

Конечно-элементное моделирование эволюции доменной структуры сегнетоэластопластичного материала при циклическом нагружении

Выполнил студент группы:
3641503/90601
Мамчиц Алексей

Руководитель:
Доцент, к.ф.-м.н.
Семенов А. С.

Санкт-Петербург
2021 г.

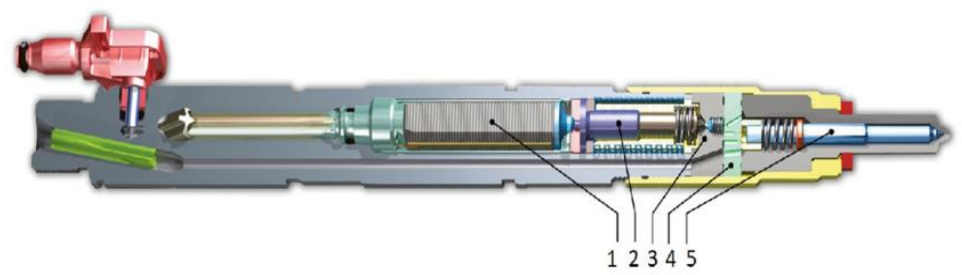
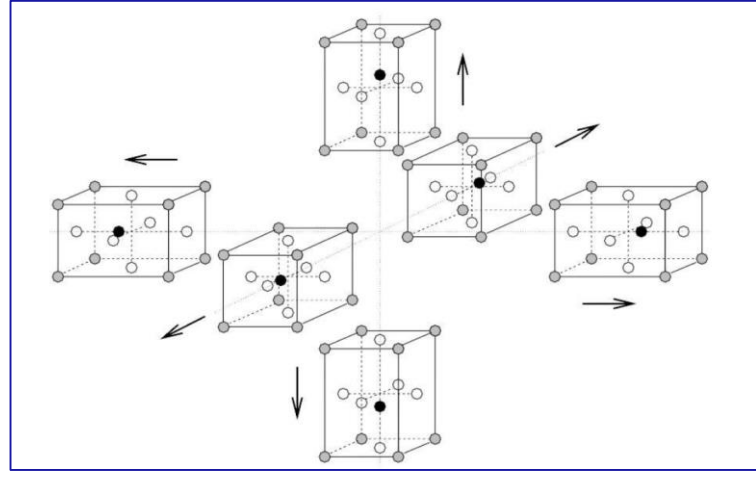
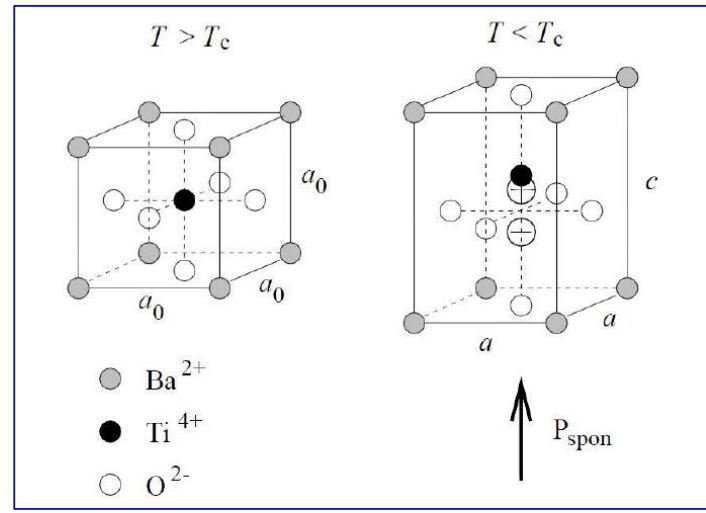
Мотивация

- Возрастающая актуальность применения подобных материалов
- Сложность моделирования микроструктуры
- Необходимость создать упорядоченную классификацию структур

Цели работы

- Определение эффективных свойств периодических структур монокристалла СЭУМ
- Моделирование движения доменных границ для монокристалла СЭУМ
- Построение гистерезисов зависимости электрического смещения от электрического поля

**Основные сведения.
 Применение**



1 – пьезоэлемент; 2 – гидрокомпенсатор; 3 – управляющий клапан; 4 – дроссельная шайба; 5 – игла распылителя

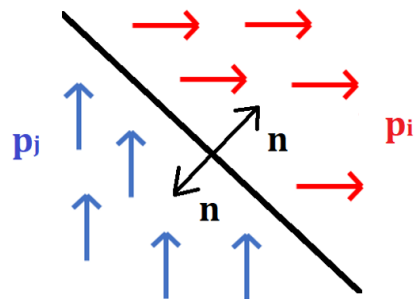


Совместные доменные структуры

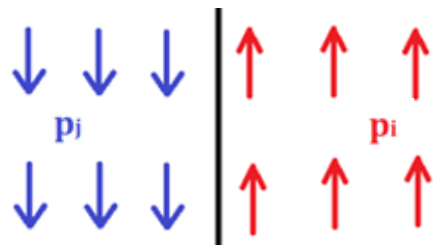
Условия совместности доменов:

$$\epsilon_i - \epsilon_j = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{a})$$

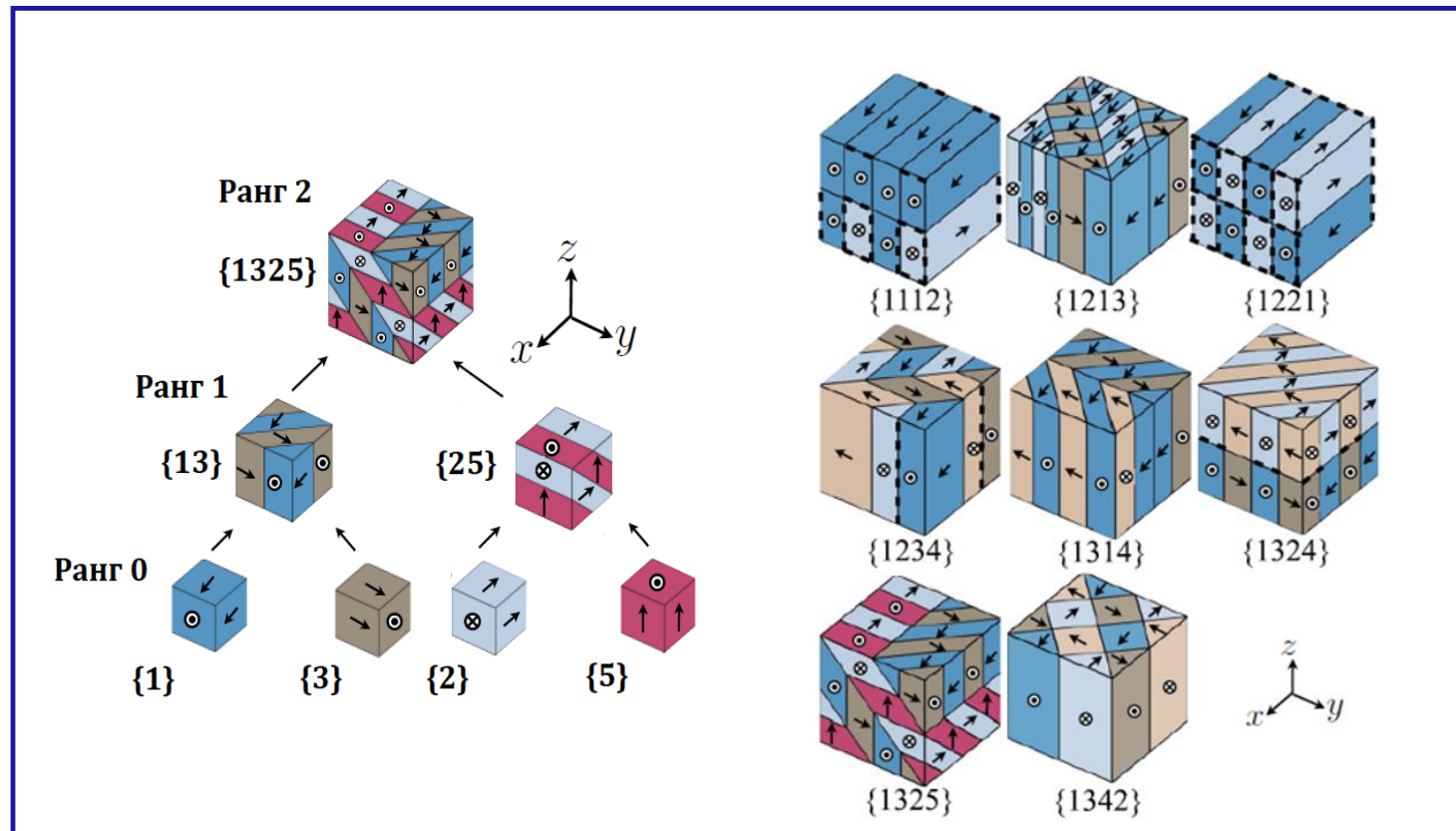
$$(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j) \cdot \mathbf{n} = 0$$



Граница 90°

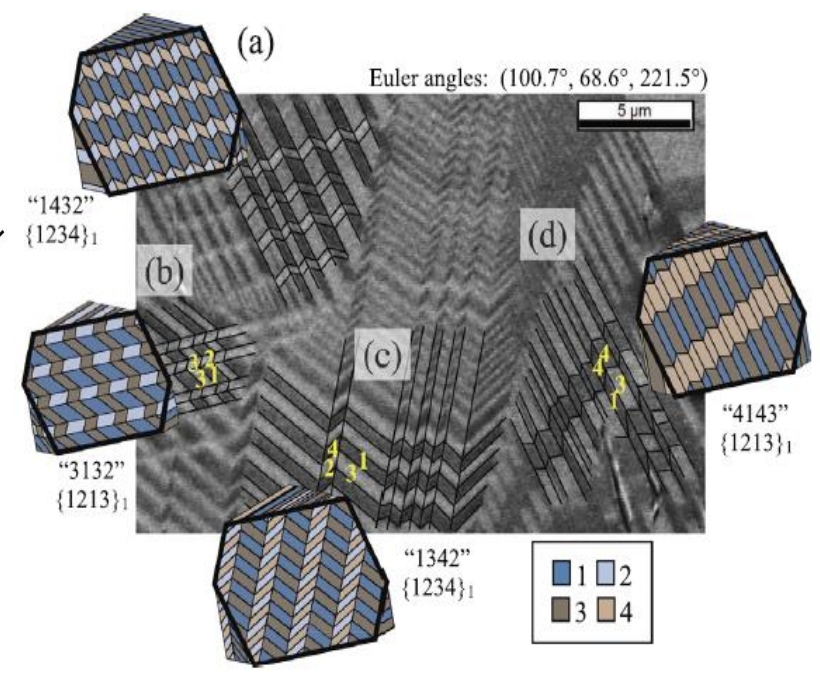
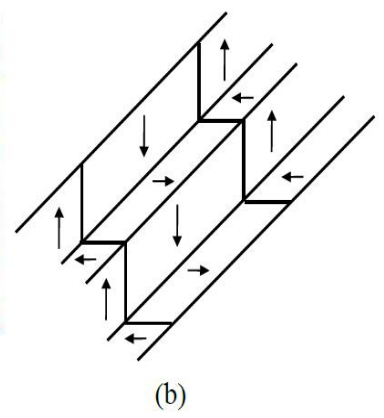
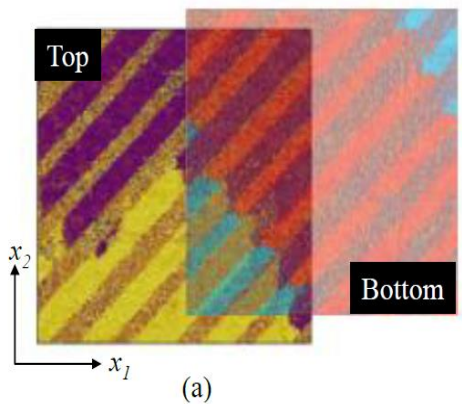
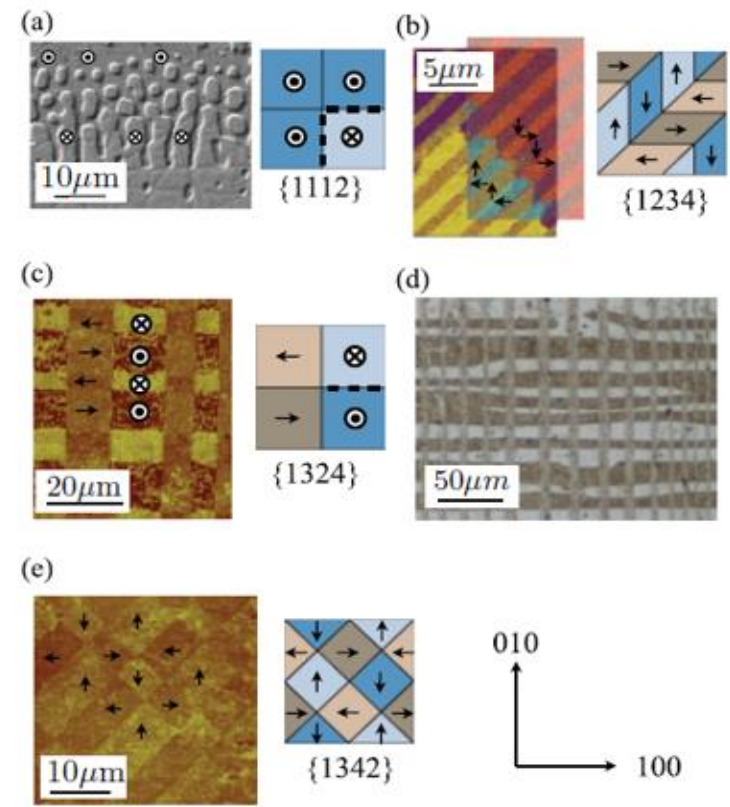


Граница 180°



N. T. Tsou, P. R. Potnis, and Huber J. E., PHYSICAL REVIEW B 83, 184120 (2011)

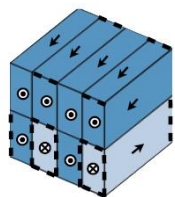
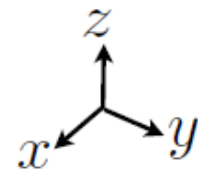
Примеры доменных структур, наблюдаемых в экспериментах



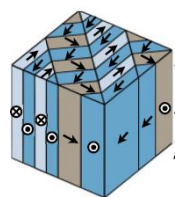
Изображения периодических доменных структур, полученные с помощью SEM, PFM и AFM в тетрагональной решетке титаната бария

Пример обнаружения периодических структур 2 ранга в материале с памятью формы

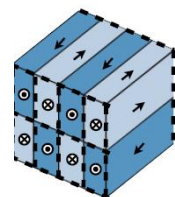
Конечно-элементные модели представительных объемов



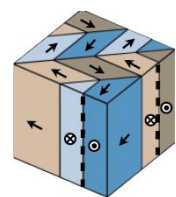
{1112}



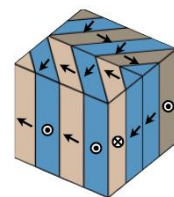
{1213}



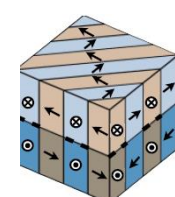
{1221}



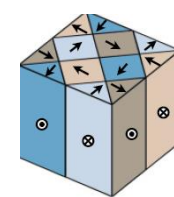
{1234}



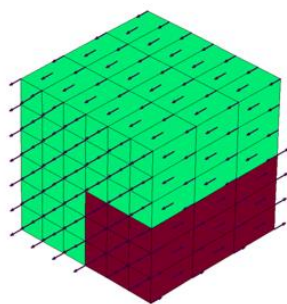
{1314}



{1324}

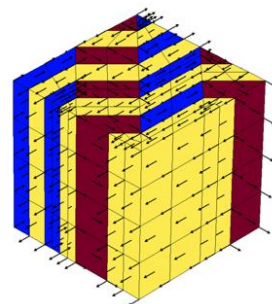


{1342}



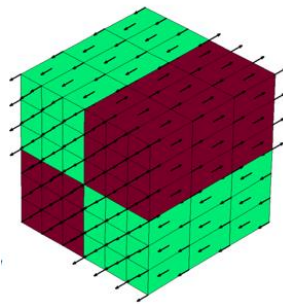
2 направления
поляризации

108 элементов
196 узлов



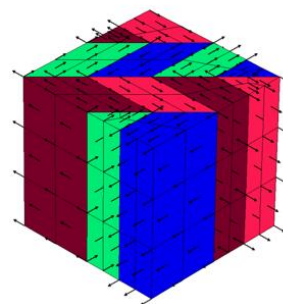
3 направления
поляризации

272 элемента
415 узлов



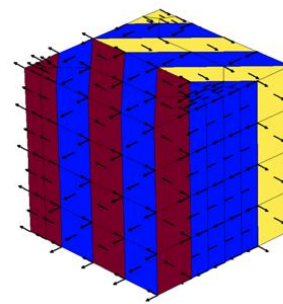
2 направления
поляризации

108 элементов
196 узлов



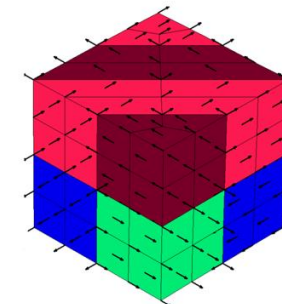
4 направления
поляризации

132 элемента
228 узлов



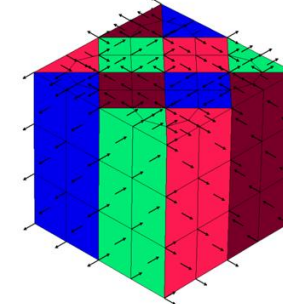
3 направления
поляризации

112 элементов
200 узлов



4 направления
поляризации

56 элементов
115 узлов



4 направления
поляризации

120 элементов
196 узлов

Постановка задачи

Постановка электромеханической
краевой задачи:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \bar{\mathbf{f}}_V = 0$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u})^s$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$$

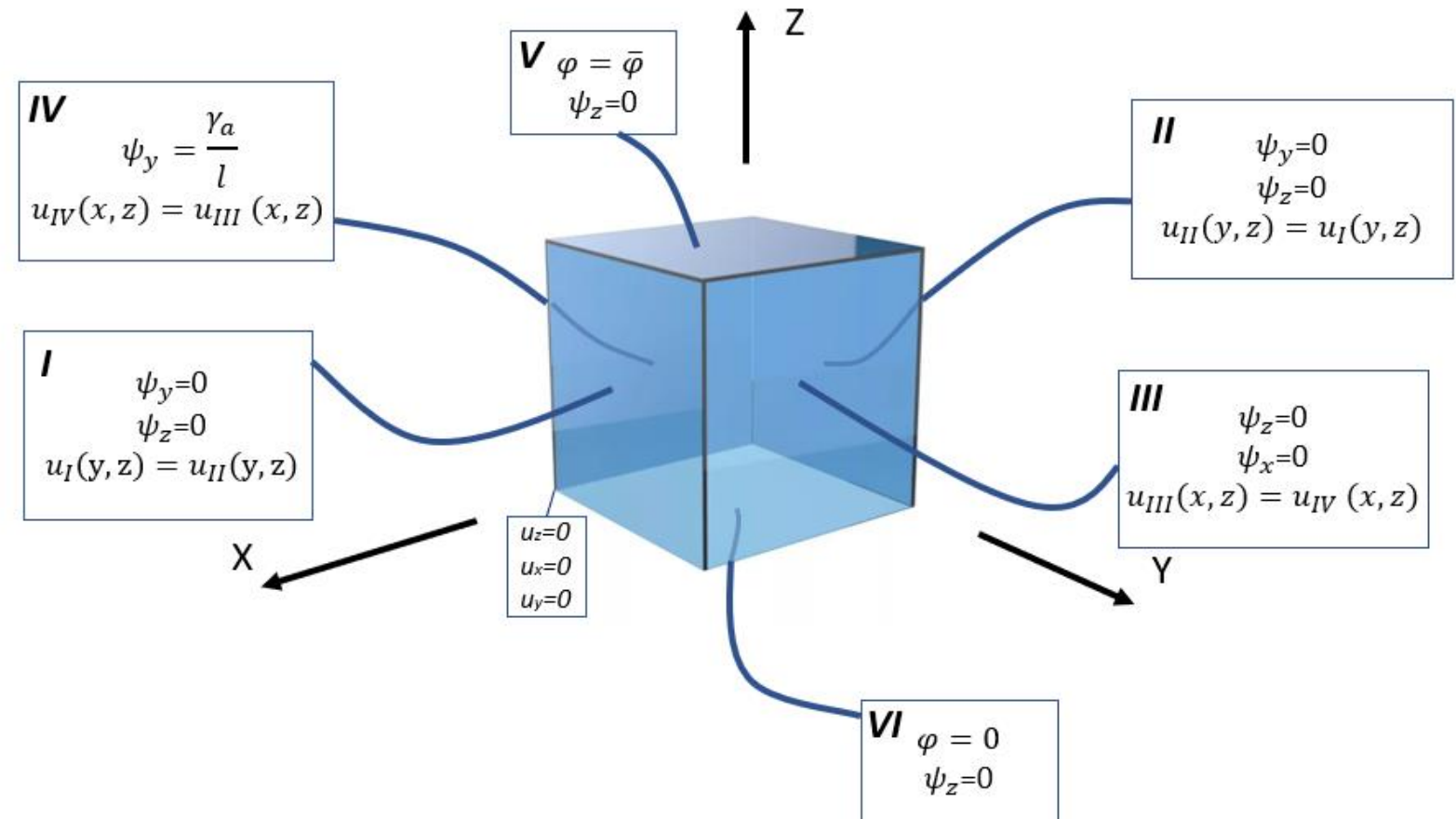
$$\nabla \times \mathbf{E} = 0$$

Условие механической периодичности:

$$\mathbf{u}_I(y, z) = \mathbf{u}_{II}(y, z),$$

$$\mathbf{u}_{III}(x, z) = \mathbf{u}_{IV}(x, z)$$

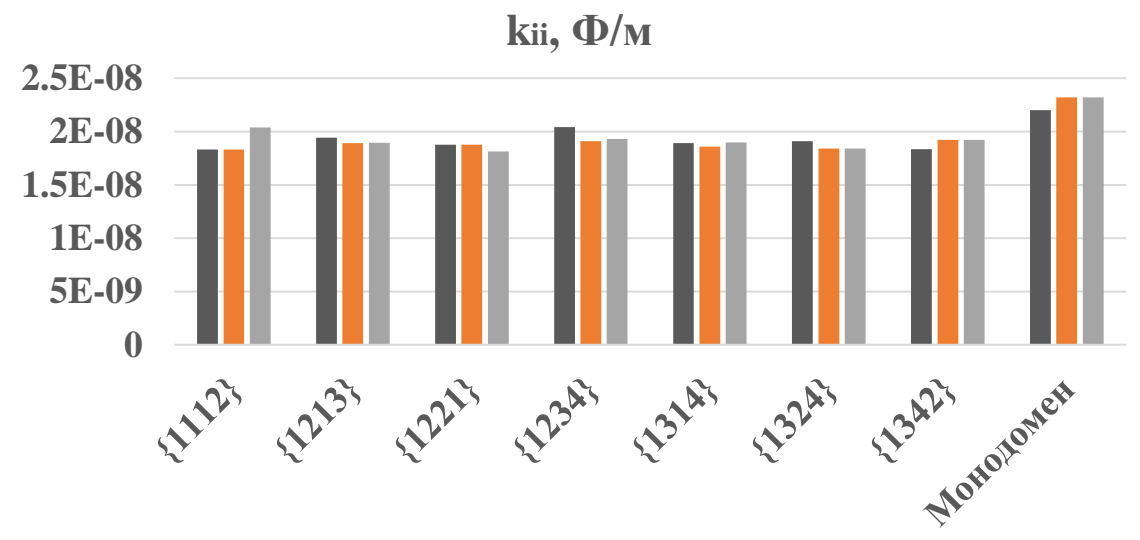
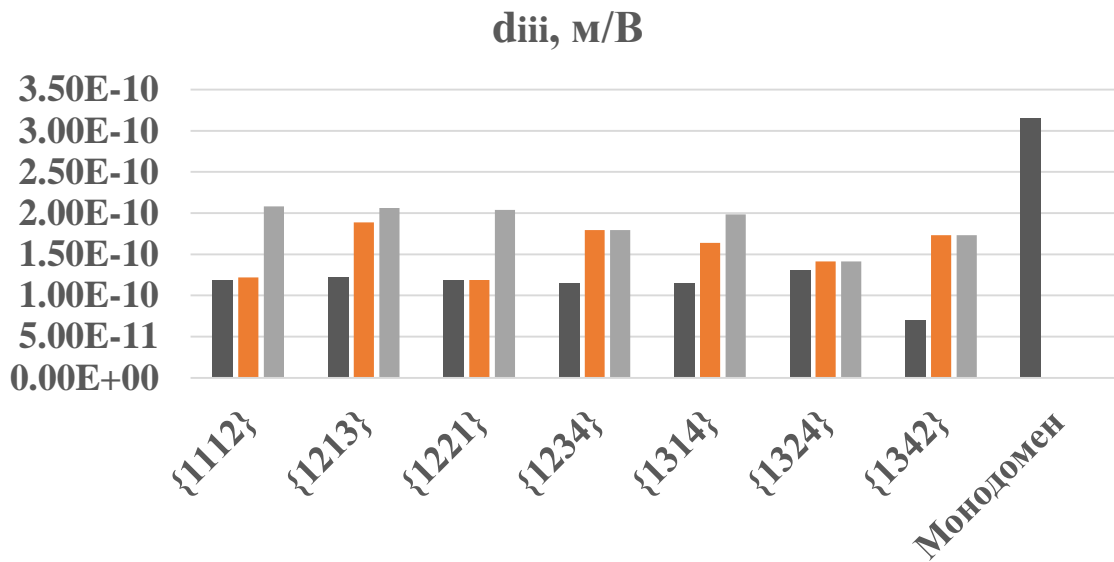
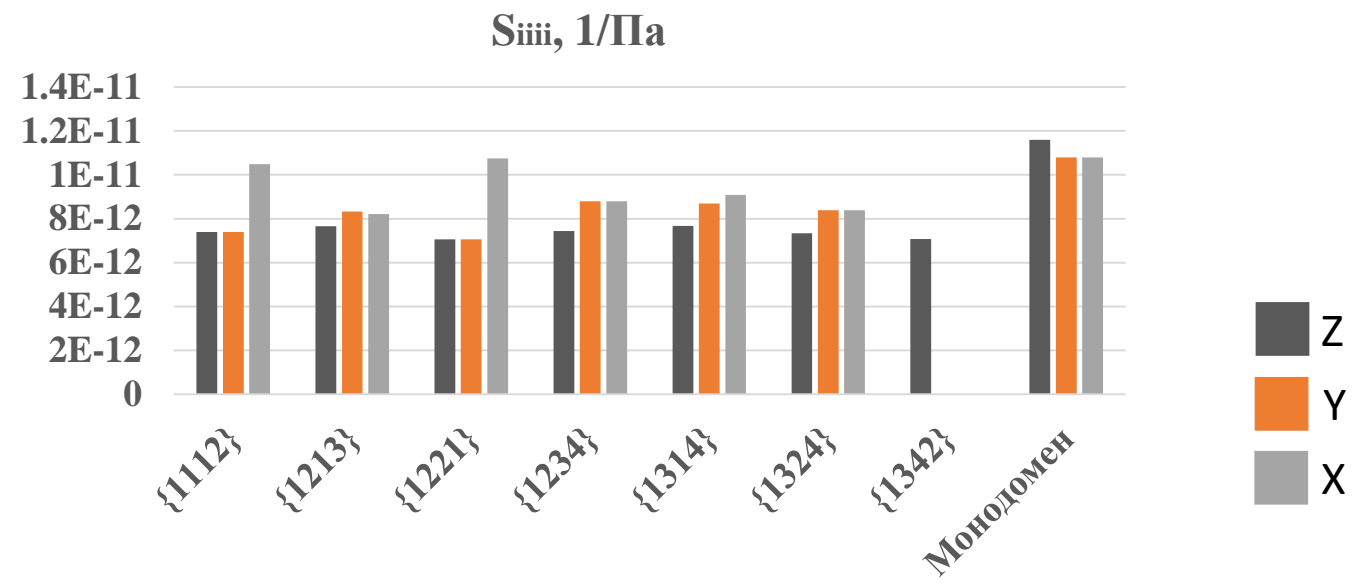
Граничные условия:



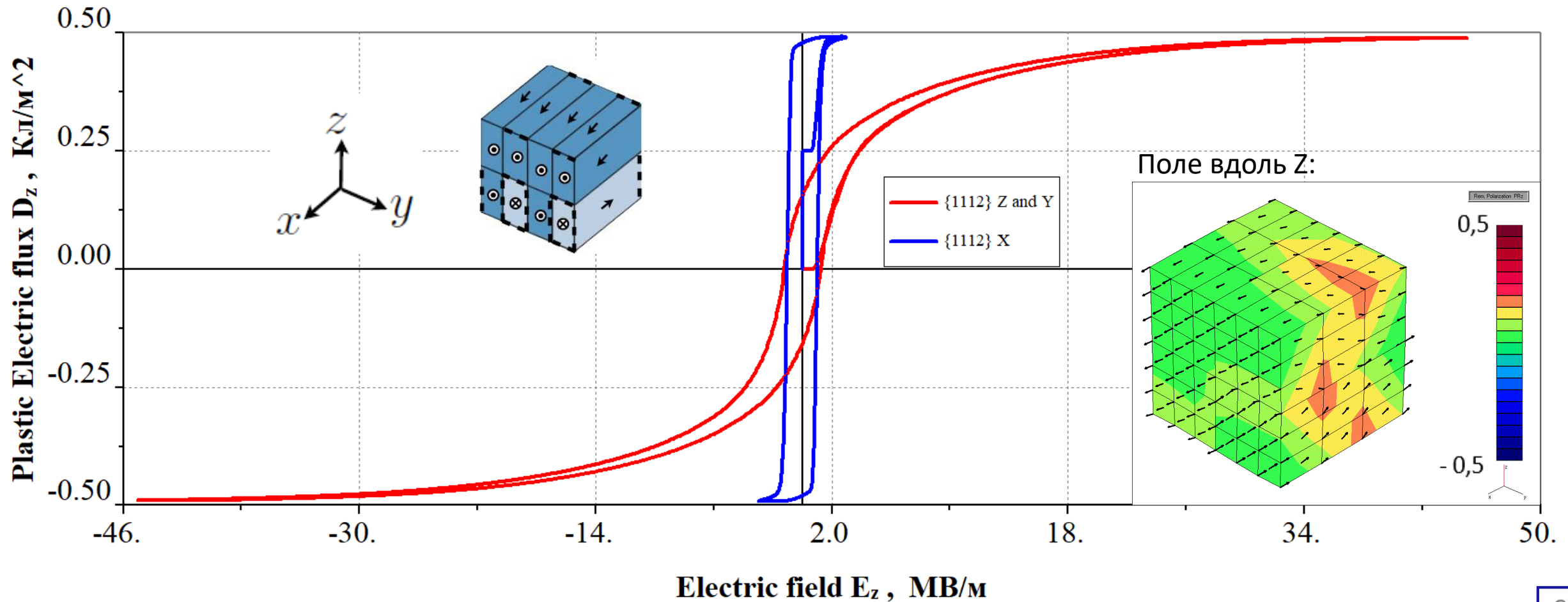
**Результаты:
Эффективные модули**

$$\begin{cases} \varepsilon - \varepsilon^r = {}^4 S^E \cdot \sigma + E \cdot {}^3 d \\ D - P^r = {}^3 d \cdot \sigma + k^\sigma \cdot E \end{cases}$$

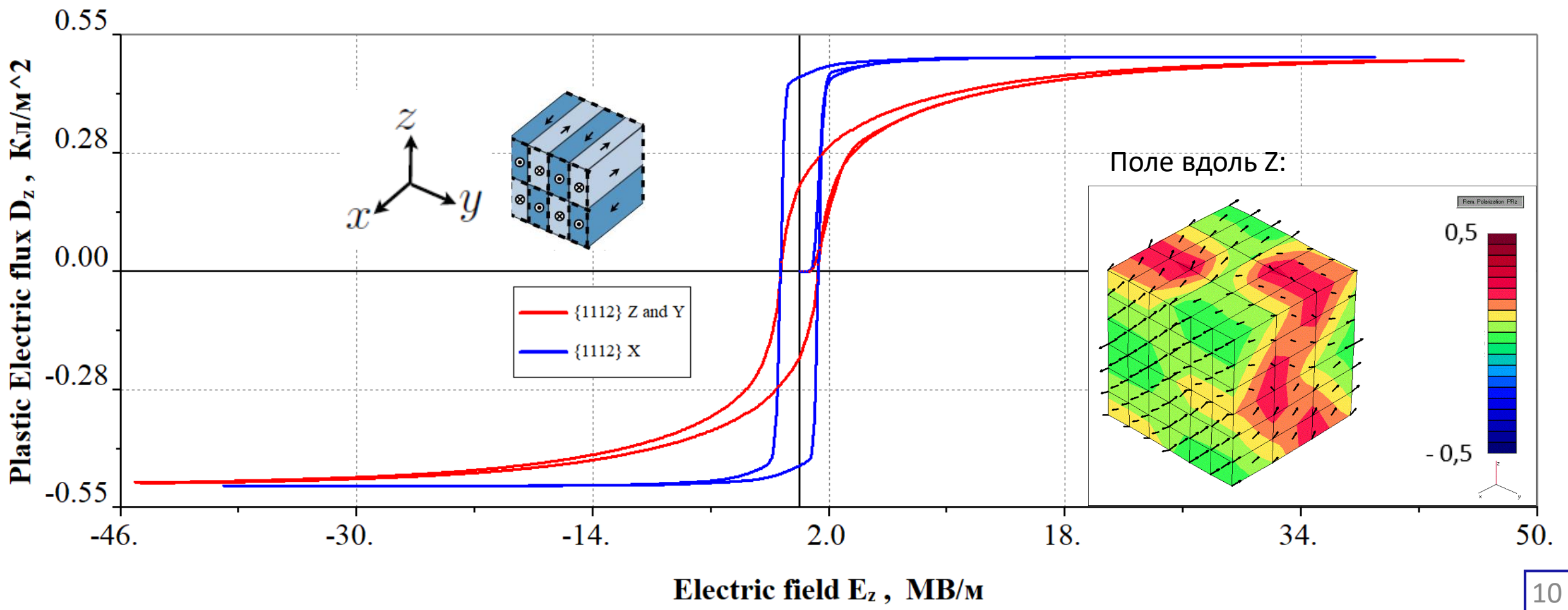
$$\begin{cases} d_{iii} = \frac{\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{zz}^r}{E_z} & S_{iii} = \frac{\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{zz}^r}{\sigma_{zz}} \\ k_{ii} = \frac{P_{zz} - P_{zz}^r}{E_z} \end{cases}$$

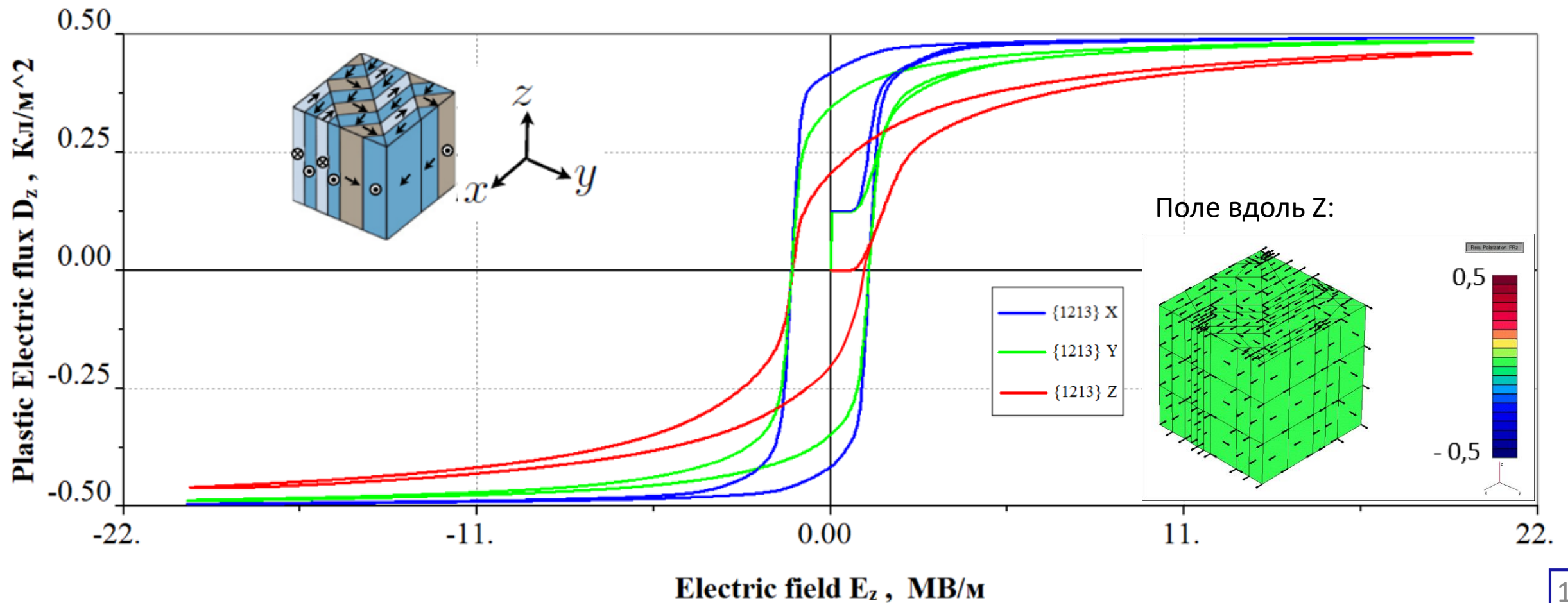


Результаты: Гистерезисы и движение границ. Структура {1112}



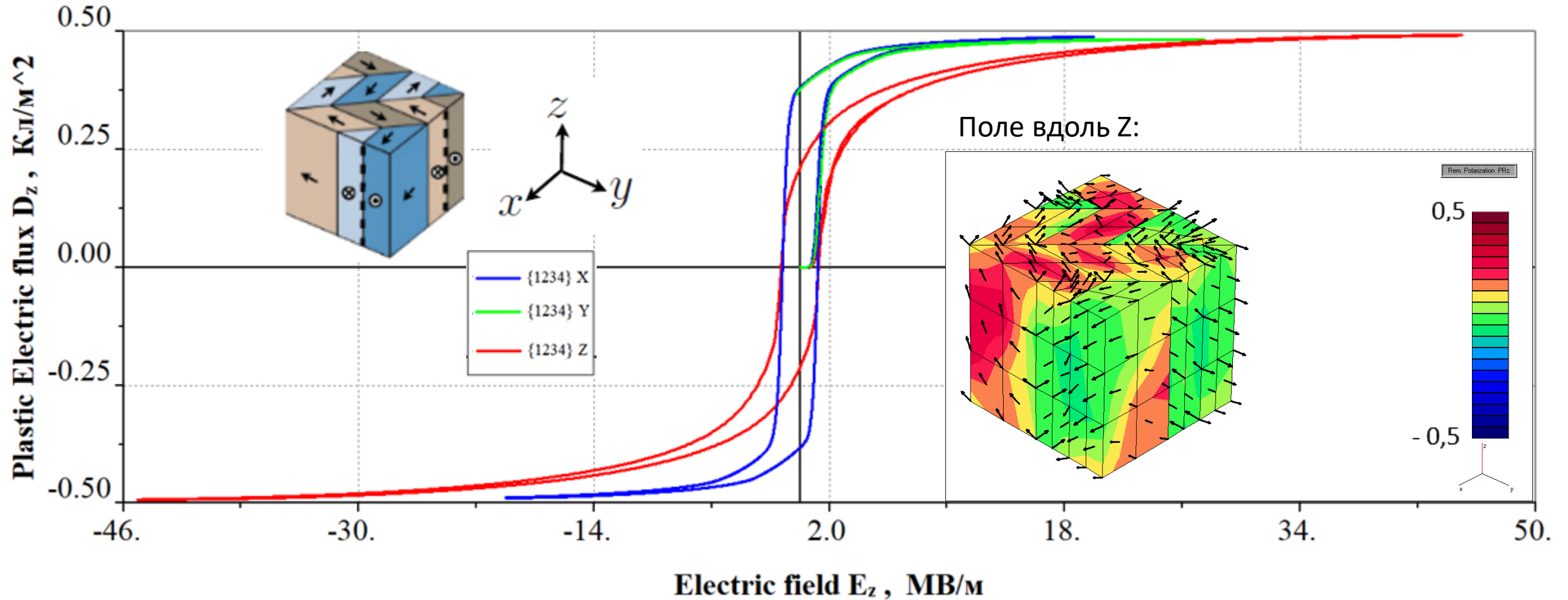
**Результаты:
Гистерезисы и движение границ. Структура {1221}**



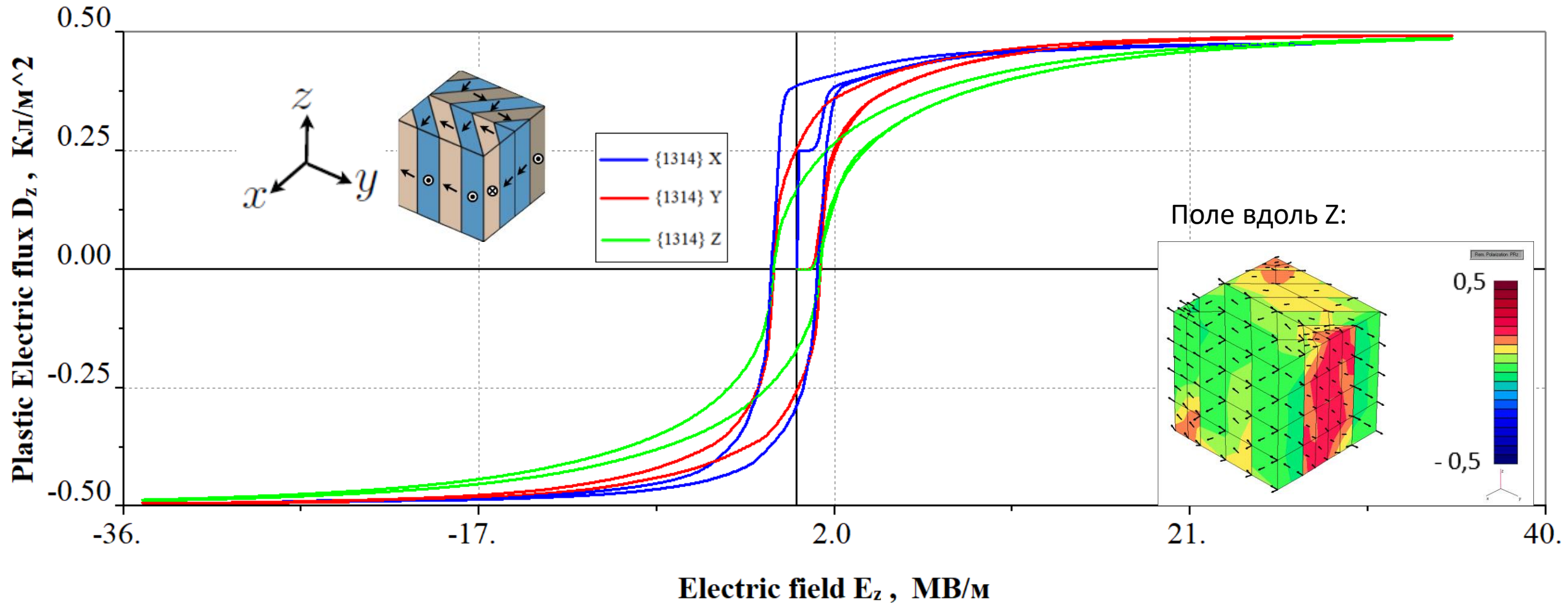
Результаты:**Гистерезисы и движение границ. Структура {1213}**

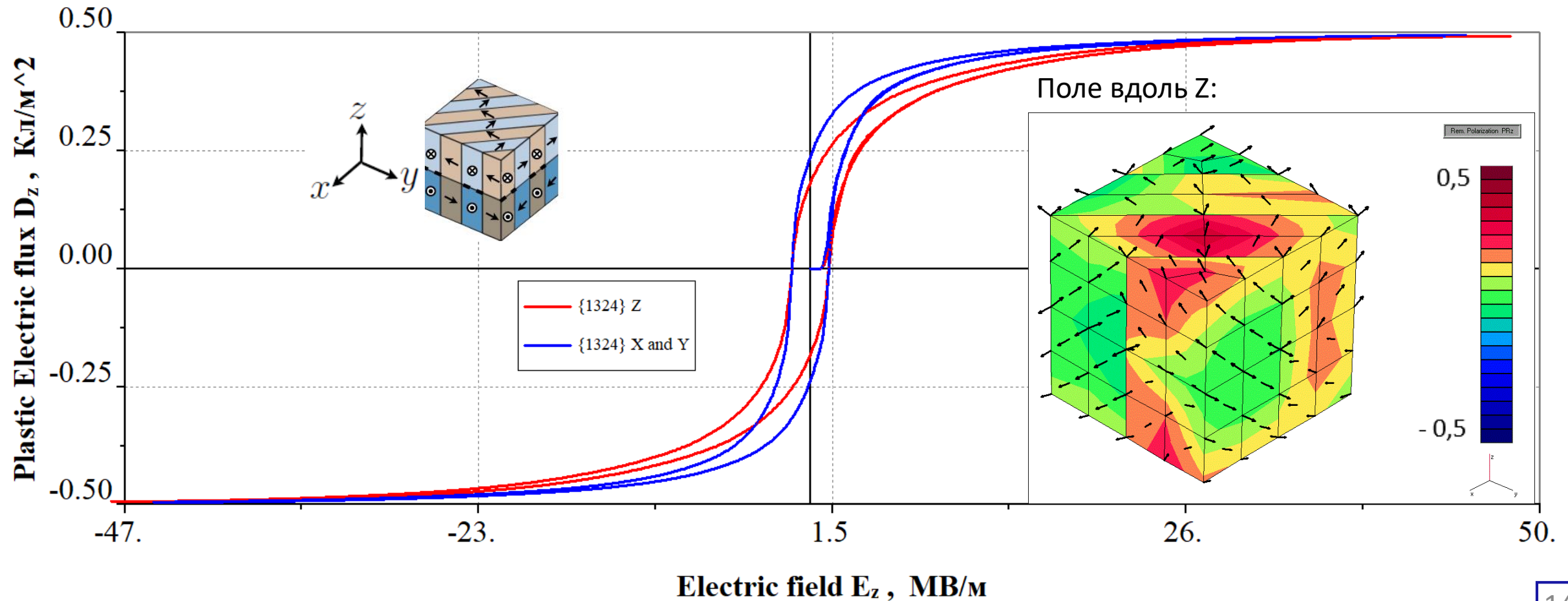
Результаты:

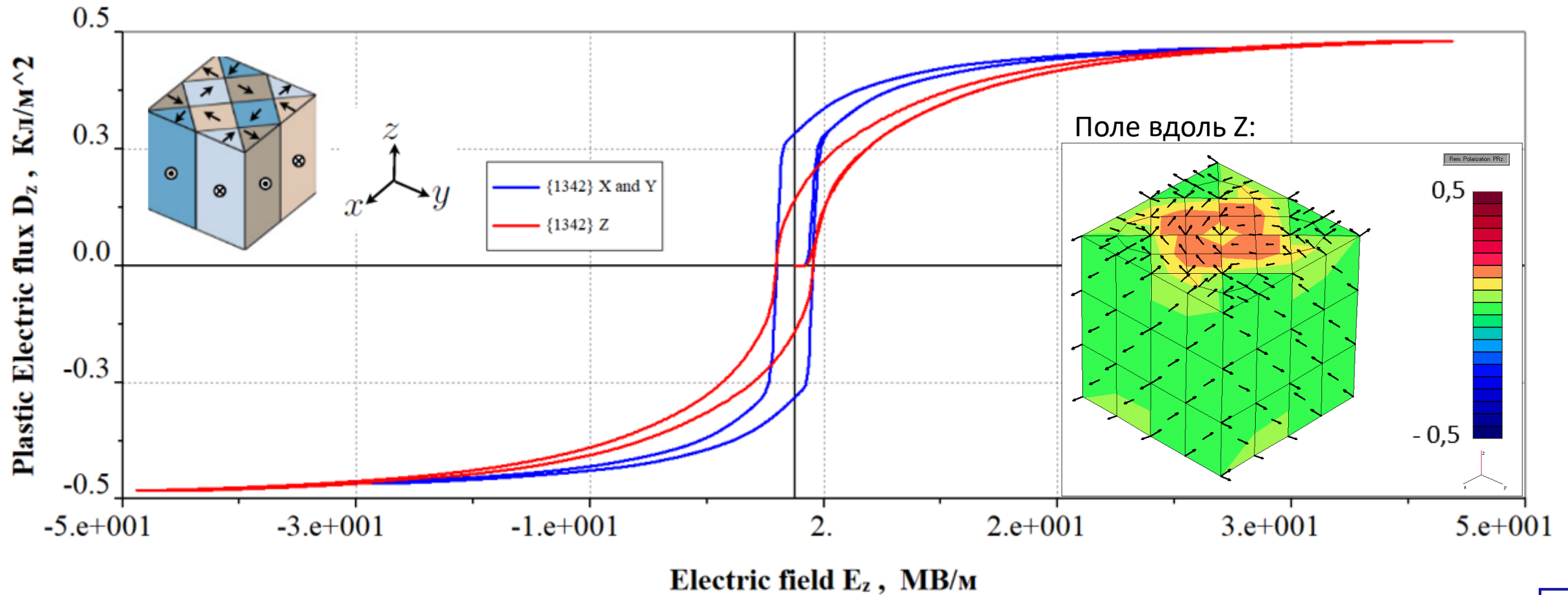
Гистерезисы и движение границ. Структура {1234}



Результаты: Гистерезисы и движение границ. Структура {1314}

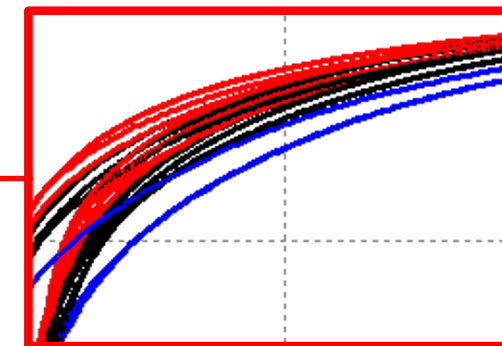
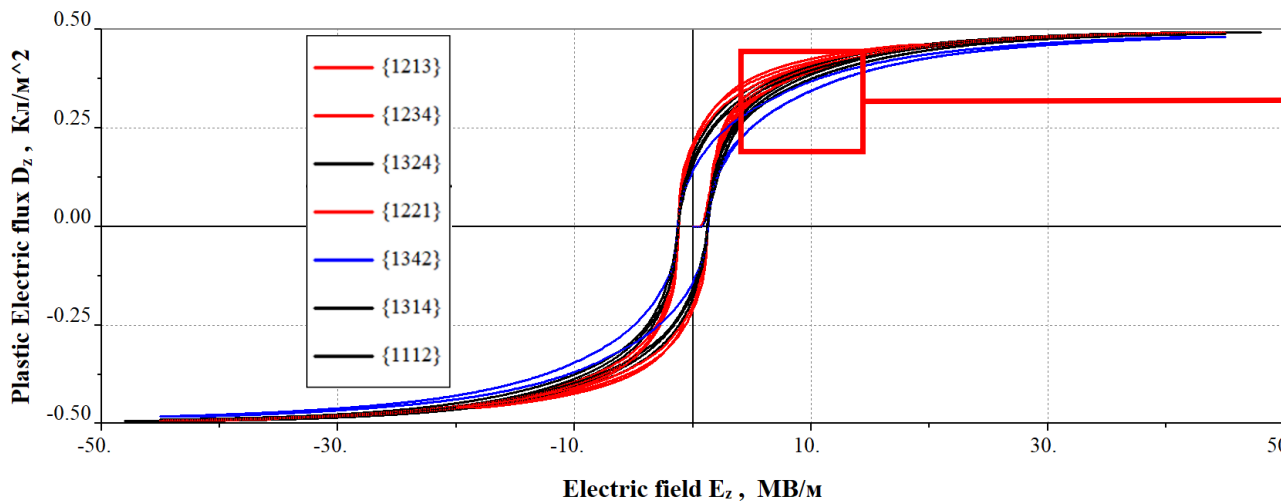
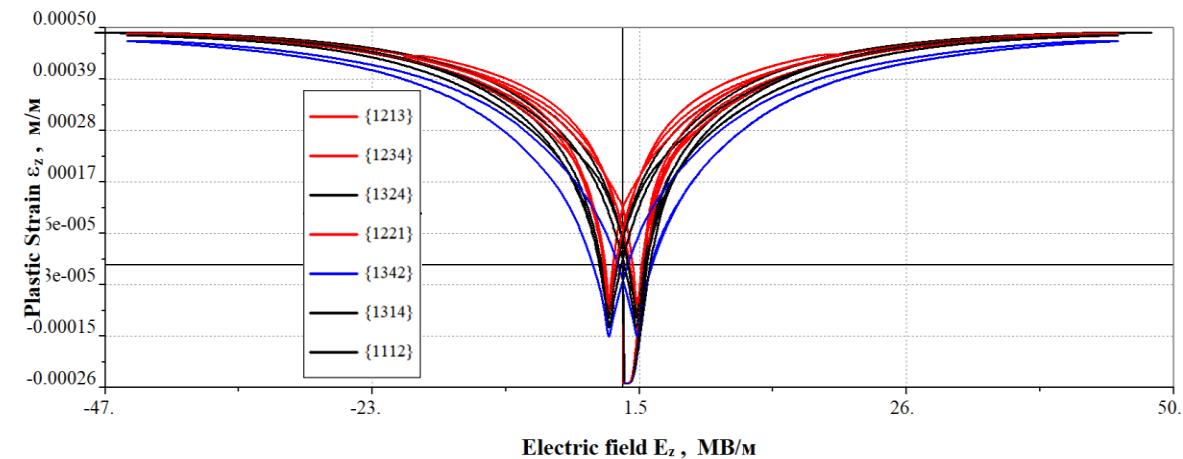
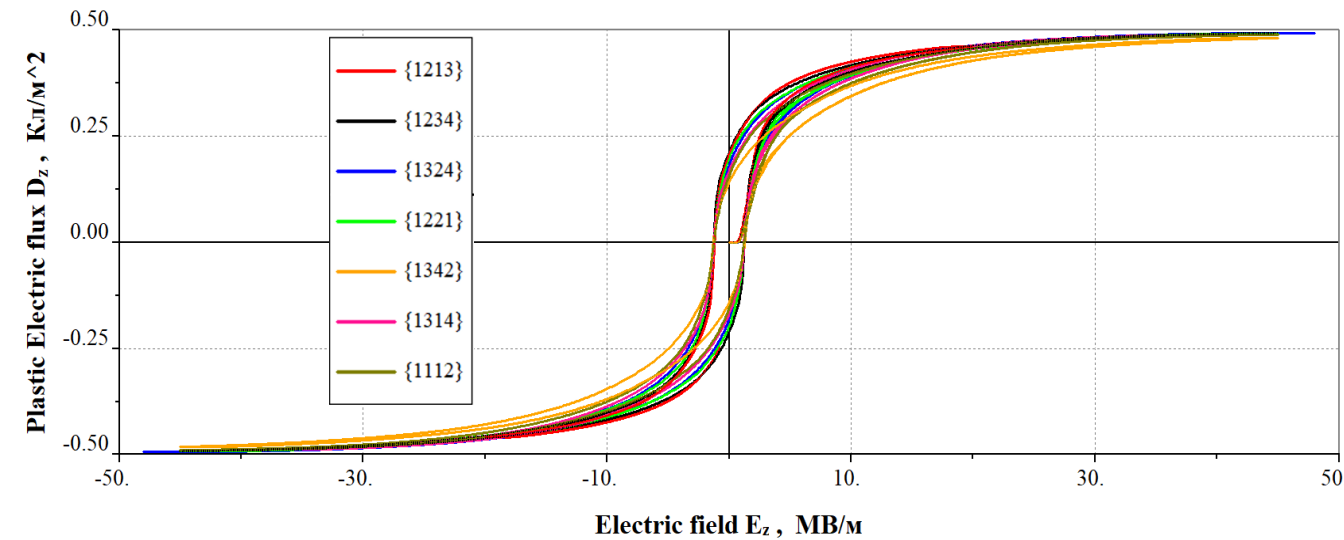


Результаты:**Гистерезисы и движение границ. Структура {1324}**

Результаты:**Гистерезисы и движение границ. Структура {1342}**

Результаты:

Сравнение гистерезисов для структур при направлении поля по оси Z



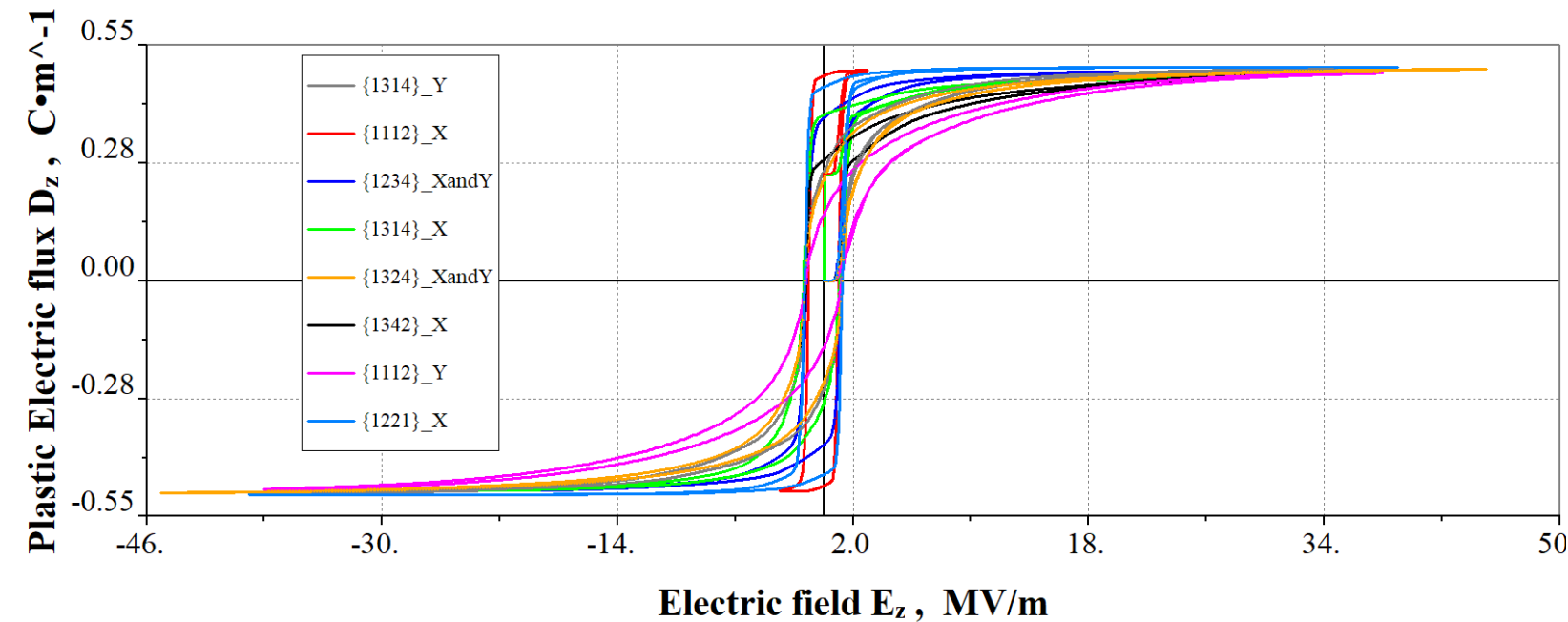
1 группа

2 группа

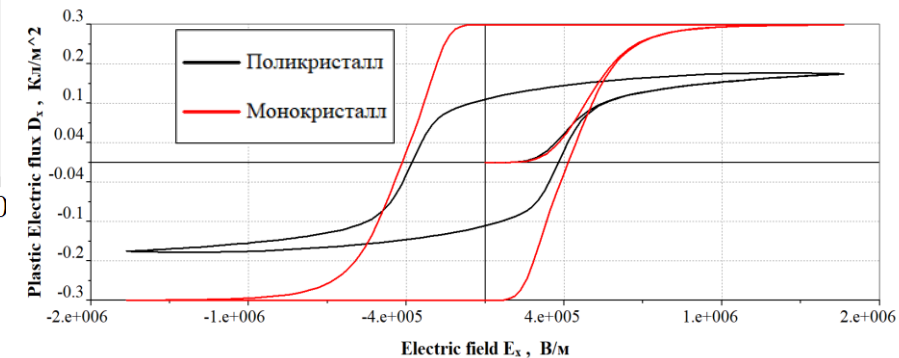
{1213} {1234} {1221} {1324} {1314} {1112} {1342}

Результаты:

Сравнение гистерезисов для структур при нагрузке по оси X и Y



Сравнение с гистерезисами для монокристалла и поликристалла



Структуры, имеющие в своем составе меньшее количество 90-градусных границ, а также с направлением начальной поляризации по оси приложенной нагрузки, соответствуют гистерезисам, схожим с гистерезисом для монокристалла

Оценка предельных границ гистерезисов

${}^4C_\Phi$ - Верхняя граница эффективного тензора модулей жесткости (Фойгт)

$${}^4C \leq {}^4C_\Phi$$

4S_P - Верхняя граница эффективного тензора модулей податливости (Рейсс)

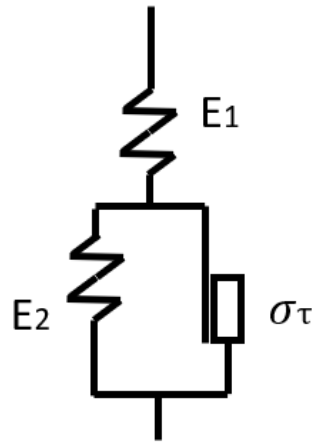
$${}^4S \leq {}^4S_P$$

Упругость (1D):

$$E_P \leq E \leq E_\Phi$$

Упругопластичность (1D):

$$E_{TP} \leq E_T \leq E_{T\Phi}$$



$$\textcircled{3} \quad \sigma = \frac{E_1 E_2}{E_1 + E_2} \varepsilon + \frac{E_1}{E_1 + E_2} \sigma_\tau$$

$$\textcircled{4} \quad \dot{\sigma} = \frac{E_1(E_1 + E_2)\varepsilon - E_1 E_2 \varepsilon - E_1 \sigma_\tau \frac{E_{20}}{E_0}}{(E_1 + E_2)^2} \left(\dot{\varepsilon} - \frac{\dot{\sigma}}{E_1} \right) + E_t \dot{\varepsilon}$$

$$\textcircled{5} \quad \dot{\sigma} = \bar{E}(\varepsilon, \varepsilon^p, \sigma) \left(\dot{\varepsilon} - \frac{\dot{\sigma}}{E_1} \right) + E_T \dot{\varepsilon}$$

$$\textcircled{6} \quad \dot{\sigma} = \frac{\bar{E} + E_T}{1 + \frac{\bar{E}}{E_1}} \dot{\varepsilon}$$

Упругопластичность с насыщением (1D):

$$\bar{\bar{E}}_{TP} \leq \bar{\bar{E}}_T \leq \bar{\bar{E}}_{T\Phi}$$

$$\textcircled{1} \quad E_2 = \frac{E_{20}}{1 - \frac{\varepsilon^p}{\varepsilon_0}}$$

$$\textcircled{2} \quad \dot{E}_2 = \frac{E_{20} t \frac{1}{\varepsilon_0}}{\left(1 - \frac{\varepsilon^p}{\varepsilon_0}\right)} \left(\dot{\varepsilon} - \frac{\dot{\sigma}}{E_1} \right)$$

$$\textcircled{7} \quad \dot{\sigma} = \bar{\bar{\bar{E}}} \dot{\varepsilon}$$

Заключение

Результаты работы:

- Найдены эффективные линейные модули для монокристаллов с учетом наличия пространственно-неоднородных доменных структур
- Исследована возможность моделирования движения доменных стенок на основе мультидоменной микроструктурной модели
- Определены кривые гистерезиса для монокристаллов с учетом наличия пространственно-неоднородных доменных структур

Результаты предложенной работы могут служить основой для моделирования более сложных объектов, таких как поликристаллы, в которых удастся оценить взаимное влияние монокристаллов друг на друга. Кроме того, существует потенциал для развития теории предельных уровней гистерезисов, а также для варьирования электромеханических граничных условий для поиска наиболее оптимальной их комбинации.