



Моделирование поведения поликристаллических сегнетоэлектроупругих материалов на основе микромеханических и самосогласованных моделей

Додонов Павел Анатольевич, группа 6055/11 Научный руководитель к. ф.-м. н., доцент Семёнов Артём Семёнович Рецензент д. ф.-м. н., профессор Иванова Елена Александровна













**Модули памяти** Нелинейный диэлектрик (Murata, Coherent, Fujitsu)

> Системы впрыска Обратный пьезоэффект (Bosch, Zexel, Denso, Delphi, Siemens VDO)





**Микромоторы** Обратный пьезоэффект (Canon, Nokia, Micromo, PCBmotor)

**Датчики давления** Прямой пьезоэффект Dytran, Noliac, Volture

Гаситель колебаний, разработка Обратный пьезоэффект (AUDI)









### Модель тетрагонального монокристалла















$$G^{\alpha} = (\underline{\mu}^{\alpha} \gamma^{\alpha} + \frac{1}{2} \tilde{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{\alpha}) \cdot \cdot \underline{\underline{\sigma}} + (\underline{\underline{s}}^{\alpha} P^{\alpha} + \frac{1}{2} \tilde{\underline{\underline{D}}}^{\alpha}) \cdot \underline{\underline{E}}$$

1. Склерономная модель

$$\dot{f}^{\alpha} = \left\{ \underbrace{\underline{\dot{\sigma}}}_{\underline{\dot{E}}} \right\}^{T} \sum_{\beta=1}^{N} {}^{I}X_{\alpha\beta}^{-1} \left\{ \underbrace{\widehat{\underline{\sigma}}}_{\underline{\hat{E}}}^{\beta} \right\}$$
for equations of the second s

$$\begin{cases} \underline{\widehat{\underline{\sigma}}}^{\alpha} = {}^{4}\underline{\underline{C}}^{D}\cdot\underline{\widehat{\underline{\varepsilon}}}^{\alpha} + \underline{\widehat{D}}^{\alpha}\cdot{}^{3}\underline{\underline{h}} \\ \underline{\widehat{\underline{E}}}^{\alpha} = {}^{3}\underline{\underline{h}}\cdot\underline{\widehat{\underline{\varepsilon}}}^{\alpha} + \underline{\widehat{D}}^{\alpha}\cdot\underline{\underline{\beta}}^{\varepsilon} \end{cases}$$

$lpha_{активна:}^{система}$	lpha система неактивна:
$\begin{cases} G^{\alpha} = G_{c}^{\alpha} \\ \dot{G}^{\alpha} = \dot{G}_{c}^{\alpha} \\ \dot{f}^{\alpha} > 0 \end{cases} \begin{cases} G^{\alpha} = G_{c}^{\alpha} \\ \dot{G}^{\alpha} < \dot{G}_{c}^{\alpha} \\ \dot{f}^{\alpha} = 0 \end{cases}$	$\begin{cases} G^{\alpha} < G_{c}^{\alpha} \\ \dot{f}^{\alpha} = 0 \end{cases}$





$$G^{\alpha} = (\underline{\mu}^{\alpha} \gamma^{\alpha} + \frac{1}{2} \underline{\tilde{\underline{\varepsilon}}}^{\alpha}) \cdot \cdot \underline{\underline{\sigma}} + (\underline{s}^{\alpha} P^{\alpha} + \frac{1}{2} \underline{\widetilde{D}}^{\alpha}) \cdot \underline{E}$$

1. Реономная модель

$$\dot{f}^{\alpha} = B^{\alpha} \left| \frac{G^{\alpha}}{G^{\alpha}_{c}} \right|^{n-1} \left( \frac{G^{\alpha}}{G^{\alpha}_{c}} \right) H^{\alpha}$$

упрочнение:

1. Модель Белова – Креера:

2. Модель Пэтака – МакМикинга:

$$H^{\alpha} = \left(\frac{c_{I}}{c_{0}}\right)^{m}$$
$$H^{\alpha} = \left(1 - e^{-\frac{c_{I}}{c_{0}}}\right)$$





## Построение модели поликристалла





### Отображение всех направлений ориентаций доменов в модели поликристалла Белова - Креера



Различными цветами отображаются группы доменов, принадлежащие отдельным монокристаллам











### Осреднение по поликристаллу

## 1. Осреднение методом Тейлора









Если внешнее воздействие: <u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u><u></u></u>

$$\underline{\underline{\sigma}}^{k} = \underline{\underline{\sigma}}$$
$$\underline{\underline{E}}^{k} = \underline{\underline{E}}$$



Объем монокристалла







**Constitutive Equation Studio** 

Значения параметров модели		
$B^{lpha}$	1	
Ро, Кл/м <sup>2</sup>	0,56	
n	50	
<b>ν</b> , Гц	1	
m	1	
Gc <sup>180</sup> , В*Кл/м <sup>3</sup> *10 <sup>5</sup>	5	
Gc <sup>90</sup> , В*Кл/м <sup>3</sup> *10 <sup>5</sup>	2,5	

упругие, диэлектрические и пьезо- константы материала взяты из экспериментов Zhou D, 2003 с материалом PZT-PICI5I





Christopher S. Lynch. Electro-Mechanical Coupling in 8/65/35 PLZT. Journal of Applied Mechanics 44 (1996) 4137













Material: PZT-5H. From: Huber, J.E., Fleck, N.A. Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment. J. Mech. Phys. Solids 49, 785-811, 2001

![](_page_16_Picture_0.jpeg)

### Определение констант и параметров модели, на основе экспериментальных данных

![](_page_16_Figure_4.jpeg)

![](_page_16_Figure_5.jpeg)

![](_page_16_Figure_6.jpeg)

Эксперименты PLZT PIC-151

Упругие константы, Па <sup>-1</sup>	Диэлектрическая проницаемость, Ф/м	Пьезоэлектрические коэф., м/В
$S_{11} = 1.1 * 10^{-11}$	k <sub>11</sub> =0,45*10 <sup>-9</sup>	$d_{13} = -1.2 * 10^{-9}$
		$d_{33} = 1,5 * 10^{-9}$
		Критическая энергия переключения
Поляризация насыщения, Kl/m^2,	Деформация насыщения	систем скольжения , Дж
$P_0 = 0,41,$	$\varepsilon_0 = 0,0056$	Gc90 = 600000, Gc180 = 850000

![](_page_17_Picture_0.jpeg)

![](_page_17_Picture_2.jpeg)

### Осреднение по поликристаллу

### 2. Самосогласованная схема осреднения

![](_page_18_Picture_0.jpeg)

### 2. Самосогласованная схема осреднения

![](_page_18_Figure_4.jpeg)

![](_page_19_Picture_0.jpeg)

![](_page_19_Picture_2.jpeg)

![](_page_19_Figure_3.jpeg)

$$\left\{ \underline{\underline{\dot{\mathcal{E}}}}_{\underline{\underline{F}}}^{\bullet} \right\} = \begin{bmatrix} 4 \underline{\underline{C}}^{D,t(k)} & -\frac{3}{\underline{\underline{h}}}^{t(k)^{T}} \\ -\frac{3}{\underline{\underline{h}}}^{t(k)} & \underline{\underline{\beta}}^{\varepsilon,t(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^{\varepsilon\varepsilon(k)} & \underline{\underline{A}}^{\varepsilon D(k)} \\ \underline{\underline{\underline{A}}}^{D\varepsilon(k)} & \underline{\underline{\underline{A}}}^{DD(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\underline{\dot{E}}} \\ \underline{\underline{\dot{D}}} \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} \\ \underline{\underline{F}} \end{cases} = \begin{bmatrix} {}^{4}\underline{\underline{C}}^{D,t(k)} & -{}^{3}\underline{\underline{h}}^{t(k)^{T}} \\ {}^{3}\underline{\underline{h}}^{t(k)} & \underline{\underline{\beta}}^{\varepsilon,t(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^{\varepsilon\varepsilon(k)} & \underline{\underline{A}}^{\varepsilon D(k)} \\ \underline{\underline{A}}^{D\varepsilon(k)} & \underline{\underline{A}}^{DD(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\underline{\dot{E}}} \\ \underline{\underline{\dot{D}}} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 \underline{\underline{C}}^{D,0} & -\frac{3}{\underline{\underline{h}}}^{0,T} \\ -\frac{3}{\underline{\underline{h}}}^{0} & \underline{\underline{\beta}}^{\varepsilon,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \underline{\underline{C}}^{D,t} & -\frac{3}{\underline{\underline{h}}}^{t,T} \\ -\frac{3}{\underline{\underline{h}}}^{t} & \underline{\underline{\beta}}^{\varepsilon,t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^{\varepsilon\varepsilon(k)} & \underline{\underline{A}}^{\varepsilon D(k)} \\ \underline{\underline{A}}^{D\varepsilon(k)} & \underline{\underline{A}}^{DD(k)} \end{bmatrix}$$

![](_page_20_Picture_0.jpeg)

![](_page_20_Picture_2.jpeg)

### 2.1. Самосогласованная схема осреднения:

### аппроксимация

![](_page_20_Figure_5.jpeg)

![](_page_21_Picture_0.jpeg)

![](_page_21_Picture_2.jpeg)

### 2.1. Самосогласованная схема осреднения:

аппроксимация

![](_page_21_Figure_5.jpeg)

![](_page_21_Figure_6.jpeg)

![](_page_22_Picture_0.jpeg)

![](_page_22_Picture_2.jpeg)

## Достигнутые результаты

- а) Предложена модель сегнетоэлектроупругого поликристалла, включающая 60 монокристаллов и 360 доменов, с ориентацией осей <001> кристаллитов в направлении 60 вершин многогранникаС60.
- б) Разработаны различные варианты самосогласованных схем осреднения сегнетоэлектроупругого поликристаллического агрегата
- в) Произведен сравнительный анализ склерономных и реономных микромеханических моделей сегнетоэлектроупругого материала
- г) Произведен сравнительный анализ моделей прямого осреднения (без учета взаимного влияния кристаллитов друг на друга) и самосогласованной модели (с учетом взаимного влияния кристаллитов)
- д) Получены основные закономерности эволюции поверхности нагружения на основе вычислительных экспериментов с микромеханическими моделями
- е) Исследовано влияние параметров микромеханических моделей монокристаллов при использовании самосогласованной схемы осреднения поликристалла.
- ж) Выполнена идентификация реономных параметров феноменологической модели сегнетоэлектроупругого материала на основе вычислительных экспериментов с микромеханическими моделями.
- Проведено сравнение прогнозов рассматриваемых моделей с результатами экспериментов для материала PZT PIC-151.

![](_page_23_Picture_0.jpeg)

![](_page_23_Picture_2.jpeg)

# Спасибо за внимание

![](_page_24_Picture_0.jpeg)

![](_page_24_Picture_2.jpeg)

Вспомогательные формулы

$$\begin{cases} \underline{\tilde{\varepsilon}}^{\alpha} = \sum_{I} A^{\alpha I} \begin{bmatrix} {}^{4} \underline{S}^{E,I} \cdots \underline{\sigma} + \underline{E} \cdot {}^{3} \underline{d}^{I} \end{bmatrix} \\ \underline{\tilde{D}}^{\alpha} = \sum_{I} A^{\alpha I} \begin{bmatrix} {}^{3} \underline{d}^{I} \cdots \underline{\sigma} + \underline{k}^{\sigma,I} \cdot \underline{E} \end{bmatrix} \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} \underline{A}^{\varepsilon\varepsilon(k)} & \underline{A}^{\varepsilon D(k)} \\ \underline{A}^{D\varepsilon(k)} & \underline{A}^{DD(k)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \underline{C}^{D,t(k)} & -\frac{3}{\underline{h}}^{t(k)^{T}} \\ -\frac{3}{\underline{h}}^{t(k)} & \underline{\beta}^{\varepsilon,t(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 \underline{C}^{D,*} & -\frac{3}{\underline{h}}^{*,T} \\ -\frac{3}{\underline{h}}^{*} & \underline{\beta}^{\varepsilon,*} \end{bmatrix} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \underline{C}^{D,0} & -\frac{3}{\underline{h}}^{0,T} \\ -\frac{3}{\underline{h}}^{0} & \underline{\beta}^{\varepsilon,0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 \underline{C}^{D,*} & -\frac{3}{\underline{h}}^{*,T} \\ -\frac{3}{\underline{h}}^{*} & \underline{\beta}^{\varepsilon,*} \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \underline{\underline{P}}_{i} = (1 - \underline{a}_{i} \cdot \underline{n})\underline{\underline{c}}_{i}\underline{\underline{c}}_{i} + (\underline{a}_{i} \cdot \underline{n})\underline{\underline{\underline{E}}} + \sin(\widehat{\underline{a}}_{i}, \underline{\underline{n}})\underline{\underline{c}}_{i} \times \underline{\underline{\underline{E}}}, \\ \underline{\underline{c}}_{i} = \frac{\underline{a}_{i} \times \underline{n}}{|\underline{a}_{i} \times \underline{n}|} \end{cases}$$

![](_page_25_Picture_0.jpeg)

![](_page_25_Picture_2.jpeg)

![](_page_25_Figure_3.jpeg)

![](_page_26_Picture_0.jpeg)

![](_page_26_Figure_2.jpeg)

![](_page_26_Figure_3.jpeg)

![](_page_27_Picture_0.jpeg)

![](_page_27_Picture_2.jpeg)

Система упрочнения для склерономной модели

$$\dot{G}^{\alpha}_{c} = \sum_{\beta} H^{\alpha\beta} \dot{f}^{\beta}$$

$$\begin{cases} H^{\alpha\beta} = H \cdot diag\{1, 1, 1, ..., 1\} \\ \dot{G}^{\alpha}_{c} = H \dot{f}^{\alpha} \\ \\ \beta : I \rightarrow J \\ \beta : I \leftarrow J \end{cases}$$

если lpha активна, то

$$G_c^\beta = G_c^0$$