

УДК 539.3

Моделирование эффективных модулей для различных типов пористых пьезокерамических материалов¹

А. В. Наседкин

(Донской государственный технический университет),

М. С. Шевцова

(Южный научный центр РАН)

Методами моделирования представительных объёмов, эффективных модулей и конечных элементов определяется полный набор материальных констант пористых пьезокерамических материалов с учётом гипотезы о неоднородной поляризации в окрестности пор. Для численного определения эффективных модулей в конечно-элементном пакете ANSYS решаются наборы статических пьезоэлектрических задач для представительных объёмов с граничными условиями, обеспечивающими постоянные значения полей деформаций, напряжений, электрического поля и электрической индукции однородного тела. Расчёты проводятся с помощью специально разработанных компьютерных программ, написанных на макроязыке APDL ANSYS. Исследуется влияние количества ячеек и различных моделей представительных объёмов на значения важнейших эффективных модулей для ряда типов пористой пьезокерамики. Обсуждается корреляция результатов вычислительных и натурных экспериментов. Показано, что характер зависимостей эффективных модулей от пористости слабо зависит от типа пористых пьезоэлектрических материалов.

Ключевые слова: пьезоэлектричество, электроупругость, пористая пьезокерамика, неоднородная поляризация, эффективные модули, модели представительных объёмов, метод конечных элементов.

Введение. В настоящее время пористая пьезокерамика, являющаяся сравнительно новым классом пьезоэлектрических композиционных материалов, находит широкое применение в ультразвуковых преобразователях, гидрофонах, датчиках давления и других пьезоэлектрических устройствах. Основная выгода при использовании пьезокомпозитивов заключается в возможности существенного улучшения основных рабочих параметров пьезоустройств, особенно при их нагрузке на акустические среды. Так, экспериментальные исследования показывают [1, 2], что пористая пьезокерамика обладает высокой объёмной пьезочувствительностью в широкой полосе частот и более низким импедансом по сравнению с плотной пьезокерамикой. При этом указанные эффекты усиливаются при повышении степени пористости керамики. В то же время важнейшие толщинные характеристики (пьезомодуль d_{33} , коэффициенты электромеханической связи k_t , k_{33}) для ряда пористых пьезокерамик практически не зависят от пористости, а соответствующие продольные величины (d_{31} , k_p , k_{31}) быстро убывают с ростом пористости [1–3]. Между тем, имеющиеся экспериментальные данные по свойствам пористой пьезокерамики достаточно противоречивы, и зависимости пьезомодулей, например в [4–6], отличаются от полученных в [1–3]. Всё это определяет актуальность решения задач по теоретическому определению и предсказанию свойств пьезокомпозиционных материалов, и, в частности, пористых пьезокерамик. Обзоры по разнообразным исследованиям пористых пьезокомпозитивов можно найти в [1, 7] и в многочисленных статьях А. Н. Рыбьянца. В представленной работе рассматривается один из методов механики композитивов — метод эффективных модулей [3, 7–9]. Уточнённое моделирование базируется на использовании специальных моделей представительных объёмов, метода конечных элементов (МКЭ) и учёта неоднородности поляризации пьезокерамики вблизи пор. Результаты вычислительных экс-

¹ Работа выполнена при частичной поддержке АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» Минобрнауки (проект 1.6052.2011) и РФФИ.

периментов, рассчитанных по представленной технологии моделирования, призваны ответить на вопрос о том, существенно ли меняются теоретические зависимости пьезомодулей и других эффективных характеристик от пористости для пьезокерамик различной сегнетожесткости.

Базовый вариант метода эффективных модулей. Пусть Ω — представительный объём неоднородного пьезокерамического материала кристаллографического класса 6mm, $\Gamma = \partial\Omega$ — его граница. Рассмотрим следующую систему дифференциальных уравнений статической теории электроупругости в Ω :

$$\begin{cases} \mathbf{L}^*(\nabla) \cdot \mathbf{T} = 0, & \nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \\ \mathbf{T} = \mathbf{c}^E \cdot \mathbf{S} - \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{E}, & \mathbf{D} = \mathbf{e} \cdot \mathbf{S} + \boldsymbol{\epsilon}^S \cdot \mathbf{E} \\ \mathbf{S} = \mathbf{L}(\nabla) \cdot \mathbf{u}, & \mathbf{E} = -\nabla\varphi \end{cases} \quad (1)$$

$$\mathbf{L}^*(\nabla) = \begin{bmatrix} \partial_1 & 0 & 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ 0 & \partial_2 & 0 & \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla = \begin{Bmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{Bmatrix},$$

с граничными условиями

$$\mathbf{u} = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \varphi = -\mathbf{x} \cdot \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma = \partial\Omega. \quad (2)$$

В (1)—(2) для удобства дальнейшего применения метода конечных элементов использованы векторно-матричные обозначения, стандартные для технических применений теории электроупругости (пьезоэлектричества): $\mathbf{T} = \{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}\}$ — псевдо-вектор напряжений σ_{ij} ; \mathbf{D} — вектор электрической индукции; $\mathbf{S} = \{\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \epsilon_{33}, 2\epsilon_{23}, 2\epsilon_{13}, 2\epsilon_{12}\}$ — псевдо-вектор деформаций ϵ_{ij} ; \mathbf{E} — вектор напряжённости электрического поля; $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ — вектор-функция перемещений; $\varphi = \varphi(\mathbf{x})$ — функция электрического потенциала; $\mathbf{c}^E = \mathbf{c}^E(\mathbf{x})$ — матрица упругих жёсткостей, измеренных при постоянном электрическом поле, размерности 6×6 ; $\mathbf{e} = \mathbf{e}(\mathbf{x})$ — матрица пьезомодулей, размерности 3×6 ; $\boldsymbol{\epsilon}^S = \boldsymbol{\epsilon}^S(\mathbf{x})$ — матрица диэлектрических проницаемостей, измеренных при постоянных деформациях, размерности 3×3 ; \mathbf{x} — вектор пространственных координат; $(\dots)^*$ — операция транспонирования для матриц и векторов.

Особенностью краевой задачи (1)—(2) являются граничные условия (2), в которых предполагается, что $\mathbf{S}_0 = \{\epsilon_{011}, \epsilon_{022}, \epsilon_{033}, 2\epsilon_{023}, 2\epsilon_{013}, 2\epsilon_{012}\}$, $\mathbf{E}_0 = \{E_{01}, E_{02}, E_{03}\}$, где все ϵ_{0ij} , E_{0i} — постоянные (не зависящие от \mathbf{x}) величины. Для такой задачи, как известно [6], $\langle \mathbf{S} \rangle = \mathbf{S}_0$, $\langle \mathbf{E} \rangle = \mathbf{E}_0$, где в угловых скобках обозначаются осреднённые по объёму характеристики: $\langle \dots \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (\dots) d\Omega$. Кроме того, будут выполняться и важные энергетические соотношения: $\langle \mathbf{S}^* \cdot \mathbf{T} \rangle = \langle \mathbf{S}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{T} \rangle = \mathbf{S}_0^* \cdot \langle \mathbf{T} \rangle$, $\langle \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{D} \rangle = \langle \mathbf{E}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{D} \rangle = \mathbf{E}_0^* \cdot \langle \mathbf{D} \rangle$.

Указанные свойства позволяют обосновать метод нахождения эффективных модулей $\mathbf{c}^{E\text{eff}}$, \mathbf{e}^{eff} , $\boldsymbol{\epsilon}^{S\text{eff}}$, известный как метод эффективных модулей в механике композитов [3, 7—9]. Поставим в соответствие неоднородному пьезоэлектрическому композиту в области Ω среду сравнения — макроднородный пьезоэлектрический материал с некоторыми неизвестными пока модулями $\mathbf{c}^{E\text{eff}}$, \mathbf{e}^{eff} , $\boldsymbol{\epsilon}^{S\text{eff}}$. Будем рассматривать для среды сравнения в Ω ту же задачу (1)—(2), но с постоянными модулями $\mathbf{c}^{E\text{eff}}$, \mathbf{e}^{eff} , $\boldsymbol{\epsilon}^{S\text{eff}}$. Легко проверить, что решением такой задачи в области Ω будут являться следующие механические и электрические поля:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \Phi = \Phi_0 = -\mathbf{x} \cdot \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_0, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_0, \quad (3)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 = \mathbf{c}^{E \text{ eff}} \cdot \mathbf{S}_0 - \mathbf{e}^{\text{eff}*} \cdot \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}_0 = \mathbf{e}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}^{S \text{ eff}} \cdot \mathbf{E}_0, \quad (4)$$

причём векторы механических напряжений $\mathbf{T} = \mathbf{T}_0$, деформаций $\mathbf{S} = \mathbf{S}_0$, электрической индукции $\mathbf{D} = \mathbf{D}_0$ и напряжённости электрического поля $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0$ не зависят от пространственных координат \mathbf{x} . Если предположить, что для неоднородного пьезокомпозита и для среды сравнения равны средние напряжения и средняя электрическая индукция:

$$\langle \mathbf{T} \rangle = \langle \mathbf{T}_0 \rangle, \quad \langle \mathbf{D} \rangle = \langle \mathbf{D}_0 \rangle, \quad (5)$$

то это обеспечит и равенства средних деформаций, векторов напряжённости электрического поля и потенциальных электромеханических энергий $\Pi = \langle \mathbf{S}^* \cdot \mathbf{T} + \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{D} \rangle$.

Соотношения (4), (5) позволяют получить расчётные формулы для определения эффективных модулей. Именно, как несложно заметить из (4), (5), для этого достаточно в задаче (1)—(2) для неоднородного композита положить в краевых условиях (2) лишь одну из компонент $S_{0\alpha}$, E_{0i} ($\alpha = 1, \dots, 6$; $i = 1, 2, 3$) отличной от нуля. Тогда, предполагая, что эффективная среда сравнения также является пьезокерамическим материалом класса бтп, можно выделить пять краевых задач (1)—(2), различающихся только ненулевыми компонентами в граничных условиях (2), которые позволяют в совокупности найти полный набор эффективных констант пьезокерамического композита:

I. $S_1 = \varepsilon_0$, $S_\beta = 0$, $\beta \neq 1$, $\mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow$

$$c_{1j}^{E \text{ eff}} = \langle \sigma_{jj} \rangle / \varepsilon_0, \quad j = 1, 2, 3, \quad e_{31}^{\text{eff}} = \langle D_3 \rangle / \varepsilon_0; \quad (6)$$

II. $S_3 = \varepsilon_0$, $S_\beta = 0$, $\beta \neq 3$, $\mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow$

$$c_{33}^{E \text{ eff}} = \langle \sigma_{33} \rangle / \varepsilon_0, \quad e_{33}^{\text{eff}} = \langle D_3 \rangle / \varepsilon_0, \quad c_{13}^{E \text{ eff}} = \langle \sigma_{11} \rangle / \varepsilon_0 = \langle \sigma_{22} \rangle / \varepsilon_0; \quad (7)$$

III. $S_4 = 2\varepsilon_0$, $S_\beta = 0$, $\beta \neq 4$, $\mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow$

$$c_{44}^{E \text{ eff}} = \langle \sigma_{23} \rangle / (2\varepsilon_0), \quad e_{15}^{\text{eff}} = \langle D_2 \rangle / (2\varepsilon_0); \quad (8)$$

IV. $\mathbf{S}_0 = 0$, $\mathbf{E}_0 = E_0 \mathbf{e}_1 \Rightarrow$

$$e_{15}^{\text{eff}} = -\langle \sigma_{13} \rangle / E_0, \quad \varepsilon_{11}^{S \text{ eff}} = \langle D_1 \rangle / E_0; \quad (9)$$

V. $\mathbf{S}_0 = 0$, $\mathbf{E}_0 = E_0 \mathbf{e}_3 \Rightarrow$

$$e_{31}^{\text{eff}} = -\langle \sigma_{11} \rangle / E_0 = -\langle \sigma_{22} \rangle / E_0, \quad e_{33}^{\text{eff}} = -\langle \sigma_{33} \rangle / E_0, \quad \varepsilon_{33}^{S \text{ eff}} = \langle D_3 \rangle / E_0. \quad (10)$$

Итак, чтобы определить десять независимых эффективных констант пористой пьезокерамики ($c_{11}^{E \text{ eff}}$, $c_{12}^{E \text{ eff}}$, $c_{13}^{E \text{ eff}}$, $c_{33}^{E \text{ eff}}$, $c_{44}^{E \text{ eff}}$, e_{31}^{eff} , e_{33}^{eff} , e_{15}^{eff} , $\varepsilon_{11}^{S \text{ eff}}$, $\varepsilon_{33}^{S \text{ eff}}$), достаточно решить пять статических задач электроупругости (1)—(2) с различными \mathbf{S}_0 и \mathbf{E}_0 в краевых условиях (2) и использовать формулы (6)—(10).

Моделирование представительных объёмов. Приведённые формулы расчёта эффективных модулей предполагают решение соответствующих краевых задач электроупругости в областях Ω , которые должны являться представительными объёмами пористых пьезокомпозитов. В качестве представительных объёмов в идеале следует брать области, достаточно большие по сравнению с размерами неоднородностей (т. е. пор), но малые по сравнению с расстояниями, на которых существенно меняются медленные переменные.

Как известно [1], пористый пьезокерамический материал является бинарным композитом, состоящим из пьезоактивной и пассивной (непьезоактивной) фаз. Пьезоактивная фаза образует

трёхмерный пьезокерамический каркас, в котором пассивная фаза существует в виде изолированных или связанных друг с другом воздушных пор. Первый случай по классификации Р. Э. Ньюема отвечает связности 3—0, а второй — связности 3—3 (закрытая и открытая пористость соответственно).

При небольшом проценте пористости достаточно простой, но адекватной наблюдаемой на практике микроструктуре пористого материала, представляется модель пьезокерамической кубической решётки, состоящей из одинаковых ячеек-кубиков, часть из которых случайным образом объявляется порами. Отметим, что подобная модель рассматривалась в [3]. Однако такая модель при большом числе пор может потерять связность каркаса, а также не поддерживает структуру связности композита (3—0 или 3—3).

Для построения связанных структур в кубической решётке можно использовать алгоритмы теории перколяции, позволяющие получать протекающие кластеры. При малой пористости можно строить кластеры из пор, а при большой пористости — кластеры из пьезокерамического материала. Один из таких методов — метод ограниченной диффузией агрегации Виттена — Сандера [10] был программно реализован В. В. Ремизовым и наряду с другими аналогичными методами анализировался в [11] применительно к рассматриваемым задачам.

Конечно-элементное решение задач для представительных объёмов. Для решения задач электроупругости (1)—(2) для неоднородного пьезоэлектрического материала в представительном объёме Ω можно перейти к их слабым постановкам и использовать классическую технику конечно-элементных аппроксимаций. Пусть Ω_h — область, занимаемая соответствующей конечно-элементной сеткой, $\Omega_h \subseteq \Omega$, $\Omega_h = \bigcup_k \Omega^{ek}$, где Ω^{ek} — отдельный конечный элемент с номером k . Для статических задач можно искать приближённое решение $\{\mathbf{u}_h \approx \mathbf{u}, \varphi_h \approx \varphi\}$ на конечно-элементной сетке $\Omega_h = \bigcup_k \Omega^{ek}$ в форме

$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_u^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}, \quad \varphi_h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_\varphi^*(\mathbf{x}) \cdot \Phi, \quad (11)$$

где \mathbf{N}_u^* — матрица базисных функций для перемещений; \mathbf{N}_φ^* — вектор-строка базисных функций для электрического потенциала; \mathbf{U}, Φ — векторы узловых перемещений и электрического потенциала.

В соответствии с обычной конечно-элементной техникой, аппроксимируем континуальную слабую постановку задачи электроупругости в конечномерных пространствах, связанных с базисными функциями $\mathbf{N}_u^*, \mathbf{N}_\varphi^*$. Подставляя (11) и аналогичные представления для проекционных функций в слабую постановку задачи электроупругости для Ω_h , получим следующую конечно-элементную систему:

$$\begin{cases} \mathbf{K}_{uu} \cdot \mathbf{U} + \mathbf{K}_{u\varphi} \cdot \Phi = \mathbf{F}_u \\ -\mathbf{K}_{u\varphi}^* \cdot \mathbf{U} + \mathbf{K}_{\varphi\varphi} \cdot \Phi = \mathbf{F}_\varphi \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $\mathbf{K}_{uu} = \sum^a \mathbf{K}_{uu}^{ek}$, $\mathbf{K}_{u\varphi} = \sum^a \mathbf{K}_{u\varphi}^{ek}$, $\mathbf{K}_{\varphi\varphi} = \sum^a \mathbf{K}_{\varphi\varphi}^{ek}$ — глобальные конечно-элементные матрицы, получаемые из элементных матриц в результате процесса ансамблирования (\sum^a); $\mathbf{F}_u, \mathbf{F}_\varphi$ — векторы, определяемые внешними воздействиями.

Элементные матрицы имеют вид:

$$\mathbf{K}_{uu}^{ek} = \int_{\Omega^{ek}} \mathbf{S}_u^{e*} \cdot \mathbf{c}^E \cdot \mathbf{S}_u^e d\Omega, \quad \mathbf{K}_{u\varphi}^{ek} = \int_{\Omega^{ek}} \mathbf{S}_u^{e*} \cdot \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{S}_\varphi^e d\Omega, \quad (13)$$

$$\mathbf{K}_{\varphi\varphi}^{ek} = \int_{\Omega^{ek}} \mathbf{S}_\varphi^{e*} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^S \cdot \mathbf{S}_\varphi^e d\Omega, \quad \mathbf{S}_u^e = \mathbf{L}(\nabla) \cdot \mathbf{N}_u^{e*}, \quad \mathbf{S}_\varphi^e = \nabla \mathbf{N}_\varphi^{e*}, \quad (14)$$

где \mathbf{N}_v^{e*} , \mathbf{N}_ϕ^{e*} — матрица и вектор-строка аппроксимирующих базисных функций, соответственно определённых на отдельных конечных элементах.

Отметим, что МКЭ является сейчас стандартным методом решения задач пьезоэлектрического приборостроения и с успехом используется как в практике расчётов реальных пьезоэлектрических устройств, так и на микро- и наноуровнях исследований в электроупругости [12].

Моделирование неоднородной поляризации. При рассмотрении неоднородного пористого пьезоэлектрического материала логично предположить, что поляризация пьезокерамики может быть неоднородной и наследовать структуру поля поляризации. В связи с этим, для учёта частичной поляризации пьезокерамики в окрестности пор, на предварительном этапе можно промоделировать процесс поляризации пористой керамики. Для этого решим задачу квазиэлектростатики с помощью МКЭ для пористого диэлектрика в области Ω , сгенерированной для представительного объёма по одному из двух методов, описанных в предыдущем разделе. При этом каждую из кубических ячеек можно считать кубическим конечным элементом (КЭ) со своими диэлектрическими свойствами, различными для КЭ, заполненных материалом, и для пористых КЭ.

Тогда для неоднородного куба $\Omega = [0, L] \times [0, L] \times [0, L]$ в декартовой системе координат $Ox_1x_2x_3$, будем иметь следующую краевую задачу:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad \mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = -\nabla \phi, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (15)$$

$$\phi = V_j, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\phi_j}, \quad j = 1, 2; \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q, \quad (16)$$

где L — линейный размер куба; $\Gamma = \bigcup_j \Gamma_{\phi_j} \cup \Gamma_q$; Γ_{ϕ_j} — электроды $x_3 = 0$ и $x_3 = L$, для которых задаётся разность потенциалов $V_1 - V_2 = \kappa L E_p$, пропорциональная значению поля поляризации E_p с коэффициентом пропорциональности κ ; $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ — матрица диэлектрических проницаемостей неполяризованной керамики с порами.

Заметим, что система МКЭ для задачи (15), (16) получается фактически как частный случай из (12)—(14), если положить $\mathbf{c}^E = 0$, $\mathbf{e} = 0$, $\boldsymbol{\varepsilon}^S = \boldsymbol{\varepsilon}$, и не использовать степени свободы \mathbf{U} .

После решения задачи (15), (16) находились значения векторов поляризации $\mathbf{P}^{ek} = \mathbf{D}^{ek} - \varepsilon_0 \mathbf{E}^{ek}$ в центральной точке каждого КЭ с номером k , не являющегося порой. Здесь и далее через ε_0 обозначена диэлектрическая проницаемость вакуума, $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м. С данными КЭ ассоциировались свои элементные системы координат $Ox_1^{ek}x_2^{ek}x_3^{ek}$, для которых оси Ox_3^{ek} выбирались такими, чтобы их направления совпадали с направлениями векторов поляризации \mathbf{P}^{ek} .

Две другие оси определялись по следующему алгоритму (рис. 1). Пусть \mathbf{P}_{12}^{ek} — вектор проекции вектора поляризации \mathbf{P}^{ek} на плоскость Ox_1x_2 исходной декартовой системы координат, т. е. $\mathbf{P}_{12}^{ek} = \mathbf{P}^{ek} - P_3^{ek} \mathbf{e}_3$, где \mathbf{e}_3 — орт оси Ox_3 . Первым поворотом относительно оси Ox_3 в плоскости Ox_1x_2 на угол θ_{12}^{ek} повернём оси Ox_1 , Ox_2 так, чтобы новая ось $O\tilde{x}_1^{ek}$ совпала по направлению с вектором \mathbf{P}_{12}^{ek} . Получив промежуточную систему координат $O\tilde{x}_1^{ek}\tilde{x}_2^{ek}x_3$, повернём её вторым поворотом относительно оси $O\tilde{x}_2^{ek}$ в плоскости $Ox_3\tilde{x}_1^{ek}$ на угол θ_{31}^{ek} так, чтобы ось Ox_3^{ek} совпала по направлению с вектором поляризации \mathbf{P}^{ek} , то есть $\cos \theta_{31}^{ek} = P_3^{ek} / |\mathbf{P}^{ek}|$, $Ox_2^{ek} \equiv O\tilde{x}_2^{ek}$. В результате получим требуемую элементную систему координат $Ox_1^{ek}x_2^{ek}x_3^{ek}$.

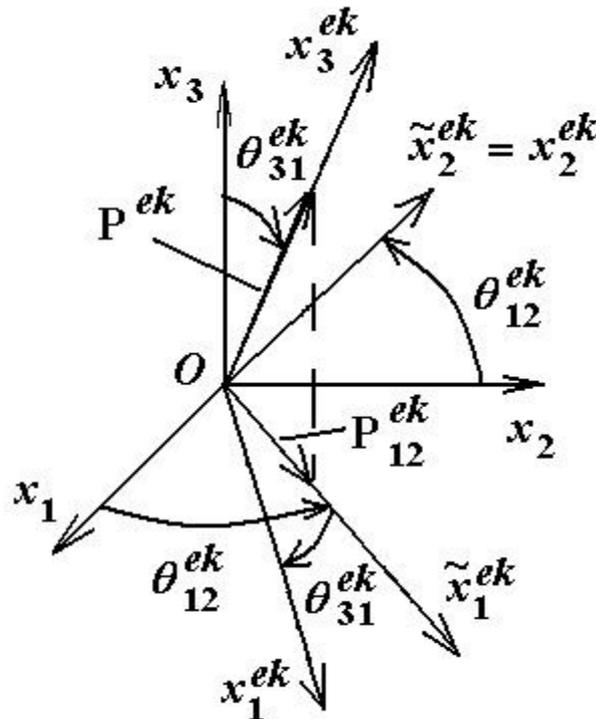


Рис. 1. Элементарная система координат отдельного конечного элемента

Для работоспособности указанного алгоритма при малых величинах модуля вектора \mathbf{P}_{12}^{ek} , то есть в случае, когда направление вектора поляризации \mathbf{P}^{ek} близко к направлению оси Ox_3 , алгоритм модифицировался следующим образом: $\cos\theta_{12}^{ek} = P_1^{ek} / |\mathbf{P}_{12}^{ek}|$, если $|\mathbf{P}_{12}^{ek}| \geq d_{12}^{ek}$; $\cos\theta_{12}^{ek} = 1$, если $|\mathbf{P}_{12}^{ek}| < d_{12}^{ek}$, где $d_{12}^{ek} = 0,001|\mathbf{P}^{ek}|$.

На втором этапе моделирования КЭ электростатики модифицируются в элементы с возможностями пьезоэлектрического анализа. Новым элементам присваиваются материальные свойства двух типов: поляризованной пьезокерамики для КЭ матрицы и пренебрежимо малые упругие и пьезоэлектрические модули и диэлектрические проницаемости, равные диэлектрической проницаемости вакуума, для пор. С поляризованными КЭ пьезокерамической матрицы связываются элементные системы координат $Ox_1^{ek} x_2^{ek} x_3^{ek}$, определённые по векторам поляризации \mathbf{P}^{ek} . Далее для определения эффективных модулей решается задача электроупругости (1)–(2) для неоднородного представительного объёма по методам, описанным выше. Подчеркнём, что при учёте неоднородной поляризации задача (1)–(2) решается для неоднородной структуры, причём каждый КЭ поляризованной пьезокерамики имеет свои модули \mathbf{c}^{Eek} , \mathbf{e}^{ek} , $\boldsymbol{\varepsilon}^{Sek}$, получаемые по известным формулам пересчёта тензорных коэффициентов при переходе от кристаллографической декартовой системы координат $Ox_1 x_2 x_3$ в элементные системы координат $Ox_1^{ek} x_2^{ek} x_3^{ek}$.

Если не учитывать неоднородность поляризации, то задача (15), (16) не используется, и в задаче (1)–(2) все КЭ имеют или свойства пьезокерамического материала класса бтт, поляризованного вдоль оси Ox_3 , или свойства пор.

Результаты расчётов и выводы. По описанной выше методике были проведены численные эксперименты по определению эффективных модулей для пористых пьезокерамических материа-

лов различной сегнетожесткости: сегнетожесткой пьезокерамики PZT-8, пьезокерамики PZT-4 средней сегнетожесткости и сегнетомягкой пьезокерамики PZT-5Н. Входными данными для расчетов принимались значения модулей пьезокерамических материалов при нулевой пористости, приведенные в табл. 1.

Таблица 1

Модули пьезокерамических материалов различной сегнетожесткости при нулевой пористости

	PZT-8	PZT-4	PZT-5Н
c_{11}^E , ГПа	146,8	138,9	127,2
c_{12}^E , ГПа	81,08	77,83	80,2
c_{13}^E , ГПа	81,05	74,28	84,67
c_{33}^E , ГПа	131,7	115,4	117,4
c_{44}^E , ГПа	31,35	25,64	22,98
e_{31} , Кл/м ²	-3,875	-5,202	-6,623
e_{33} , Кл/м ²	13,91	15,08	23,24
e_{15} , Кл/м ²	10,34	12,72	17,03
$\epsilon_{11}^S/\epsilon_0$	904	762	1704,4
$\epsilon_{33}^S/\epsilon_0$	561	663	1433,6

Конечно-элементные модели представительных объемов пористых пьезокерамик состояли из кубических решеток геометрически одинаковых ячеек-кубиков, которые являлись гексаэдральными восьмиузловыми КЭ с пьезоэлектрическими свойствами. В зависимости от заданной величины объемной пористости p часть КЭ объявлялась порами, причём рассматривались два метода генерирования пор: простой случайный метод и метод Виттена — Сандера.

Кубические решетки брались размера $n \times n \times n$, где n — число ячеек вдоль одной из координатных осей. Вычислительные эксперименты с числами $n=10, 20, 30, 40$ показали, что значения эффективных модулей стабилизируются при $n=20$. Это число $n=20$ и было взято за базовый размер кубической решетки при дальнейших расчетах.

После вычисления полных наборов эффективных модулей $c_{\alpha\beta}^{E\text{ eff}}$, $e_{i\alpha}^{\text{eff}}$, $\epsilon_{ii}^{S\text{ eff}}$ по известным формулам находились и другие характеристики пьезокерамических материалов: коэффициенты электромеханических связей, упругие податливости, пьезомодули иных форм определяющих соотношений и т. п. Проанализируем поведение пьезомодулей d_{31}^{eff} и d_{33}^{eff} в зависимости от пористости p . Чтобы сравнить, как изменяются эти пьезомодули для пьезокерамических композитов различной сегнетожесткости, будем рассматривать их относительные изменения $r(d_{3j}) = d_{3j}^{\text{eff}}(p)/d_{3j}$, где $j=1$ или $j=3$; $d_{3j}^{\text{eff}}(p)$ — значения эффективных пьезомодулей при пористости p ; d_{3j} — значения пьезомодулей плотной пьезокерамики, то есть при $p=0$.

На рис. 2 приведены зависимости от пористости p относительных величин пьезомодулей $r(d_{31})$ и $r(d_{33})$ для сегнетомягкой пьезокерамики PZT-5Н в предположении однородной поляризации пьезокерамической матрицы для двух методов генерации представительных объемов: простого случайного метода и метода Виттена — Сандера. Как проиллюстрировано на рис. 2, а, при

методе Виттена — Сандера с ростом пористости наблюдается большее убывание пьезомодуля $d_{31}^{\text{eff}}(p)$, чем при простом случайном методе.

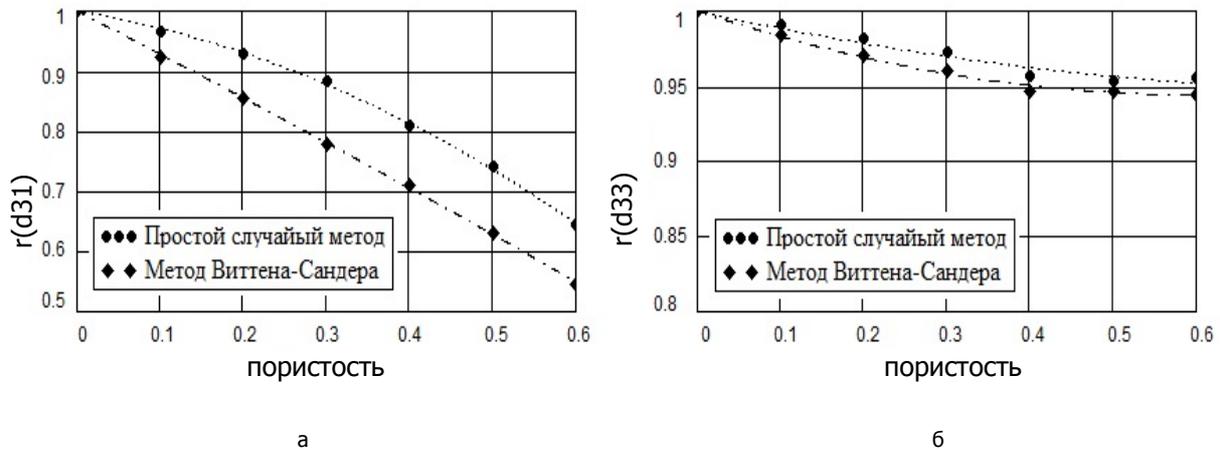


Рис. 2. Зависимости относительных пьезомодулей $r(d_{31})$ (а) и $r(d_{33})$ (б) от пористости для сегнетомягкой пьезокерамики PZT-5H при однородной поляризации матрицы для различных методов генерации представительных объёмов

В то же время величины пьезомодуля $d_{33}^{\text{eff}}(p)$ практически не зависят от пористости для обоих методов (рис. 2, б). Аналогичные тенденции наблюдались и для пьезокерамики PZT-4 средней сегнетожесткости и для сегнетожесткой пьезокерамики PZT-8.

Таким образом, способы генерации представительных объёмов могут оказывать достаточно существенное влияние на значения эффективных модулей пористых пьезокомпозигов различной сегнетожесткости. Поскольку большее убывание пьезомодулей $d_{31}^{\text{eff}}(p)$ пористых пьезокерамик было получено и в результате обработки ряда натуральных экспериментов [1—6], то следует признать метод Виттена-Сандера генерации представительных объёмов более подходящим в сравнении с простым случайным методом.

На рис. 3 и рис. 4 отражены зависимости относительных величин пьезомодулей $r(d_{31})$ и $r(d_{33})$ от пористости p для пьезокерамических материалов различной сегнетожесткости в предположениях однородной (а) и неоднородной (б) поляризации пьезокерамической матрицы при генерации представительных объёмов по методу Виттена — Сандера.

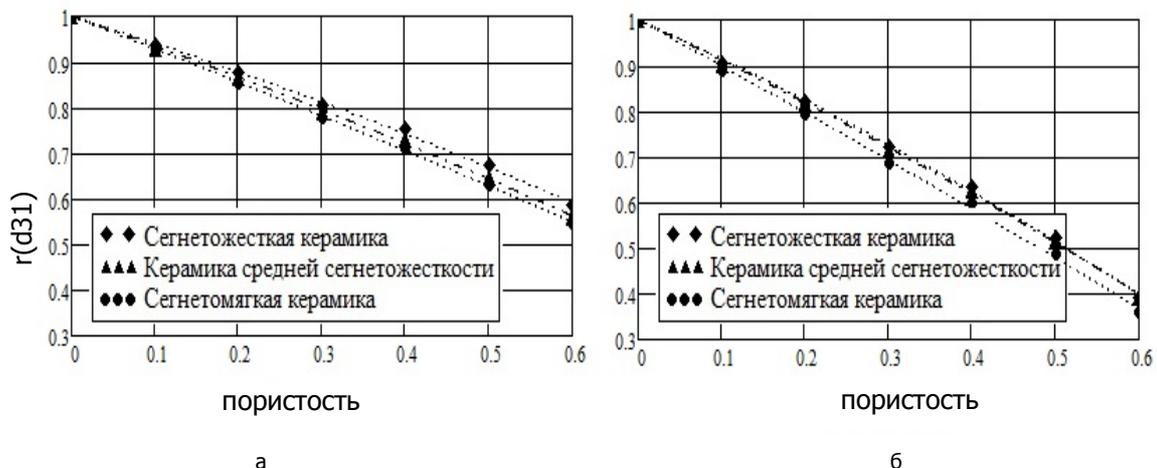


Рис. 3. Зависимости относительных пьезомодулей $r(d_{31})$ от пористости для пьезокерамик различной сегнетожесткости при однородной (а) и неоднородной (б) поляризациях матрицы при генерации представительных объёмов по методу Виттена — Сандера

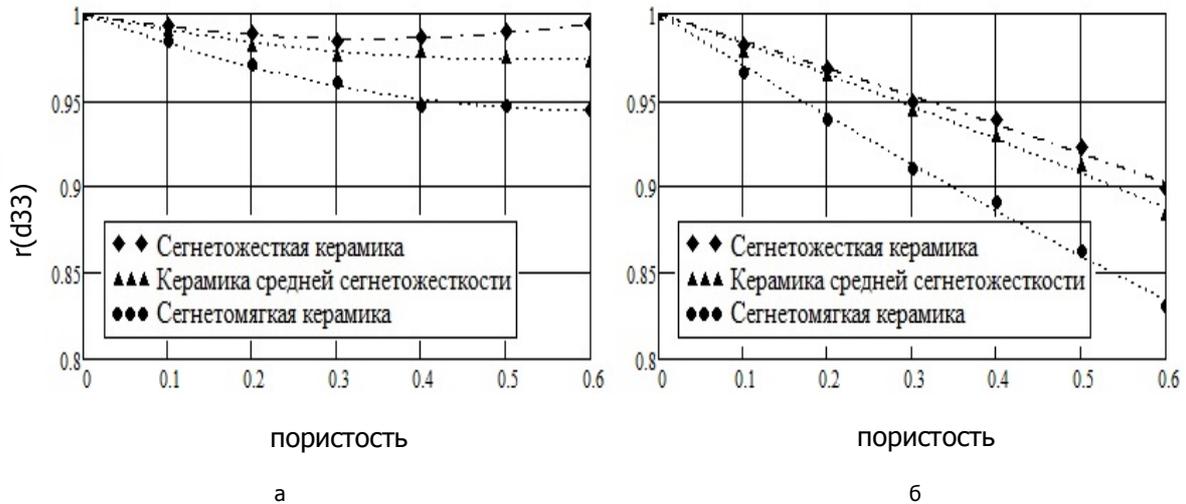


Рис. 4. Зависимости относительных пьезомодулей $r(d_{33})$ от пористости для пьезокерамик различной сегнетожесткости при однородной (а) и неоднородной (б) поляризациях матрицы при генерации представительных объемов по методу Виттена — Сандера

Как видно на рис. 3 и 4, для более сегнетомягких керамик (т. е. для пьезокерамик с большей подвижностью доменных стенок) пьезомодули $d_{31}^{eff}(p)$ и $d_{33}^{eff}(p)$ несколько сильнее зависят от пористости. Однако основные тенденции поведения пьезомодулей от пористости сохраняются, а сами относительные величины пьезомодулей достаточно близки для всех рассмотренных типов пьезокерамических материалов.

Из сравнения рис. 3, 4, а и рис. 3, 4, б можно заключить, что учёт неоднородности поляризации в окрестности пор обеспечивает большее убывание пьезомодулей, причём этот эффект сильнее проявляется для пьезомодуля $d_{31}^{eff}(p)$. Эти зависимости лучше согласуются с известными экспериментальными данными [1–6] и в связи с этим можно сделать вывод о важности учёта гипотезы о неоднородности поляризации пьезокерамических материалов в окрестности пор.

Библиографический список

1. Данцигер, А. Я. Многокомпонентные системы сегнетоэлектрических сложных оксидов: физика, кристаллохимия, технология. Аспекты дизайна пьезоэлектрических материалов / А. Я. Данцигер [и др.] // Ростов-на-Дону : Изд-во Рост. гос. ун-та, 2002. — Т. 2. — 365 с.
2. Лопатин, С. С. Свойства пористой пьезоэлектрической керамики типа цирконаттитаната свинца / С. С. Лопатин, Т. Г. Лупейко // Известия АН СССР. Серия неорганические материалы. — 1991. — Т. 27. — № 9. — С. 1948–1951.
3. Getman, I. Theoretical and experimental investigation of the porous PZT ceramics / I. Getman, S. Lopatin // Ferroelectrics. — 1996. — V. 186. — P. 301–304.
4. Ситало, Е. И. Электроупругие свойства высокопористой сегнетокерамики / Е. И. Ситало [и др.] // Пьезотехника-2005 : материалы межд. научно-практич. конф. «Фунд. пробл. функционального материаловедения, пьезоэлектрич. приборостроения и нанотехнологий». — Ростов-на-Дону : Изд-во РГУ, 2005. — С. 204–206.
5. Сегалла, А. Г. Изготовление и исследование ряда пористых пьезокерамических материалов связности 3–0/ А. Г. Сегалла [и др.] // Пьезотехника-2005 : материалы межд. научно-практич. конф. «Фунд. пробл. функционального материаловедения, пьезоэлектрич. приборостроения и нанотехнологий». — Ростов-на-Дону : Изд-во РГУ, 2005. — С. 220–223.
6. Li, J. F. Fabrication and evaluation of porous piezoelectric ceramics and porosity-graded piezoelectric actuators / J. F. Li [et al.] // J. Am. Ceram. Soc. — 2003. — V. 86. — P. 1094–1098.

7. Nasedkin, A. V. Improved finite element approaches for modeling of porous piezocomposite materials with different connectivity / A. V. Nasedkin, M. S. Shevtsova // *Ferroelectrics and Superconductors : Properties and Applications*. Ed. I. A. Parinov. New-York : Nova Science Publishers. — 2011. — Ch. 7. — P. 231–254.

8. Хорошун, Л. Н. Прогнозирование эффективных свойств пьезоактивных композитных материалов / Л. Н. Хорошун, Б. П. Маслов, П. В. Лещенко. — Киев : Наукова думка, 1989. — 347 с.

9. Nasedkin, A. Different approaches to finite element modelling of effective moduli of porous piezoceramics with 3-3 (3-0) connectivity / A. Nasedkin [et al.] // *Proc. 2005 IEEE Ultrason. Symp., Rotterdam, Sept. 18–21, 2005*. — P. 1648–1651.

10. Witten, T. A. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon / T. A. Witten, L. M. Sander // *Phys. Rev. Lett.* — 1981. — V. 47. — P. 1400–1403.

11. Domashenkina, T. V. Finite element modeling of porous piezocomposite materials with different connectivity and applications for analysis of ultrasonic transducers/ T. V Domashenkina [et al.] // *Proc. 7th GRACM Int. Congr. Comput. Mech.* [Электронный ресурс], Athens, Greece, June 30 — July 2, 2011. — 1 электрон. опт. диск (CD).

12. Вернигора, Г. Д. О поляризации и определении эффективных характеристик пористой пьезокерамики / Г. Д. Вернигора, [и др.] // *Вестник Дон. гос. техн. ун-та*. — 2011. — Т. 11. — № 4 (55). — С. 462–469.

Материал поступил в редакцию 21.11.12.

References

1. Danziger, A. Y., et al. *Mnogokomponentny`e sistemy` segnetoe`lektricheskix slozhny`x oksidov: fizika, kristalloximiya, texnologiya. Aspekty` dizajna p`ezoe`lektricheskix materialov.* [Multicomponent systems of ferroelectric complex oxides: physics, crystal chemistry, technology.] Rostov-on-Don : Izd-vo Rost. gos. un-ta, 2002, vol. 2, 365 p. (in Russian).

2. Lopatin, S. S., Lupeyko, T. G. *Svoystva poristoj p`ezoe`lektricheskoy keramiki tipa cirkonata-titanata svincza.* [Porous piezoelectric ceramics properties of lead zirconate titanate type.] *Izvestiya AN SSSR. Inorganic materials series*, 1991, vol. 27, no. 9, pp. 1948–1951 (in Russian).

3. Getman, I., Lopatin, I. *Theoretical and experimental investigation of the porous PZT ceramics.* *Ferroelectrics*, 1996, vol. 186, pp. 301–304.

4. Sitalo, E. I., et al. *E`lektrouprugie svoystva vy`sokoporistoj segnetokeramiki.* [Electroelastic properties of highly porous Fe ceramics.] *P`ezotexnika-2005 : materialy` mezhd. nauchno-praktich. konf. «Fund. probl. funkcional`nogo materialovedeniya, p`ezoe`lektrich. priborostroeniya i nanotexnologij».* [Piezofacilities-2005 : Proc. Int. Sci.-Prac. Conf. "Fundamental problems of functional Hylology, piezoelectric instrument making and nanotechnologies.] Rostov-on-Don : Izd-vo RGU, 2005, pp. 204–206 (in Russian).

5. Segalla, A. G., et al. *Izgotovlenie i issledovanie ryada poristy`x p`ezokeramicheskix materialov svyaznosti 3–0.* [Fabrication and investigation of a number of porous piezoceramic materials with 3–0 connectivity.] *P`ezotexnika-2005 : materialy` mezhd. nauchno-praktich. konf. «Fund. probl. funkcional`nogo materialovedeniya, p`ezoe`lektrich. priborostroeniya i nanotexnologij».* [Piezofacilities-2005: Proc. Int. Sci.-Prac. Conf. "Fundamental problems of functional Hylology, piezoelectric instrument making and nanotechnologies.] Rostov-on-Don : Izd-vo RGU, 2005, pp. 220–223 (in Russian).

6. Li, J. F., et al. *Fabrication and evaluation of porous piezoelectric ceramics and porosity-graded piezoelectric actuators.* *J. Am. Ceram. Soc.*, 2003, vol. 86, pp. 1094–1098.

7. Nasedkin, A. V., Shevtsova, M. S. Improved finite element approaches for modeling of porous piezocomposite materials with different connectivity. *Ferroelectrics and Superconductors : Properties and Applications*. Ed. I. A. Parinov. New-York: Nova Science Publishers, 2011, ch. 7, pp. 231–254.

8. Khoroshun, L. N., Maslov, B. P., Leshchenko, P. V. Prognozirovanie e`ffektivny`x svoystv p`ezoaktivny`x kompozitny`x materialov. [Prediction of piezoelectric composite effective properties.] Kiev : Naukova Dumka, 1989, 347 p. (in Russian).

9. Nasedkin, A., et al. Different approaches to finite element modelling of effective moduli of porous piezoceramics with 3-3 (3-0) connectivity. *Proc. 2005 IEEE Ultrason. Symp., Rotterdam*, Sept. 18–21, 2005, pp. 1648–1651.

10. Witten, T. A., Sander, L. M. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. *Phys. Rev. Lett.*, 1981, vol. 47, pp. 1400–1403.

11. Domashenkina, T. V., et al. Finite element modeling of porous piezocomposite materials with different connectivity and applications for analysis of ultrasonic transducers. *Proc. 7th GRACM Int. Congr. Comput. Mech. 1 electronic optical disc (CD)*. Athens, Greece, June 30 — July 2, 2011.

12. Vernigora, G. D., et al. O polarizacii i opredelenii e`ffektivny`x xarakteristik poristoj p`ezokeramiki. [On polarization and identification of porous piezoceramics effective characteristics.] *Vestnik of DSTU*, 2011, vol. 11, no. 4 (55), pp. 462–469 (in Russian).

EFFECTIVE MODULI SIMULATION FOR VARIOUS TYPES OF POROUS PIEZOCERAMIC MATERIALS¹

A. V. Nasedkin

(Don State Technical University),

M. S. Shevtsova

(Southern Scientific Center, Russian Academy of Sciences)

A complete set of material constants for porous piezoceramic materials with allowance on the inhomogeneous polarization in the pores vicinity is determined by the simulation techniques for the representative volumes, effective moduli, and finite elements. For the numerical determination of the effective moduli, sets of the piezoelectric static problems for representative volumes with boundary conditions providing constant values of the stress, strain, electric fields, and the electric displacement of a homogeneous body are solved in the ANSYS FE package. The calculations are performed using the specially developed computer programs in APDL ANSYS macro language. The effect of the cells number and various models of the representative volumes on the crucial values of the effective modules for a number of types of porous piezoelectric ceramics is investigated. The results correlation of the computational and full-scale experiments is discussed. It is shown that the dependence of the effective moduli on porosity weakly depends on the type of porous piezoelectric materials.

Keywords: piezoelectricity, electroelasticity, porous piezoelectric ceramics, inhomogeneous polarization, effective moduli, models of representative volumes, finite-element method.

¹ The research is done with the partial financial support from Analytical branch target program of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation "Development of scientific potential of higher school" (project 1.6052.2011) and from RFFI (12-07-00639_a).