

УДК 539.3; 539.5

DOI 10.17223/19988621/58/11

А.С. Скалиух

# ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОТ НЕОБРАТИМЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КЕРАМИКИ<sup>1</sup>

Для необратимых процессов деформирования и поляризации устанавливается линейная функциональная зависимость упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических характеристик деформированного и частично поляризованного поликристаллического сегнетоэлектрического тела от необратимых параметров, к которым относятся остаточная деформация и поляризация, когда направление вектора электрического поля не совпадает ни с одной из главных осей тензора напряжения.

**Ключевые слова:** определяющие соотношения, деформирование, поляризация, сегнетоэлектрики, сегнетоэластики, индуцированные и остаточные параметры, необратимый процесс.

## Обозначения и операции тензорной алгебры и анализа

В данной статье приняты следующие обозначения и операции тензорной алгебры и анализа:  $T_n$  – линейное пространство тензоров  $n$ -го ранга;  $\{\mathbf{e}_m\}_{m=1}^3, \{\mathbf{e}^m\}_{m=1}^3$  – векторы основного и взаимного базисов;  $g_{mn} = \mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_n$  – метрические коэффициенты;  $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon} \in T_2$  – тензоры напряжений и деформации;  $\mathbf{E}, \mathbf{D} \in T_1$  – векторы электрического поля и электрической индукции;  $\boldsymbol{\varepsilon}_0 \in T_2$  – тензор остаточной деформации;  $\mathbf{P}_0 \in T_1$  – вектор остаточной поляризации;  $\mathbf{S} \in T_4, \mathbf{d} \in T_3, \boldsymbol{\alpha} \in T_2$  – тензор упругих податливостей, тензор пьезоэлектрических модулей и тензор диэлектрических проницаемостей соответственно. Простое умножение  $\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} = d^{mnk} E^s g_{ks} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n$ ; полное умножение тензоров одного ранга  $\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} = \sigma^{mn} \varepsilon^{ks} g_{mk} g_{ns} = \sigma^{mn} \varepsilon_{mn}$ , полное умножение тензоров разных рангов  $\mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma} = S^{mnks} \sigma^{ij} g_{ki} g_{sj} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n = S^{mnks} \sigma_{ks} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n$ ; если ранг тензора первого множителя меньше ранга второго множителя, то  $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{S} = \sigma^{ij} S^{mnks} g_{jn} g_{im} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s = S^{mnks} \sigma_{mn} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s$ . Операция транспонирования  $\mathbf{S}^{T((12),(34))} = S^{mnks} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m$ . Набла – оператор Гамильтона  $\nabla = \mathbf{e}^m \frac{\partial}{\partial x^m}$ . Производная тензорной функции по тензорному аргументу

$$S_{,\varepsilon} \equiv \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial S^{mnks}}{\partial \varepsilon^{ij}} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s \mathbf{e}^i \mathbf{e}^j \text{ и т.д.}$$

<sup>1</sup> Работа поддержана РФФИ, грант 17-08-00860-а.

## Введение

Стремительное внедрение сегнетоэлектрических материалов в технику за последние два десятилетия обусловлено их замечательными пьезоэлектрическими и диэлектрическими свойствами. Большую роль в этом играют поликристаллические материалы, или керамики, технология изготовления которых позволяет получать рабочие элементы сенсоров и актуаторов различных форм и размеров. Для придания рабочих свойств керамику подвергают предварительной поляризации в сильном электрическом поле. В результате этого изменяется структура материала, изменяется класс анизотропии и появляются пьезоэлектрические свойства. Кроме электрического поля на процесс поляризации влияют также интенсивные механические напряжения. В отличие от пластических материалов здесь при интенсивных нагрузках появляется не только остаточная деформация, но и остаточная поляризация. В дальнейшем поляризованная керамика используется в малых электрических и механических полях, когда ее структура уже не изменяется. Однако сами процессы поляризации электрическим полем и деполяризации механическими напряжениями являются необратимыми процессами и играют важную роль в первоначальном формировании структуры материала. Математическое моделирование необратимых процессов деформирования и поляризации (квазистатистический процесс) осуществляется на основе общих законов механики сплошных сред [1]. Полная система уравнений включает в себя полевые уравнения (уравнения равновесия и статики диэлектриков), геометрические соотношения (связь тензора деформаций с вектором перемещения и электрического поля с электрическим потенциалом) и определяющие соотношения (дифференциальные или интегральные операторы гистерезисного типа). Вывод определяющих соотношений связан с учетом многих факторов и должен опираться на физику явления, учитывать внутреннюю структуру материала и достаточно точно согласовываться с экспериментальными данными. К настоящему времени накоплен определенный опыт моделирования и можно выделить несколько основных направлений исследования, принципиально отличающиеся друг от друга. Это феноменологические методы [2–8], типа методов пластичности, методы двухуровневой сплошной среды [9–14], опирающиеся на методы микромеханических переключений и некоторые другие [15]. Эксперименты показывают, что в процессе поляризации меняется класс анизотропии материала, появляются пьезоэлектрические свойства, соответственно упругие, диэлектрические и пьезоэлектрические свойства также меняются. В отмеченных работах для упрощения делаются предположения о том, что упругие и диэлектрические свойства изменяются столь незначительно, что их можно взять такими, какие они в неполяризованном состоянии. Основной акцент делается на пьезоэлектрические модули, причем учитывается только влияние остаточной поляризации посредством введения множителя, в виде отношения модуля вектора остаточной поляризации на величину поляризации насыщения. Делается это безо всякого доказательства, исключительно с помощью интуитивных соображений. Однако при таком подходе остается открытым вопрос о механическом деформировании поликристаллического сегнетоэлектрика интенсивными механическими напряжениями, когда появляется остаточная деформация, меняется класс анизотропии материала, а описать эту анизотропию невозможно. Исследований, посвященным изучению влияния остаточной деформации на упругие модули в этом случае, автором не обнаружено. В [16] рассмотрена модель Джила – Атертона, являющаяся разновидностью микромеханических моделей. В ней авторы для

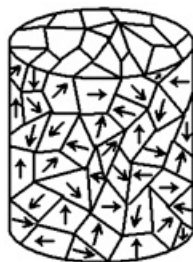
учета обратимых параметров вводят один скалярный коэффициент, да и тот приходится подбирать при сравнении с экспериментальными результатами. В [17] авторы предложили конечно-элементный подход, в рамках которого проводят усреднение и получают эффективные модули поляризованной керамики. Но и здесь функциональная зависимость от остаточных параметров не раскрыта.

В настоящей работе с помощью термодинамического подхода установлена функциональная зависимость для тензоров упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических модулей от вектора остаточной поляризации и тензора остаточной деформации, когда протекает необратимый процесс поляризации и деформирования в поликристаллическом сегнетоэлектрике при нагрузках, не приводящих к разрушению. Предметом исследования являются поликристаллические сегнетоэлектрические материалы. Из общей модели, описывающей меняющиеся упругие и необратимые параметры, целенаправленно выбраны определяющие соотношения для обратимых частей поляризации и деформирования. В отличие от многих задач пластических материалов, где упругие деформации подчиняются закону Гука с модулем упругости и коэффициентом Пуассона изотропного тела, здесь тело претерпевает фазовый переход «твердое тело – твердое тело», переходя из изотропного состояния в анизотропное, при котором физические модули изменяются в процессе развития пластической деформаций и остаточной поляризации.

## 1. Определяющие соотношения для обратимых параметров

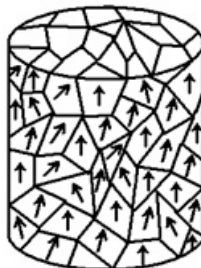
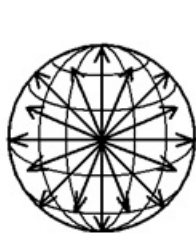
Для определения параметров рассматриваемых процессов обратимся к основным положениям внутреннего строения поликристаллических сегнетоэлектриков [1]. Сегнетоэлектрическая керамика состоит из огромного числа кристаллитов, размерами порядка  $10^{-6} - 10^{-5}$  м. На линейном размере кристаллита оказывается в среднем от одного до сотни доменов, каждый из которых способен содержать сотни и более атомных ячеек. Поэтому как в мелкозернистых, так и в крупнозернистых керамиках количество атомных ячеек по линейному размеру кристаллита составляет число порядка  $10^4$ . В каждой атомной ячейке в низкотемпературной сегнетоэлектрической фазе центр положительных и отрицательных зарядов не совпадают, что характеризуется объемной плотностью электрических диполей в виде вектора спонтанной поляризации  $\mathbf{p}_s$  и тензора спонтанной деформации  $\mathbf{\epsilon}_s$ , одна из главных осей которого совпадает с направлением вектора  $\mathbf{p}_s$ . Пусть для определенности рассматриваются сегнетоэлектрики типа перовскита, типичным представителем которых является титанат бария. Под представительным объемом понимаем объем, линейные размеры которого значительно меньше линейных размеров конечного тела, но содержащий огромное количество кристаллитов, для сохранения физических свойств тела. Для наглядности на рис. 1 показан представительный объем, в котором каждый кристаллит просто совпадает с одним доменом. В деполяризованном состоянии векторы спонтанной поляризации, показанные стрелками, располагаются произвольным образом. Взяв некоторую точку за точку приведения, можно поставить в соответствие каждому вектору спонтанной поляризации коллинеарный ему единичный вектор. Деполяризованное состояние характеризуется равномерным распределением таких векторов на единичной сфере, как показано на том же рисунке.

Если приложить интенсивное электрическое поле, то векторы спонтанной поляризации поворачиваются наиболее близко к направлению поля, подчиняясь кристаллографическому строению сегнетоэлектрика, что и показано на рис. 2.



**Рис. 1.** Представительный объем в деполаризованном состоянии и распределение осей доменов

**Fig. 1.** Representative volume in a depolarized state and distribution of the domain axes

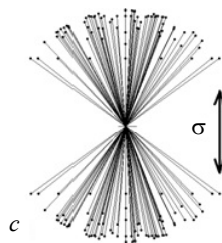
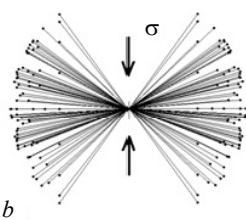
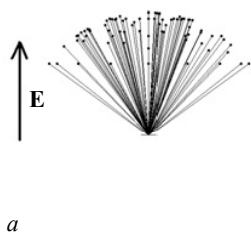


**Рис. 2.** Представительный объем в поляризованном электрическим полем состоянии и распределение осей доменов

**Fig. 2.** Representative volume in a polarized state provided by electric field and distribution of the domain axes



Изображающие единичные векторы расположатся в конусе, показанном на рис. 3, *a*. После снятия электрического поля векторы спонтанной поляризации остаются в таком положении и в начальное состояние не возвращаются, что характеризует изменившуюся структуру. Однако и механические напряжения могут поворачивать векторы спонтанной поляризации, при достижении ими пороговых значений. В частности, для сжимающих напряжений оси доменов располагаются в торе треугольного сечения, а для растягивающих – в двух одноосных конусах с общей вершиной, как показано на рис. 3, *b* и *c*.



**Рис. 3.** Распределение осей векторов спонтанной поляризации после воздействия: *a* – электрического поля; *b* – сжимающих напряжений; *c* – растягивающих напряжений

**Fig. 3.** Distribution of the axes of spontaneous polarization vectors after the action of: (a) electric field, (b) compressive stresses, and (c) tensile stresses

В этом проявляются отличительные особенности сегнетоэлектриков от ферромагнетиков, у которых векторы спонтанной намагниченности могут поворачиваться в направлении магнитного поля на любой угол.

В представительном объеме, содержащем  $N$  элементарных ячеек, определяется вектор остаточной поляризации и тензор остаточной деформации путем операции осреднения:

$$\mathbf{P}_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{p}_s)_k, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\boldsymbol{\varepsilon}_s)_k.$$

Пусть к представительному объему поликристаллической сегнетоэлектрической среды приложено внешнее электрическое поле  $\mathbf{E}$  и механическое напряже-

ние  $\sigma$ . Считается, что эти поля неизменны во всех точках представительного объема, что позволяет считать их определяющими параметрами. Под их воздействием доменные стенки деформируются. Эти явления описываются результирующими эффектами в виде обратимых составляющих вектора поляризации и тензора деформации  $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$ , которые исчезают при исчезновении нагрузок. Как только механические или электрические воздействия достигают пороговых значений, начинаются повороты векторов спонтанной поляризации, и связанные с ними изменениями направлений главных осей тензоров спонтанной деформации. Доменные стенки передвигаются, что приводит к появлению вышеопределенных необратимых параметров  $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$ . В связи с вышесказанным вектор поляризации  $\mathbf{P}$  и тензор деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$  в необратимых процессах подразделяют на обратимые  $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$  и необратимые  $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$  части:  $\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_0$ , и относят к искомым параметрам. Обратимые части являются параметрами состояния и связаны с внутренней энергией, а необратимые части являются параметрами процесса, и для их определения приходится использовать дополнительные соотношения, наступающие в процессе достижения нагрузками пороговых значений.

Целью нашего исследования является построение определяющих соотношений обратимых составляющих и установление функциональной зависимости физических характеристик материала от остаточных параметров. Поскольку речь идет о характеристиках представительного объема, воспользуемся элементами термодинамики необратимых процессов. Известно, что физические характеристики термически деполяризованной среды в отличие от среды, поляризованной до состояния насыщения, отличаются между собой. Поэтому в случае частичной поляризации они будут зависеть от остаточных параметров  $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$ , и будут меняться с изменением этих параметров. Найдем уравнения, связывающие обратимые искоемые параметры  $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$  с определяющими параметрами  $\mathbf{E}$  и  $\sigma$ . С этой целью воспользуемся уравнениями первого и второго начала термодинамики необратимых процессов в дифференциальной форме [1]:

$$\begin{aligned} \rho \dot{u} &= \sigma : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \omega, \\ \rho \dot{s} &\geq \frac{\rho \omega}{T} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{q}}{T} - \mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\rho, u, \sigma, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{q}, \omega, s, T, \nabla$  – плотность массы, массовая плотность внутренней энергии, тензор напряжений, тензор деформаций, вектор электрического поля, вектор электрической индукции, вектор потока тепла, мощность внутренних источников тепла, массовая плотность энтропии, абсолютная температура, набла оператор Гамильтона соответственно. Точка сверху обозначает субстанциональную производную по времени. Но так как все деформации малы, то справедливы гипотезы геометрически линейной механики, откуда следует, что субстанциональная производная совпадает с частной производной.

Внутренняя энергия является функцией внешних параметров и энтропии  $u(\boldsymbol{\varepsilon}_e, \mathbf{D}_e, s)$ ,  $\mathbf{D}_e = \mathbf{P}_e + \varepsilon_* \mathbf{E}$ , где  $\varepsilon_*$  – диэлектрическая проницаемость вакуума. Чтобы определяющие параметры стали независимыми, введем термодинамическую функцию Гиббса

$$G = u - Ts - \frac{1}{\rho} \sigma : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{\rho} \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}}$$

и проведем стандартные действия, связанные с исключением из соотношений (1)

мощности внутренних источников тепла. Получим неравенство диссипации, в котором для случая процесса холодной поляризации можно пренебречь термическими слагаемыми ( $\mathbf{q}$ ,  $s$ ,  $T$ ), и которое можно записать в виде

$$-(\rho G_{,\sigma} + \varepsilon) : \dot{\sigma} - (\rho G_{,E} + \mathbf{D}) \cdot \dot{E} - \rho G_{,\varepsilon_0} : \dot{\varepsilon}_0 - \rho G_{,P_0} \cdot \dot{P}_0 = S_i \geq 0. \quad (2)$$

Динамика переключения диполей составляет менее  $10^{-11}$  с. Процесс переключения домена имеет временной масштаб порядка  $10^{-8} - 10^{-5}$  с. Поэтому, когда напряжение и электрическое поле изменяются в пределах  $10^{-1} - 10^{-2}$  с, имеем квазистатический процесс и малые отклонения от термодинамического равновесия. Тогда функцию скорости диссипации  $S_i$  можно рассматривать как линейную относительно скоростей своих параметров, т.е.

$$S_i = \chi_\varepsilon^S : \dot{\sigma} + \chi_D^S \cdot \dot{E} + \chi_{\varepsilon_0}^S : \dot{\varepsilon}_0 + \chi_{P_0}^S \cdot \dot{P}_0. \quad (3)$$

Обобщенные диссипативные силы  $\chi_\varepsilon^S$ ,  $\chi_D^S$ ,  $\chi_{\varepsilon_0}^S$ ,  $\chi_{P_0}^S$  в общем случае представляют собой функции, которые зависят от набора параметров  $\sigma$ ,  $E$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $P_0$ , равно как и от скоростей этих параметров  $\dot{\sigma}$ ,  $\dot{E}$ ,  $\dot{\varepsilon}_0$ ,  $\dot{P}_0$ , причем они должны обеспечивать выполнение неравенства скорости диссипации (2).

Для керамических материалов обратимые части деформации и поляризации  $\varepsilon_e$ ,  $P_e$  достаточно малы (приблизительно на порядок меньше остаточных параметров), в силу чего определяющие соотношения естественно строить в виде линейных соотношений. С этой целью конкретизируем функцию Гиббса, выбрав ее в квадратичном виде:

$$G = -\frac{1}{\rho}(\sigma : \varepsilon_0 + E \cdot P_0) - \frac{1}{2\rho}[\sigma : S(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + 2E \cdot d(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + E \cdot \varepsilon(\varepsilon_0, P_0) \cdot E]. \quad (4)$$

Входящие сюда упругие податливости, пьезоэлектрические модули и диэлектрические проницаемости являются функциями остаточных параметров  $S = S(\varepsilon_0, P_0)$ ,  $d = d(\varepsilon_0, P_0)$ ,  $\varepsilon = \varepsilon(\varepsilon_0, P_0)$  и обладают следующими свойствами симметрии  $S = S^{T(12)} = S^{T(34)} = S^{T((12),(34))}$ ,  $d = d^{T(23)}$ ,  $\varepsilon = \varepsilon^{T(12)}$ . Воспользовавшись независимостью обобщенных скоростей  $\dot{\sigma}$ ,  $\dot{E}$ ,  $\dot{\varepsilon}_0$ ,  $\dot{P}_0$  и проведя стандартные математические операции в (2) на основании (4), получаем две пары соотношений. Первая пара связывает тензор деформаций и вектор электрической индукции с тензором механических напряжений, вектором электрического поля и первой парой диссипативных сил. Вторая пара уравнений связывает тензор механических напряжений, вектор электрического поля и производные модулей физических характеристик по остаточным параметрам со второй парой диссипативных сил. Избегая чрезмерного обобщения, будем пренебрегать вязкоупругими свойствами, для чего надо положить  $\chi_\varepsilon^S = 0$ ,  $\chi_D^S = 0$ . Тогда первую пару уравнений можно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon - \varepsilon_0 &= S(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + d^T(\varepsilon_0, P_0) \cdot E, \\ D - P_0 &= d(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + \varepsilon(\varepsilon_0, P_0) \cdot E, \end{aligned} \quad (5)$$

где для тензора пьезомодулей  $d^T = d^{T(1,(23))}$ . Вторую пару уравнений можно записать так:

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \left( \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} \right)^{T((34),(56))} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} \right)^{T((23),(45))} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \left( \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} \right)^{T(2,(34))} \cdot \mathbf{E} &= \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^S, \\
 \mathbf{E} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \left( \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{P}_0} \right)^{T((34),5)} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{P}_0} \right)^{T((23),4)} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \left( \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{P}_0} \right)^{T(2,3)} \cdot \mathbf{E} &= \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^S.
 \end{aligned} \quad (6)$$

Учитывая, что  $\mathbf{D} - \mathbf{P}_0 = \mathbf{D}_e$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \boldsymbol{\varepsilon}_e$ , можно сказать, что (5) представляют собой определяющие соотношения для обратимых параметров. Остается только выяснить характер зависимости физических характеристик от остаточных параметров. С этой целью рассмотрим обобщенные диссипативные силы  $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^S, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^S$ , входящие в систему (6). Для необратимых процессов мы не вправе считать, что они являются аналитическими функциями своих аргументов. Сделаем предположение, что они состоят как из аналитической, так и неаналитической частей, входящих аддитивным образом, с обязательным выполнением неравенства (2). Обозначим аналитические части через  $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)}, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)}$ , а неаналитические –  $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}$ , тогда

$$\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^S = \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)} + \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \quad \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^S = \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)} + \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}.$$

Очевидно, что аналитические части не могут зависеть от остаточных параметров, поэтому они будут функциями только внешних параметров:

$$\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)} = \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}), \quad \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)} = \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}).$$

Надо также отметить, что при отсутствии внешних нагрузок эти функции равны нулю. Все это позволяет разложить их в ряд Тейлора в окрестности ненагруженного состояния. Выполнив такое разложение с точностью до квадратичных составляющих и введя для удобства записи дальнейших формул соответствующие (6) операции транспонирования, для тензоров такого разложения получим

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)} &= \mathbf{A} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{K}^{T((34),(56))} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{M}^{T(2,(34))} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{N}^{T((23),(45))} : \boldsymbol{\sigma}, \\
 \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)} &= \mathbf{A}_1 : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{K}_1^{T((34),(56))} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{M}_1^{T(2,(34))} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{N}_1^{T((23),(45))} : \boldsymbol{\sigma}.
 \end{aligned}$$

Тензоры  $\mathbf{B}_1 \in T_2$ ;  $\mathbf{B}, \mathbf{A}_1, \mathbf{M}_1 \in T_3$ ;  $\mathbf{A}, \mathbf{M}, \mathbf{N}_1 \in T_4$ ;  $\mathbf{N}, \mathbf{K}_1 \in T_5$ ,  $\mathbf{K} \in T_6$  не зависят от остаточных  $\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0$  и от определяющих параметров  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}$ . Введенные аналитические части диссипативных сил никак не изменяют неравенство диссипации (2), они лишь исключают из функции скорости диссипации слагаемые, которые не влияют на диссипацию энергии. Подставляя эти разложения в (6) и учитывая независимость определяющих параметров, получаем систему равенств, которые связывают эти параметры с неаналитическими частями диссипативных сил  $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}$  и с производными физических характеристик, т.е. имеем

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{A} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \quad \mathbf{E} = \mathbf{A}_1 : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} = \mathbf{K}, \quad \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} = \mathbf{N}, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} = \mathbf{M}, \quad \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{P}_0} = \mathbf{K}_1, \quad \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{P}_0} = \mathbf{N}_1, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{P}_0} = \mathbf{M}_1. \quad (8)$$

Соотношения (7) описывают изменение необратимых параметров. Однако построение неаналитических частей обобщенных диссипативных сил представляет собой очень сложную задачу, которая, по-видимому, даже в простейших случаях не решена. Вместо этого для нахождения необратимых параметров применяются другие методы и подходы [18], с условием удовлетворения неравенству (2).

Однако для наших целей важны соотношения (8), которые позволяют сформулировать линейную зависимость тензоров  $S(\epsilon_0, P_0)$ ,  $d(\epsilon_0, P_0)$ ,  $\epsilon(\epsilon_0, P_0)$  от остаточных параметров с точностью до постоянных тензоров  $S_0, d_0, \epsilon_0$ :

$$\begin{aligned} S(\epsilon_0, P_0) &= S_0 + K : \epsilon_0 + K_1 \cdot P_0, \\ d(\epsilon_0, P_0) &= d_0 + N : \epsilon_0 + N_1 \cdot P_0, \\ \epsilon(\epsilon_0, P_0) &= \epsilon_0 + M : \epsilon_0 + M_1 \cdot P_0. \end{aligned} \quad (9)$$

Очевидно, что в полученных соотношениях  $S_0, \epsilon_0$  – тензоры упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей для термически деполяризованной керамики, когда  $\epsilon_0 = 0, P_0 = 0$ . В деполяризованном состоянии керамика не обладает пьезоэлектрическими свойствами, поэтому  $d_0 = 0$ . Простые рассуждения позволяют еще больше упростить эти соотношения, рассмотрев ситуации с изменением направления вектора остаточной поляризации. Действительно, если направление вектора остаточной поляризации изменить на противоположное, то тензор остаточной деформации не изменится. Соответственно тензор упругих податливостей и тензор диэлектрических проницаемостей также не изменятся, в отличие от тензора пьезоэлектрических модулей, который меняет знак на противоположный. Отсюда сразу же вытекают следующие равенства:

$$K_1 = 0, \quad M_1 = 0, \quad N = 0.$$

Следовательно, вместо (9) имеем:

$$\begin{aligned} S(\epsilon_0) &= S_0 + K : \epsilon_0, \\ d(P_0) &= N_1 \cdot P_0, \\ \epsilon(\epsilon_0) &= \epsilon_0 + M : \epsilon_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Тензоры упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей для термически деполяризованной керамики  $S_0, \epsilon_0$  должны быть определены до начала процесса поляризации. Соотношения (10) составляют одну из главных частей исследования. Остается лишь конкретизировать компоненты входящих в них тензоров.

## 2. Обсуждение результатов

Тензоры  $K, N_1, M$  методами термодинамики определить уже невозможно, здесь, как и при определении физических характеристик материала, необходимы экспериментальные методы. Заметим, что эти тензоры, будучи связанными с физическими модулями, должны обладать такими же свойствами симметрии, как и тензоры физических модулей  $S, d, \epsilon$ . Кроме того,  $K, M$  должны быть симметричными по последней паре индексов, что вытекает из (8), в силу дифференцирования физических характеристик по симметричному тензору остаточной деформации. Это обстоятельство позволяет вместо тензорного представления воспользоваться матричным представлением Фойхта. Используя декартову прямоуголь-



ную систему координат, введем векторы

$$\hat{\mathbf{e}}_0 = \{\varepsilon_{011}, \varepsilon_{022}, \varepsilon_{033}, 2\varepsilon_{023}, 2\varepsilon_{013}, 2\varepsilon_{012}\}, \quad \hat{\mathbf{P}}_0 = \{P_{01}, P_{02}, P_{03}\}.$$

Тензорам  $\mathbf{K} \in T_6$ ,  $\mathbf{N}_1, \mathbf{M}, \mathbf{S}, \mathbf{S}_0 \in T_4$ ,  $\mathbf{d} \in T_3$ ,  $\mathfrak{z}, \mathfrak{z}_0 \in T_2$  поставим в соответствие матрицы  $\hat{\mathbf{K}}, \hat{\mathbf{N}}_1, \hat{\mathbf{M}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}_0, \hat{\mathbf{d}}, \hat{\mathfrak{z}}, \hat{\mathfrak{z}}_0$  по следующему правилу:

$$K_{(mn)(ks)(pt)} \Rightarrow \hat{K}_{\alpha\beta\gamma}, \quad N_{1m(nk)s} \Rightarrow \hat{N}_{1m\alpha s}, \quad M_{mn(ks)} \Rightarrow \hat{M}_{mn\alpha}, \quad S_{(mn)(ks)} \Rightarrow \hat{S}_{\alpha\beta}, \\ S_{(mn)(ks)} \Rightarrow \hat{S}_{0\alpha\beta}, \quad d_{m(nk)} \Rightarrow \hat{d}_{m\alpha}, \quad \mathfrak{z}_{mn} \Rightarrow \hat{\mathfrak{z}}_{mn}, \quad \mathfrak{z}_{mn} \Rightarrow \hat{\mathfrak{z}}_{0mn},$$

где в скобках выделены пары латинских индексов, которые заменяются на один греческий, а  $\alpha, \beta, \gamma$  определяются по одному и тому же правилу, например:

$$\alpha = \begin{cases} m, & m = n; \\ 9 - (m + n), & m \neq n. \end{cases}$$

Вначале определяются компоненты матриц  $\hat{\mathbf{S}}_0, \hat{\mathfrak{z}}_0$ . С этой целью отметим [1], что, термически деполяризованная керамика является изотропным телом. Поэтому, проведя два упругих и один электрический эксперимент, можно полностью определить компоненты этих матриц. Действительно, среди упругих экспериментов наиболее простыми являются статические эксперименты по определению модуля Юнга  $E$  и коэффициента Пуассона  $\nu$ , а в качестве электрического эксперимента – эксперимент по определению диэлектрической проницаемости пластинки  $\varepsilon_0$ . Тогда компоненты матриц  $\hat{\mathbf{S}}_0, \hat{\mathfrak{z}}_0$  определяются как

$$\hat{S}_{011} = \hat{S}_{011} = \hat{S}_{011} = \frac{1}{E}; \quad \hat{S}_{012} = \hat{S}_{013} = \hat{S}_{023} = -\frac{\nu}{E}; \\ \hat{S}_{044} = \hat{S}_{055} = \hat{S}_{066} = \frac{2(1+\nu)}{E}; \quad \hat{\mathfrak{z}}_{011} = \hat{\mathfrak{z}}_{011} = \hat{\mathfrak{z}}_{011} = \varepsilon_0. \quad (11)$$

Для определения остальных матриц воспользуемся также известными значениями упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей поляризованной до насыщения керамики  $\hat{\mathbf{S}}_{\text{sat}}, \hat{\mathbf{d}}_{\text{sat}}, \hat{\mathfrak{z}}_{\text{sat}}$ . Известно [1], что поляризованная электрическим полем до насыщения керамика относится к классу трансверсально-изотропного тела и ее матрицы констант в системе координат, когда ось  $Oz$  направлена по вектору остаточной поляризации, имеют следующий вид:

$$\hat{\mathbf{S}}_{\text{sat}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{13} & S_{13} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(S_{11} - S_{12}) \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{d}}_{\text{sat}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (12) \\ \hat{\mathfrak{z}}_{\text{sat}} = \begin{pmatrix} \mathfrak{z}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{z}_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \mathfrak{z}_{33} \end{pmatrix}.$$

Одна из главных осей тензора деформации совпадает с осью  $Oz$ , а две другие лежат в плоскости  $Oxy$ . Поэтому будем определять компоненты матриц тензоров  $\hat{\mathbf{K}}, \hat{\mathbf{N}}_1, \hat{\mathbf{M}}$  в этих осях. Обратимся вначале к матрице  $\hat{\mathbf{K}}$ . С этой целью рассмотрим матрицу  $\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_0$ . В состоянии, когда керамика поляризована до состояния насыщения, компоненты  $\hat{\mathfrak{e}}_{01}, \hat{\mathfrak{e}}_{02}, \hat{\mathfrak{e}}_{03}$  являются главными значениями тензора остаточной деформации, удовлетворяющими условию  $\hat{\mathfrak{e}}_{01} \leq \hat{\mathfrak{e}}_{02} \leq \hat{\mathfrak{e}}_{03}$ . Как следует из экспе-

риментальных данных, тензор остаточных деформаций является несжимаемым, тогда из матричного равенства  $\hat{\mathbf{S}}_{\text{sat}} = \hat{\mathbf{S}}_0 + \hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$  следует, что:

$$S_{\alpha\beta} = \hat{S}_{0\alpha\beta} + \hat{K}_{\alpha\beta 1} \hat{\varepsilon}_{01} + \hat{K}_{\alpha\beta 2} \hat{\varepsilon}_{02} + \hat{K}_{\alpha\beta 3} \hat{\varepsilon}_{03}, \quad \hat{\varepsilon}_{01} = \hat{\varepsilon}_{02} = -\frac{\varepsilon_{\text{sat}}}{2}, \quad \hat{\varepsilon}_{03} = \varepsilon_{\text{sat}},$$

где  $\varepsilon_{\text{sat}}$  – осевая деформация вдоль направления поляризации в состоянии насыщения. Естественнo считать, что всем  $S_{\alpha\beta} = 0$  будут отвечать  $\hat{K}_{\alpha\beta\gamma} = 0$ ,  $\forall \gamma$ . Так как поворот осей вокруг оси  $Oz$  не влияет на все главные значения, а главные значения деформаций в плоскости  $Oxy$  равны между собой, можно считать, что  $\hat{K}_{\alpha\beta 1} = \hat{K}_{\alpha\beta 2} = 1/\sigma_0$ ,  $\hat{K}_{\alpha\beta 3} = m_{\alpha\beta} \hat{K}_{\alpha\beta 1} = m_{\alpha\beta}/\sigma_0$ , где  $\sigma_0$  – некоторый множитель, размерность которого совпадает с размерностью механического напряжения. Тогда  $S_{\alpha\beta} = \hat{S}_{0\alpha\beta} + \varepsilon_{\text{sat}}(-1 + m_{\alpha\beta})/\sigma_0$ . Отсюда определяем  $m_{\alpha\beta}$ , после чего находим

$$\hat{S}_{\alpha\beta}(\varepsilon_0) = \hat{S}_{0\alpha\beta} + (\hat{\varepsilon}_{01} + \hat{\varepsilon}_{02} + m_{\alpha\beta} \hat{\varepsilon}_{03})/\sigma_0, \quad m_{\alpha\beta} = 1 + \frac{(S_{\alpha\beta} - \hat{S}_{0\alpha\beta})\sigma_0}{\varepsilon_{\text{sat}}}.$$

В этих соотношениях  $\hat{\varepsilon}_{01} + \hat{\varepsilon}_{02} + \hat{\varepsilon}_{03} = 0$ , так как это первый инвариант и выполняются условия несжимаемости. В силу этого неопределенный множитель  $\sigma_0$  уходит, а выражение принимает вид

$$\hat{S}_{\alpha\beta}(\varepsilon_0) = \hat{S}_{0\alpha\beta} + \frac{(S_{\alpha\beta} - \hat{S}_{0\alpha\beta})}{\varepsilon_{\text{sat}}} \hat{\varepsilon}_{03}. \quad (12)$$

Отметим, что сюда входит лишь наибольшее главное значение тензора остаточной деформации, а все компоненты матриц в правой части по (11), (12) полностью известны. Аналогичные рассуждения позволяют найти матрицу  $\mathbf{M}$  и определить изменяющиеся диэлектрические проницаемости:

$$\hat{\varepsilon}_{mn}(\varepsilon_0) = \hat{\varepsilon}_{0mn} + \frac{(\hat{\varepsilon}_{mn} - \hat{\varepsilon}_{0mn})}{\varepsilon_{\text{sat}}} \hat{\varepsilon}_{03}. \quad (13)$$

Остается найти матрицу  $\hat{\mathbf{N}}_1$ , после чего определить пьезоэлектрические модули. С этой целью рассмотрим ту же систему координат и состояние полной поляризации, тогда компоненты матричного равенства  $\hat{\mathbf{d}}_{\text{sat}} = \hat{\mathbf{N}}_1 \cdot \hat{\mathbf{P}}_0$ :

$$d_{m\alpha} = N_{1m\alpha 1} \hat{P}_{01} + N_{1m\alpha 2} \hat{P}_{02} + N_{1m\alpha 3} \hat{P}_{03}, \quad \hat{P}_{01} = \hat{P}_{02} = 0, \quad \hat{P}_{03} = p_{\text{sat}},$$

где  $p_{\text{sat}}$  – поляризация в состоянии насыщения. Опуская схожие рассуждения, можем окончательно записать:

$$\hat{d}_{m\alpha}(P_0) = \frac{\hat{P}_{03}}{p_{\text{sat}}} d_{m\alpha}. \quad (14)$$

Соотношения (12) – (14) полностью определяют физические характеристики материала в необратимом процессе деформирования и поляризации.

Соотношения (12), (13) надо рассматривать в локальной системе координат, оси которой совпадают с главными осями тензора остаточной деформации, когда ось  $Oz$  направлена по третьему главному направлению и направлена по вектору остаточной поляризации.

### 3. Заключение

Необратимые процессы в поликристаллических сегнетоэлектрических средах связаны с внутренней перестройкой структуры материала, что приводит к изменению и механических и электрических свойств материала. Изменяются не только пьезоэлектрические модули, но и упругие податливости и диэлектрические проницаемости. Если моделируется необратимый процесс поляризации и деформирования, то необходимо знать функциональную зависимость этих модулей от изменяющихся остаточных деформаций, равно как и от остаточной поляризации. Очевидно, что физические материальные характеристики должны определяться для представительного объема, включающего в себя множество микроструктурных особенностей в виде кристаллитов и доменов. Для таких объемов можно использовать элементы термодинамики необратимых процессов, что и было сделано в настоящей работе. Основным моментом в таком подходе явилось аддитивное представление диссипативных сил при скоростях остаточных параметров в виде аналитической и неаналитической частей. Именно это позволило конкретизировать аналитические части и построить линейные тензорные соотношения относительно остаточных параметров для физических характеристик материала. С помощью простого анализа проведена конкретизация этих зависимостей: в частности, выяснилось, что упругие податливости и диэлектрические проницаемости зависят от деформаций, в то время как пьезомодули зависят от поляризации, что наглядно продемонстрировано соотношениями (10). Входящие в них тензоры с постоянными компонентами имеют высокие ранги, что оказывает существенное влияние на их определение. Очевидно, что методами термодинамики определить эти коэффициенты не представляется возможным. Поэтому были задействованы данные двух состояний керамики, когда она деполяризована и поляризована до состояния насыщения. И в том и в другом случае физические модули материала известны и их можно найти в справочной литературе для конкретного типа керамики. Реже встречаются данные для деполяризованного состояния. В этом случае предложено находить модули экспериментальным путем. При определении неизвестных величин были сделаны очевидные предположения о нулевых значениях некоторых компонентов тензоров из простых соображений анизотропии. Еще одна порция предположений сделана на основе имеющихся экспериментальных данных об осевой симметрии, несжимаемости и взаимовлияний полей. В итоге были получены соотношения (12) – (14), представляющие собой искомые функциональные зависимости. Входящие в них характеристики материала в деполяризованном состоянии и поляризованном до состояния насыщения материала определяются по (11), (12).

Подводя итоги, можно сказать, что, во-первых, построены определяющие соотношения (5), которые необходимы при моделировании необратимых процессов. Они представляют собой линейные тензорные соотношения, связывающие  $\mathbf{D}_e, \epsilon_e$  с определяющими параметрами  $\mathbf{E}$  и  $\boldsymbol{\sigma}$ . В них входят тензоры физических характеристик  $\mathbf{S}(\epsilon_0), \mathbf{d}(\mathbf{P}_0), \mathbf{z}(\epsilon_0)$ , меняющиеся в процессе эволюции остаточной деформации и поляризации. Интересно отметить, что в определяющих соотношениях линейная зависимость сохраняется при любых значениях и ориентации остаточных параметров  $\epsilon_0, \mathbf{P}_0$ . Во-вторых, исследованы функциональные зависимости физических модулей от остаточных параметров, которые представлены соотношениями (10). Этими соотношениями доказано, что физические характеристики частично поляризованного или деполяризованного тела, равно как и в случае не-

однородной поляризации, зависят линейным образом от остаточной деформации и остаточной поляризации. И наконец, выбраны компоненты постоянных тензоров по известным данным двух состояний материала. Интересно также отметить, что соотношения (14) полностью совпадают с данными работ [5, 9], а соотношения (12), (13) получены впервые.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Белоконь А.В., Скалчих А.С. Математическое моделирование необратимых процессов поляризации. М.: Физматлит, 2010.
2. Huber J.E., Fleck N.A. Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment // J. Mechanics and Physics of Solids. 2001. No. 49. P. 785–811. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00052-1.
3. Kamlah M., Bohle U. Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior // Int. J. Solids and Structures. 2001. No. 38. P. 605–633. DOI: 10.1016/S0020-7683(00)00055-X.
4. McMeeking R.M., Landis C.M. A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics // Int. J. Engineering Science. 2002. No. 40. P. 1553–1577. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00033-2.
5. Landis C.M. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics // J. Mechanics and Physics of Solids. 2002. No. 50. P. 127–152. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00021-7.
6. Haug A., Knoblauch V., McMeeking R.M. Combined isotropic and kinematic hardening in phenomenological switching models for ferroelectric ceramics // Int. J. Engineering Science. 2003. No. 41. P. 867–901. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00320-8.
7. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. Constitutive Law for Ferroelastic and Ferroelectric Piezoceramics // J. Intelligent Material Systems and Structures. 2005. V. 16. P. 221–236. DOI: 10.1177/1045389X05049650.
8. Muller R., Schroder J., Lupascu D.C. Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics // GAMM-Mitt. 31. 2008. No. 2. P. 133–150. DOI: 10.1002/gamm.200890007.
9. Huber J.E., Fleck N.A. Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behaviour // European J. Mechanics A/Solids. 2004. No. 23. P. 203–217. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2003.11.006.
10. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model // Int. J. Solids and Structures. 2005. No. 42. P. 2949–2964. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2004.09.045.
11. Haug A., Onck P.R., Giessen E.V. Development of inter- and intragranular stresses during switching of ferroelectric polycrystals // Int. J. Solids and Structures. 2007. No. 44. P. 2066–2078. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2006.07.024.
12. Pane I., Fleck N.A., Chu D.P., Huber J.E. The influence of mechanical constraint upon the switching of a ferroelectric memory capacitor // European J. Mechanics A/Solids. 2009. No. 28. P. 195–201. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2008.09.002.
13. Jayabal K., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M. Micromechanical modelling of switching phenomena in polycrystalline piezoceramics. Application of a polygonal finite element approach // Computational Mechanics. 2011. V. 48. No. 4. P. 421–435. DOI: 10.1007/s00466-011-0595-4.
14. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. A multiscale model for reversible ferroelectric behavior of polycrystalline ceramics // Mechanics of Materials. 2014. No. 71. P. 85–100. DOI: 10.1016/j.mechmat.2014.01.006.
15. Aleshin V.I., Luchaninov A.G. Modeling of domain processes in piezoceramic materials // Ferroelectrics. 2002. V. 266. P. 111–124. <https://doi.org/10.1080/00150190211447>. DOI: 10.1080/00150190211447.

16. Smith R.C., Ounaies Z. A Domain Wall Model for Hysteresis in Piezoelectric Materials // J. Intelligent Material Systems and Structures. 2000. V. 11. No. 1. P. 62–79. DOI: 10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY.
17. Осипова Н.Г., Семёнов А.С. Моделирование нелинейного поведения пьезокерамики тетрагональной структуры методами конечно-элементной гомогенизации // Научно-технические ведомости СПбГПУ, физико-математические науки. Санкт-Петербург. 2011. № 4(134). С. 56–64.
18. Skaliukh A. About Mathematical Models of Irreversible Polarization Processes of a Ferroelectric and Ferroelastic Polycrystals // Ferroelectrics and Their Applications / Husein Irzaman (ed). IntechOpen. DOI: 10.5772/intechopen.78262. URL: <https://www.intechopen.com/books/ferroelectrics-and-their-applications/about-mathematical-models-of-irreversible-polarization-processes-of-a-ferroelectric-and-ferroelastic>

Статья поступила 10.10.18

Skaliukh A.S. (2019) FUNCTIONAL DEPENDENCE OF THE PHYSICAL CHARACTERISTICS ON IRREVERSIBLE PARAMETERS UNDER ELECTROMECHANICAL ACTION ON THE FERROELECTRIC CERAMICS. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 128–141

DOI 10.17223/19988621/58/11

Keywords: constitutive equations, strain, polarization, ferroelectrics, ferroelastics, induced and residual parameters, irreversible process.

The main purpose of the work is to study the functional dependences of the material physical characteristics on the residual parameters of strain and polarization for irreversible process of polarization and strain. The dissipative forces in the inequality for dissipation are presented as a sum of analytical and non-analytical parts. Expansion of the analytical parts in powers of determining parameters provides the differential equations, which, being integrated, yield the unknown functional dependences. Integration constants represent the physical modules of a depolarized state. The tensor components of expansion in powers are determined by using elastic compliance modules, piezoelectric modules, and dielectric constants of two states: thermally depolarized ceramics and ceramics polarized up to saturation. As a result, the constitutive equations for reversible parameters were obtained as linear tensor equations with material elastic, piezoelectric, and dielectric properties representing tensor functions studied above.

**Financial support.** This study was supported by Russian Foundation for Basic Research (RFBR) under the research project № 17-08-00860-a.

*SKALIUKH Alexander Sergeevich* (Candidate of Physics and Mathematics, Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences named after I.I. Vorovich, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation)

## REFERENCES

1. Belokon' A.V., Skaliukh A.S. (2010) *Matematicheskoe modelirovanie neobratimyykh protsessov polarizatsii* [Mathematical modeling of irreversible processes of polarization]. Moscow: Fizmatlit.
2. Huber J.E., Fleck N.A. (2001) Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 49. pp. 785–811. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00052-1.
3. Kamlah M., Bohle U. (2001) Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior. *International Journal of Solids and Structures*. 38. pp. 605–633. DOI: 10.1016/S0020-7683(00)00055-X.

4. McMeeking R.M., Landis C.M. (2002) A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics. *International Journal of Engineering Science*. 40. pp. 1553–1577. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00033-2.
5. Landis C.M. (2002) Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 50. pp. 127–152. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00021-7.
6. Haug A., Knoblauch V., McMeeking R.M. (2003) Combined isotropic and kinematic hardening in phenomenological switching models for ferroelectric ceramics. *International Journal of Engineering Science*. 41. pp. 887–901. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00320-8.
7. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. (2005) Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 16. pp. 221–236. DOI: 10.1177/1045389X05049650.
8. Muller R., Schroder J., Lupascu D.C. (2008) Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics. *GAMM-Mitteilungen*. 31(2). pp. 133–150. DOI: 10.1002/gamm.200890007.
9. Huber J.E., Fleck N.A. (2004) Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behavior. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 23. pp. 203–217. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2003.11.006.
10. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. (2005) Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model. *International Journal of Solids and Structures*. 42. pp. 2949–2964. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2004.09.045.
11. Haug A., Onck P.R., Giessen E. (2007) Development of inter- and intragranular stresses during switching of ferroelectric polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*. 44. pp. 2066–2078. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2006.07.024.
12. Pane I., Fleck N.A., Chu D.P., Huber J.E. (2009) The influence of mechanical constraint upon the switching of a ferroelectric memory capacitor. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 28. pp. 195–201. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2008.09.002.
13. Jayabal K., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M. (2011) Micromechanical modelling of switching phenomena in polycrystalline piezoceramics. Application of a polygonal finite element approach. *Computational Mechanics*. 48(4). pp. 499–514. DOI: 10.1007/s00466-011-0595-4.
14. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. (2014) A multiscale model for reversible ferroelectric behaviour of polycrystalline ceramics. *Mechanics of Materials*. 71. pp. 85–100. DOI: 10.1016/j.mechmat.2014.01.006.
15. Aleshin V.I., Luchaninov A.G. (2002) Modeling of domain processes in piezoceramic materials. *Ferroelectrics*. 266. pp. 111–124. DOI: 10.1080/00150190211447.
16. Smith R.C., Ounaies Z. (2000) A domain wall model for hysteresis in piezoelectric materials. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 11(1). pp. 62–79. DOI: 10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY.
17. Osipova N.G., Semionov A.S. (2011) Modelirovanie nelineynogo povedeniya p'ezokeramiki tetragonal'noy struktury metodami konechno-elementnoy gomogenizatsii [Simulation of the nonlinear behavior of ferroelectric ceramics with tetragonal structure by finite-element homogenizing]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki – St. Petersburg Polytechnic University Journal - Physics and Mathematics*. 4(134). pp. 56–64.
18. Skaliukh A. (2018) About Mathematical Models of Irreversible Polarization Processes of a Ferroelectric and Ferroelastic Polycrystals. In «Ferroelectrics and Their Applications». IntechOpen. DOI: 10.5772/intechopen.78262. URL: <https://www.intechopen.com/books/ferroelectrics-and-their-applications/about-mathematical-models-of-irreversible-polarization-processes-of-a-ferroelectric-and-ferroelastic>.

Received: October 10, 2018