

ОТЗЫВ

официального оппонента

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

Актуальность темы диссертации. Все более широкое распространение на практике получают активные (смарт) материалы, характерным примером которых являются сегнетоэлектродупругие материалы. Они находят широкое применение на практике в качестве рабочих элементов сенсоров и актюаторов, нанопозиционеров, микромоторов, пьезотрансформаторов, элементов энергонезависимой памяти, автономных накопителей энергии (харвастеров), магнетоэлектрических преобразователей, и др. Для оценки напряженного состояния, точности позиционирования, прочности и долговечности рассматриваемых устройств, а также в целях оптимизации их формы возникает необходимость разработки уточненных моделей сегнетоэлектродупругого материала.

Несмотря на значительное число работ, посвященных построению различных моделей сегнетоэлектриков/сегнетоэластиков, основное их внимание сосредоточено на описании отдельных эффектов при простейших вариантах нагружения. В связи с этим, тема диссертации, направленная на построение универсальной комплексной модели механики сегнетоэлектродупругих сред с учетом различных структурных уровней, изменяющейся микроструктуры, многофазного состава, анизотропии свойств и наличием эволюционирующих дефектов при произвольных программах электромеханического нагружения является, несомненно, актуальной.

Структура и содержание диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, 6 приложений и списка литературы, включающего 515 наименований.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, раскрыта научная новизна и достоверность результатов работы, сформулирована цель исследования, приведены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлено необходимое для разработки многоуровневых моделей описание структуры сегнетоэлектростроупругих материалов на различных масштабных уровнях, рассмотрены принципы формирования доменной структуры, указаны особенности поведения вблизи морфотропной фазовой границы. В работе сделан систематический обзор данных экспериментальных исследований процессов необратимого деформирования и поляризации при различных видах нагружения. Результатом детального обзора существующих микроструктурных и феноменологических моделей сегнетоэлектростроупругих материалов явился анализ их преимуществ и недостатков.

Во второй главе представлена формулировка определяющих уравнений многоуровневой микроструктурной модели сегнетоэлектростроупругого материала с учетом мультидоменной структуры, многофазного состава, анизотропии свойств доменов, наличия и эволюции полярных точечных дефектов и диссипативного характера движения доменных стенок для термодинамически согласованного описания монотонного и гистерезисного поведения моно- и поликристаллических сегнетоэлектриков /сегнетоэластиков в условиях сложного многоосного комбинированного электрического и/или механического нагружения. Многоуровневая *микроструктурная* модель учитывает процессы изменения структуры на разных структурных уровнях (элементарная ячейка кристаллической решетки, домен, кристалл, поликристалл). Гомогенизация при переходе с уровня домена на уровень монокристалла осуществляется аналитически в рамках осреднения Рейсса. Связь между макроскопическими переменными (для поликристалла) и переменными на мезоуровне (для кристаллита) определяется на основе прямых методов гомогенизации с использованием конечно-элементного решения краевых задач для представительного элемента поликристалла.

Третья глава посвящена разработке эффективных методов решения нелинейных связанных краевых задач сегнетоэлектростроупругости. Предложена векторно-потенциальная вариационная формулировка задач сегнетоэлектростроупругости, позволяющая избежать проблем со сходимостью итерационных процедур, возникающих при использовании стандартной скалярно-потенциальной вариационной формулировки. Предложенные модели материала и методы решения нелинейных связанных задач реализованы в разработанном автором конечно-элементном программном комплексе PANTOCRATOR.

В четвертой главе представлены результаты оценки и верификации предложенных микроструктурных и феноменологических моделей материала. Для поликристаллических сегнетопьезоокерамик PZT PIC 151, PZT-5H, PLZT 8/65/35, PZT-51, PZT-4D с составами

вблизи морфотропной фазовой границы при использовании двухфазной (тетрагонально / ромбоэдрической) многоуровневой микроструктурной модели удалось получить хорошее соответствие результатов расчета экспериментальным данным для диэлектрического, электромеханического и механического гистерезисов. Феноменологическая модель демонстрирует хорошее соответствие результатов расчета с данными опытов для поликристаллической сегнетопъезокерамики при пропорциональном нагружении. При непропорциональном нагружении и комбинированном электромеханическом воздействии точность прогнозов феноменологической модели ниже в сравнении с результатами микромеханической модели.

Пятая глава посвящена описанию поведения сегнетоэлектродупругих материалов вблизи морфотропной фазовой границы на основе предложенной многоуровневой двухфазной тетрагонально / ромбоэдрической микроструктурной модели. Она позволяет описать появление максимальных значений остаточной деформации и поляризации поликристаллической пьезокерамики при определенном сочетании объемных долей тетрагональной и ромбоэдрической фаз. Автором показано, что основной причиной появления максимума остаточной деформации и поляризации поликристалла в смесях являются принципиальные отличия (несовпадение максимумов и минимумов) в характере ориентационных зависимостей остаточных деформаций для тетрагональной или ромбоэдрической фаз. Для двухфазной смеси характерно увеличение числа направлений с максимальной остаточной деформацией и поляризацией, позволяющее более точно переориентировать направления поляризации кристаллитов в поликристалле по отношению к направлению внешнего воздействия. Предложенный автором подход, основанный на многовариантных вычислительных экспериментах с варьированием соотношений фаз, может быть использован при поиске оптимального фазового состава как для двухфазных, так и для трехфазных смесей в целях обеспечения наивысших показателей материала.

Шестая глава посвящена моделированию поведения сегнетоэлектродупругих материалов при учете дефектов, в качестве которых рассматривались подвижные кислородные вакансии, акцепторные или донорные легирующие примеси. В работе представлены результаты сравнения расчета смещения петель диэлектрического и электромеханического гистерезисов с использованием предложенной многоуровневой микроструктурной модели с учетом дефектов с данными экспериментов для BaTiO_3 , PMS-PZT, PMN-PZT, KTS и PZT PIC151. Исследовано влияние ориентации дефектов на сдвиг и срез петли гистерезиса. Показана возможность корректного описания процесса старения после предварительной поляризации, эффекта дезэджинга, связанного с уменьшением начального поля смещения при интенсивном циклическом нагружении, а

также эволюции поверхности переключения на основе микроструктурной модели с учетом изменяющихся дефектов.

В заключении приведены основные результаты и выводы диссертационного исследования, выносимые на защиту.

Научная новизна диссертационной работы связана с разработкой многоуровневой микроструктурной модели сегнетоэлектродупругого 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 доменов и диссипативного характера движения доменных стенок. Полученные с помощью разработанной модели материала новые результаты позволяют дать объяснение ряду принципиальных эффектов поведения рассматриваемого класса материалов: наличие 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 и дезейджинга.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в разработке моделей материала, методов решения нелинейных краевых связанных задач, алгоритмов и конечно-элементного комплекса программ для анализа процессов поляризации и напряженно-деформированного состояния рабочих элементов сенсоров и актуаторов, используемых в технике.

Теоретическая значимость работы заключается в разработке подхода к построению многоуровневых термодинамически согласованных моделей нелинейного поведения моно- и поликристаллических активных материалов с изменяющейся микроструктурой, с учетом различных структурных уровней, многофазным строением и наличием эволюционирующих точечных дефектов.

Автореферат в целом соответствует структуре и содержанию диссертации и отражает основные результаты, представленные в ней.

Апробация. Основные положения и результаты диссертации опубликованы в 45 печатных трудах, в том числе в 16 изданиях, рекомендованных ВАК РФ или входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus. Результаты исследований докладывались автором на 47 международных и всероссийских научных конференциях.

Замечания по диссертационной работе:

1. В работе отсутствуют комментарии о возможности применения предложенных

микроструктурных моделей для описания поведения сегнетоэлектрических тонких пленок.

2. Для объяснения экстремальных свойств в области морфотропной фазовой границы в твердых растворах ЦТС используется модель для двухфазной системы, состоящей из смеси тетрагональной и ромбоэдрической фаз. При этом не учитываются экспериментальные данные и теоретические расчеты, в соответствии с которыми в узком интервале концентраций оказывается устойчивой промежуточная моноклинная фаза.

3. Полученные в работе результаты апробированы на конференциях, где в основном обсуждались проблемы механики твердого тела, но практически не представлялись на сегнетоэлектрических конференциях, как отечественных, так и междугородних.

4. Разработанные модели прошли верификацию на составах пьезокерамики (PZT-5H, PZT-4D и т.д.), производимых на «Западе». Результаты верификации для отечественных видов пьезокерамик (таких как ЦТСНВ-1, ЦТС-19, ПКР различных типов) в работе отсутствуют.

5. В автореферате отдельным пунктом отсутствуют выводы и заключение по работе, что несколько затрудняет восприятие содержательной части автореферата.

Однако перечисленные замечания не снижают ценности полученных автором диссертации результатов, их строгости, достоверности, научной и практической значимости.

Заключение

Диссертационная работа А.С. Семенова «Многоуровневые модели сегнетоэлектрoупругих 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 диссертации на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области механики деформируемого твердого тела, посвященное созданию научно обоснованной методологии и построению на ее основе математических моделей сегнетоэлектрoупругих сред с учетом особенностей процессов необратимого деформирования и поляризации на различных структурных уровнях.

Диссертация Семенова Артема Семеновича 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».

Официальный оппонент:

ведущий научный сотрудник

лаборатории Физики сегнетоэлектричества и магнетизма ФТИ им. А.Ф. Иоффе,

доктор физико-математических наук

/Пронин Игорь Петрович/

14 июня 2022 г.

Подпись Пронина И.П. заверяю:

зам. зав. отделом кадров ФТИ И.С. Бурдakov

14.06.2022



Санкт-Петербург 194021 Политехническая ул. 26

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Телефон: +7 (812) 2972245

Email: post@mail.ioffe.ru

Андреев А.И.

