



***Моделирование нелинейного поведения
поликристаллической пьезокерамики методом
конечно-элементной гомогенизации с учетом
тетрагональной и ромбоэдрической фаз***

Выполнил: студент гр. 63602\1 Пуделева О.А.

Руководитель: к.ф.-м.н., доц. Семёнов А.С.



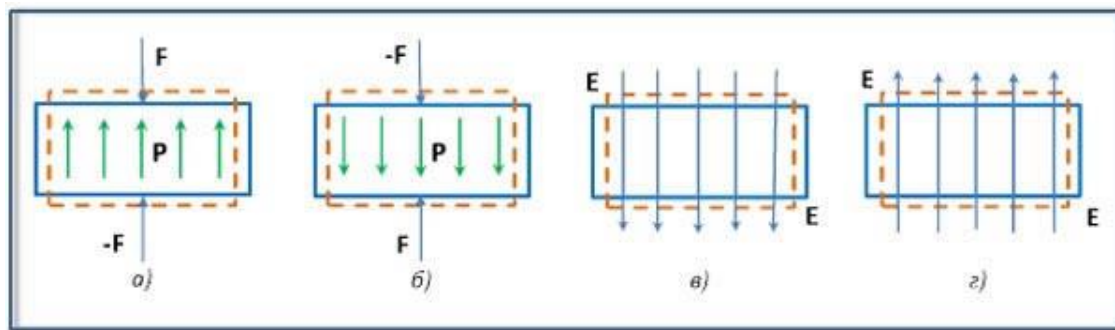
План

- Общие сведения о сегнетоэлектриках и их применение
- Определяющие уравнения сегнетоэлектричества
- Феноменологическая модель сегнетоэлектрика
- Постановка задачи КЭ моделирования
- Результаты КЭ моделирования для ромбоэдрической и смешанной (тетрагональной/ромбоэдрической) кристаллической решетки
- Построение зависимости деформации насыщения от вида напряженного состояния на основе экспериментальных данных
- Выводы

Пьезокера́мика — искусственный материал, обладающий пьезоэлектрическими и сегнетоэлектрическими свойствами, имеющий поликристаллическую структуру.

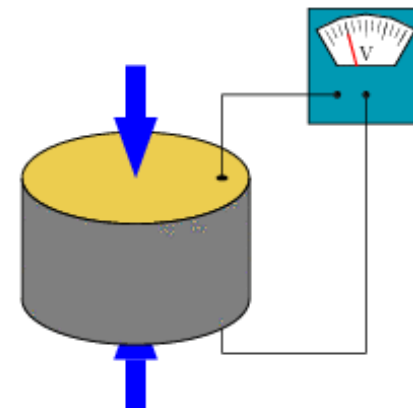
Сегнетоэлектричество — явление возникновения в определенном интервале температур спонтанной поляризации в кристалле, даже в отсутствии внешнего электрического поля, которая может быть переориентирована его приложением.

Пьезоэффект



Прямой

Обратный



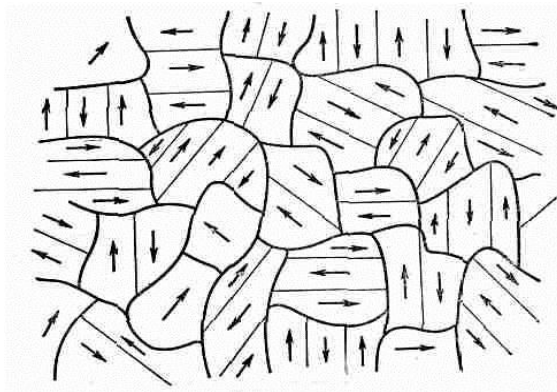
Применение пьезокерамики

- Микромоторы
- Гасители вибраций
- Клапаны впрыска топлива
- Датчики давления
- Актюаторы системы антиблокировки тормозов
- Нанопозиционеры
- Датчики уровня заправочных жидкостей



Основные уравнения сегнетоэлектричества

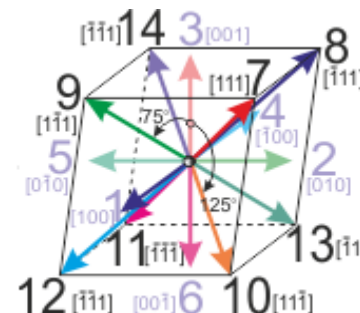
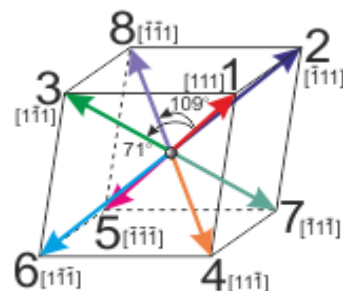
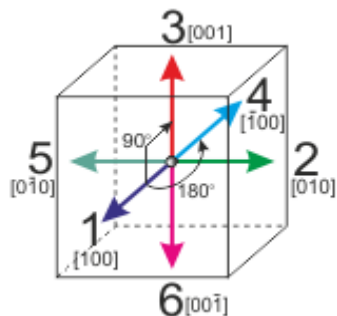
$$\begin{bmatrix} \varepsilon \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S & d^T \\ d & k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ E \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_r \\ P_r \end{bmatrix}$$



$$\begin{bmatrix} \varepsilon \\ D \end{bmatrix} = \sum_{I=1}^M \begin{bmatrix} S_I & d_I^T \\ d_I & k_I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ E \end{bmatrix} C_I + \sum_{I=1}^M C_I \begin{bmatrix} \varepsilon_I \\ P_I \end{bmatrix}$$

M – количество систем скольжения

N – количество ориентаций спонтанной поляризации





Движущая сила и скорость движения доменных стенок

$$\dot{c}_I = \sum_{\alpha=1}^N A^{I\alpha} \dot{f}_{\alpha}$$

$$A^{I\alpha}=1 \quad \rightarrow c_I \text{ возрастает}$$

$$A^{I\alpha}=-1 \quad \rightarrow c_I \text{ убывает}$$

$$A^{I\alpha}=0 \quad \rightarrow c_I - \text{const}$$

$$\begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_r \\ \dot{P}_r \end{bmatrix} = \sum_{l=1}^M \dot{c}_l \begin{bmatrix} \varepsilon_l \\ P_l \end{bmatrix} = \sum_{\alpha=1}^N \dot{f}_{\alpha} \begin{bmatrix} \mu_{\alpha} \gamma_{\alpha} \\ s_{\alpha} P_{\alpha} \end{bmatrix}$$

$$\dot{w}^D = \dot{w} - \dot{w}^S = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} + E \cdot \dot{D} - \dot{w}^S$$

$$w^S = \frac{1}{2} \sigma \cdot (\varepsilon - \varepsilon_r) + \frac{1}{2} E \cdot (D - P_r)$$

$$\dot{w}^D = \sum_{\alpha} [G_{\alpha} \dot{f}_{\alpha}]$$

$$\dot{f}_{\alpha} = \dot{f}_0 \left| \frac{G_{\alpha}}{G_c} \right|^{m-1} \frac{G_{\alpha}}{G_c} \left(\frac{c_I}{c_0} \right)^{1/k}$$



Феноменологическая модель сегнетоэлектрика

$$\Psi = \Psi^s(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{ij}^r) + \Psi^r(\varepsilon_{ij}^r)$$

$$\Psi^s(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{ij}^r) = \frac{1}{2} c_{iljk} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^r) (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^r)$$

$$\hat{\sigma}_{ij} = \frac{\partial \Psi^s}{\partial \varepsilon_{ij}} - \frac{\partial \Psi^r}{\partial \varepsilon_{ij}^r}$$

$$\hat{s}_{ij} = \hat{\sigma}_{ij} - \frac{\hat{\sigma}_{kk}}{3} \delta_{ij}$$

$$\Phi(\hat{\sigma}_{ij}, \varepsilon_{ij}^r) = 0$$

$$\Phi(\hat{s}_{ij}, \varepsilon_{ij}^r) = \frac{3\hat{s}_{ij}\hat{s}_{ij}}{2\sigma_0^2} - 1 = 0$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^r = \lambda \frac{\partial \Phi}{\partial \hat{\sigma}_{ij}} \quad \lambda > 0$$

$$\Psi^r = \frac{1}{2} H_0 \varepsilon_c \left[\frac{J_2^e}{\varepsilon_c} \exp \left(\frac{p}{1 - \frac{\bar{\varepsilon}}{\varepsilon_c}} \right) \right]^2$$

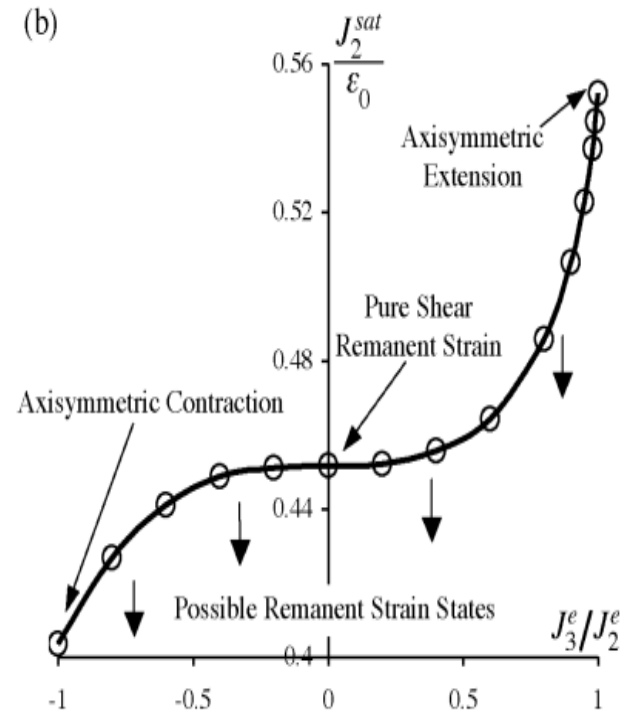
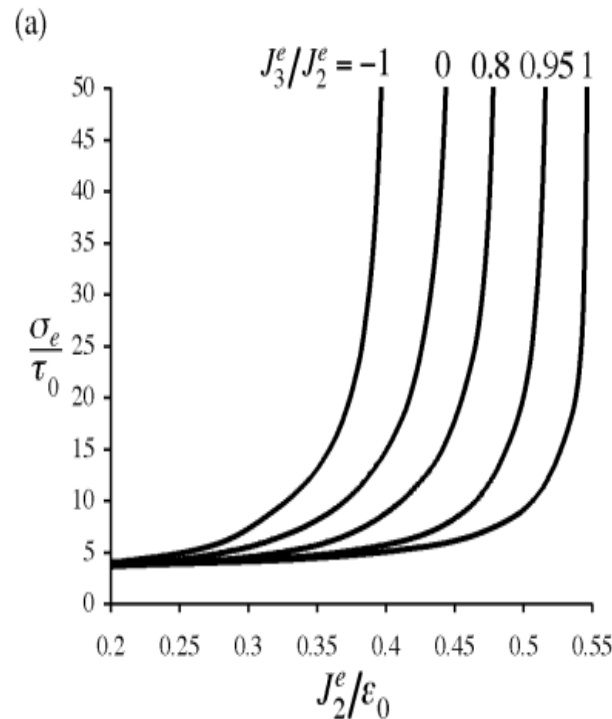
$$\bar{\varepsilon} = J_2^e f \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)$$

$$J_2^e = \left(\frac{2}{3} e_{ij}^r e_{ij}^r \right)^{1/2}$$

$$J_3^e = \left(\frac{4}{3} e_{ij}^r e_{jk}^r e_{ki}^r \right)^{1/3}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = \begin{bmatrix} \varepsilon^r & 0 & 0 \\ 0 & b\varepsilon^r & 0 \\ 0 & 0 & -(1+b)\varepsilon^r \end{bmatrix}$$

$$\frac{J_3^e}{J_2^e} = \frac{-\sqrt{3}(b+b^2)^{1/3}}{4\sqrt[6]{1+b+b^2}} \operatorname{sgn}(\varepsilon^r)$$

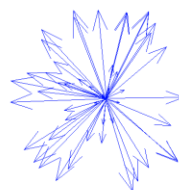
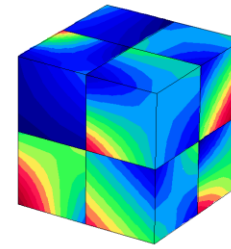
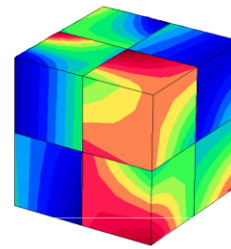
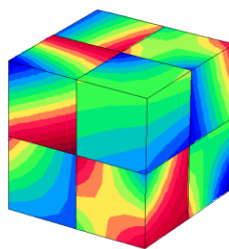


$$f \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.0965 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 + 0.01 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 + 0.8935, \frac{J_3^e}{J_2^e} \leq 0$$

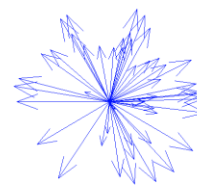
$$f \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.1075 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 - 0.027 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 - 0.028 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^{21} + 8935, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} \geq 0$$

Постановка задачи КЭ моделирования

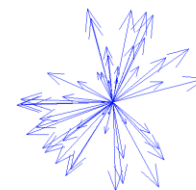
Величина	Символ	Значение	Размерность
Упругие модули	C_{11}^E	74,85	ГПа
	C_{33}^E	74,85	
	C_{12}^E	33,62	
	C_{23}^E	33,62	
	C_{44}^E	20,61	
	C_{55}^E	20,61	
Диэлектрическая проницаемость	k_{11}^σ	$6.51 \cdot 10^{-8}$	Ф/м
	k_{33}^σ	$-2.09 \cdot 10^{-7}$	
Пьезоэлектрические модули	d_{16}	$1.1 \cdot 10^{-9}$	м/В
	d_{31}	$-1.1 \cdot 10^{-9}$	
	d_{33}	$2.2 \cdot 10^{-9}$	
Спонтанная деформация	ε_0	0,3	%
Спонтанная поляризация	P_0	0,41	Кл/м ²



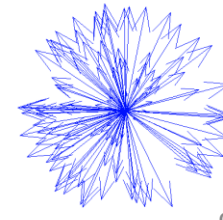
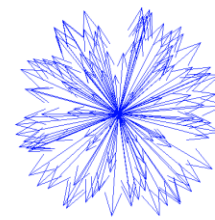
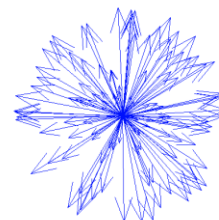
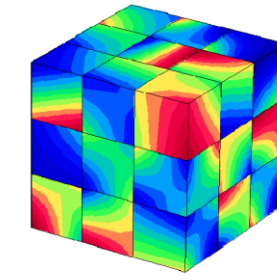
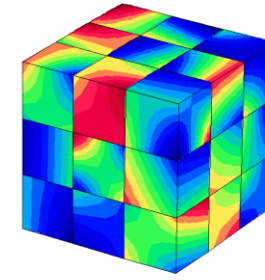
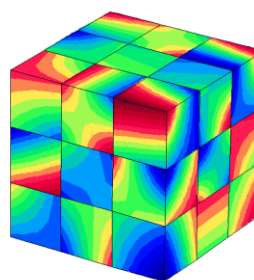
Ориентация 1



Ориентация 2



Ориентация 3



Постановка краевой задачи

$$\nabla \cdot \sigma = 0$$

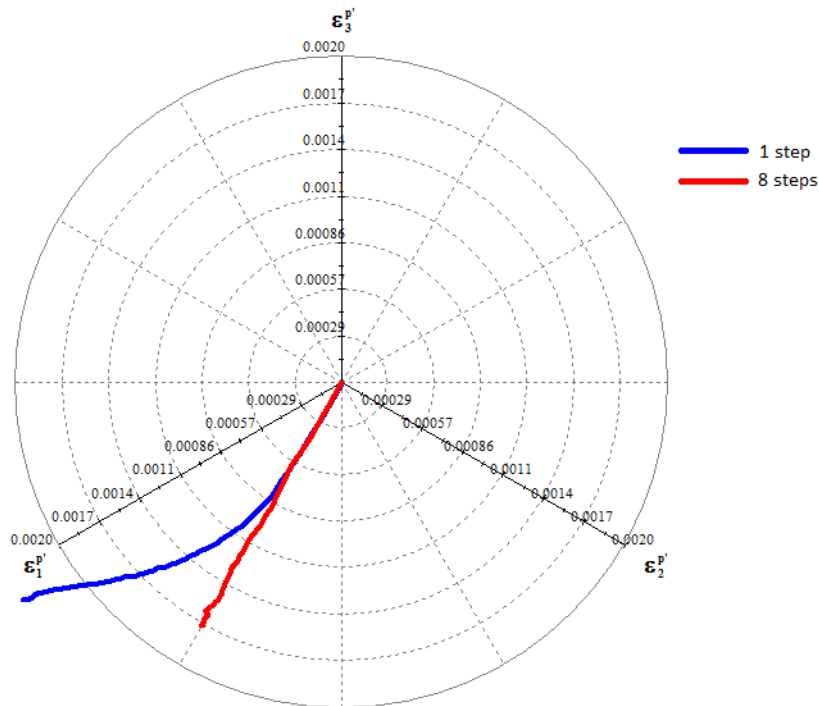
$$\nabla \cdot D = 0$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S & d^T \\ d & k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ E \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_r \\ P_r \end{bmatrix}$$

$$E = -\nabla \varphi$$

$$\varepsilon = \nabla u^s$$

Граничные условия:



$$n \cdot \sigma \Big|_{S_\sigma} = n \cdot \bar{\sigma},$$

$$u \Big|_{S_u} = \bar{\varepsilon} \cdot r,$$

$$n \cdot D \Big|_{S_D} = n \cdot \bar{D},$$

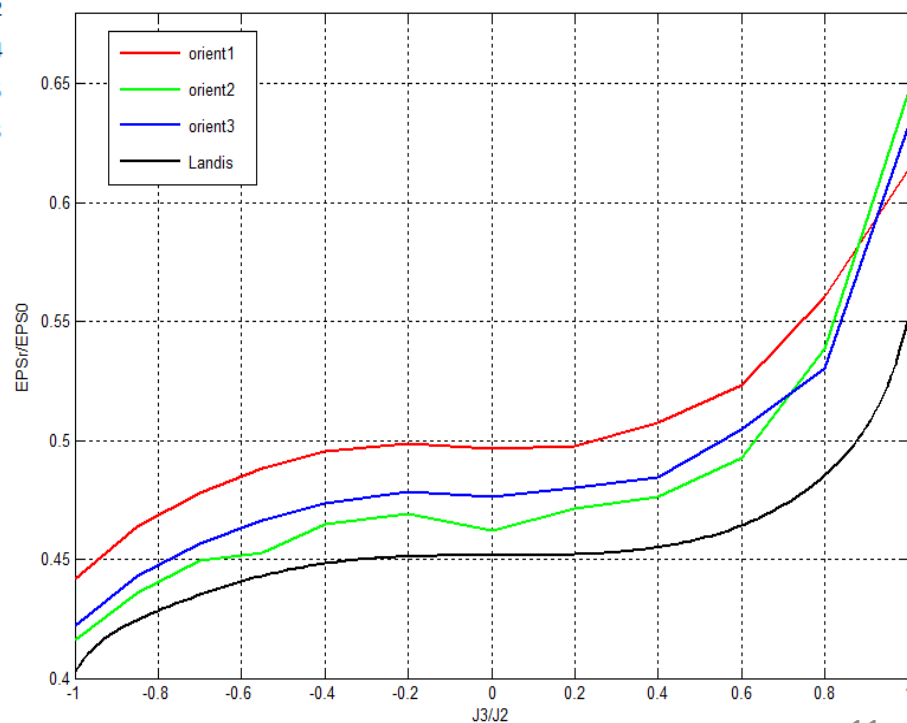
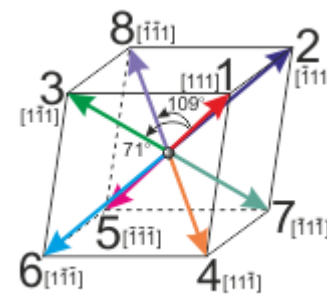
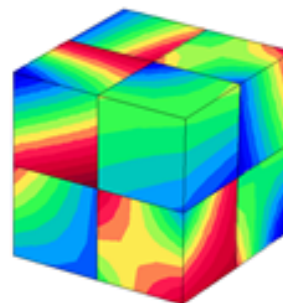
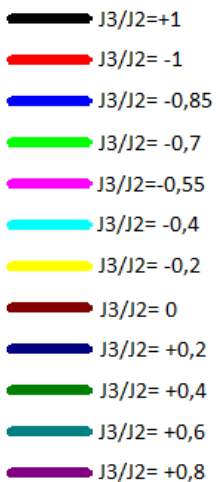
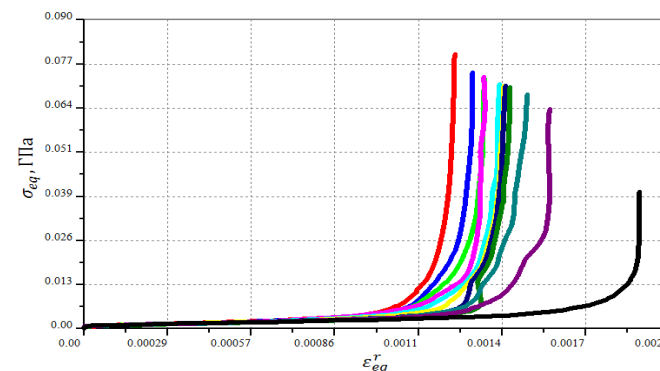
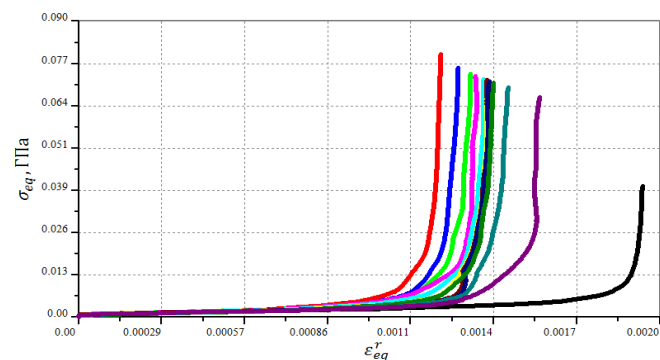
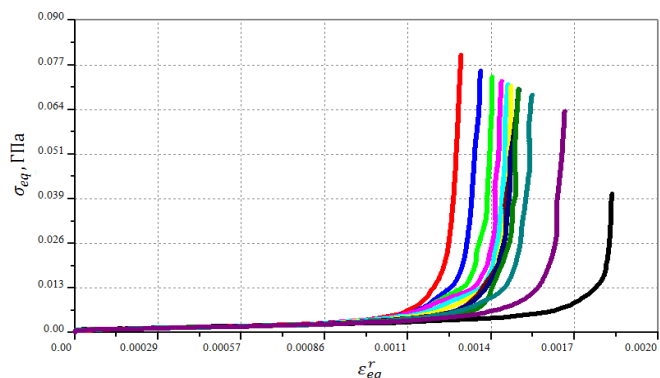
$$\varphi \Big|_{S_\varphi} = \bar{E} \cdot r$$

$$\bar{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & b' \bar{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -(1 + b') \bar{\varepsilon} \end{bmatrix}$$

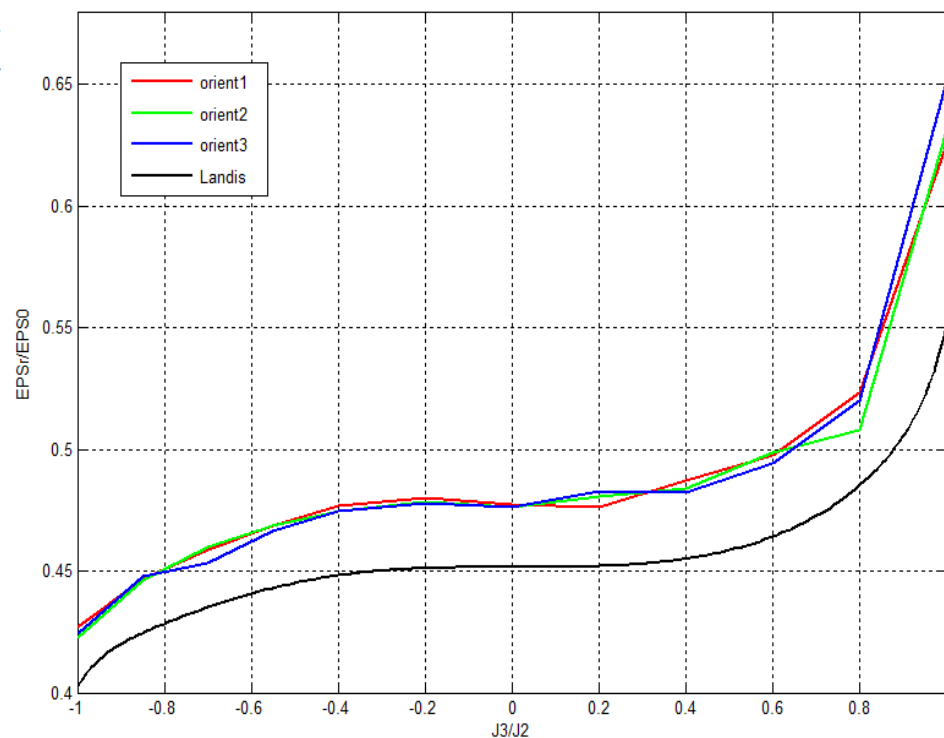
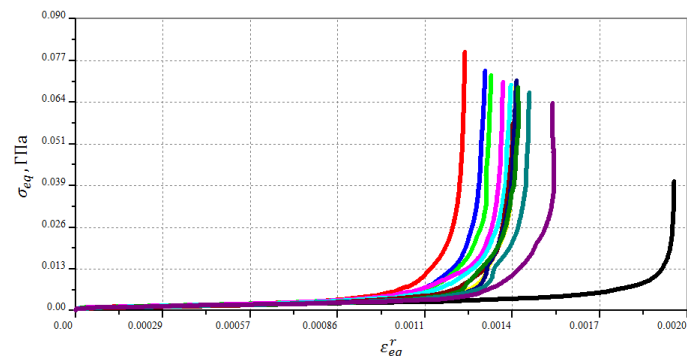
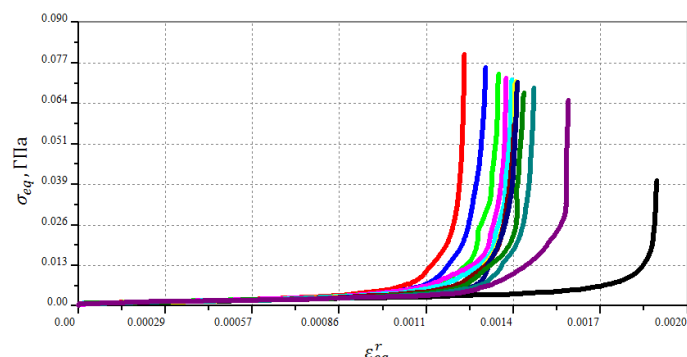
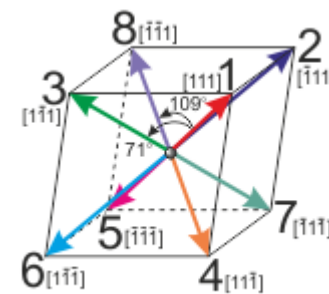
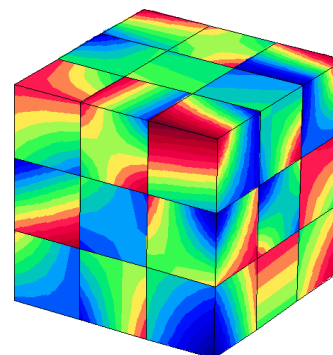
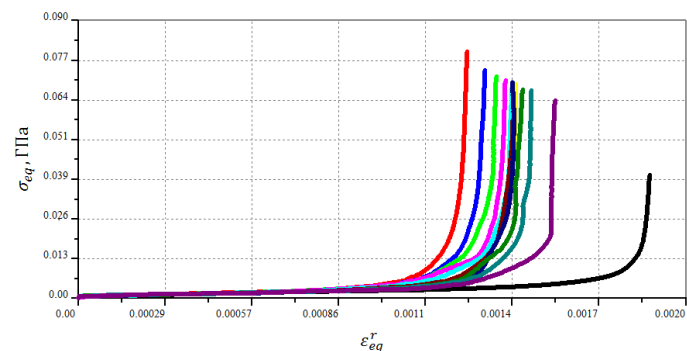
$$b' \neq \text{const}$$

$$b' - \text{var}$$

Результаты

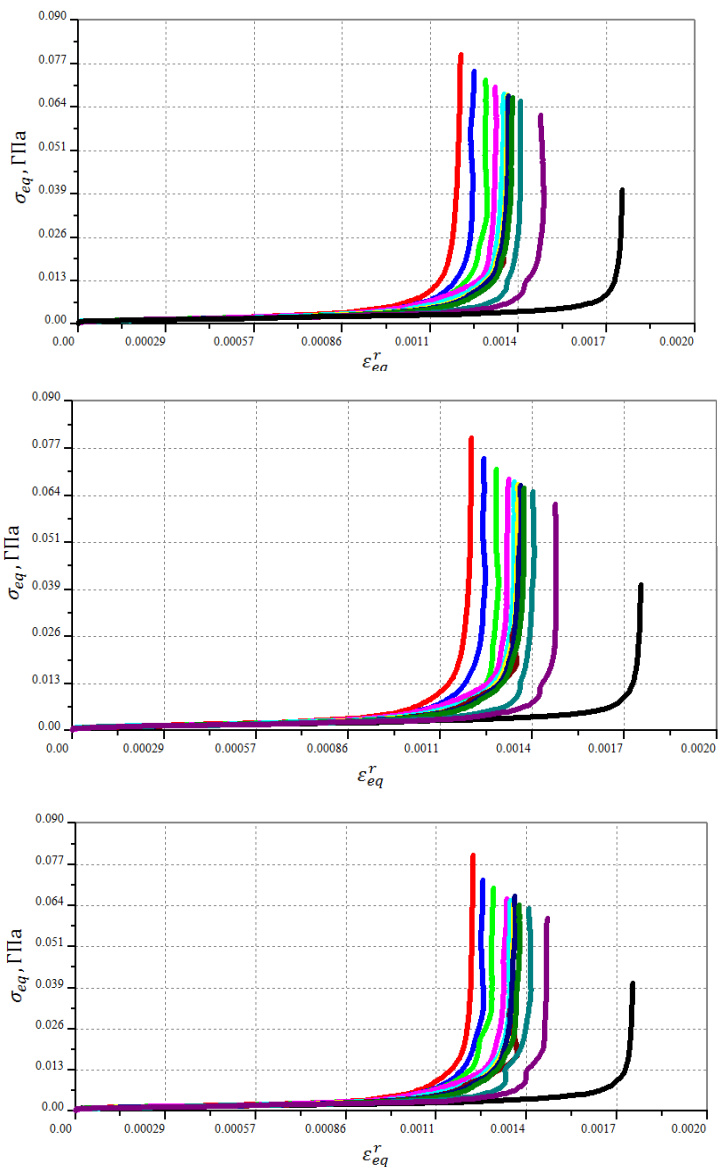


Результаты

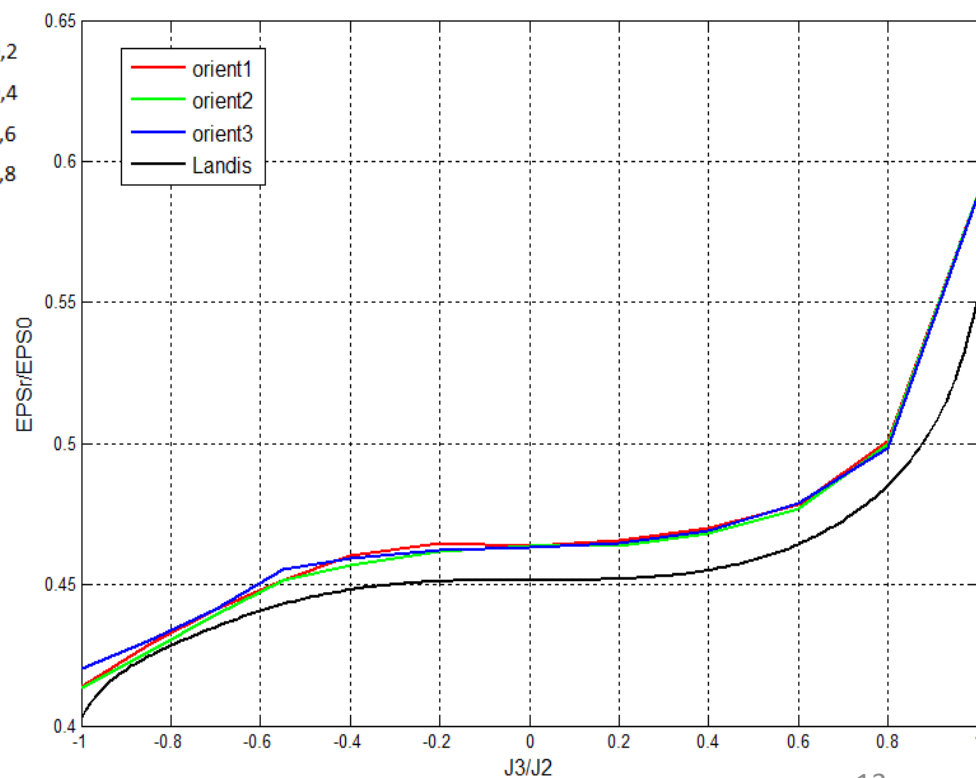
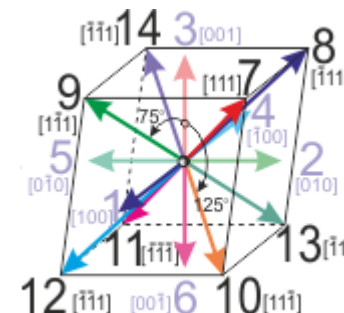
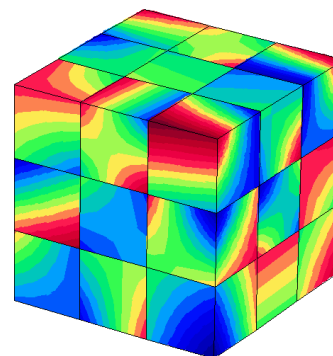




Результаты



- $J3/J2 = +1$
- $J3/J2 = -1$
- $J3/J2 = -0,85$
- $J3/J2 = -0,7$
- $J3/J2 = -0,55$
- $J3/J2 = -0,4$
- $J3/J2 = -0,2$
- $J3/J2 = 0$
- $J3/J2 = +0,2$
- $J3/J2 = +0,4$
- $J3/J2 = +0,6$
- $J3/J2 = +0,8$





Построение зависимости деформации насыщения от вида напряженного состояния

$$g(J_3^e/J_2^e) = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_0} \frac{1}{f(J_3^e/J_2^e)}$$

$$\varepsilon_c = 0.4034492\varepsilon_0$$

$$f_1^I(0) = f_1^{II}(0) = f_1^{IV}(0) = f_1^V(0) = 0$$

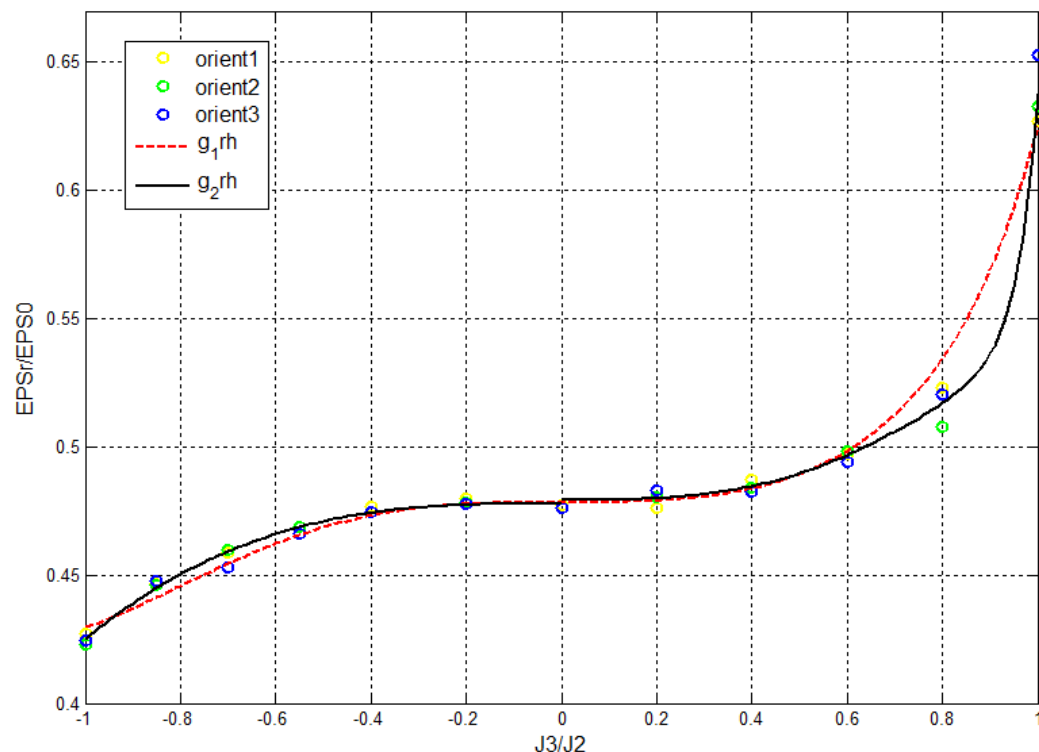
$$f_1\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right) = \alpha_1 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^6 + \alpha_2 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^3 + \alpha_3$$

$$f_2\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right) = \alpha_1 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^3 + \alpha_2 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^6 + \alpha_3, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} \leq 0$$
$$f_2\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right) = \alpha_4 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^3 + \alpha_5 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^6 + \alpha_6 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^{21} + \alpha_7, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} > 0$$

$$g_1^{rh} (J_3^e/J_2^e) = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_0 f_1^{rh} (J_3^e/J_2^e)}$$

$$g_2^{rh} (J_3^e/J_2^e) = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_0 f_2^{rh} (J_3^e/J_2^e)}$$

Функция	Δ
g_1^{rh}	0.0101
g_2^{rh}	0.0021



$$f_1^{rh} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.0512 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 - 0.1468 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 + 0.8434$$

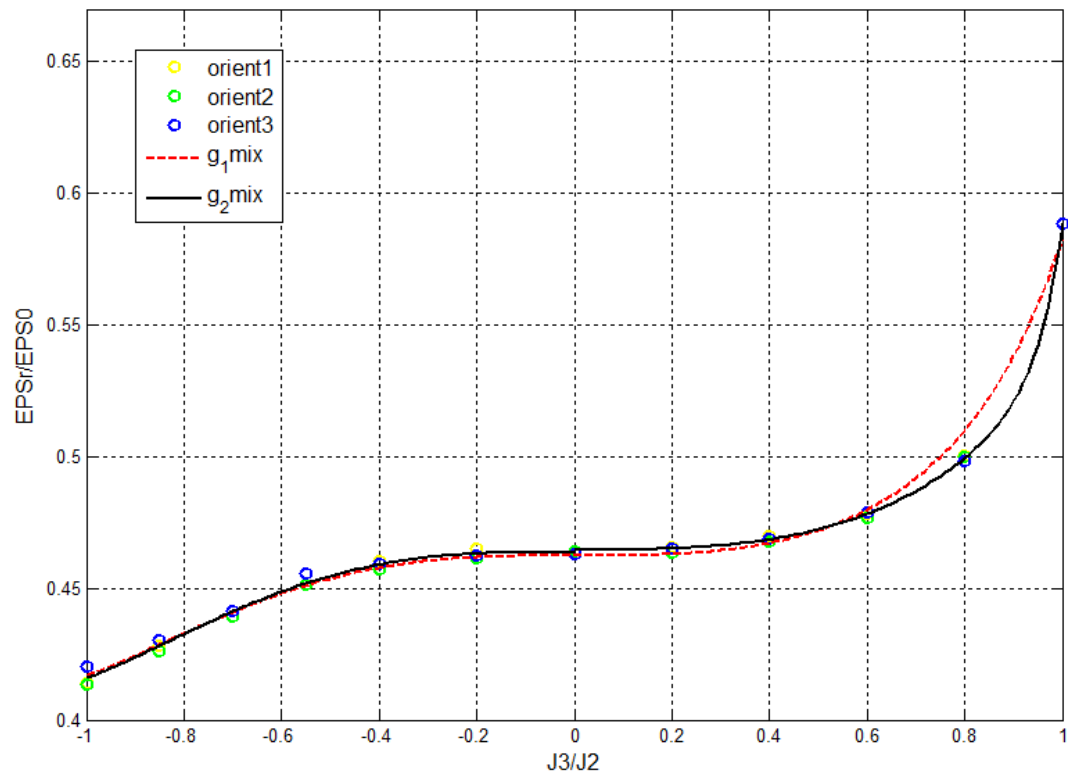
$$f_2^{rh} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.0972 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 - 0.0071 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 + 0.8444, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} \leq 0$$

$$f_2^{rh} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.1518 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 + 0.0650 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 - 0.1222 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^{21} + 0.8419, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} > 0$$

$$g_1^{mix}(J_3^e/J_2^e) = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_0} \frac{1}{f_1^{mix}(J_3^e/J_2^e)}$$

$$g_2^{mix}(J_3^e/J_2^e) = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_0} \frac{1}{f_2^{mix}(J_3^e/J_2^e)}$$

Функция	Δ
g_1^{mix}	0.0101
g_2^{mix}	0.0021

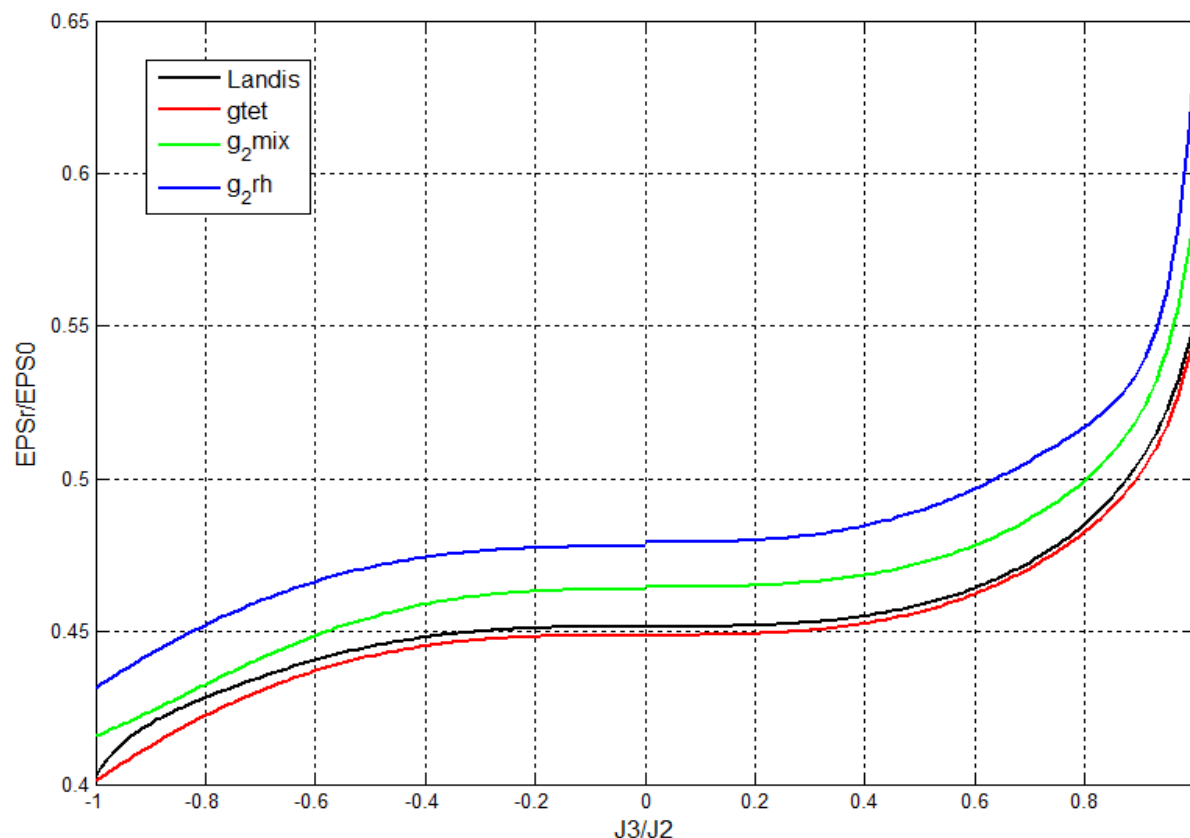


$$f_1^{mix}\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right) = -0.0424\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^6 - 0.1378\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^3 + 0.8726$$

$$f_2^{mix}\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right) = -0.1452\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^3 - 0.0449\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^6 + 0.8699, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} \leq 0$$

$$f_2^{mix}\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right) = -0.1127\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^3 - 0.0098\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^6 - 0.0604\left(\frac{J_3^e}{J_2^e}\right)^{21} + 0.8684, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} > 0$$

Сравнение результатов



$$g^{tet} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_0} \frac{1}{f^{tet} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)}$$

$$f^{tet} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.112 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 - 0.0052 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 + 0.899, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} \leq 0$$

$$f^{tet} \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right) = -0.1206 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^3 - 0.0047 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^6 - 0.0373 \left(\frac{J_3^e}{J_2^e} \right)^{21} + 0.899, \quad \frac{J_3^e}{J_2^e} \geq 0$$



Выводы

- Выполнены многовариантные расчетные исследования для определения параметров свободной энергии феноменологической модели сегнетоупругого материала с использованием микромеханических моделей
- Установлены экспериментальные зависимости деформации насыщения от вида напряженного состояния для различных распределений ориентаций монокристаллов в поликристалле.
- Получены аналитические зависимости деформации насыщения от вида напряженного состояния, проведено их сравнение с экспериментальными данными.
- Установлено, что наличие ромбоэдрической фазы способствует увеличению деформации насыщения

Спасибо за внимание!