

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Семенова Артема Семеновича
«Многоуровневые модели сегнетоэлектродупругих материалов и их
применение при решении краевых задач»,
представленную к защите на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук по специальности
1.1.8 (ранее 01.02.04) – Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации. Прогрессирующий рост числа смарт систем и конструкций с использованием активных материалов, возникший на рубеже нового тысячелетия и неуклонно продолжающийся в настоящее время, приводит к необходимости повышения точности позиционирования, предсказания неоднородного напряженно состояния, обеспечения прочности при монотонном и циклическом, одноосном и многоосном, комбинированном электрическом и механическом воздействии. Все более актуальной становится необходимость моделирования процессов переключения, необратимого деформирования и поляризации, эволюции микроструктуры сегнетоэлектродупругих материалов. Интерес к разработке уточненных связанных нелинейных определяющих уравнений сегнетоэлектродупругих материалов продиктован потребностями автомобильной, авиакосмической, морской, медицинской, компьютерной техники, устройств памяти, нанопозиционеров, микромоторов, гасителей колебаний, сенсоров, актуаторов и др.

Структура и содержание диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, списка 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. По структуре и оформлению диссертация и автореферат диссертации соответствуют установленным требованиям.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, научная новизна и достоверность результатов работы, сформулирована цель исследования, приведены основные положения, выносимые на защиту, указан личный вклад в работу, данные о диссертации, апробации и публикациях соискателя по теме работы.

Первая глава посвящена рассмотрению экспериментальных и теоретических основ процессов переключения в сегнетоэлектродупругих

материалах. В работе представлено описание структуры сегнетоэлектрoупругих материалов на различных масштабных уровнях, рассмотрены принципы формирования доменной структуры, указаны особенности поведения вблизи морфотропной фазовой границы. В работе сделан систематический обзор имеющихся экспериментальных данных по необратимому деформированию и поляризации при различных программах механического, электрического и комбинированного нагружения. Отдельный параграф диссертации посвящен аналитическому обзору классических и современных микроструктурных и феноменологических моделей описания процессов необратимого деформирования и поляризации сегнетоэлектрoупругих материалов. Во введении также представлены математические формулировки балансовых уравнений механики деформируемого твердого тела, электростатики и термодинамики, приведена формулировка связанной краевой задачи сегнетоэлектрoупругости.

Во второй главе рассматриваются предложенные определяющие уравнения (микроструктурные и феноменологические модели) сегнетоэлектрoупругого материала. Математическая формулировка микроструктурной модели 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. Многоуровневая микроструктурная модель учитывает процессы изменения структуры на разных масштабных уровнях (элементарная ячейка кристаллической решетки, домен, кристалл, поликристалл). Формулировка определяющих уравнений использует аналогию с моделями пластичности кристаллов. Для описания поведения поликристаллического сегнетоэлектрoупругого материала на макроуровне используется метод многоуровневой гомогенизации. Связь между макроскопическими (для поликристалла) механическими и электрическими переменными и переменными на мезоуровне (для кристаллита) определяется на основе прямых методов гомогенизации с использованием конечно-элементного решения краевых задач для представительного элемента поликристалла. Гомогенизация при переходе с уровня домена на уровень монокристалла осуществляется аналитически в рамках осреднения Рейсса.

Для описания поведения материала на макроуровне также предложена 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 микро-структурной модели.

Третья глава посвящена разработке методов решения нелинейных связанных краевых задач сегнетоэластостатики. Предложена векторно-потенциальная вариационная формулировка задач сегнетоэластостатики, позволяющая избежать проблем со сходимостью итерационных процедур, возникающих при использовании стандартной скалярно-потенциальной вариационной формулировки с характерными для рассматриваемых классов материалов невыпуклыми диаграммами деформирования. Для обеспечения единственности векторного потенциала предложены и верифицированы специальные виды граничных условий.

Предложен метод возвратного отображения для эффективного интегрирования нелинейных дифференциально-алгебраических определяющих уравнений сегнетоэластостатического материала эволюционного типа при наличии ограничений. Для обеспечения квадратичной скорости сходимости итерационной процедуры Ньютона-Рафсона в работе получены выражения для согласованного касательного оператора на основе линеаризации дискретной задачи, соответствующей методу возвратного отображения.

Модели сегнетоэластостатического материала и методы решения нелинейных связанных задач реализованы в разработанном автором конечно-элементном программном комплексе. Результаты расчетов пьезоэлектрической пластины, полого цилиндра, параллелепипеда с цилиндрическим включением и сферическими включениями, пластины с отверстием, представительного объема поликристаллического агрегата, образца с центральной краевой трещиной и многослойного актуатора продемонстрировали эффективность предложенных методов решения.

Верификация предложенных вариационных формулировок, способов задания граничных условий, методов решения нелинейных задач, произведенная на основе сравнения полученных результатов с предложенными 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, диапазоны допустимых значений штрафных параметров.

В четвертой главе представлены результаты анализа и верификации предложенных микроструктурных и феноменологических моделей сегнето-электроупругого материала. Использование двухфазной (с учетом тетрагональной и ромбоэдрической фаз) микроструктурной модели с реальными константами материала, определенными на основе данных измерения параметров кристаллической решетки, позволяет получить хорошее соответствие результатов расчета данным экспериментов для различных поликристаллических сегнетопъезокерамик. Наблюдается качественное и количественное соответствие экспериментальным диэлектрическому, электромеханическому и механическому гистерезисам, кривым деполяризации и реполяризации, эффектам, наблюдаемых при наложении постоянного механического напряжения на циклическое электрическое поле и при наложении постоянного электрического поля на кривые механического нагружения/разгрузки, а также для кривых переполаризации при непропорциональном нагружении по двухлучевым (трехзвенным) траекториям.

Установлено, что использование однофазной тетрагональной микроструктурной модели может приводить к значительным отличиям от результатов экспериментов при описании электромеханического гистерезиса.

Феноменологическая модель позволяет получить хорошее соответствие результатов расчета с данными опытов для поликристаллической сегнетопъезокерамики при пропорциональном нагружении. Однако при комбинированном и непропорциональном нагружении точность прогнозов феноменологической модели ниже в сравнении с результатами микромеханической модели.

Пятая глава посвящена описанию поведения сегнетоэлектроупругих материалов вблизи морфотропной фазовой границы. Предложенная автором многоуровневая двухфазная (смесь тетрагональной и ромбоэдрической фаз) микроструктурная модель позволяет описать появление экстремальных значений остаточной деформации и поляризации поликристаллической пьезокерамики при определенном сочетании объемных долей тетрагональной и ромбоэдрической фаз (называемом морфотропной фазовой границей). Применение в расчетах однофазных моделей с реальными константами материала при учете только тетрагональной или только ромбоэдрической фазы приводит к существенно заниженным уровням остаточных деформаций.

В работе показано, что основными причинами появления концентрационного максимума остаточной деформации и поляризации поликристалла в смесях являются принципиальные отличия в характере ориентационных зависимостей (анизотропии) остаточных деформаций для различных фаз. В смеси наблюдается увеличение числа направлений с максимальной остаточной деформацией и поляризацией, приводящее к более точному выстраиванию направлений поляризации кристаллитов в поликристалле в соответствии с направлением внешнего воздействия. Кроме этого в смеси, в отличие от одиночных фаз, отсутствуют направления с нулевыми остаточными деформациями в монокристалле, что снижает уровень микронапряжений в поликристалле и, как следствие этого, приводит к меньшему уменьшению остаточной деформации и поляризации при разгрузке.

Предложен подход расчетного определения экстремальных свойств двухфазных и трехфазных смесей, открывающий возможность синтеза сегнетоэлектростроупругих материалов с оптимальной структурной путем управления его метастабильными состояниями.

Шестая глава посвящена моделированию гистерезисного поведения сегнетоэлектростроупругих материалов при учете точечных дефектов, в качестве которых рассматриваются акцепторные или донорные легирующие примеси и подвижные кислородные вакансии. Сравнение результатов расчета смещения петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов с использованием предложенной многоуровневой микроструктурной модели материала с учетом полярных точечных дефектов с данными экспериментальных исследований для ряда сегнетоэлектростроупругих материалов показало удовлетворительное соответствие. Сравнение проводилось как для поликристаллических, так и для монокристаллических материалов с тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической структурой. В работе установлена связь отклонения ориентации полярных дефектов от направления внешнего воздействия и разориентации дефектов между собой на вид петли гистерезиса моно- и поликристаллических материалов.

Результаты моделирования эволюции поверхности переключения на основе микроструктурной модели с учетом дефектов продемонстрировали возможность корректного описания наблюдаемого в экспериментах изменения формы поверхности переключения после предварительной поляризации и последующей разгрузки для образцов из BaTiO_3 и поликристаллической пьезокерамики PZT-5Н.

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

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

Новизна полученных результатов. В работе предложена многоуровневая микроструктурная модель сегнетоэлектростроупругого материала для описания процессов необратимого деформирования и поляризации моно- и поликристаллических материалов с учетом эволюции и взаимодействия мультидоменной и дефектной подструктур, многофазного состава, анизотропии свойств и диссипативного характера движения доменных стенок. Подобных моделей, позволяющих учесть столь широкий спектр особенностей поведения сегнетоэлектростроупругих, ранее предложено не было.

В диссертации для решения нелинейных связанных электромеханических краевых задач впервые предложена векторно-потенциальная вариационная формулировка задачи сегнетоэлектростроупругости, лишенная недостатков стандартной скалярно-потенциальной вариационной формулировки при решении нелинейных задач.

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

Значимость результатов диссертации. Практическая значимость диссертационной работы заключается в разработке средств (включающих предложенные и верифицированные модели материала, методы решения нелинейных краевых связанных задач, алгоритмы и конечно-элементный комплекс программ) для анализа напряженно-деформированного состояния рабочих элементов сенсоров и актуаторов, используемых в автомобильной, авиационной и медицинской технике. Теоретическая значимость работы заключается в разработке подхода к построению

многоуровневых термодинамически согласованных моделей нелинейного поведения моно- и поликристаллических активных материалов с изменяющейся микроструктурой, многофазным строением и наличием эволюционирующих точечных дефектов.

Автореферат соответствует структуре и содержанию диссертационной работы и отражает результаты, основные выводы и рекомендации, приведенные в ней.

Апробация работы. Основные положения диссертации А.С. Семенова опубликованы в 45 работах, в том числе в 16 изданиях, рекомендованных ВАК России или входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus. Результаты исследований докладывались соискателем на большом числе международных и всероссийских научных конференций по научной специальности диссертации. Полностью работа докладывалась на четырех профильных научных семинарах.

Замечания по диссертационной работе.

- 1) В диссертации используются в основном статические (квазистатические) постановки задач сегнетоэлектрорупругости. Однако ряд процессов поляризации и работа многих пьезоэлектрических устройств происходят в динамическом режиме. В этой связи было бы интересно обсудить возможности обобщения предлагаемых подходов на динамические задачи.
- 2) Использование осреднения Рейсса требует какого-то обоснования, поскольку имеются многие другие альтернативные методы.
- 3) Изотропное приближение, несмотря на ссылки на работы, где оно использовалось, также требует обоснования, поскольку наличие анизотропных пьезоэлектрических свойств кажется нелогичным при использовании изотропных упругих и диэлектрических свойств.
- 4) При сравнении скалярно-потенциальной и векторно-потенциальной формулировок по сходимости в нелинейных задачах можно было бы вместо метода Ньютона-Рафсона использовать метод движения по дугам (arc-length method), что вполне вероятно могло бы нивелировать недостатки сходимости МКЭ в классической формулировке для задач электрорупругости.
- 5) Электрические граничные условия при векторно-потенциальной формулировке представляются более сложными. Здесь было бы интересно обсудить типы функций формы, которые являются наиболее подходящими

для удовлетворения этих граничных условий (вместе со сходимостью и вычислительной трудоемкостью).

- 6) Электрическое граничное условие для электродов, запитываемых генераторами тока (заряда), кажется, не рассмотрено. Это условие возможно мало используется для статических задач, но оно чрезвычайно важно для динамических задач, в частности для поиска частот электрических антирезонансов. Для распространения метода на динамические задачи было бы полезно проанализировать возможности использования этого условия при векторно-потенциальной формулировке.
- 7) Было бы полезным дать сравнение предлагаемой векторно-потенциальной формулировки с гибридным МКЭ, рассмотренном в цитируемой в диссертации работе [415], также со смешанным МКЭ, представленном в работах А. Pechstein с соавторами.
- 8) Для практического использования было бы крайне полезно разработать какие инженерные (или стандартизированные) рекомендации по неоднородностям полей поляризации вблизи кромок электродов, в окрестности включений и т.п.
- 9) Для работы такого объема естественно, что имеются некоторые опечатки и неточности (на стр. 96 опущен множитель у диэлектрической проницаемости вакуума, а в (1.60) обычно используется знак минус; на стр. 109 указано на 10 констант, но потом говорится о $6+3+2$ константах; использование формул терминов на кириллице (ЭПОП, ЭПОК) кажется, не совсем удачным; и т.п.)

Указанные замечания не умаляют значимости полученных результатов и не снижают общей положительной оценки работы. Кроме того, многие из этих замечания носят характер пожеланий.

Заключение по диссертации

Диссертация Семенова Артема Семеновича «Многоуровневые модели сегнетоэлектродупругих материалов и их применение при решении краевых задач», представленная на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, является завершенной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне, в которой разработаны теоретические положения и получены прикладные результаты, совокупность которых можно квалифицировать как серьезное научное достижение в области механики деформируемого твердого тела в части разработки подходов описания необратимых процессов деформирования и поляризации

сегнетоэлектрoупругих сред с учетом различных структурных уровней, многофазного состава и эволюции дефектов, а также методов решения нелинейных задач сегнетоэлектрoупругости.

Диссертационная работа Семенова А.С. отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук в соответствии с Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – Механика деформируемого твердого тела.

«10» июня 2022 г.

Даю согласие на обработку своих персональных данных

Официальный оппонент

 Наседкин Андрей Викторович

доктор физико-математических наук
(специальность 01.02.04 – механика деформируемого твердого тела),
профессор, зав. кафедрой «Математическое моделирование»
Института математики механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»,
телефон: 8(863) 2975 111,
e-mail: avnasedkin @sfedu.ru,
адрес 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а, а. 219.



Подпись: Наседкина А.В.

Член Совета
Федерального университета
Мирошниченко О.С.

10.06.2022