Литература, 1960. 897 с.
70. Най Д. Физические свойства кристаллов. Москва: Мир, 1967. 384 с.
71. Новожилов В.В., Кадашевич Ю.И. Микронапряжения в конструкционных материалах. Ленинград: Машиностроение, 1990. 223 с.
72. Ньюнхем Р.Э. Свойства материалов. Анизотропия, симметрия, структура. Москва, Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2007. 652 с.
73. Осипова Н.Г., Семенов А.С. Моделирование нелинейного поведения пьезокерамики тетрагональной структуры методами конечно-элементной гомогенизации // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. Т. 134, № 4. С. 56–64.
74. Пальмов В.А. Колебания упруго-пластических тел. Москва: Наука, 1976. 328 с.
75. Пальмов В.А. Нелинейная механика деформируемых тел. Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического ун-та, 2014. 792 с.
76. Панич А.Е. Пьезокерамические актюаторы. Ростов-на-Дону, 2008. 159 с.
77. Партон В.З., Кудрявцев Б.А. Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. Москва: Наука, 1988. 472 с.
78. Поздеев А.А., Трусков П.В., Няшин Ю.И. Большие упруго-пластические деформации. Теория, алгоритмы, приложения. Москва: Наука, 1986. 232 с.
79. Поплавко Ю.М., Переверзева Л.П., Раевский И. П. Физика активных диэлектриков. Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета, 2009. 478 с.
80. Рабе К.М., Ан Ч.Г., Трискон Ж.-М. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд / ред. Б.А. Струков, А.И. Лебедев, Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. 443 с.
81. Рокафеллар Р.Т. Выпуклый анализ. Москва: Мир, 1973. 472 с.
82. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Том 1. Москва: Наука, 1970. 492 с.
83. Семенов А.С. Совершенствование методов исследования процессов термо-упруго-пластического деформирования на основе многомодельного анализа и точного интегрирования определяющих уравнений / Диссертация на соискание уч. степ. канд. физ.-мат. наук. С.-Петербург 1996.
84. Семенов А.С. PANTOCRATOR - конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // В сборнике: Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решения. Труды V Международной конференции. 2003. С. 466–480.
85. Семенов А.С. Вычислительные методы в теории пластичности. Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического ун-та, 2008. 211 с.
86. Семенов А.С. Микромеханическая модель поликристаллического сегнетоэлектроупругого материала с учетом дефектов // Прикладная механика и техническая физика. 2019. Т. 60, № 6. С. 173–191.
87. Семенов А.С. Микроструктурные и феноменологические модели гистерезисного поведения сегнетоэлектроупругих материалов с учетом дефектов // Труды «XII Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики», Том 3. Механика деформируемого твердого тела. Уфа: РИЦ БашГУ, 2019. С. 367–369.
88. Семенов А.С. Микроструктурная модель сегнетоэлектроупругого материала с учетом эволюции дефектов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 51, № 1. С. 32–57.
89. Семенов А.С. Моделирование поведения сегнетопьезокерамики при сложном непропорциональном нагружении на основе микроструктурной модели // Упругость и неупругость. Мат. Межд. науч. симпозиума по проблемам механики деформируемых тел, посвященного 110-летию со дня рождения А.А. Ильюшина / ред. Г.Л. Бровко, Д.В. Георгиевский, И.Н. Молодцова, Москва: Изд-во Моск. ун-та, 2021. С. 512–519.

90. Семенов А.С., Бальке Х., Вальмерспергер Т. Феноменологическое описание и численное моделирование неупругого деформирования сегнетопьезокерамики при сложном электро-механическом воздействии // Механика деформируемого твердого тела. Вестник Нижегородского университета. 2011. Т. 4, № 4. С. 1763–1765.
91. Семенов А.С., Бальке Х., Мельников Б.Е. Моделирование поликристаллической пьезокерамики методом конечно-элементной гомогенизации // Морские интеллектуальные технологии. 2011. № 3. С. 106–112.
92. Семенов А.С., Беляев М.О., Грищенко А.И. Моделирование процесса возникновения овальности поперечного сечения образцов из монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов при растяжении // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2017. № 2. С. 153–177.
93. Семенов А.С., Гецов Л.Б. Критерии термоусталостного разрушения монокристаллических жаропрочных сплавов и методы определения их параметров // Проблемы прочности. 2014. № 1. С. 50–62.
94. Семенов А.С., Гецов Л.Б. Экстраполяционные методы прогнозирования термоусталостной долговечности монокристаллических сплавов // Научно-технические ведомости СПбПУ. Естественные и инженерные науки. 2019. Т. 25, № 4. С. 94–106.
95. Семенов А.С., Грищенко А.И., Колотников М.Е., Гецов Л.Б. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин Часть 1. Модели материала, критерии разрушения, идентификация параметров // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2019. Т. 23, № 1. С. 70–81.
96. Семенов А.С., Грищенко А.И., Колотников М.Е., Гецов Л.Б. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин. Часть 2. Результаты расчетов // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2019. Т. 23, № 2. С. 61–74.
97. Семенов А.С., Грищенко А.И., Мельников Б.Е. Моделирование морфологической разупорядоченности элементов минерального матрикса на наноуровне // Современные технологии в медицине. 2015. Т. 7, № 4. С. 21–29.
98. Семенов А.С., Лисковски А.Ч., Ноймайстер П. [и др.] Эффективные методы решения нелинейных краевых задач сегнетоэлектростатического взаимодействия // Морские интеллектуальные технологии. 2010. № 1. С. 55–61.
99. Семенов А.С., Лобанов С.М. Моделирование реономного поведения сегнетоэлектростатических материалов при циклическом нагружении // Журнал технической физики. 2018. Т. 88, № 10. С. 1526–1532.
100. Семенов А.С., Мельников Б.Е. Моделирование процессов неупругого деформирования сегнетоэластиков // Мат. VII Межд. научного симпозиума «Проблемы прочности, пластичности и устойчивости в механике деформируемого твердого тела». Тверь: ТГТУ, 2011. С. 197–202.
101. Семенов А.С., Семенов С.Г., Гецов Л.Б. Методы расчетного определения скорости роста трещин усталости, ползучести и термоусталости в поли- и монокристаллических лопатках ГТУ // Проблемы прочности. 2015. № 2. С. 61–87.
102. Сидоркин А.С. Доменная структура в сегнетоэлектриках и родственных материалах. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2000. 240 с.
103. Скалиух А.С. Конечно-элементное моделирование необратимого процесса поляризации сегнетоэлектрических керамик // Математика и математическое моделирование. 2018. № 5. С. 1–16.
104. Скалиух А.С. Функциональная зависимость физических характеристик от необратимых параметров при электромеханическом воздействии на сегнетоэлектрические керамики // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2019. Т. 58, С. 128–141.
105. Смайт В. Электростатика и электродинамика. Москва: Иностранная Литература, 1954. 604 с.
106. Смоленский Г.А. Физика сегнетоэлектрических явлений. Ленинград: Наука, 1985. 396 с.
107. Смоленский Г.А., Крайник Н.Н. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Москва: Наука,

1968. 184 с.

108. Струков Б.А. Фазовые переходы в сегнетоэлектрических кристаллах с дефектами // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 12. С. 95–101.

109. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. Москва: Наука, 1995. 293 с.

110. Стрэттон Д.А. Теория электромагнетизма. Москва, Ленинград: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1948. 540 с.

111. Тамм И.Е. Основы теории электричества. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 616 с.

112. Тополов В.Ю., Панич А.Е. Физика сегнето- и пьезоэлектриков. Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета, 2009. 72 с.

113. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред / под ред. П.А. Жилина, А.И. Лурье, Москва: Мир, 1975. 592 с.

114. Трусов П.В., Келлер И.Э. Теория определяющих соотношений. Часть I. Общая теория. Пермь: Изд-во ПГТУ, 2006. 172 с.

115. Турик А. Экспериментальное исследование статистического распределения доменов в сегнетоэлектрике // Физика твердого тела. 1963. Т. 5, № 10. С. 2922–2925.

116. Турик А. К теории поляризации и гистерезиса сегнетоэлектриков // Физика твердого тела. 1963. Т. 5, № 4. С. 1213–1215.

117. Уорден К. Новые интеллектуальные материалы и конструкции. Москва: Техносфера, 2003. 223 с.

118. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике: Т.5: Электричество и магнетизм. Москва: Мир, 1977. 292 с.

119. Фридкин В.М., Дюшарм С. Сегнетоэлектричество в наноразмерной области // Успехи физических наук. 2014. Т. 184, № 6. С. 133–144.

120. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов. Москва: Мир, 1967. 544 с.

121. Шур В.Я., Румянцев Е.Л. Исследование кинетики субмикронных и нано-доменных структур в сегнетоэлектрических монокристаллах при внешних воздействиях. Екатеринбург, 2007. 105 с.

122. Шур В.Я., Румянцев Е.Л., Николаева Е.В., Шишкин Е.И., Батурин И.С. Кинетический подход к объяснению эффекта усталости в сегнетоэлектриках // Физика твердого тела. 2002. Т. 44, № 11. С. 2049–2054.

123. Эйлер Л. Новый метод определения движения твердых тел // *Novi Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1775. Т. 20, С. 208–238.

124. Эшелби Д. Континуальная теория дислокаций. Москва: Иностранная Литература, 1963. 248 с.

125. Юрин В.А., Белугина Н.В., Мелешина В.А., Анкудинов М.А., Желудев И.С. Доменная структура у-облученных кристаллов триглицинсульфата // Изв. Акад. наук СССР. Сер физ. 1971. Т. XXXY, № 9. С. 1927–1930.

126. Ястребов В.А., Семенов А.С., Мельников Б.Е. Процессы хрупкого и усталостного разрушения на основе связанных уравнений упруго-поврежденности в локальной и нелокальной теории // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого твердого тела. Сб. трудов науч. шк. ак. В.В. Новожилова / ред. Е.П. Колпак, Санкт-Петербург: Изд-во СПбГУ, 2005. С. 157–166.

127. Abeyaratne R., Knowles J.K. On the driving traction acting on a surface of strain discontinuity in a continuum // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1990. Vol. 38, No. 3. P. 345–360.

128. Aizu K. Possible Species of “Ferroelastic” Crystals and of Simultaneously Ferroelectric and Ferroelastic Crystals // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1969. Vol. 27, No. 2. P. 387–396.

129. Allik H., Hughes T.J.R. Finite element method for piezoelectric vibration // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1970. Vol. 2, No. 2. P. 151–157.

130. Arlt G. Twinning in ferroelectric and ferroelastic ceramics: stress relief // *Journal of Materials Science*. 1990. Vol. 25, No. 6. P. 2655–2666.

131. Arlt G. A physical model for hysteresis curves of ferroelectric ceramics // *Ferroelectrics*. 1996. Vol.

- 189, No. 1–4. P. 103–119.
132. Arlt G., Neumann H. Internal bias in ferroelectric ceramics: Origin and time dependence // *Ferroelectrics*. 1988. Vol. 87, No. 1. P. 109–120.
133. Armero F. Elastoplastic and Viscoplastic Deformations in Solids and Structures // *Encyclopedia of Computational Mechanics*. Second Edition. 2017. P. 1–41.
134. Armero F., Pérez-Foguet A. On the formulation of closest-point projection algorithms in elastoplasticity—part I: The variational structure // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2002. Vol. 53, No. 2. P. 297–329.
135. Arndt H., Schmidt G., Vogel N. Influence of uniaxial pressure on the properties of PLZT ceramics // *Ferroelectrics*. 1984. Vol. 61, No. 1. P. 9–18.
136. Arockiarajan A., Menzel A., Seemann W. Constitutive modelling of rate-dependent domain switching effects in ferroelectric and ferroelastic materials // *Journal of Electroceramics*. 2008. Vol. 20, No. 3–4. P. 159–165.
137. Arockiarajan A., Sansour C. Micromechanical modeling and simulation of rate-dependent effects in ferroelectric polycrystals // *Computational Materials Science*. 2008. Vol. 43, No. 4. P. 842–854.
138. Avrami M. Kinetics of phase change. I: General theory // *The Journal of Chemical Physics*. 1939. Vol. 7, No. 12. P. 1103–1112.
139. Balke N., Granzow T., Rödel J. Degradation of lead-zirconate-titanate ceramics under different dc loads // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 105, No. 10. P. 104105.
140. Balke N., Lupascu D.C., Granzow T., Rödel J. Fatigue of Lead Zirconate Titanate Ceramics. I: Unipolar and DC Loading // *Journal of the American Ceramic Society*. 2007. Vol. 90, No. 4. P. 1081–1087.
141. Bartel T., Schulte R., Kiefer B., Menzel A., Svendsen B. Investigations on enhanced Fischer – Burmeister NCP functions: application to a rate-dependent model for ferroelectrics // *Archive of Applied Mechanics*. 2019. Vol. 89, No. 6. P. 995–1010.
142. Bassiouny E., Ghaleb A.F., Maugin G.A. Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects—I. Basic equations // *International Journal of Engineering Science*. 1988. Vol. 26, No. 12. P. 1279–1295.
143. Bassiouny E., Ghaleb A.F., Maugin G.A. Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects—II. Poling of ceramics // *International Journal of Engineering Science*. 1988. Vol. 26, No. 12. P. 1297–1306.
144. Bassiouny E., Maugin G.A. Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects—III. Parameter identification // *International Journal of Engineering Science*. 1989. Vol. 27, No. 8. P. 975–987.
145. Bassiouny E., Maugin G.A. Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects—IV. Combined electromechanical loading // *International Journal of Engineering Science*. 1989. Vol. 27, No. 8. P. 989–1000.
146. Belov A.Y., Kreher W.S. Viscoplastic behaviour of perovskite type ferroelectrics // *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*. 2005. Vol. 118, No. 1–3. P. 7–11.
147. Belov A.Y., Kreher W.S. Viscoplastic models for ferroelectric ceramics // *Journal of the European Ceramic Society*. 2005. Vol. 25, No. 12. P. 2567–2571.
148. Belov A.Y., Kreher W.S. Simulation of microstructure evolution in polycrystalline ferroelectrics-ferroelastics // *Acta Materialia*. 2006. Vol. 54, No. 13. P. 3463–3469.
149. Belov A.Y., Kreher W.S. Micromechanics of ferroelectrics: From domain walls to piezoceramic devices // *Ferroelectrics*. 2007. Vol. 351, P. 79–87.
150. Belov A.Y., Kreher W.S. Creep in soft PZT: The effect of internal fields // *Ferroelectrics*. 2009. Vol. 391, No. 1 PART 3. P. 12–21.
151. Benveniste Y. The determination of the elastic and electric fields in a piezoelectric inhomogeneity // *Journal of Applied Physics*. 1992. Vol. 72, No. 3. P. 1086–1095.
152. Bergander H. Plastische Deformationsgesetze in differentieller Standardformulierung // *Zeits.*

Angew. Math. Mech. 1980. Vol. 60, P. 509–519.

153. Biro O., Preis K. On the Use of the Magnetic Vector Potential in the Finite Element Analysis of Three-Dimensional Eddy currents // IEEE Transactions on Magnetics. 1989. Vol. 25, No. 4. P. 3145–3159.

154. Boehler J.P. Introduction to the Invariant Formulation of Anisotropic Constitutive Equations // Appl. Tensor Funct. Solid Mech. Vienna: Springer, 1987. P. 13–30.

155. Böhle U. Phänomenologische Modellierung und Finite-Elemente-Simulationen von nichtlinearen elektromechanischen Vorgängen in ferroelektrischen Materialien. Wissenschaftliche Bericht FZKA 6347, 1999. Karlsruhe, 1999.

156. Brainerd J.G., Jensen A.G., Cumming L.G. [et al.] Standards on Piezoelectric crystals, 1949 // Proceedings of the IRE. 1949. Vol. 37, No. 12. P. 1378–1395.

157. Büttner J., Simeon B. Runge–Kutta methods in elastoplasticity // Applied Numerical Mathematics. 2002. Vol. 41, No. 4. P. 443–458.

158. Cao H., Evans A.G. Nonlinear Deformation of Ferroelectric Ceramics // Journal of the American Ceramic Society. 1993. Vol. 76, No. 4. P. 890–896.

159. Cao W. Defects in ferroelectrics // Disord. strain-induced Complex. Funct. Mater / Ed. T. Kakeshita, T. Fukuda, A. Saxena, P. A., Berlin, Heidelberg: Springer, 2011. P. 113–134.

160. Carl K., Hardtl K.H. Electrical After-Effects In Pb(Ti, Zr)O₃ Ceramics // Ferroelectrics. 1978. Vol. 17, No. 1. P. 473–486.

161. Chaboche J.L. A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories // International Journal of Plasticity. 2008. Vol. 24, No. 10. P. 1642–1693.

162. Chaboche J.L., Rousselier G. On the Plastic and Viscoplastic Constitutive Equations—Part I: Rules Developed With Internal Variable Concept // Journal of Pressure Vessel Technology. 1983. Vol. 105, No. 2. P. 153–158.

163. Chaboche J.L., Rousselier G. On the Plastic and Viscoplastic Constitutive Equations—Part II: Application of Internal Variable Concepts to the 316 Stainless Steel // Journal of Pressure Vessel Technology. 1983. Vol. 105, No. 2. P. 159.

164. Chan K.H., Hagood N.W. Modeling of nonlinear piezoceramics for structural actuation // Proc. SPIE: Smart Structures and Intelligent Systems. 1994. Vol. 2190, P. 194–205.

165. Chen L.-Q. Phase-Field Models for Microstructure Evolution // Annual Review of Materials Research. 2002. Vol. 32, No. 1. P. 113–140.

166. Chen P.J. Three dimensional dynamic electromechanical constitutive relations for ferroelectric materials // International Journal of Solids and Structures. 1980. Vol. 16, No. 12. P. 1059–1067.

167. Chen P.J. Characterization of the three dimensional properties of poled PZT 65/35 in the absence of losses // Acta Mechanica. 1983. Vol. 47, No. 1–2. P. 95–106.

168. Chen P.J., Madsen M.M. One dimensional polar responses of the electrooptic ceramic PLZT 7/65/35 due to domain switching // Acta Mechanica. 1981. Vol. 41, No. 3–4. P. 255–264.

169. Chen P.J., Montgomery S.T. A macroscopic theory for the existence of the hysteresis and butterfly loops in ferroelectricity // Ferroelectrics. 1980. Vol. 23, No. 1. P. 199–207.

170. Chen P.J., Percy P.S. One dimensional dynamic electromechanical constitutive relations of ferroelectric materials // Acta Mechanica. 1979. Vol. 31, No. 3–4. P. 231–241.

171. Chen P.J., Tucker T.J. Determination of the polar equilibrium properties of the ferroelectric ceramic PZT 65/35 // Acta Mechanica. 1981. Vol. 38, No. 3–4. P. 209–218.

172. Chen P.J., Tucker T.J. One dimensional polar mechanical and dielectric responses of the ferroelectric ceramic PZT 65/35 due to domain switching // International Journal of Engineering Science. 1981. Vol. 19, P. 147–158.

173. Chen W., Lynch C.S. A micro-electro-mechanical model for polarization switching of ferroelectric materials // Acta Materialia. 1998. Vol. 46, No. 15. P. 5303–5311.

174. Chen W., Lynch C.S. A model for simulating polarization switching and AF-F phase changes in

- Ferroelectric Ceramics // Journal of Intelligent Material Systems and Structures. 1998. Vol. 9, No. 6. P. 427–431.
175. Chen W., Lynch C.S. Multiaxial constitutive behavior of ferroelectric materials // Journal of Engineering Materials and Technology. 2001. Vol. 123, No. 2. P. 169–175.
176. Cheng J., Wang B., Du S. Time dependence of effective properties of polycrystalline ferroelectric ceramics // Mechanics Research Communications. 1999. Vol. 26, No. 4. P. 407–414.
177. Choudhury S., Li Y.L., Krill C.E., Chen L.-Q. Phase-field simulation of polarization switching and domain evolution in ferroelectric polycrystals // Acta Materialia. 2005. Vol. 53, No. 20. P. 5313–5321.
178. Cochran W. Crystal stability and the theory of ferroelectricity // Physical Review Letters. 1959. Vol. 3, No. 9. P. 412–414.
179. Cochran W. Crystal stability and the theory of ferroelectricity // Advances in Physics. 1960. Vol. 9, No. 36. P. 387–423.
180. Cocks A.C.F., McMeeking R.M. A phenomenological constitutive law for the behaviour of ferroelectric ceramics // Ferroelectrics. 1999. Vol. 228, No. 1–4. P. 219–228.
181. Coleman B.D. Thermodynamics of materials with memory // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1964. Vol. 17, No. 1. P. 1–46.
182. Coleman B.D., Gurtin M.E. Thermodynamics with internal state variables // The Journal of Chemical Physics. 1967. Vol. 47, No. 2. P. 597–613.
183. Damjanovic D. Logarithmic Frequency Dependence of Piezoelectric Effect Due To Pinning of Domain Walls // Physical Review B. Condensed matter. 1997. Vol. 55, No. 2. P. R649–R653.
184. Damjanovic D. Hysteresis in piezoelectric and ferroelectric materials // Sci. Hysteresis / Eds. I. Mayergoyz, G. Bertotti, Cambridge: Elsevier, 2006. P. 337–465.
185. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. A multiscale model for reversible ferroelectric behaviour of polycrystalline ceramics // Mechanics of Materials. 2014. Vol. 71, P. 85–100.
186. Davis M., Damjanovic D., Hayem D., Setter N. Domain engineering of the transverse piezoelectric coefficient in perovskite ferroelectrics // Journal of Applied Physics. 2005. Vol. 98, No. 1. P. 1–10.
187. Delibas B., Arockiarajan A., Seemann W. Rate dependent properties of perovskite type tetragonal piezoelectric materials using micromechanical model // International Journal of Solids and Structures. 2006. Vol. 43, No. 3–4. P. 697–712.
188. Devonshire A.F. Theory of barium titanate — Part I // Philosophical Magazine and Journal of Science. 1949. Vol. 40, No. 309. P. 1040–1063.
189. Devonshire A.F. Theory of barium titanate — Part II // Philosophical Magazine and Journal of Science. 1951. Vol. 42, No. 333. P. 1065–1079.
190. Devonshire A.F. Theory of ferroelectrics // Advances in Physics. 1954. Vol. 3, No. 10. P. 85–130.
191. Du G., Liang R., Wang L. [et al.] Linear temperature scaling of ferroelectric hysteresis in Mn-doped $\text{Pb}(\text{Mn}_{1/3}\text{Sb}_{2/3})\text{O}_3\text{-Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ ceramic with internal bias field // Applied Physics Letters. 2013. Vol. 102, No. 14. P. 142903.
192. Ducharme S., Fridkin V.M., Bune A. V. [et al.] Intrinsic Ferroelectric Coercive Field // Physical Review Letters. 2000. Vol. 84, No. 1. P. 175–178.
193. Dusthakar D.K., Menzel A., Svendsen B. Comparison of phenomenological and laminate-based models for rate-dependent switching in ferroelectric continua // GAMM-Mitteilungen. 2015. Vol. 38, No. 1. P. 147–170.
194. Eckert S., Baaser H., Gross D., Scherf O. A BDF2 integration method with step size control for elasto-plasticity // Computational Mechanics. 2004. Vol. 34, No. 5. P. 377–386.
195. Eichel R.A., Erhart P., Träskelin P. [et al.] Defect-dipole formation in copper-doped PbTiO_3 ferroelectrics // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100, No. 9. P. 095504.
196. Eichel R.A., Kungl H., Hoffmann M.J. Determination of functional center local environment in copper-modified $\text{Pb}[\text{Zr}_{0.54}\text{Ti}_{0.46}]\text{O}_3$ ceramics // Journal of Applied Physics. 2004. Vol. 95, No. 12. P.

8092–8096.

197. Eichel R.A., Kungl H., Jakes P. Defect structure of non-stoichiometric and aliovalently doped perovskite oxides // *Materials Technology*. 2013. Vol. 28, No. 5. P. 241–246.
198. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. Phenomenological modelling of the non-linear behavior of ferroelectric materials // *J. Phys. IV France*. 2004. Vol. 115, P. 67–72.
199. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2005. Vol. 16, No. 3. P. 221–236.
200. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. Finite element analysis of a multilayer piezoelectric actuator taking into account the ferroelectric and ferroelastic behaviors // *International Journal of Engineering Science*. 2006. Vol. 44, No. 15–16. P. 996–1006.
201. Eng L.M. Nanoscale domain engineering and characterization of ferroelectric domains // *Nanotechnology*. 1999. Vol. 10, No. 4. P. 405–411.
202. Erdem E., Drahus M.D., Eichel R.A. [et al.] Defect structure in «soft» (Gd,Fe)-codoped PZT 52.5/47.5 piezoelectric ceramics // *Functional Materials Letters*. 2008. Vol. 1, No. 1. P. 7–11.
203. Erhart P., Träskelin P., Albe K. Formation and switching of defect dipoles in acceptor-doped lead titanate: A kinetic model based on first-principles calculations // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2013. Vol. 88, No. 2. P. 024107.
204. Eringen A.C., Maugin G.A. *Electrodynamics of Continua I: Foundations and Solid Media*. New York: Springer, 1990. 436 p.
205. Esaklul K.A., Gerberich W.W., Koepke B.G. Stress Relaxation in PZT // *Journal of the American Ceramic Society*. 1980. Vol. 63, No. 1–2. P. 25–30.
206. Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*. 1957. Vol. 241, No. 1226. P. 376–396.
207. Fan J., Stoll W.A., Lynch C.S. Nonlinear constitutive behavior of soft and hard PZT: Experiments and modeling // *Acta Materialia*. 1999. Vol. 47, No. 17. P. 4415–4425.
208. Fang D., Li C. Nonlinear electric-mechanical behavior of a soft PZT-51 ferroelectric ceramic // *Journal of Materials Science*. 1999. Vol. 34, No. 16. P. 4001–4010.
209. Fang D., Li F., Liu B. [et al.] Advances in developing electromechanically coupled computational methods for piezoelectrics/ferroelectrics at multiscale // *Applied Mechanics Reviews*. 2013. Vol. 65, No. 6. P. 060802-1–52.
210. Fatuzzio E., Merz W.J. *Ferroelectricity*. New York: North-Holland, 1967. 102–104 p.
211. Fatuzzo E. Theoretical Considerations on the Switching Transient in Ferroelectrics // *Physical Review*. 1962. Vol. 127, No. 6. P. 1999–2005.
212. Fedeli P., Kamlah M., Frangi A. Phase-field modeling of domain evolution in ferroelectric materials in the presence of defects // *Smart Materials and Structures*. 2019. Vol. 28, No. 3. P. 035021/1–16.
213. Feng Z., Ren X. Aging effect and large recoverable electrostrain in Mn-doped KNbO₃-based ferroelectrics // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 91, No. 3. P. 032904.
214. Fett T., Müller S., Munz D., Thun G. Nonsymmetry in the deformation behaviour of PZT // *Journal of Materials Science Letters*. 1998. Vol. 17, No. 4. P. 261–265.
215. Fett T., Munz D., Thun G. Multiaxial Deformation Behavior of PZT from Torsion Tests // *Journal of the American Ceramic Society*. 2003. Vol. 86, No. 8. P. 1427–1429.
216. Fett T., Thun G. Determination of room-temperature tensile creep of PZT // *Journal of Materials Science Letters*. 1998. Vol. 17, P. 1929–1931.
217. Flippen R.B. Domain wall dynamics in ferroelectric/ferroelastic molybdates // *Journal of Applied Physics*. 1975. Vol. 46, No. 3. P. 1068–1071.
218. Forrester J.S., Kisi E.H. Ferroelastic switching in a soft lead zirconate titanate // *Journal of the European Ceramic Society*. 2004. Vol. 24, P. 595–602.

219. Fotinich Y., Carman G.P. Stresses in piezoceramics undergoing polarization switchings // *Journal of Applied Physics*. 2000. Vol. 88, No. 11. P. 6715–6725.
220. Frederick C.O., Armstrong P.J. A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect // *Materials at high temperatures*. 2007. Vol. 24, No. 1. P. 1–26.
221. Gao P., Nelson C.T., Jokisaari J.R. [et al.] Revealing the role of defects in ferroelectric switching with atomic resolution // *Nature Communications*. 2011. Vol. 2, No. 1. P. 1–6.
222. Genenko Y.A., Glaum J., Hirsch O. [et al.] Aging of poled ferroelectric ceramics due to relaxation of random depolarization fields by space-charge accumulation near grain boundaries // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2009. Vol. 80, No. 22. P. 224109.
223. Genenko Y.A., Glaum J., Hoffmann M.J., Albe K. Mechanisms of aging and fatigue in ferroelectrics // *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*. 2015. Vol. 192, P. 52–82.
224. Genenko Y.A., Lupascu D.C. Drift of charged defects in local fields as aging mechanism in ferroelectrics // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2007. Vol. 75, No. 18. P. 184107.
225. Gerson R. Variation in ferroelectric characteristics of lead zirconate titanate ceramics due to minor chemical modifications // *Journal of Applied Physics*. 1960. Vol. 31, No. 1. P. 188–194.
226. Getsov L.B., Semenov A.S., Ignatovich I.A. Thermal fatigue analysis of turbine discs on the base of deformation criterion // *International Journal of Fatigue*. 2017. Vol. 97, P. 88–97.
227. Gong X., Suo Z. Reliability of ceramic multilayer actuators: A nonlinear finite element simulation // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1996. Vol. 44, No. 5. P. 751–769.
228. Gridnev S.A., Shuvalov L.A. The Influence Of Real Structure On Switching Processes And Peculiarities Of Mechanical Relaxation In Proper Ferroelastics $\text{Kh}_3(\text{SeO}_3)_2$ And $\text{Kd}_3(\text{SeO}_3)_2$ // *Ferroelectrics*. 1983. Vol. 48, No. 1. P. 113–129.
229. Grishchenko A.I., Semenov A.S., Getsov L.B. Modeling inelastic deformation of single crystal superalloys with account of γ / γ' phases evolution // *Materials Physics and Mechanics*. 2015. Vol. 24, No. 4. P. 325–330.
230. Groot S.R. Thermodynamics of irreversible process. Amsterdam, 1952. 544 p.
231. Guillon O., Delobelle P., Thiébaud F., Walter V., Perreux D. Uniaxial electromechanical behavior of a soft PZT: Experiments and modeling // *Ferroelectrics*. 2004. Vol. 308. P. 95–111.
232. Guillon O., Thiebaud F., Delobelle P., Perreux D. Tensile behavior of PZT in short and open-circuit conditions // *Materials Letters*. 2004. Vol. 58, No. 6. P. 986–990.
233. Guillon O., Thiebaud F., Delobelle P., Perreux D. Modelling of the electromechanical behaviour of PZT // *Journal de Physique IV (Proceedings)*. 2004. Vol. 115, P. 85–92.
234. Guillon O., Thiébaud F., Delobelle P., Perreux D. Compressive creep of PZT ceramics: Experiments and modelling // *Journal of the European Ceramic Society*. 2004. Vol. 24, No. 9. P. 2547–2552.
235. Guo R., Cross L.E., Park S.-E. [et al.] Origin of the High Piezoelectric Response in $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ // *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 84, No. 23. P. 5423–5426.
236. Guyomar D., Ducharme B., Sébald G. Time fractional derivatives for voltage creep in ferroelectric materials: Theory and experiment // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2008. Vol. 41, No. 12. P. 125410.
237. Haertling G.H. Ferroelectric ceramics: history and technology // *Journal of the American Ceramic Society*. 1999. Vol. 82, No. 4. P. 797–818.
238. Hajjaji A., Rguiti M., Courtois C. [et al.] A polycrystal hysteresis model based on the Landau theory for ferroelectric ceramics // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2011. Vol. 13, No. 3. P. 313–318.
239. Han W., Reddy B.D. Plasticity : Mathematical Theory and Numerical Analysis. 2013. P. 421.
240. Haug A., Huber J.E., Onck P.R., Giessen E. Van der Multi-grain analysis versus self-consistent estimates of ferroelectric polycrystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2007. Vol. 55, No. 3. P. 648–665.

241. Haug A., Knoblauch V., McMeeking R.M. Combined isotropic and kinematic hardening in phenomenological switching models for ferroelectric ceramics // *International Journal of Engineering Science*. 2003. Vol. 41, No. 8. P. 887–901.
242. Haun M.J., Furman E., Jang S.J., Cross L.E. Thermodynamic theory of the lead zirconate-titanate solid solution system. Part V: Theoretical calculations // *Ferroelectrics*. 1989. Vol. 99, No. 1. P. 63–86.
243. Hegewald T., Inman D.J. Vibration suppression via smart structures across a temperature range // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2001. Vol. 12, No. 3. P. 191–203.
244. Heilig C., Hardtl K.H. Time dependence of mechanical depolarization in ferroelectric ceramics // *IEEE Proc.* 6th IEKC Montreux, 1998. P. 503–506.
245. Helmholtz H. Über Integrale der hydrodynamischen Gleichungen, welche den Wirbelbewegungen entsprechen // *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*. 1858. Vol. 1858, No. 55. P. 25–55.
246. Hill R. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1965. Vol. 13, No. 2. P. 89–101.
247. Hill R. A self-consistent mechanics of composite materials // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1965. Vol. 13, No. 4. P. 213–222.
248. Hill R. Generalized Relations for Incremental Deformation of Metal Crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1966. Vol. 14, P. 95–102.
249. Hirasaki G.J., Hellums J.D. A general formulation of the boundary conditions on the vector potential in three-dimensional hydrodynamics // *Quarterly of Applied Mathematics*. 1968. Vol. 26, No. 3. P. 331–342.
250. Hooker M.W. Properties of PZT-based piezoelectric ceramics between-150 and 250°C. Hampton, 1998.
251. Hooton J.A., Merz W.J. Etch patterns and ferroelectric domains in BaTiO₃ single crystals // *Physical Review*. 1955. Vol. 98, No. 2. P. 409–413.
252. Horiuchi S., Kagawa F., Hatahara K. [et al.] Above-room-temperature ferroelectricity and antiferroelectricity in benzimidazoles // *Nature Communications*. 2012. Vol. 3, No. 1308. P. 1–6.
253. Huang M., Brinson L.C. A Multivariant model for single crystal shape memory alloy behavior // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1998. Vol. 46, No. 8. P. 1379–1409.
254. Huber J.E. *Ferroelectrics: models and applications* 1998.
255. Huber J.E., Fleck N.A. Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: Theory versus experiment // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2001. Vol. 49, No. 4. P. 785–811.
256. Huber J.E., Fleck N.A. Ferroelectric switching: A micromechanics model versus measured behaviour // *European Journal of Mechanics, A/Solids*. 2004. Vol. 23, No. 2. P. 203–217.
257. Huber J.E., Fleck N.A., Landis C.M., McMeeking R.M. A constitutive model for ferroelectric polycrystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1999. Vol. 47, P. 1663–1697.
258. Huo Y., Jiang Q. Modeling of domain switching in polycrystalline ferroelectric ceramics // *Smart Mater. Struct.* 1997. Vol. 6, No. 1. P. 441–447.
259. Huo Y., Jiang Q. Modeling of domain switching in ferroelectric ceramics: An example // *International Journal of Solids and Structures*. 1998. Vol. 35, No. 13. P. 1339–1353.
260. Hutchinson J.W. Elastic-Plastic Behaviour of Polycrystalline Metals and Composites // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1970. Vol. 319, No. 1537. P. 247–272.
261. Hwang S.C., Huber J.E., McMeeking R.M., Fleck N.A. The simulation of switching in polycrystalline ferroelectric ceramics // *Journal of Applied Physics*. 1998. Vol. 84, No. 3. P. 1530–1540.
262. Hwang S.C., Lynch C.S., McMeeking R.M. Ferroelectric/ferroelastic interactions and a polarization switching model // *Acta Metallurgica Et Materialia*. 1995. Vol. 43, No. 5. P. 2073–2084.
263. Hwang S.C., McMeeking R.M. A finite element model of ferroelectric polycrystals // *Ferroelectrics*. 1998. Vol. 211, P. 177–194.
264. Hwang S.C., McMeeking R.M. A finite element model of ferroelastic polycrystals // *International*

Journal of Solids and Structures. 1999. Vol. 36, P. 1541–1556.

265. Hwang S.C., McMeeking R.M. A finite element model of ferroelectric/ferroelastic polycrystals // Proc. SPIE. 2000. Vol. 3992, P. 404–417.
266. Ikeda T., Yoshida K., Ueda T. Constitutive model for rate dependent behavior of ferroelectric materials // Proc. SPIE. 2011. Vol. 7978, No. April 2011. P. 797805-1–10.
267. Ishibashi Y., Takagi Y. Note on ferroelectric domain switching // Journal of the Physical Society of Japan. 1971. Vol. 31, No. 2. P. 506–510.
268. Ishiwara H., Arimoto Y., Okuyama M. Ferroelectric Random Access Memories. Fundamentals and Applications. Berlin, Heidelberg, Heidelberg: Springer-Verlag, 2004. 284 p.
269. Ivashov I. V., Semenov A.S. Influence of crack face boundary conditions on the fracture of polycrystalline piezoelectric ceramics // Magazine of Civil Engineering. 2014. Vol. 51, No. 7.
270. Jaffe B., Cook W.R., Jaffe H.L. Piezoelectric ceramics. New York: Academic Press, 1971. 317 p.
271. Jelitto H., Keßler H., Schneider G.A., Balke H. Fracture behavior of poled piezoelectric PZT under mechanical and electrical loads // Journal of the European Ceramic Society. 2005. Vol. 25, No. 5. P. 749–757.
272. Jiang Q. On the driving traction acting on a surface of discontinuity within a continuum in the presence of electromagnetic fields // Journal of Elasticity. 1994. Vol. 34, No. 1. P. 1–21.
273. Jiles D.C., Atherton D.L. Theory of ferromagnetic hysteresis // Journal of Applied Physics. 1984. Vol. 55, No. 6. P. 2115–2120.
274. Jin L., Li F., Zhang S. Decoding the fingerprint of ferroelectric loops: Comprehension of the material properties and structures // Journal of the American Ceramic Society. 2014. Vol. 97, No. 1. P. 1–27.
275. Jo W., Erdem E., Eichel R.A. [et al.] Effect of Nb-donor and Fe-acceptor dopants in $(\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2})\text{TiO}_3$ - BaTiO_3 - $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{NbO}_3$ lead-free piezoceramics // Journal of Applied Physics. 2010. Vol. 108, No. 1. P. 014110.
276. Kamlah M. Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics – modeling of electromechanical hysteresis phenomena // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2001. Vol. 13, No. 4. P. 219–268.
277. Kamlah M., Boehle U. Nonlinear finite element method for piezoelectric structures made of hysteretic ferroelectric ceramics // Proc. SPIE. Smart Structures and Materials. 2000. Vol. 3992, P. 255–266.
278. Kamlah M., Boehle U., Munz D., Tsakmakis C. Macroscopic description of nonlinear electro-mechanical coupling in ferroelectrics // Proc. SPIE 3039, Smart Structures and Materials. 1997. Vol. 3039, P. 144–155.
279. Kamlah M., Böhle U. Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior // International Journal of Solids and Structures. 2001. Vol. 38, No. 4. P. 605–633.
280. Kamlah M., Böhle U., Munz D. On a non-linear finite element method for piezoelectric structures made of hysteretic ferroelectric ceramics // Computational Materials Science. 2000. Vol. 19, No. 1–4. P. 81–86.
281. Kamlah M., Jiang Q. A Model for PZT ceramics under Uni-Axial Loading // Smart Mater. Struct. 1998. Vol. 8, P. 441–459.
282. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model // International Journal of Solids and Structures. 2005. Vol. 42, No. 9–10. P. 2949–2964.
283. Kamlah M., Tsakmakis C. Phenomenological modeling of the non-linear electro-mechanical coupling in ferroelectrics // International Journal of Solids and Structures. 1999. Vol. 36, No. 5. P. 669–695.
284. Kamlah M., Wang Z. A thermodynamically and microscopically motivated constitutive model for piezoceramics // Computational Materials Science. 2003. Vol. 28, No. 3–4. P. 409–418.
285. Kay H.F., Vousden P. Symmetry changes in barium titanate at low temperatures and their relation to its ferroelectric properties // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 1949. Vol. 40, No. 309. P. 1019–1040.
286. Ke S.M., Huang H.T., Fan H.Q. [et al.] Antiferroelectric-like properties and enhanced polarization

- of Cu-doped K_{0.5}Na_{0.5}NbO₃ piezoelectric ceramics // *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 101, No. 8. P. 082901.
287. Kessler H., Balke H. On the local and average energy release in polarization switching phenomena // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2001. Vol. 49, No. 5. P. 953–978.
288. Keve E.T., Bye K.L., Whipps P.W., Annis A.D. Structural inhibition of ferroelectric switching in triglycine sulphate—i. additives // *Ferroelectrics*. 1972. Vol. 3, No. 1. P. 39–48.
289. Khan K.A., Muliana A.H., Atitallah H.B., Ounaies Z. Time-dependent and energy dissipation effects on the electro-mechanical response of PZTs // *Mechanics of Materials*. 2016. Vol. 102. P. 74–89.
290. Kim J.H., Lee C., Lee S., Lee S.J., Å S.K. Time-Dependent Behavior of a Lead Titanate Zirconate Wafer under Constant Electric Fields at High Temperatures // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 48, P. 101404-1–7.
291. Kim S.J. A prediction of rate-dependent behaviour in ferroelectric polycrystals // *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*. 2007. Vol. 141, No. 1–2. P. 34–42.
292. Kim S.J., Jiang Q. A finite element model for rate-dependent behavior of ferroelectric ceramics // *International Journal of Solids and Structures*. 2002. Vol. 39, No. 4. P. 1015–1030.
293. Kim S.J., Seelecke S. A rate-dependent three-dimensional free energy model for ferroelectric single crystals // *International Journal of Solids and Structures*. 2007. Vol. 44, No. 3–4. P. 1196–1209.
294. Klinkel S. A phenomenological constitutive model for ferroelastic and ferroelectric hysteresis effects in ferroelectric ceramics // *International Journal of Solids and Structures*. 2006. Vol. 43, No. 22–23. P. 7197–7222.
295. Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F. Thermodynamics and kinetics of slip // *Progr. Mater. Sci.* 1975. Vol. 19, P. 1–288.
296. Kontsos A., Landis C.M. Phase-Field Modeling of Domain Structure Energetics and Evolution in Ferroelectric Thin Films // *Journal of Applied Mechanics*. 2010. Vol. 77, No. 4. P. 041014.
297. Kouhia R., Marjamäki P., Kivilahti J. On the implicit integration of rate-dependent inelastic constitutive models // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2005. Vol. 62, No. 13. P. 1832–1856.
298. Kuna M. Fracture mechanics of piezoelectric materials – Where are we right now? // *Engineering Fracture Mechanics*. 2010. Vol. 77, No. 2. P. 309–326.
299. Kungl H., Theissmann R., Knapp M. [et al.] Estimation of strain from piezoelectric effect and domain switching in morphotropic PZT by combined analysis of macroscopic strain measurements and synchrotron X-ray data // *Acta Materialia*. 2007.
300. Kwei G.H., Lawson A.C., Billinge S.J.L., Cheong S.W. Structures of the ferroelectric phases of barium titanate // *The Journal of Physical Chemistry*. 1993. Vol. 97, No. 10. P. 2368–2377.
301. Lagoudas D.C., Bhattacharyya A. On the Correspondence between Micromechanical Models for Isothermal Pseudoelastic Response of Shape Memory Alloys and the Preisach Model for Hysteresis // *Mathematics and Mechanics of Solids*. 1997. Vol. 2, No. 4. P. 405–440.
302. Lambeck P.V., Jonker G.H. Ferroelectric domain stabilization in batio₃ by bulk ordering of defects // *Ferroelectrics*. 1978. Vol. 22, No. 1. P. 729–731.
303. Lambeck P.V., Jonker G.H. The nature of domain stabilization in ferroelectric perovskites // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1986. Vol. 47, No. 5. P. 453–461.
304. Lammer H. Racket with self-powered piezoelectric damping system // 2005.
305. Landis C.M. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2002. Vol. 50, No. 1. P. 127–152.
306. Landis C.M. A new finite-element formulation for electromechanical boundary value problems // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2002. Vol. 55, No. 5. P. 613–628.
307. Landis C.M. On the strain saturation conditions for polycrystalline ferroelastic materials // *Journal of Applied Mechanics*. 2003. Vol. 70, No. 4. P. 470–478.

308. Landis C.M., McMeeking R.M. A self-consistent constitutive model for switching in polycrystalline barium titanate // *Ferroelectrics*. 2001. Vol. 255, No. 1. P. 13–34.
309. Landis C.M., Wang J., Sheng J. Micro-electromechanical determination of the possible remanent strain and polarization states in polycrystalline ferroelectrics and the implications for phenomenological constitutive theories // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2004. Vol. 15, No. 7. P. 513–525.
310. Laskewitz B., Kamlah M. Nonlinear finite element simulations of poling processes in piezoceramic devices // *PAMM*. 2004. Vol. 4, No. 1. P. 286–287.
311. Lavrov K., Semenov A., Benin A. Modeling of nonlinear multiaxial deformation of concrete on the base of hyperelastic orthotropic model // *MATEC Web of Conferences*. 2016. Vol. 53. P. 01043.
312. Lee N., Kim S. Effects of loading rate and temperature on domain switching and evolutions of reference remnant state variables during polarization reversal in a PZT wafer // *Ceramics International*. 2012. Vol. 38, No. 2. P. 1115–1126.
313. Lemaitre J., Desmorat R. *Engineering damage mechanics*. 2005. 395 p.
314. Lematre M., Ul R., Tran-Huu-Hue L.P., Lethiecq M. Electromechanical behavior of a doped barium titanate piezoceramic under mechanical stress: modeling and comparison with experimental measurements // *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2020. Vol. 67, No. 2. P. 350–355.
315. Leontsev S.O., Eitel R.E. Progress in engineering high strain lead-free piezoelectric ceramics // *Science and Technology of Advanced Materials*. 2010. Vol. 11. № 4. P. 044302.
316. Levaniuk A.P., Sigov A.S. *Defects and structural phase transitions*. New York: Gordon and Breach Science Publishers, 1988. 208 p.
317. Li F., Wang L., Jin L. [et al.] Piezoelectric activity in perovskite ferroelectric crystals // *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2015. Vol. 62, No. 1. P. 18–32.
318. Li F.X., Soh A.K. An optimization-based computational model for domain evolution in polycrystalline ferroelastics // *Acta Materialia*. 2010. Vol. 58, No. 6. P. 2207–2215.
319. Li J.Y., Dunn M.L. Analysis of microstructural fields in heterogeneous piezoelectric solids // *International Journal of Engineering Science*. 1999. Vol. 37, No. 6. P. 665–685.
320. Li J.Y., Liu D. On ferroelectric crystals with engineered domain configurations // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2004. Vol. 52, No. 8. P. 1719–1742.
321. Liskowsky A.C., Semenov A.S., Balke H., McMeeking R.M. Finite element modeling of the ferroelectroelastic material behavior in consideration of domain wall motions // *MRS Proc.* San Francisco: Cambridge University Press, 2005. P. CC4.2.
322. Little E.A. Dynamic behavior of domain walls in barium titanate // *Physical Review*. 1955. Vol. 98, No. 4. P. 978–984.
323. Liu I.-S. On representations of anisotropic invariants // *International Journal of Engineering Science*. 1982. Vol. 20, No. 10. P. 1099–1109.
324. Liu Q.D. Investigation into the creeping polarization and strain in PZT-855 under combined mechanical and electrical loadings // *Acta Mechanica*. 2011. Vol. 220, No. 1–4. P. 1–14.
325. Liu Q.D., Fleck N.A., Huber J.E., Chu D.P. Birefringence measurements of creep near an electrode tip in transparent PLZT // *Journal of the European Ceramic Society*. 2009. Vol. 29, P. 2289–2296.
326. Liu Q.D., Huber J.E. Creep in ferroelectrics due to unipolar electrical loading // *Journal of the European Ceramic Society*. 2006. Vol. 26, No. 13. P. 2799–2806.
327. Liu Q.D., Huber J.E. Electrical creep around a circular hole in PLZT 8/65/35 // *Journal of the European Ceramic Society*. 2012. Vol. 32, No. 1. P. 195–202.
328. Lobanov S.M., Semenov A.S. Modeling of nonlinear behavior of polycrystalline lead-free piezoceramics with a content of tetragonal, rhombohedral and orthorhombic phases under cyclic loading // *Procedia Structural Integrity*. 2017. Vol. 6, P. 90–94.
329. Lobanov S.M., Semenov A.S. Finite-element modeling of ferroelectric material behavior at morphotropic phase boundaries between tetragonal, rhombohedral and orthorhombic phases // *Journal*

- of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1236, No. 1. P. 012062.
330. Loge R.E., Suo Z. Nonequilibrium thermodynamics of ferroelectric domain evolution // *Acta Materialia*. 1996. Vol. 44, No. 8. P. 3429–3438.
331. Lohkämper R., Neumann H., Arlt G. Internal bias in acceptor-doped BaTiO₃ ceramics: Numerical evaluation of increase and decrease // *Journal of Applied Physics*. 1990. Vol. 68, No. 8. P. 4220–4224.
332. Lu W., Fang D.N., Hwang K.C. Micromechanics of ferroelectric domain switching behavior // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2001. Vol. 37, No. 1–3. P. 29–38.
333. Lu W., Fang D.N., Li C.Q., Hwang K.C. Nonlinear electric-mechanical behavior and micromechanics modelling of ferroelectric domain evolution // *Acta Materialia*. 1999. Vol. 47, No. 10. P. 2913–2926.
334. Lubliner J. On the structure of the rate equations of materials with internal variables // *Acta Mechanica*. 1973. Vol. 17, No. 1–2. P. 109–119.
335. Lubliner J. *Plasticity theory*. Berkeley: Dover Publications, 2008. 528 p.
336. Luenberger D.G., Ye Y. Linear and nonlinear programming // *Mathematics in Science and Engineering*. 1973. Vol. 98, No. C. P. 109–148.
337. Luo Z., Glaum J., Granzow T. [et al.] Bipolar and unipolar fatigue of ferroelectric BNT-based lead-free piezoceramics // *Journal of the American Ceramic Society*. 2011. Vol. 94, No. 2. P. 529–535.
338. Lupascu D., Rödel J. Fatigue in bulk lead zirconate titanate actuator materials // *Advanced Engineering Materials*. 2005. Vol. 7, No. 10. P. 882–898.
339. Lupascu D.C. *Fatigue in ferroelectric ceramics and related issues*. Heidelberg: Springer, 2004. 225 p.
340. Lupascu D.C., Schröder J., Lynch C.S., Kreher W., Westram I. Mechanical properties of ferro-piezoceramics // *Springer Series in Materials Science*. 2011. Vol. 140, No. 1. P. 469–542.
341. Lynch C.S. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT // *Acta Materialia*. 1996. Vol. 44, No. 10. P. 4137–4148.
342. Maier R.A., Pomorski T.A., Lenahan P.M., Randall C.A. Acceptor-oxygen vacancy defect dipoles and fully coordinated defect centers in a ferroelectric perovskite lattice: Electron paramagnetic resonance analysis of Mn²⁺ in single crystal BaTiO₃ // *Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 118, No. 16. P. 164102.
343. Marton P., Rychetsky I., Hlinka J. Domain walls of ferroelectric BaTiO₃ within the Ginzburg-Landau-Devonshire phenomenological model // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2010. Vol. 81, P. 144125-1–11.
344. Maugin G.A. *Continuum mechanics of electromagnetic solids*. Amsterdam: North Holland, 1988. 598 p.
345. Maugin G.A. Coupled magnetomechanical and electromechanical hysteresis effects // *Appl. Electromagn. Mater.* Oxford, Tokyo: Pergamon, 1989. P. 3–18.
346. Maugin G.A. Non-equilibrium thermodynamics of electromagnetic solids // *Non-Equilibrium Thermodyn. with Appl. to Solids* Vienna: Springer Vienna, 1993. P. 205–258.
347. Maxwell J.C. On Physical lines of force // *Philosophical Magazine*. 1861. Vol. 11. P. 161–175.
348. Maxwell J.C. A dynamical theory of the electromagnetic field // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1865. Vol. 155. P. 459–512.
349. McMeeking R.M., Hwang S.C. On the potential energy of a piezoelectric inclusion and the criterion for ferroelectric switching // *Ferroelectrics*. 1997. Vol. 200, No. 1–4. P. 151–173.
350. McMeeking R.M., Landis C.M. A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics // *International Journal of Engineering Science*. 2002. Vol. 40, No. 14. P. 1553–1577.
351. Mehling V., Tsakmakis C., Gross D. Phenomenological model for the macroscopical material behavior of ferroelectric ceramics // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2007. Vol. 55, No. 10. P. 2106–2141.
352. Meindlhumer M., Pechstein A., Humer A. Variational inequalities for ferroelectric constitutive modeling // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2021. Vol. 32, No. 3. P. 317–330.
353. Merz W.J. Domain Formation and Domain Wall Motions in Ferroelectric BaTiO₃ Single Crystals

// Physical Review. 1954. Vol. 95, No. 3. P. 690–704.

354. Merz W.J. Switching time in ferroelectric BaTiO₃ and its dependence on crystal thickness // Journal of Applied Physics. 1956. Vol. 27, No. 8. P. 938–943.

355. Meštrić H., Eichel R.A., Dinse K.P. [et al.] High-frequency electron paramagnetic resonance investigation of the Fe³⁺ impurity center in polycrystalline PbTiO₃ in its ferroelectric phase // Journal of Applied Physics. 2004. Vol. 96, No. 12. P. 7440–7444.

356. Michelitsch T., Kreher W.S. A simple model for the nonlinear material behavior of ferroelectrics // Acta Materialia. 1998. Vol. 46, No. 14. P. 5085–5094.

357. Miehe C., Rosato D. A rate-dependent incremental variational formulation of ferroelectricity // International Journal of Engineering Science. 2011. Vol. 49, No. 6. P. 466–496.

358. Miehe C., Rosato D., Kiefer B. Variational principles in dissipative electro-magneto-mechanics: A framework for the macro-modeling of functional materials // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2011. Vol. 86, No. 10. P. 1225–1276.

359. Miehe C., Vallicotti D., Zäh D. Computational structural and material stability analysis in finite electro-elasto-statics of electro-active materials // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2015. Vol. 102, No. 10. P. 1605–1637.

360. Miller R.C., Weinreich G. Mechanism for the sidewise motion of 180° domain walls in barium titanate // Physical Review. 1960. Vol. 117, No. 6. P. 1460–1466.

361. Morozov M.I., Lupascu D.C., Damjanovic D. Mechanisms of aging in ferroelectrics: The orientation of dipoles versus the charge drift // IEEE Int. Symp. Appl. Ferroelectr. 2008.

362. Mota A., Zimmerman J.A. A variational, finite-deformation constitutive model for piezoelectric materials // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2011. Vol. 85, No. 6. P. 752–767.

363. Muench I., Renuka Balakrishna A., Huber J.E. Periodic boundary conditions for the simulation of 3D domain patterns in tetragonal ferroelectric material // Archive of Applied Mechanics. 2018. Vol. 89, No. 6. P. 1–18.

364. Muliana A. Time dependent behavior of ferroelectric materials undergoing changes in their material properties with electric field and temperature // International Journal of Solids and Structures. 2011. Vol. 48, No. 19. P. 2718–2731.

365. Müller R., Schröder J., Lupascu D.C. Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics // GAMM-Mitteilungen. 2008. Vol. 31, No. 2. P. 133–150.

366. Nagai G., Hayashi T., Takekawa T. Numerical procedure for polycrystalline ferroelectric/ferroelastic problems using Landau's phenomenological model // Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering. 2008. Vol. 2, No. 10. P. 1307–1317.

367. Neumann H., Arlt G. Dipole orientation in Cr-modified BaTiO₃ ceramics // Ferroelectrics. 1987. Vol. 76, No. 1. P. 303–310.

368. Neumeister P., Balke H. Micromechanical modelling of remanent properties of morphotropic PZT // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2011. Vol. 59, No. 9. P. 1794–1807.

369. Neumeister P., Stark S., Semenov A.S., Balke H. Simulating the ferroelectric response of functional ceramics - approaches, prospects and limitations // Proc. 4th Sci. Symp. "Lightweight Design by Integrating Functions. Proc. CRC/Transregio 39 / Ed. R. Neugebauer, Nuremberg, 2013. P. 93–102.

370. Nguyen Q.S. Stability and nonlinear solid mechanics. Paris: John Wiley, 2000. 398 p.

371. Noheda B., Cox D.E., Shirane G. [et al.] A monoclinic ferroelectric phase in the Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O₃ solid solution // Applied Physics Letters. 1999. Vol. 74, No. 14. P. 2059–2061.

372. Noheda B., Cox D.E., Shirane G. [et al.] Stability of the monoclinic phase in the ferroelectric perovskite PbZr_(1-x)Ti_(x)O₃ // Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics. 2000. Vol. 63, No. 1. P. 014103.

373. Noheda B., Gonzalo J.A., Cross L.E. [et al.] A tetragonal-to-monoclinic phase transition in a ferroelectric perovskite: the structure of PbZr_(0.52)Ti_(0.48)O₃ // Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics. 2000. Vol. 61, No. 13. P. 8687–8695.

374. Nowick A.S., Berry B.S. Anelastic relaxation in crystalline solids. New York, London: Academic Press, 1972. 694 p.
375. Oh H.T., Lee J.Y., Lee H.Y. Mn-modified PMN-PZT $[\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3]$ single crystals for high power piezoelectric transducers // Journal of the Korean Ceramic Society. 2017. Vol. 54, No. 2. P. 150–157.
376. Orihara H., Hashimoto S., Ishibashi Y. A theory of D-E hysteresis loop based on the Avrami model // Journal of the Physical Society of Japan. 1994. Vol. 63, No. 3. P. 1031–1035.
377. Ortiz M., Martin J.B. Symmetry-preserving return mapping algorithms and incrementally extremal paths: A unification of concepts // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 1989. Vol. 28, No. 8. P. 1839–1853.
378. Papadopoulos P., Taylor R.L. On the application of multi-step integration methods to infinitesimal elastoplasticity // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 1994. Vol. 37, No. 18. P. 3169–3184.
379. Pardo L., Ricote J. Multifunctional polycrystalline ferroelectric materials. New York: Springer, 2011. 782 p.
380. Park S.E., Wada S., Cross L.E., Shrout T.R. Crystallographically engineered BaTiO_3 single crystals for high-performance piezoelectrics // Journal of Applied Physics. 1999. Vol. 86, No. 5. P. 2746–2750.
381. Pathak A., McMeeking R.M. Three-dimensional finite element simulations of ferroelectric polycrystals under electrical and mechanical loading // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2008. Vol. 56, No. 2. P. 663–683.
382. Patoor E., Berveiller M. Micromechanical Modelling of the Thermomechanical Behavior of Shape Memory Alloys // Mech. Solids with Phase Chang. Vienna: Springer Vienna, 1997. P. 121–188.
383. Pechstein A.S., Meindlhumer M., Humer A. The polarization process of ferroelectric materials in the framework of variational inequalities // ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 2020. Vol. 100, No. 6. P. e201900329.
384. Perzyna P. Thermodynamics of rheological materials with internal changes // J. de Mecanique. 1971. Vol. 10, No. 3. P. 391–408.
385. Phillips A., Juh-Ling T. The effect of loading path on the yield surface at elevated temperatures // International Journal of Solids and Structures. 1972. Vol. 8, No. 4. P. 463–474.
386. Pike G.E., Warren W.L., Dimos D. [et al.] Voltage offsets in $(\text{Pb,L a})(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ thin films // Applied Physics Letters. 1995. Vol. 66, No. 4. P. 484.
387. Pipkin A.C., Rogers T.G. A non-linear integral representation for viscoelastic behaviour // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1968. Vol. 16, No. 1. P. 59–72.
388. Polukhov E., Vallicotti D., Keip M.A. Computational stability analysis of periodic electroactive polymer composites across scales // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2018. Vol. 337, P. 165–197.
389. Postnikov V.S., Pavlov V.S., Turkov S.K. Internal friction in ferroelectrics due to interaction of domain boundaries and point defects // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1970. Vol. 31, No. 8. P. 1785–1791.
390. Potnis P.R., Tsou N.T., Huber J.E. A review of domain modelling and domain imaging techniques in ferroelectric crystals // Materials. 2010. Vol. 4, No. 2. P. 417–447.
391. Preisach F. Über die magnetische Nachwirkung // Zeitschrift für Physik. 1935. Vol. 94, No. 5–6. P. 277–302.
392. Pudeleva O.V., Semenov A.S., Melnikov B.E. Multiscale finite element modeling of nonlinear behavior of polycrystalline piezoceramics with account of tetragonal and rhombohedral phases // Procedia Structural Integrity. 2017. Vol. 6, P. 309–315.
393. Ren X. Large electric-field-induced strain in ferroelectric crystals by point-defect-mediated reversible domain switching // Nature Materials. 2004. Vol. 3, No. 2. P. 91–94.
394. Ricinschi D., Harnagea C., Papusoi C. [et al.] Analysis of ferroelectric switching in finite media as a Landau-type phase transition // Journal of Physics Condensed Matter. 1998. Vol. 10, No. 2. P. 477–492.
395. Robels U., Arlt G. Domain wall clamping in ferroelectrics by orientation of defects // Journal of

- Applied Physics. 1993. Vol. 73, No. 7. P. 3454–3460.
396. Robert G., Damjanovic D., Setter N. Preisach modeling of ferroelectric pinched loops // Applied Physics Letters. 2000. Vol. 77, No. 26. P. 4413–4415.
397. Rödel J. Effective intrinsic linear properties of laminar piezoelectric composites and simple ferroelectric domain structures // Mechanics of Materials. 2007. Vol. 39, No. 4. P. 302–325.
398. Rödel J., Kreher W.S. Self-consistent modelling of non-linear effective properties of polycrystalline ferroelectric ceramics // Computational Materials Science. 2000. Vol. 19, No. 1–4. P. 123–132.
399. Rödel J., Kreher W.S. Modeling of domain wall contribution to the effective properties of polycrystalline ferroelectric ceramics // Proc. SPIE. Smart Structures and Materials. 2000. Vol. 3992, No. June 2000. P. 353–362.
400. Rödel J., Kreher W.S. Modelling linear and nonlinear behavior of polycrystalline ferroelectric ceramics // Journal of the European Ceramic Society. 2003. Vol. 23, No. 13. P. 2297–2306.
401. Rojac T., Damjanovic D. Domain walls and defects in ferroelectric materials // Japanese Journal of Applied Physics. 2017. Vol. 56, No. 10. P. 10PA01.
402. Rosato D., Miehe C. Rate-dependent incremental variational formulation of ferroelectricity // Proc. Appl. Math. Mech. 2007. Vol. 7, P. 4070013–4070014.
403. Roth S., Neumeister P., Semenov A.S., Balke H. Finite element simulation of the non-remanent straining ferroelectric material behaviour based on the electrostatic scalar potential: Convergence and stability // Proc. IUTAM Symp. "Multiscale Model. Fatigue, Damage Fract. Smart Mater." / Ed. M. Kuna, A. Ricoeur, Freiberg, IUTAM Bookseries. 2011. P. 43–53.
404. Rudyak V.M. Dielectric Viscosity and Other Properties of Ferroelectrics // Ferroelectrics. 1981. Vol. 35, No. 1. P. 251–251.
405. Salazar R., Bayona-Roa C., Téllez G. Electric vector potential formulation in electrostatics: analytical treatment of the gaped surface electrode // The European Physical Journal Plus 2020 135:11. 2020. Vol. 135, No. 11. P. 1–28.
406. Schapery R.A. Application of thermodynamics to thermomechanical, fracture, and birefringent phenomena in viscoelastic media // Journal of Applied Physics. 1964. Vol. 35, No. 5. P. 1451–1465.
407. Schapery R.A. On the characterization of nonlinear viscoelastic materials // Polymer Engineering and Science. 1969. Vol. 9, No. 4. P. 295–310.
408. Schmid H. Multi-ferroic magnetoelectrics // Ferroelectrics. 1994. Vol. 162, P. 317–338.
409. Schneider G.A. Influence of Electric Field and Mechanical Stresses on the Fracture of Ferroelectrics // Annual Review of Materials Research. 2007. Vol. 37, P. 491–538.
410. Schrade D., Mueller R., Xu B.X., Gross D. Domain wall pinning by point defects in ferroelectric materials // Proc. SPIE. Behavior and Mechanics of Multifunctional and Composite Materials. 2007. Vol. 6526, P. 65260B.
411. Schrade D., Müller R., D. G. Phase field simulations in ferroelectric materials // Proc. Appl. Math. Mech. 2006. Vol. 6, P. 455–456.
412. Schrade D., Müller R., Xu B.X., Gross D. Domain evolution in ferroelectric materials: A continuum phase field model and finite element implementation // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2007. Vol. 196, No. 41–44. P. 4365–4374.
413. Schrade D., Xu B.-X., Müller R., Gross D. On phase field modeling of ferroelectrics: parameter identification and verification // Proc. SMASIS08 ASME Conf. Smart Mater. Adapt. Struct. Intell. Syst. Maryland, USA, 2008. P. 1–8.
414. Schröder J., Gross D. Invariant formulation of the electromechanical enthalpy function of transversely isotropic piezoelectric materials // Archive of Applied Mechanics 2003 73:8. 2004. Vol. 73, No. 8. P. 533–552.
415. Schwaab H., Grünbichler H., Supancic P., Kamlah M. Macroscopical non-linear material model for ferroelectric materials inside a hybrid finite element formulation // International Journal of Solids and Structures. 2012. Vol. 49, No. 3–4. P. 457–469.

416. Scott J.F. Ferroelectric memories. Berlin, Heidelberg: Springer, 2000. 248 p.
417. Sebald G., Lebrun L., Guyomar D. Modeling of elastic nonlinearities in ferroelectric materials including nonlinear losses: Application to nonlinear resonance mode of relaxors single crystals // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2005. Vol. 52, No. 4. P. 596–602.
418. Seelecke S., Kim S.-J., Ball B.L., Smith R.C. A rate-dependent two-dimensional free energy model for ferroelectric single crystals // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2005. Vol. 17, No. 4. P. 337–350.
419. Selten M., Schneider G.A., Knoblauch V., McMeeking R.M. On the evolution of the linear material properties of PZT during loading history-an experimental study // International Journal of Solids and Structures. 2005. Vol. 42, No. 13. P. 3953–3966.
420. Semenov A.S., Balke H. Nonlinear finite element analysis of fully coupled electro mechanical problems // Proc. of the Int. Conf. Assessment of Reliability of Materials and Structures: Problems and Solutions: 2008. P. 326–339.
421. Semenov A.S., Grishchenko A.I., Melnikov B.E. Computational study of bone tissue mechanical properties dependence on nanoscale morphological characteristics // Applied Mechanics and Materials. 2015. Vol. 752–753, P. 103–108.
422. Semenov A.S., Kessler H., Liskowsky A., Balke H. On a vector potential formulation for 3D electromechanical finite element analysis // Communications in Numerical Methods in Engineering. 2006. Vol. 22, No. 5. P. 357–375.
423. Semenov A.S., Liskowsky A.C., Balke H. Vector potential formulation for 3D nonlinear finite element analysis of fully coupled electro-mechanical problems // Proc. 19th Chemnitz FEM-Symposium Chemnitz, 2006. P. 30–31.
424. Semenov A.S., Liskowsky A.C., Balke H. Vector potential formulation for the three-dimensional finite element analysis of nonlinear electromechanical problems // Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. 2007. Vol. 6526, P. 65260A.
425. Semenov A.S., Liskowsky A.C., Balke H. Comparison of vector and scalar potential formulation in computational ferroelectroelasticity // Proc. Second GAMM-Seminar Multiscale Mater. Model. Stuttgart, 2008. P. 30–32.
426. Semenov A.S., Liskowsky A.C., Balke H. Return mapping algorithms and consistent tangent operators in ferroelectroelasticity // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2010. Vol. 81, No. 10. P. 1298–1340.
427. Semenov A.S., Liskowsky A.C., Neumeister P., Balke H. Effective computational methods for the modeling of ferroelectroelastic hysteresis behaviour // Proc. IUTAM Symp. "Multiscale Model. Fatigue, Damage Fract. Smart Mater." / Ed. M. Kuna, A. Ricoeur, IUTAM Bookseries. 2011. P. 43–53.
428. Semenov A.S., Liskowsky A.C., Neumeister P., Balke H. Effective computational methods for the solution of ferroelectroelastic problems under complex loading // PAMM. 2010. Vol. 10, No. 1. P. 383–384.
429. Semenov A.S., Lobanov S.M. Comparison of Rate-Dependent Ferroelectroelastic Phenomenological Models for Prediction of PZT Creep // Applied Mechanics and Materials. 2015. Vol. 725–726, P. 961–966.
430. Semenov A.S., Melnikov B.E. Interactive Rheological Modeling in Elasto-visco-plastic Finite Element Analysis // Procedia Engineering. 2016. Vol. 165, P. 1748–1756.
431. Semenov A.S., Trapp J., Nöthe M. [et al.] Thermo-electro-mechanical modeling of spark plasma sintering processes accounting for grain boundary diffusion and surface diffusion // Computational Mechanics. 2021. Vol. 67, No. 5. P. 1395–1407.
432. Shaikh M.G., Phanish S., Sivakumar S.M. Domain switching criteria for ferroelectrics // Computational Materials Science. 2006. Vol. 37, No. 1–2. P. 178–186.
433. Shieh J., Huber J.E., Fleck N.A. An evaluation of switching criteria for ferroelectrics under stress and electric field // Acta Materialia. 2003. Vol. 51, No. 20. P. 6123–6137.
434. Shin Y.-H., Grinberg I., Chen I.-W., Rappe A.M. Nucleation and growth mechanism of ferroelectric domain-wall motion // Nature. 2007. Vol. 449, No. 7164. P. 881–884.
435. Shu Y.C., Bhattacharya K. Domain patterns and macroscopic behaviour of ferroelectric materials

- // Philosophical Magazine B: Physics of Condensed Matter; Statistical Mechanics, Electronic, Optical and Magnetic Properties. 2001. Vol. 81, No. 12. P. 2021–2054.
436. Shur V.Y., Rumyantsev E.L., Nikolaeva E. [et al.] Kinetics of fatigue in bulk ferroelectrics // Proc. SPIE. Smart Structures and Materials. 2002. Vol. 80, P. 1037–1039.
437. Simo J.C. Numerical analysis and simulation of plasticity // Handb. Numer. Anal. / Ed. P. Ciarlet, J. Lions, Amsterdam: Elsevier, 1998. P. 183–499.
438. Simo J.C., Govindjee S. Non-linear B-stability and symmetry preserving return mapping algorithms for plasticity and viscoplasticity // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 1991. Vol. 31, No. 1. P. 151–176.
439. Simo J.C., Hughes T.J.R. Computational inelasticity. New York: Springer, 1998. 392 p.
440. Simo J.C., Taylor R.L. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1985. Vol. 48, No. 1. P. 101–118.
441. Smith R.C. Smart material systems. Philadelphia: SIAM, 2005. 501 p.
442. Sohrabi A., Muliana A. Rate-dependent electro-mechanical coupling response of ferroelectric materials: A finite element formulation // Mechanics of Materials. 2013. Vol. 62, P. 44–59.
443. Song T.K. Landau-Khalatnikov simulations for ferroelectric switching in ferroelectric random access memory application // Journal of the Korean Physical Society. 2005. Vol. 46, No. 1. P. 5–9.
444. Sosnicki O., Barillot F., Leger M., Claeysen F. Active damping of vibrations applied on ski structures // Proc. 10th Int. Conf. New Actuators Bremen, 2006. P. 932–935.
445. Spivak A. Comprehensive introduction to differential geometry. Vol. 3. Clothbound, 1999.
446. Stark S., Neumeister P., Balke H. A hybrid phenomenological model for ferroelectroelastic ceramics. Part II: Morphotropic PZT ceramics // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2016. Vol. 95, P. 805–826.
447. Stark S., Neumeister P., Balke H. A hybrid phenomenological model for ferroelectroelastic ceramics. Part I: Single phased materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2016. Vol. 95, P. 774–804.
448. Stark S., Roth S., Neumeister P., Balke H. Modifications of the Newton–Raphson method for finite element simulations in ferroelectroelasticity // International Journal of Solids and Structures. 2013. Vol. 50, No. 5. P. 773–780.
449. Stark S., Semenov A.S., Balke H. On the boundary conditions for the vector potential formulation in electrostatics // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2015. Vol. 102, No. 11. P. 1704–1732.
450. Steinhausen R., Hauke T., Beige H. [et al.] Properties of fine scale piezoelectric PZT fibers with different Zr content // Journal of the European Ceramic Society. 2001. Vol. 21, No. 10–11. P. 1459–1462.
451. Steinhausen R., Pientschke C., Kuvatov A.Z. [et al.] Modelling and characterization of piezoelectric and polarization gradients // J. Electroceramics 2008. P. 47–52.
452. Steinkopff T. Finite-element modelling of ferroic domain switching in piezoelectric ceramics // Journal of the European Ceramic Society. 2002. Vol. 19, No. 6–7. P. 1247–1249.
453. Su Y., Landis C.M. Continuum thermodynamics of ferroelectric domain evolution: Theory, finite element implementation, and application to domain wall pinning // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2007. Vol. 55, No. 2. P. 280–305.
454. Subbarao E.C., McQuarrie M.C., Buessem W.R. Domain effects in polycrystalline barium titanate // Journal of Applied Physics. 1957. Vol. 28, No. 10. P. 1194–1200.
455. Sun C.-T., Achuthan A. Domain switching criteria for piezoelectric materials // Proc. SPIE. 2001. Vol. 4333, No. July 2001. P. 240.
456. Sun Q.P., Hwang K.C. Micromechanics modelling for the constitutive behavior of polycrystalline shape memory alloys—I. Derivation of general relations // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1993. Vol. 41, No. 1. P. 1–17.
457. Tagantsev A.K., Cross L.E., Fousek J. Domains in ferroic crystals and thin films. New York:

Springer, 2010. 821 p.

458. Takahashi M. Space charge effect in lead zirconate titanate ceramics caused by the addition of impurities // *Japanese Journal of Applied Physics*. 1970. Vol. 9, No. 10. P. 1236–1246.
459. Tan W.L., Kochmann D.M. An effective constitutive model for polycrystalline ferroelectric ceramics: Theoretical framework and numerical examples // *Computational Materials Science*. 2017. Vol. 136, P. 223–237.
460. Tan Y.Q., Zhang J.L., Wang C.L. Aging behaviours of CuO modified BaTiO₃ ceramics // *Advances in Applied Ceramics*. 2014. Vol. 113, No. 4. P. 223–227.
461. Theissmann R., Schmitt L.A., Kling J. [et al.] Nanodomains in morphotropic lead zirconate titanate ceramics: On the origin of the strong piezoelectric effect // *Journal of Applied Physics*. 2007. Vol. 102, No. 2. P. 024111.
462. Truesdell C., Noll W. *The non-linear field theories of mechanics*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004. P. 1–579.
463. Tsou N.T., Huber J.E. Compatible domain structures and the poling of single crystal ferroelectrics // *Mechanics of Materials*. 2010. Vol. 42, No. 7. P. 740–753.
464. Uchino K. *Ferroelectric Devices*. New York: CRC Press, 2009. 308 p.
465. Valanis K.C. Thermodynamics of large viscoelastic deformations // *Journal of Mathematics and Physics*. 1966. Vol. 45, No. 1–4. P. 197–212.
466. Valanis K.C. Fundamental Consequences on New Intrinsic Time Measure as a Limit of the Endochronic Theory // *Archives Mechanics*. 1980. Vol. 32, P. 171–191.
467. Valasek J. Piezo-electric and allied phenomena in Rochelle salt // *Physical Review*. 1921. Vol. 17, No. 4. P. 475–481.
468. Viehland D., Chen Y. Random-field model for ferroelectric domain dynamics and polarization reversal // *Journal of Applied Physics*. 2000. Vol. 88, No. 11. P. 6696–6707.
469. Viehland D., Tito F., McLaughlin E. [et al.] Enhancement of electromechanical coupling coefficient and acoustic power density in conventional «Hard» Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O₃ ceramics by application of uniaxial stress // *Journal of Applied Physics*. 2001. Vol. 90, No. 3. P. 1496–1500.
470. Vizdrik G., Ducharme S., Fridkin V.M., Yudin S.G. Kinetics of ferroelectric switching in ultrathin films // *Physical Review B*. 2003. Vol. 68, No. 9. P. 094113.
471. Volterra V. *Theory of functionals and of integral and integro-differential Equations*. New York: Dover Publications, 1959. 288 p.
472. Wada S., Yako K., Kakemoto H., Tsurumi T., Kiguchi T. Enhanced piezoelectric properties of barium titanate single crystals with different engineered-domain sizes // *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 98, No. 1. P. 014109.
473. Wang C.C. A new representation theorem for isotropic functions: An answer to Professor G. F. Smith's criticism of my papers on representations for isotropic functions // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1970. Vol. 36, No. 3. P. 166–197.
474. Wang D., Fotinich Y., Carman G.P. Influence of temperature on the electromechanical and fatigue behavior of piezoelectric ceramics // *Journal of Applied Physics*. 1998. Vol. 83, No. 10. P. 5342–5350.
475. Wang H.-Q., Dai Y.-J., Zhang X.-W. Microstructure and hardening mechanism of K_{0.5}Na_{0.5}NbO₃ lead-free ceramics with CuO doping sintered in different atmospheres // *Journal of the American Ceramic Society*. 2012. Vol. 95, No. 4. P. 1182–1184.
476. Wang L., Willatzen M. Modeling of nonlinear responses for reciprocal transducers involving polarization switching // *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2007. Vol. 54, No. 1. P. 177–189.
477. Wang L., Zhou Z., Zhao X. [et al.] Enhanced strain effect of aged acceptor-doped BaTiO₃ ceramics with clamping domain structures // *Applied Physics Letters*. 2017. Vol. 110, No. 10. P. 102904.
478. Waser R., Böttger U., Grossmann M. Static and dynamic properties of domains 2004. P. 31–46.

479. Weiland L.M., Lynch C.S. Thermo-electro-mechanical behavior of ferroelectric materials Part II: Introduction of rate and self-heating effects // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2003. Vol. 14, No. 10. P. 605–622.
480. Weng G.J., Wong D.T. Thermodynamic driving force in ferroelectric crystals with a rank-2 laminated domain pattern, and a study of enhanced electrostriction // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2009. Vol. 57, No. 3. P. 571–597.
481. Wieder H.H. Model for switching and polarization reversal in colemanite // *Journal of Applied Physics*. 1960. Vol. 31, No. 1. P. 180–187.
482. Wilkins M.L. Calculation of elastic-plastic flow // *Methods Comput. Phys.* / Eds. B. Alde, S. Fernbach, M. Rotenberg, New York: Academic Press, 1964. P. 211–263.
483. Wilkinson A.P., Xu J., Pattanaik S., Billinge S.J.L. Neutron Scattering Studies of Compositional Heterogeneity in Sol–Gel Processed Lead Zirconate Titanates // *Chemistry of Materials*. 1998. Vol. 10, No. 11. P. 3611–3619.
484. Woldman A.Y., Landis C.M. Thermo-electro-mechanical phase-field modeling of paraelectric to ferroelectric transitions // *International Journal of Solids and Structures*. 2019. Vol. 178–179, P. 19–35.
485. Wolf F., Sutor A., Rupitsch S.J., Lerch R. Modeling and measurement of creep- and rate-dependent hysteresis in ferroelectric actuators // *Sensors and Actuators, A: Physical*. 2011. Vol. 172, No. 1. P. 245–252.
486. Wongdamnern N., Ngamjarurojana A., Laosiritaworn Y., Ananta S., Yimnirun R. Dynamic ferroelectric hysteresis scaling of BaTiO₃ single crystals // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 105, No. 4. P. 044109–1–044109–6.
487. Yan Y., Feng Y., Li Z. The effect of uniaxial pressure, temperature and electric field on the internal bias field in the lead-based piezoelectric ceramics // *Materials Letters*. 2016. Vol. 164, P. 248–251.
488. Yang T.J., Gopalan V., Swart P.J., Mohideen U. Direct observation of pinning and bowing of a single ferroelectric domain wall // *Physical Review Letters*. 1999. Vol. 82, No. 20. P. 4106–4109.
489. Yen J.H., Shu Y.C., Shieh J., Yeh J.H. A study of electromechanical switching in ferroelectric single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2008. Vol. 56, No. 6. P. 2117–2135.
490. Yimnirun R., Laosiritaworn Y., Wongsanmai S., Ananta S. Scaling behavior of dynamic hysteresis in soft lead zirconate titanate bulk ceramics // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 89, No. 16. P. 162901.
491. Yimnirun R., Wongmaneeung R., Wongsanmai S. [et al.] Dynamic hysteresis and scaling behavior of hard lead zirconate titanate bulk ceramics // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 90, No. 11. P. 112908–1–112908–3.
492. Yoo I.K., Desu S.B. Modelling of the hysteresis of ferroelectric thin films // *Philosophical Magazine B*. 1994. Vol. 69, No. 3. P. 461–469.
493. Yu G., Chen X., Wang G., Dong X. Scaling Behavior of Ferroelectric Hysteresis Loop in 63PbTiO₃–37BiScO₃ Bulk Ceramic // *Ferroelectrics*. 2010. Vol. 403, No. 1. P. 219–224.
494. Zhang L., Erdem E., Ren X., Eichel R.A. Reorientation of (Mn_{Ti}^{'''} - V_O^{''})^x dipoles in acceptor-modified BaTiO₃ single crystals: An electron paramagnetic resonance study // *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93, No. 20. P. 202901.
495. Zhang L.X., Chen W., Ren X. Large recoverable electrostrain in Mn-doped (Ba,Sr) TiO₃ ceramics // *Applied Physics Letters*. 2004. Vol. 85, No. 23. P. 5658–5660.
496. Zhang S., Lee S.M., Kim D.H., Lee H.Y., Shrout T.R. Characterization of Mn-modified Pb (Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbZrO₃-PbTiO₃ single crystals for high power broad bandwidth transducers // *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93, No. 12. P. 122908.
497. Zhang Y., Xu R., Liu B., Fang D. An electromechanical atomic-scale finite element method for simulating evolutions of ferroelectric nanodomains // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2012. Vol. 60, No. 8. P. 1383–1399.
498. Zhang Z.K., Fang D.N., Soh A.K. A new criterion for domain-switching in ferroelectric materials // *Mechanics of Materials*. 2006. Vol. 38, No. 1–2. P. 25–32.
499. Zhao X.J., Liu B., Fang D.N. Study on electroelastic field concentration around the electrode tip in

- multilayer ferroelectric actuators of two designs and their optimizations // *International Journal of Plasticity*. 2010. Vol. 26, No. 4. P. 533–548.
500. Zhao Z.H., Dai Y., Huang F. The formation and effect of defect dipoles in lead-free piezoelectric ceramics: A review // *Sustainable Materials and Technologies*. 2019. Vol. 20, P. e00092.
501. Zheng L., Yang L., Li Y. [et al.] Origin of Improvement in Mechanical Quality Factor in Acceptor-Doped Relaxor-Based Ferroelectric Single Crystals // *Physical Review Applied*. 2018. Vol. 9, No. 6. P. 064028.
502. Zhou D. Experimental investigation of non-linear constitutive behavior of PZT piezoceramics 2003.
503. Zhou D., Kamiah M., Kamlah M. Experimental studies on the non-linear ferroelectric and ferro-elastic properties of piezoceramics // *Smart Devices: Modeling of Material Systems, An International Workshop*. 2008. Vol. 1029, P. 58–74.
504. Zhou D., Kamlah M. Dielectric and piezoelectric performance of soft PZT piezoceramics under simultaneous alternating electromechanical loading // *Journal of the European Ceramic Society*. 2005. Vol. 25, No. 12. P. 2415–2420.
505. Zhou D., Kamlah M. Determination of room-temperature creep of soft lead zirconate titanate piezoceramics under static electric fields // *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 98, No. 2005. P. 104107.
506. Zhou D., Kamlah M. Room-temperature creep of soft PZT under static electrical and compressive stress loading // *Acta Materialia*. 2006. Vol. 54. P. 1389–1396.
507. Zhou D., Kamlah M., Laskewitz B. Multi-axial non-proportional polarization rotation tests of soft PZT piezoceramics under electric field loading // *Proc. SPIE. Smart Structures and Materials*. 2006. Vol. 6170, P. 617009.
508. Zhou D., Kamlah M., Munz D. Rate dependence of soft PZT ceramics under electric field loading // *Proc. SPIE. Smart Structures and Materials*. 2001. Vol. 4333, P. 64–70.
509. Zhou D., Kamlah M., Munz D. Effects of uniaxial prestress on the ferroelectric hysteretic response of soft PZT // *Journal of the European Ceramic Society*. 2005. Vol. 25, No. 4. P. 425–432.
510. Zhou D., Kamlah M., Munz D. Effects of bias electric fields on the non-linear ferroelastic behavior of soft lead zirconate titanate piezoceramics // *Journal of the American Ceramic Society*. 2005. Vol. 88, No. 4. P. 867–874.
511. Zhou D., Kamlah M., Wang Z., Laskewitz B. An experimental study of domain switching criterion for soft PZT piezoceramics subjected to coaxial proportional electromechanical loading // *Proc. SPIE. Smart Structures and Materials* / Ed. W.D. Armstrong, 2005. P. 327–334.
512. Zhou D., Wang R., Kamlah M. Determination of reversible and irreversible contributions to the polarization and strain response of soft PZT using the partial unloading method // *Journal of the European Ceramic Society*. 2010. Vol. 30, No. 12. P. 2603–2615.
513. Zhou D., Wang Z., Kamlah M. Experimental investigation of domain switching criterion for soft lead zirconate titanate piezoceramics under coaxial proportional electromechanical loading // *Journal of Applied Physics*. 2005. Vol. 97, No. 8.
514. Ziegler H. An attempt to generalize Onsager's principle, and its significance for rheological problems // *ZAMP Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*. 1958. Vol. 9, No. 5–6. P. 748–763.
515. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Zhu J.Z. *Finite Element Method - Its Basis and Fundamentals* (6th Edition). London: Elsevier, 2005. 749 p.