



Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

A. S. Skaliukh, Modeling the response of polycrystalline ferroelectrics to high-intensity electric and mechanical fields, *Computer Research and Modeling*, 2022, Volume 14, Issue 1, 93–113

DOI: 10.20537/2076-7633-2022-14-1-93-113

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.9.172

February 14, 2025, 08:27:41



УДК: 539.389.4, 537.9, 538.95

## Моделирование отклика поликристаллических сегнетоэлектриков на электрические и механические поля большой интенсивности

А. С. Скалиух

Институт математики, механики и компьютерных наук им. И. И. Воровича Южного федерального университета,  
Россия, 344058, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а

E-mail: a.s.skaliukh@gmail.com

*Получено 19.11.2021, после доработки — 28.12.2021.*

*Принято к публикации 03.01.2022.*

Представлена математическая модель, описывающая необратимые процессы поляризации и деформирования поликристаллических сегнетоэлектриков во внешних электрических и механических полях большой интенсивности, вследствие чего изменяется внутренняя структура и меняются свойства материала. Необратимые явления моделируются в трехмерной постановке для случая одновременного воздействия электрического поля и механических напряжений. Объектом исследования является представительный объем, в котором исследуются остаточные явления в виде возникающих индуцированных и необратимых частей вектора поляризации и тензора деформации. Основной задачей моделирования является построение определяющих соотношений, связывающих между собой вектор поляризации и тензор деформации, с одной стороны, и вектор электрического поля и тензор механических напряжений, с другой стороны. Рассмотрен общий случай, когда направление электрического поля может не совпадать ни с одним из главных направлений тензора механических напряжений. Для обратимых составляющих определяющие соотношения построены в виде линейных тензорных уравнений, в которых упругие и диэлектрические модули зависят от остаточной деформации, а пьезоэлектрические модули — от остаточной поляризации. Определяющие соотношения для необратимых частей строятся в несколько этапов. Вначале построена вспомогательная модель идеального или безгистерезисного случая, когда все векторы спонтанной поляризации могут поворачиваться в поле внешних сил без взаимного влияния друг на друга. Предложен способ подсчета результирующих значений предельно возможных значений поляризации и деформации идеального случая в виде поверхностных интегралов по единичной сфере с плотностью распределения, полученной из статистического закона Больцмана. Далее сделаны оценки энергетических затрат, необходимых для слома механизмов закрепления доменов, и подсчитана работа внешних полей в реальном и идеальном случаях. На основании этого выведен энергетический баланс и получены определяющие соотношения для необратимых составляющих в виде уравнений в дифференциалах. Разработана схема численного решения этих уравнений для определения текущих значений необратимых искоемых характеристик в заданных электрических и механических полях. Для циклических нагрузок построены диэлектрические, деформационные и пьезоэлектрические гистерезисные кривые.

Разработанная модель может быть имплантирована в конечно-элементный комплекс для расчета неоднородных остаточных полей поляризации и деформирования с последующим определением физических модулей неоднородно поляризованной керамики как локально анизотропного тела.

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, домены, кристаллиты, электрическое поле, механические напряжения, спонтанная и остаточная поляризация, деформация, гистерезис, физические характеристики

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-19-00423).

UDC: 539.389.4, 537.9, 538.95

## Modeling the response of polycrystalline ferroelectrics to high-intensity electric and mechanical fields

A. S. Skaliukh

Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Science named after I. I. Vorovich Southern Federal University,  
8a, Milchakova st., Rostov-on-Don, 344058, Russia

E-mail: a.s.skaliukh@gmail.com

*Received 19.11.2021, after completion – 28.12.2021.  
Accepted for publication 03.01.2022.*

A mathematical model describing the irreversible processes of polarization and deformation of polycrystalline ferroelectrics in external electric and mechanical fields of high intensity is presented, as a result of which the internal structure changes and the properties of the material change. Irreversible phenomena are modeled in a three-dimensional setting for the case of simultaneous action of an electric field and mechanical stresses. The object of the research is a representative volume in which the residual phenomena in the form of the induced and irreversible parts of the polarization vector and the strain tensor are investigated. The main task of modeling is to construct constitutive relations connecting the polarization vector and strain tensor, on the one hand, and the electric field vector and mechanical stress tensor, on the other hand. A general case is considered when the direction of the electric field may not coincide with any of the main directions of the tensor of mechanical stresses. For reversible components, the constitutive relations are constructed in the form of linear tensor equations, in which the modules of elasticity and dielectric permeability depend on the residual strain, and the piezoelectric modules depend on the residual polarization. The constitutive relations for irreversible parts are constructed in several stages. First, an auxiliary model was constructed for the ideal or unhysteretic case, when all vectors of spontaneous polarization can rotate in the fields of external forces without mutual influence on each other. A numerical method is proposed for calculating the resulting values of the maximum possible polarization and deformation values of an ideal case in the form of surface integrals over the unit sphere with the distribution density obtained from the statistical Boltzmann law. After that the estimates of the energy costs required for breaking down the mechanisms holding the domain walls are made, and the work of external fields in real and ideal cases is calculated. On the basis of this, the energy balance was derived and the constitutive relations for irreversible components in the form of equations in differentials were obtained. A scheme for the numerical solution of these equations has been developed to determine the current values of the irreversible required characteristics in the given electrical and mechanical fields. For cyclic loads, dielectric, deformation and piezoelectric hysteresis curves are plotted.

The developed model can be implanted into a finite element complex for calculating inhomogeneous residual polarization and deformation fields with subsequent determination of the physical modules of inhomogeneously polarized ceramics as a locally anisotropic body.

**Keywords:** ferroelectrics, domains, crystallites, electric field, mechanical stresses, spontaneous and residual polarization, strain, hysteresis, physical characteristics

*Citation:* *Computer Research and Modeling*, 2022, vol. 14, no. 1, pp. 93–113 (Russian).

This work was done with the financial support of the Russian Science Foundation (project No. 21-19-00423).

## 1. Введение

В нелинейных моделях, описывающих необратимые процессы, искомые параметры подразделяют на обратимые и необратимые. Так, в пластических средах напряжения вызывают упругие и пластические деформации, в ферромагнетиках магнитное поле приводит к индуцированной и остаточной намагниченности, в сегнетоэлектриках электрическое поле порождает индуцированную и остаточную поляризацию. Одной из основных задач является моделирование взаимосвязи между этими и определяющими параметрами, характеризующими внешние нагрузки. Интересно отметить, что разрабатываемые математические модели одних явлений с определенными изменениями и дополнениями применяются для других и зачастую разрабатываются одними и теми же авторами. Операторные соотношения между искомыми и определяющими параметрами описывают отклик материала на внешние воздействия и носят название определяющих уравнений. В случае циклических процессов такой отклик описывается гистерезисными зависимостями. Основной целью настоящего исследования является построение математической модели процесса поляризации и деформирования поликристаллических сегнетоэлектриков или керамики.

Пьезоэлектрические свойства у керамики появляются на стадии обязательного процесса поляризации сильным электрическим полем. Этот необратимый процесс изменяет структуру материала: появляются остаточная поляризация и остаточная деформация. Но и механические напряжения большой интенсивности могут изменить структуру материала. Поэтому моделирование процессов поляризации и деформирования поликристаллических сегнетоэлектриков представляет собой важную прикладную задачу, особенно в свете микроминиатюризации керамических элементов, где малые электрические потенциалы и малые механические силы могут приводить к огромным электрическим полям и механическим напряжениям. Моделирование необратимых процессов в керамических структурах имеет свои особенности в отличие от механических задач пластичности и электростатических задач поляризации диэлектриков. Дело в том, что здесь приходится рассматривать комбинированные электромеханические нагрузки и контролировать соответствующие отклики материала, к которым относятся остаточная поляризация и остаточная деформация. А так как процессы поляризации электрическим полем и деполяризации механическими напряжениями являются необратимыми процессами, то они играют важную роль как в первоначальном, так и в текущем состояниях, формируя структуру материала. После процесса поляризации рабочие элементы поляризованной керамики используются в преобразователях, в условиях, где электрические и механические поля имеют малую интенсивность и внутренняя структура керамических элементов не изменяется. Если же в процессе работы неожиданно возникнут запредельно большие электрические или механические нагрузки, то они неизменно приведут к деполяризации или реполяризации, что, как правило, приводит к потере преобразователем его уникальных пьезоэлектрических свойств.

Математическое моделирование необратимых процессов деформирования и поляризации в основном осуществляется для случая квазистатических процессов и проводится на основе общих законов механики сплошных сред [Можен, 1991]. Основными уравнениями являются: полевые уравнения равновесия и статики диэлектриков; геометрические соотношения связи тензора деформаций с вектором перемещения и электрического поля с электрическим потенциалом; определяющие соотношения в виде линейных тензорных соотношений для обратимых переменных и в виде дифференциальных или интегральных операторов гистерезисного типа для необратимых переменных. Вывод определяющих соотношений связан с учетом многих факторов и опирается, с одной стороны, на физику явления путем учета внутренней структуры и, с другой стороны, на согласование с экспериментальными данными. К настоящему времени накоплен определенный опыт моделирования и предложено достаточно много подходов исследования.

Анализ работ показывает, что можно выделить три-четыре основных направлений исследования, принципиально отличающихся друг от друга. Это, во-первых, феноменологические методы [Huber, Fleck, 2001; Kamlah, Bohle, 2001; McMeeking, Landis, 2002; Haug et al., 2003; Elhadrouz et al., 2005; Muller et al., 2008] типа методов пластичности. В них для представительного объема вводятся обратимые и необратимые параметры поляризации и деформации, строится поверхность нагружения (поляризации), и на основе ассоциированного закона получают выражения для скоростей или приращений необратимых параметров. Во-вторых, это методы двухуровневой сплошной среды [Huber, Fleck, 2003; Kamlah et al., 2005; Haug et al., 2007; Pane et al., 2008; Jayabal et al., 2011; Daniel et al., 2014; Семенов и др., 2011; Осипова, Семёнов, 2011; Семенов, 2019], опирающиеся на методы микромеханических переключений. В них представительный объем является объединением конечного множества подобластей, в каждой из которых вводятся вектор и тензор спонтанной поляризации и деформации. В интенсивных нагружающих полях эти векторы и тензоры поворачиваются, или, как говорят, переключаются к новым осям. При моделировании этого процесса переключения вводятся определенные критерии или энергетические законы и определяются эти новые направления, согласованные с кристаллографическим строением сегнетоэлектрика. После этого осуществляют процесс осреднения по всем подобластям, составляющим представительный объем, и получают остаточные значения поляризации и деформации. Разнообразие подходов этого направления связано с представлением микроструктуры материала и формулировкой критериев переключения доменов. В-третьих, это методы усреднения на основе включений в однородную среду [Marutake, 1956; Алешин, Лучанинов, 2001; Aleshin, Luchaninov, 2002; Dunn, 1995]. Более подробный анализ работ по необратимым процессам поляризации можно найти в [Skaliukh, 2019].

В основе предлагаемого исследования лежат идеи работы [Jiles, Atherton, 1986], в которой рассматривается простейшая одномерная модель процесса намагничивания ферромагнитных материалов. Авторы использовали метод ориентационного осреднения векторов спонтанной намагниченности представительного объема, предложенный ранее И. Е. Таммом и изложенный в книге [Тамм, 2003]. В дополнение к этому они рассмотрели энергетические затраты, связанные с разрушением механизмов закрепления стенок доменов и оценили работу внешнего поля в процессе намагничивания в реальном и идеальном случае. Из полученного энергетического баланса вывели одно дифференциальное уравнение, описывающее остаточную намагниченность. Заметим, что все исследования проводились в одномерном случае. Спустя почти полтора десятилетия эти идеи были использованы для процессов поляризации поликристаллических сегнетоэлектриков, что отражено в работах [Smith, Hom, 1999; Smith, Ounaies, 2000]. И здесь все исследования проводились в одномерном случае. Кроме того, при определении обратимой составляющей поляризации авторы привели совершенно необоснованную оценку, никак не связанную с экспериментальными данными. Кроме того, в этих работах рассматривался процесс поляризации только электрическим полем. И хотя при определенном наборе параметров большие петли диэлектрического гистерезиса отлично совпадали с экспериментальными данными, дальнейшего развития эта модель не получила. Это обстоятельство вызвало определенный интерес, и нами была принята попытка изучить досконально эту модель с позиции трех измерений и одновременного воздействия электрических и механических полей. Выяснилось, что для того, чтобы эту модель можно было применять в трехмерном случае, ее надо основательно переделать и дополнить. С этой целью провели исследования для индуцированных составляющих вектора поляризации и тензора деформации и установили функциональную зависимость физических модулей от остаточных параметров, чего ранее в литературе не было представлено. Были полностью переделаны на трехмерный случай методы ориентационного осреднения, причем с учетом одновременного воздействия и электрических и механических полей, с обоснованием применения статистики Больцмана применительно к сегнетокерамикам. Полностью пересмотрены отмеченные выше

энергетические оценки и потери, поскольку совместное воздействие механических и электрических полей привело к перекрестным членам и сильно усложнило анализ. Еще одна главная особенность наших исследований заключается в том, внешние поля исследованы в самом общем случае, включая и тот, когда ни одно из направлений главных осей тензора напряжений не совпадает с направлением вектора электрического поля. И хотя общие этапы исследования остались такими же, как и в модели Джилса – Атертона, вывод энергетического балансного соотношения наполнился новым содержанием. А полученные уравнения в дифференциалах потребовали применения других численных методов. Результатом работы модели явились не только диэлектрические, но и деформационные и пьезоэлектрические петли гистерезиса. В результате предлагаемая математическая модель позволяет рассчитывать остаточные поля предварительной поляризации и деформации; определять физические характеристики неоднородно поляризованной или деформированной керамики как локально анизотропного тела; определять физические характеристики, в том числе и при частичной поляризации по текущим значениям остаточных полей и известных данных термически деполяризованной и поляризованной до состояния насыщения керамики; определять диэлектрические и деформационные петли гистерезиса для любого вида механической и электрической нагрузки. Настройка модели под конкретный вид материала керамики осуществляется подбором параметров модели путем сравнения экспериментальных и расчетных гистерезисных кривых в равномерной метрике. По физической сути предлагаемая модель является конкурентной моделям [Daniel et al., 2014; Семенов и др., 2010, 2011; Осипова, Семёнов, 2011; Семенов, 2019; Huber et al., 1999; Semenov et al., 2010; Kaliappan et al., 2011], в которых также используются элементы внутренней структуры. Но по нашему убеждению, наша модель является более приспособленной для включения ее в конечно-элементные программы, так как позволяет сохранять меньшие объемы информации о необратимых параметрах.

## 2. Основные положения

Сегнетоэлектрическая керамика состоит из огромного числа кристаллитов с размерами порядка  $10^{-6}$ – $10^{-5}$  м. На линейном размере кристаллита умещается в среднем от одного до сотни доменов, каждый из которых способен содержать сотни и более атомных ячеек. Количество атомных ячеек как в мелкозернистой, так и в крупнозернистой керамике по линейному размеру кристаллита составляет порядка  $10^4$ . В каждой атомной ячейке в низкотемпературной сегнетоэлектрической фазе центр положительных и центр отрицательных зарядов не совпадают, что характеризуется вектором спонтанной поляризации  $\mathbf{p}_s$  и тензором спонтанной деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ , одна из главных осей которого совпадает с направлением вектора  $\mathbf{p}_s$ . Будем для определенности рассматривать сегнетоэлектрики типа перовскита, типичным представителем которых является титанат бария.

Пусть  $\Omega_0$  — объем конечного тела. Наравне с  $\Omega_0$  будет использоваться  $\forall \Omega \subseteq \Omega_0$ . В качестве представительного объема или частицы макроуровня принимается объем  $\Omega_* = d\Omega$ , содержащий огромное количество кристаллитов, но характерный размер которого значительно меньше характерного размера конечного тела. Согласно положениям двухуровневой механики сплошных сред каждую материальную частицу макроконтинуума будем рассматривать как континуум первого уровня  $U_1$ . Структура такой частицы представляет собой микроконтинуум, или континуум второго уровня  $U_2$ , в котором в качестве частицы можно взять элементарную ячейку с объемом  $\omega_* = d\Omega_*$ . Иногда вместо ячейки выбирают домен, что в данном случае не принципиально. Для наглядности на рис. 1 показан представительный объем, в котором каждый кристаллит представлен 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 колли-

неарный ему единичный вектор. Тогда деполяризованное состояние характеризуется равномерным распределением таких векторов на единичной сфере, показанным на том же рисунке.

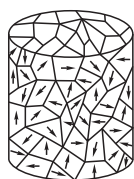


Рис. 1. Деполяризованное состояние

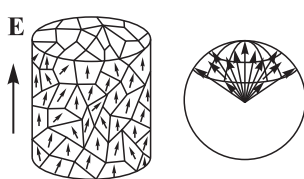


Рис. 2. Поляризация электрическим полем

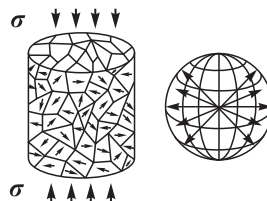


Рис. 3. Деполяризация сжимающим напряжением

Если приложить интенсивное электрическое поле, то векторы спонтанной поляризации поворачиваются наиболее близко к направлению поля, располагаясь в некотором конусе, согласовываясь с направлением кристаллографических осей кристаллов сегнетоэлектрика, как показано на рис. 2. Именно из-за фиксированного положения кристаллографических осей проявляются отличительные особенности сегнетоэлектриков от ферромагнетиков, у которых векторы спонтанной намагниченности могут поворачиваться в направлении магнитного поля на любой угол. Если же приложить интенсивное сжимающее механическое напряжение, то векторы спонтанной поляризации также повернутся, но теперь в направлении, перпендикулярном оси сжатия, и расположатся в торе с треугольным сечением (одна из сторон — дуга окружности), показанном на рис. 3. Появление спонтанной поляризации неизменно связано со спонтанной деформацией в каждой ячейке, но на рисунках, в силу громоздкости, эти деформации не показаны. После снятия нагрузок векторы спонтанной поляризации и тензоры спонтанной деформации остаются в достигнутом текущем положении и в начальное состояние не возвращаются. Именно это обстоятельство меняет структуру материала и проявляется в появлении результирующих значений остаточной поляризации и остаточной деформации представительного объема.

Спонтанные характеристики появляются на этапе изготовления керамики в процессе остывания, при переходе из высокотемпературной фазы в низкотемпературную. В частице уровня  $U_2$  для описания векторов спонтанной поляризации  $\mathbf{p}_s$  и спонтанной деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}_s$  можно ввести локальную систему координат  $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ , направив единичный вектор  $\mathbf{e}_3$  вдоль вектора спонтанной поляризации. Считается, что спонтанная деформация с большой степенью точности удовлетворяет условию несжимаемости. Например, в [Chen, 1983] отмечается, что остаточные деформации приводят к относительному изменению объема всего лишь на  $+1,35 \cdot 10^{-20} \%$ . Это позволяет представить в локальных осях вектор  $\mathbf{p}_s$  и тензор  $\boldsymbol{\varepsilon}_s$  в виде

$$\mathbf{p}_s = p_s \mathbf{e}_3, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_s = \frac{\varepsilon_s}{2} (-\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + 2\mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3). \quad (1)$$

Чтобы получить остаточную поляризацию и остаточную деформацию представительного объема, или в частице континуума первого уровня  $U_1$ , необходимо усреднить все спонтанные характеристики (1) этого объема  $\Omega_*$ . Пронумеровав все векторы и тензоры спонтанной поляризации и деформации, определим вектор остаточной поляризации и тензор остаточной деформации путем операции осреднения:

$$\mathbf{P}_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{p}_s)_k, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\boldsymbol{\varepsilon}_s)_k. \quad (2)$$

Далее будут рассматриваться изотермические процессы, при которых все переключения доменов осуществляются только внешними электрическими ( $\mathbf{E}$ ) и механическими ( $\boldsymbol{\sigma}$ ) полями.

Считается также, что эти поля неизменны во всех частицах континуума второго уровня  $U_2$  и, следовательно, являются определяющими параметрами для частицы континуума первого уровня  $U_1$ . Под их воздействием деформируются доменные стенки и могут переключаться направления спонтанных векторов. Деформирование доменных стенок имеет результирующий эффект в виде обратимых (упругих) составляющих вектора поляризации и тензора деформации  $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$  в частице континуума  $U_1$ , которые исчезают при исчезновении нагрузок. Переключение спонтанных векторов и связанные с ними изменения направлений главных осей тензоров спонтанной деформации имеют результирующий эффект в появлении в частице континуума  $U_1$  необратимых параметров  $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$ . В связи с этим вектор результирующей поляризации и тензор результирующей деформации в необратимых процессах складываются из необратимых и обратимых составляющих:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_0, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_0. \quad (3)$$

Наша задача состоит в их нахождении по заданным значениям определяющих параметров, следовательно, относя, таким образом,  $\mathbf{P}, \boldsymbol{\varepsilon}$  к искомым параметрам. Заметим, что обратимые части с термодинамической точки зрения являются параметрами состояния, поэтому связаны с внутренней энергией и находятся с ее помощью. Необратимые части являются параметрами процесса, и для их определения приходится использовать дополнительные соотношения, наступающие в процессе достижения нагрузками пороговых значений.

### 3. Определяющие соотношения для обратимых составляющих

Определяющие соотношения для обратимых составляющих и вывод функциональной зависимости физических модулей, как функций остаточных параметров, подробно описаны в [Скалиух, 2019]. Здесь приводятся только основные положения, необходимые в дальнейшем. Отличительной особенностью процесса поляризации поликристаллов сегнетоэлектриков от теории пластичности металлов является то, что здесь физические модули изменяются с появлением остаточных параметров. Изменение микроструктуры приводит к фазовому переходу «твердое тело – твердое тело» на уровне представительного объема. Материал из изотропного становится анизотропным, при этом не только изменяются упругие и диэлектрические модули, но и появляются пьезоэлектрические свойства со своими пьезоэлектрическими модулями.

Вместо обратимой составляющей поляризации  $\mathbf{P}_e$  удобно рассматривать обратимую часть электрической индукции  $\mathbf{D}_e = \mathbf{P}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_* \mathbf{E}$ . Проведя стандартные действия с функцией внутренней энергии  $u(\boldsymbol{\varepsilon}_e, \mathbf{D}_e, s)$  для изотермического процесса, получаем определяющие соотношения для обратимых частей в виде линейных тензорных соотношений, что подтверждается и другими исследователями [Landis, 2002]:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_e &= \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \mathbf{S}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{d}^T(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) \cdot \mathbf{E}, \\ \mathbf{D}_e &= \mathbf{D} - \mathbf{P}_0 = \mathbf{d}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) \cdot \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (4)$$

Анализ функциональной зависимости тензоров упругих податливостей, пьезомодулей и диэлектрических постоянных проведен в работе [Скалиух, 2019], где было показано, что упругие податливости и диэлектрические постоянные зависят только от остаточной деформации, а пьезомодули – только от остаточной поляризации, и справедливы следующие линейные зависимости:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\boldsymbol{\varepsilon}_0) &= \mathbf{S}_0 + \mathbf{K} : \boldsymbol{\varepsilon}_0, \\ \mathbf{d}(\mathbf{P}_0) &= \mathbf{N}_1 \cdot \mathbf{P}_0, \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}_0) &= \boldsymbol{\varepsilon}_0 + \mathbf{M} : \boldsymbol{\varepsilon}_0. \end{aligned} \quad (5)$$

Тензоры  $\mathbf{S}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$  фактически представляют собой упругие податливости и диэлектрические проницаемости термически деполяризованной керамики  $\mathbf{S}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$ , т. е. начального состояния керамики,



и должны быть определены до начала процесса поляризации. Определить компоненты тензоров  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{N}_1$ ,  $\mathbf{M}$  методами термодинамики уже невозможно; здесь, как и при определении физических характеристик материала необходимы экспериментальные методы. Эти тензоры, будучи связанными с физическими модулями, должны обладать такими же свойствами симметрии, как и тензоры физических модулей  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{d}$ ,  $\varepsilon$ , и, кроме того,  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{M}$  должны быть симметричными по последней паре индексов. Это обстоятельство позволяет вместо тензорного представления воспользоваться матричным представлением Фойхта, для чего в декартовой системе координат вводятся векторы

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

Тензорам  $\mathbf{K}$  (шестого ранга),  $\mathbf{N}_1$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{S}_0$  (четвертого ранга),  $\mathbf{d}$  (третьего ранга) и  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_0$  (второго ранга) ставятся в соответствие матрицы  $\widehat{\mathbf{K}}$ ,  $\widehat{\mathbf{N}}_1$ ,  $\widehat{\mathbf{M}}$ ,  $\widehat{\mathbf{S}}$ ,  $\widehat{\mathbf{S}}_0$ ,  $\widehat{\mathbf{d}}$ ,  $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ ,  $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$  по следующему правилу:

$$\begin{aligned} K_{(mn)(ks)(pt)} &\Rightarrow \widehat{K}_{\alpha\beta\gamma}, & N_{1m(nk)s} &\Rightarrow \widehat{N}_{1m\alpha s}, & M_{mn(ks)} &\Rightarrow \widehat{M}_{mna}, & S_{(mn)(ks)} &\Rightarrow \widehat{S}_{\alpha\beta}, \\ S_{(mn)(ks)} &\Rightarrow \widehat{S}_{0\alpha\beta}, & d_{m(nk)} &\Rightarrow \widehat{d}_{m\alpha}, & \varepsilon_{mn} &\Rightarrow \widehat{\varepsilon}_{mn}, & \varepsilon_{mn} &\Rightarrow \widehat{\varepsilon}_{0mn}, \end{aligned}$$

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

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

Для определения компонент матриц  $\widehat{\mathbf{S}}_0$ ,  $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$ , характеризующих изотропное тело (термически деполяризованная керамика), достаточно провести два упругих эксперимента и один электрический. Среди упругих наиболее простыми являются статические эксперименты по определению модуля Юнга  $E$  и коэффициента Пуассона  $\nu$ , а среди электрических испытаний — эксперимент по определению диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_0$  пластинки. Далее, компоненты матриц  $\widehat{\mathbf{S}}_0$ ,  $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$  находятся по известным формулам:

$$\begin{aligned} \widehat{S}_{011} = \widehat{S}_{011} = \widehat{S}_{011} &= \frac{1}{E}, & \widehat{S}_{012} = \widehat{S}_{013} = \widehat{S}_{023} &= -\frac{\nu}{E}, \\ \widehat{S}_{044} = \widehat{S}_{055} = \widehat{S}_{066} &= \frac{2(1 + \nu)}{E}, & \widehat{\varepsilon}_{011} = \widehat{\varepsilon}_{011} = \widehat{\varepsilon}_{011} &= \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (6)$$

Для определения остальных матриц используются известные значения упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей поляризованной до насыщения керамики рассматриваемого типа  $\widehat{\mathbf{S}}_{sat}$ ,  $\widehat{\mathbf{d}}_{sat}$ ,  $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{sat}$ , которые берутся из справочников. 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:

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

$$\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{sat} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}.$$

Одна из главных осей тензора деформации совпадает с осью  $Oz$ , а две другие лежат в плоскости  $Oxy$ . Поэтому компоненты матриц  $\widehat{\mathbf{K}}$ ,  $\widehat{\mathbf{N}}_1$ ,  $\widehat{\mathbf{M}}$  будут определяться в этих осях. Оставляя

в стороне подробный анализ, данный в [Скалиух, 2019], приведем окончательный вид выражений для компонент матриц физических модулей.

Матрица упругих податливостей:

$$\widehat{S}_{\alpha\beta}(\varepsilon_0) = \widehat{S}_{0\alpha\beta} + \frac{\widehat{S}_{\alpha\beta} - \widehat{S}_{0\alpha\beta}}{\varepsilon_{sat}} \widehat{\varepsilon}_{03}. \quad (7)$$

Матрица диэлектрических проницаемостей:

$$\widehat{\varepsilon}_{mn}(\varepsilon_0) = \widehat{\varepsilon}_{0mn} + \frac{\widehat{\varepsilon}_{mn} - \widehat{\varepsilon}_{0mn}}{\varepsilon_{sat}} \widehat{\varepsilon}_{03}. \quad (8)$$

Матрица диэлектрических модулей:

$$\widehat{d}_{m\alpha}(P_0) = \frac{\widehat{P}_{03}}{P_{sat}} d_{m\alpha}. \quad (9)$$

Анизотропия неоднородно деформируемого тела в данном случае соответствует классу трансверсально-изотропного тела. Поэтому из трех главных значений остаточного тензора деформаций два будут равны друг другу. Поэтому в (7), (8)  $\widehat{\varepsilon}_{03}$  представляет собой отличное от двух равных главных значений тензора остаточной деформации. А  $\widehat{P}_{03}$  представляет собой модуль вектора остаточной поляризации. Кроме этого, в предыдущих формулах  $P_{sat}$ ,  $\varepsilon_{sat}$  — поляризация и деформация насыщения.

Соотношения (5)–(9) полностью определяют физические характеристики материала в необратимом процессе деформирования и поляризации. Они представлены в локальной системе координат, оси которой совпадают с главными осями тензора остаточной деформации, когда ось  $Oz$  направлена по третьему главному направлению, совпадающему с направлением вектора остаточной поляризации.

#### 4. Определяющие соотношения для необратимых составляющих

Представленный здесь вывод определяющих соотношений для необратимых параметров состоит из нескольких вспомогательных исследований. Он включает в себя, во-первых, вывод формул для определения предельно возможных поляризации и деформации представительного объема; во-вторых, подсчет энергетических затрат, необходимых для слома механизмов закрепления стенок доменов в произвольном объеме  $\Omega$ ; в-третьих, оценку работы электрического поля и механических напряжений в реальном и идеальном процессе поляризации и деформирования в том же  $\Omega$ . На основании этих вычислений формулируется энергетический баланс, приводящий к искомому уравнению.

##### 4.1. Предельная деформация и поляризация

В книге [Тамм, 2003] дан оригинальный способ определения остаточной намагниченности в поликристаллических средах путем осреднения по направлениям спонтанных векторов намагниченности и отмечалось, что его можно с успехом использовать при подсчете поляризации поликристаллических сегнетоэлектриков. В [Jiles, Atherton, 1986] этот прием был применен при построении одномерной модели намагниченности Джилса–Атертона, которая позже была использована для описания процессов поляризации поликристаллических сегнетоэлектриков электрическим полем в одномерном случае [Smith, Hom, 1999; Smith, Ounaies, 2000]. Воспользуемся этим приемом, обобщим его для случая произвольного направления вектора электрического поля и расширим на случай одновременного воздействия электрического поля и механических

напряжений. В основе модели [Jiles, Atherton, 1986] лежит оценка предельно возможной поляризации при безгистерезисном переключения доменов, подобно тому, как это происходит в полярных жидкостях в электрическом поле. Будем называть этот случай предельным или идеальным и построим функции, определяющие предельно возможные поляризацию и деформацию при данном значении вектора электрического поля и тензора механических напряжений. Учитывая огромное число элементарных ячеек в представительном объеме  $\Omega$ , будем проводить вычисления для непрерывного континуального распределения спонтанных векторов поляризации и тензоров деформации в этом объеме. Отсчетной конфигурацией будем называть состояние, в котором частица континуума  $U_1$  имеет хаотически ориентированные сегнетоэлектрические векторы спонтанной поляризации, а состояние — начальным или неполяризованным с нулевой поляризацией и деформацией. Определим предельно возможные значения  $\mathbf{P}_\infty$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_\infty$  при переходе из начального состояния  $\{\mathbf{E} = 0, \boldsymbol{\sigma} = 0\}$  в текущее  $\{\mathbf{E}, \boldsymbol{\sigma}\}$  при условии, что на повороты векторов спонтанной поляризации не влияют ни условия закрепления стенок доменов, ни кристаллографическое строение. С этой целью выберем некоторую точку приведения, примем ее за начало глобальной системы  $Oxuz$  и поставим в соответствие каждому вектору спонтанной поляризации коллинеарный ему единичный вектор с началом в выбранной точке. Такой подход позволяет вместо операции осреднения (2) по частицам континуума уровня  $U_2$  проводить осреднение по сферическим координатам этих частиц  $(\varphi, \psi)$ , с заменой операции суммирования на операцию интегрирования, и получать значения компонент  $\mathbf{P}_\infty$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_\infty$  в глобальной системе координат. Геометрическая связь между предельной деформацией и предельной поляризацией, заложенная в (1), обязательно проявится и в окончательных выражениях  $\mathbf{P}_\infty$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_\infty$ .

Согласно теории Вейсса на процесс переключения спонтанных векторов поляризации в частице континуума уровня  $U_2$  оказывает влияние не истинное, а «эффективное» электрическое поле  $\mathbf{E}^{ef} = \mathbf{E} + \alpha \mathbf{P}_0$ . По аналогии с электрическим вводится эффективное механическое напряжение  $\boldsymbol{\sigma}^{ef} = \boldsymbol{\sigma} + \beta \boldsymbol{\varepsilon}_0$ . Смысл добавочного слагаемого состоит в появлении добавочного напряжения вследствие появления остаточной деформации в представительном объеме. Внутри представительного объема поля  $\mathbf{E}^{ef}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}^{ef}$  являются консервативными.

Согласно теореме Больцмана в консервативных полях  $\mathbf{E}^{ef}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}^{ef}$  распределение осей диполей в частице отличается от их распределения в отсутствие этого поля на величину  $e^{-\frac{U}{kT}}$ , где  $U = (-\mathbf{E}^{ef} \cdot \mathbf{p}_s - \boldsymbol{\sigma}^{ef} : \boldsymbol{\varepsilon}_s) \omega_*$  — потенциальная энергия спонтанной поляризации и деформации в сплошной среде представительного объема,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура. Опуская промежуточные выкладки деталей осреднения, получаем предельные значения поляризации и деформации в виде поверхностных интегралов:

$$\mathbf{P}_\infty = p_s \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{\frac{\mathbf{E}^{ef} \cdot \mathbf{p}_s / p_s}{a} + \frac{\boldsymbol{\sigma}^{ef} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s}{b}} \frac{\mathbf{p}_s}{p_s} \sin \psi d\psi}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{\frac{\mathbf{E}^{ef} \cdot \mathbf{p}_s / p_s}{a} + \frac{\boldsymbol{\sigma}^{ef} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s}{b}} \sin \psi d\psi},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\infty = \varepsilon_s \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{\frac{\mathbf{E}^{ef} \cdot \mathbf{p}_s / p_s}{a} + \frac{\boldsymbol{\sigma}^{ef} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s}{b}} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_s}{\varepsilon_s} \sin \psi d\psi}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{\frac{\mathbf{E}^{ef} \cdot \mathbf{p}_s / p_s}{a} + \frac{\boldsymbol{\sigma}^{ef} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s}{b}} \sin \psi d\psi},$$

где

$$a = \frac{kT}{\omega_* p_s}, \quad b = \frac{kT}{\omega_* \varepsilon_s}. \quad (11)$$

Вычисление интегралов (10) проводится численно по квадратурным формулам Гаусса. При этом подынтегральные функции необходимо преобразовать к глобальным координатам. Например,

вектор эффективного поля и тензор механических напряжений задаются в основной системе координат:

$$\mathbf{E}^{ef} = (E_m + \alpha P_{0m})\mathbf{i}_m, \quad \sigma^{ef} = (\sigma_{mn} + \beta \varepsilon_{0mn})\mathbf{i}_m\mathbf{i}_n, \quad m, n = 1, 2, 3.$$

Компоненты  $E_m, \sigma_{mn}$  являются функциями времени и могут изменяться произвольным образом, но так, чтобы обеспечивалось условие квазистатики. А для представления спонтанных величин  $\mathbf{p}_s, \varepsilon_s$  используются выражения (1) с формулами перехода к осям глобальной системы:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= -\sin \varphi \mathbf{i}_1 + \cos \varphi \mathbf{i}_2, \\ \mathbf{e}_2 &= -\cos \psi \cos \varphi \mathbf{i}_1 - \cos \psi \sin \varphi \mathbf{i}_2 + \sin \psi \mathbf{i}_3, \\ \mathbf{e}_3 &= \sin \psi \cos \varphi \mathbf{i}_1 + \sin \psi \sin \varphi \mathbf{i}_2 + \cos \psi \mathbf{i}_3. \end{aligned}$$

С математической точки зрения формулы (10) представляют собой отображение множества  $\cup\{\mathbf{p}_s, \varepsilon_s \in \omega_*\}$  на  $\{\mathbf{P}_\infty, \varepsilon_\infty \in \Omega_*\}$  при заданных эффективных полях  $\mathbf{E}^{ef}, \sigma^{ef}$ . То есть позволяют определять предельные значения поляризации и деформации представительного объема в текущем состоянии. Другими словами, они позволяют находить значения  $\mathbf{P}_\infty, \varepsilon_\infty$  при переходе от начального к текущему состоянию, не учитывая всю предысторию нагружения. В силу этого  $\mathbf{P}_\infty, \varepsilon_\infty$  являются однозначными функциями нагружающих полей  $\mathbf{E}^{ef}, \sigma^{ef}$ .

#### 4.2. Оценка энергии, необходимой для слома механизмов запираия доменов

Поля  $\mathbf{E}, \sigma$  деформирует доменные стенки, а для значений больше коэрцитивных разрушают механизмы их закрепления и переключают домены. Оценим энергию этих полей, необходимую для разрушения механизмов закрепления доменных стенок. Вначале рассмотрим отдельную частицу уровня  $U_2$ , для которой приходится рассматривать эффективные поля. Пусть для некоторого равновесного состояния нагрузки  $\mathbf{E}^{ef}, \sigma^{ef}$  получают приращения  $d\mathbf{E}^{ef}, d\sigma^{ef}$ , а элементарная ячейка  $\omega_*$  со спонтанными значениями  $\mathbf{p}'_s, \varepsilon'_s$  и энергией  $U'\omega_*$  переключается к новому состоянию с  $\mathbf{p}_s, \varepsilon_s$  и энергией  $U\omega_*$ . Здесь  $U', U$  — плотность энергии спонтанных параметров в эффективных полях, которыми и будем оперировать в дальнейшем. Переключение происходит в состояние, где энергия минимальна. В результате происходит потеря энергии переключения  $\Delta U = U' - U$ . Будем считать, что только часть этой энергии затрачивается на слом указанных выше механизмов закрепления доменных стенок. Тогда эту часть  $U_{pin}$  можно выразить следующим образом:

$$dU_{pin} = k [(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}'_s) \cdot d\mathbf{E}^{ef} + (\varepsilon_s - \varepsilon'_s) : d\sigma^{ef}] = k (dU_{pin}^{el} + dU_{pin}^{mech}). \quad (12)$$

Одной из главных трудностей такого представления является определение коэффициента пропорциональности. Это связано с тем, что наравне со 180-градусными переключениями возможны также и 90-градусные переключения. И этот коэффициент может принимать различные значения в зависимости от тех или иных условий. В связи с этим упростим нашу модель принятием некоторых допущений, но без нарушения физических принципов явления. Введем следующие предположения:

- 1) коэффициент  $k$  вычисляется при условии простейших переключений  $\mathbf{p}_s, \varepsilon_s$  электрическим полем и механическими напряжениями независимо друг от друга;
- 2) при вычислении  $k$  будут учитываться средние значения энергии переключений;
- 3) коэффициент  $k$  может зависеть от общих полей для представительного объема ( $d\mathbf{E}^{ef}, d\sigma^{ef}$ ), но не может зависеть от значений  $(\mathbf{p}_s, \varepsilon_s, \mathbf{p}'_s, \varepsilon'_s)$  одной элементарной ячейки.

Замечаем, что в (12) один коэффициент связывает затрачиваемую энергию и электрического поля, и механических напряжений, поэтому оценим аддитивный вклад этих факторов, т. е. вклад электрического поля и механических напряжений в простом случае — случае 180-градусных переключений электрическим полем (когда  $dU_{pin}^{el} = dU_{\pi}$ ) и 90-градусных переключений механическими напряжениями (когда  $dU_{pin}^{mech} = dU_{\pi/2}$ ). Этот случай соответствует холодной поляризации при комнатной температуре, когда кристаллические решетки находятся в тетрагональной фазе. Тогда легко находим [Skaliukh, 2019]

$$dU_{\pi} = 2p_s |d\mathbf{E}^{ef}|, \quad dU_{\pi/2} = \frac{3}{2}\varepsilon_s |d\sigma_I^{ef} - d\sigma_{III}^{ef}|,$$

где  $d\sigma_I^{ef}$ ,  $d\sigma_{III}^{ef}$  — наибольшее и наименьшее главные значения приращения тензора напряжений  $d\sigma^{ef}$ . Теперь, рассматривая крайние части (12) и обозначая  $dU_{\pi} + dU_{\pi/2} = dU_{\pi,\pi/2}$ , получаем

$$dU_{\pi,\pi/2} = k \left( 2p_s |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{3}{2}\varepsilon_s |d\sigma_I^{ef} - d\sigma_{III}^{ef}| \right).$$

Очевидно, что энергия переключений будет меняться от домена к домену, поэтому будем учитывать осредненную энергию переключений. С этой целью проведем осреднение по всему представительному объему. Учитывая, что  $d\mathbf{E}^{ef}$ ,  $d\sigma_I^{ef}$ ,  $d\sigma_{III}^{ef}$  не изменяются в представительном объеме, а  $p_s$ ,  $\varepsilon_s$  — это численные значения спонтанной поляризации и деформации, после осреднения легко получаем значение

$$k = \frac{\Delta U_{\pi,\pi/2}}{2p_s |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{3}{2}\varepsilon_s |d\sigma_I^{ef} - d\sigma_{III}^{ef}|}.$$

Определив  $k$ , возвращаемся к соотношению (12) и для одного домена получаем

$$dU_{pin} = \frac{\Delta U_{\pi,\pi/2} [(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}'_s) \cdot d\mathbf{E}^{ef} + (\boldsymbol{\varepsilon}_s - \boldsymbol{\varepsilon}'_s) : d\sigma^{ef}]}{2p_s |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{3}{2}\varepsilon_s |d\sigma_I^{ef} - d\sigma_{III}^{ef}|}.$$

Полная энергия, необходимая для разрушения механизмов закрепления доменных стенок в представительном объеме, находится путем осреднения. Учитывая, что эффективные поля в представительном объеме не изменяются, а также что  $\langle \mathbf{p}_s - \mathbf{p}'_s \rangle = d\mathbf{P}_0$ ,  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}_s - \boldsymbol{\varepsilon}'_s \rangle = d\boldsymbol{\varepsilon}_0$ , получаем энергию разрушения доменных стенок в представительном объеме:

$$dU_* = \langle dU_{pin} \rangle = \frac{d\mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{ef} + d\boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\sigma^{ef}}{\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{1}{k_2} |d\sigma_I^{ef} - d\sigma_{III}^{ef}|},$$

где

$$k_1 = \frac{\Delta U_{\pi,\pi/2}}{2p_s}, \quad k_2 = \frac{\Delta U_{\pi,\pi/2}}{\frac{3}{2}\varepsilon_s}. \quad (13)$$

Для произвольного объема  $\Omega$  континуума уровня  $U_1$  энергию разрушения доменных стенок можно представить в виде следующего интеграла:

$$\Delta U = \int_{\Omega} \frac{d\mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{ef} + d\boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\sigma^{ef}}{\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{1}{k_2} |d\sigma_I^{ef} - d\sigma_{III}^{ef}|} d\Omega. \quad (14)$$

### 4.3. Оценка работы электрического поля и механических напряжений

В произвольном объеме континуума уровня  $U_1$  в общем случае работа электрического поля и механических напряжений может быть представлена выражением

$$\Delta A = \int_{\Omega} (\mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} + \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega.$$

Учитывая обратимые и необратимые части искомым параметров  $\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_0$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_0$ , преобразуем предыдущее соотношение к виду

$$\Delta A = \int_{\Omega} [d(\mathbf{E} \cdot \mathbf{P}) + d(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon})] d\Omega - \int_{\Omega} (\mathbf{P}_e \cdot d\mathbf{E} + \mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E} + \boldsymbol{\varepsilon}_e : d\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}) d\Omega.$$

Преобразуем выражение во втором интеграле с учетом (4):

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}_e \cdot d\mathbf{E} + \mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E} + \boldsymbol{\varepsilon}_e : d\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}) &= \mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{ef} + \boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}^{ef} - \\ &- \frac{\alpha d(\mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{P}_0)}{2} - \frac{\beta d(\boldsymbol{\varepsilon}_0 : \boldsymbol{\varepsilon}_0)}{2} + d \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_* \cdot \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}}{2} + \frac{d(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{E})}{2} + d(\mathbf{E} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}) + \\ &+ \frac{d(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma})}{2} - \frac{\mathbf{E} \cdot (\mathbf{M} : d\boldsymbol{\varepsilon}_0) \cdot \mathbf{E}}{2} - \mathbf{E} \cdot (\mathbf{N}_1 \cdot d\mathbf{P}_0) : \boldsymbol{\sigma} - \frac{\boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{K} : d\boldsymbol{\varepsilon}_0) : \boldsymbol{\sigma}}{2}. \end{aligned}$$

В результате выражение для работы принимает вид

$$\begin{aligned} \Delta A &= \Delta A_{EP} + \Delta A_{\sigma\varepsilon} + \Delta A_{0E} + \Delta A_{0\sigma} + \Delta A_{0P} + \Delta A_{0\varepsilon} + \Delta A_E + \Delta A_{EE} + \\ &+ \Delta A_{E\sigma} + \Delta A_{\sigma\sigma} + \Delta A_{EEM} + \Delta A_{E\sigma N} + \Delta A_{\sigma\sigma K}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \Delta A_{EP} &= d \int_{\Omega} \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}_0 d\Omega, & \Delta A_{\sigma\varepsilon} &= d \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega, & \Delta A_{0E} &= - \int_{\Omega} \mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{ef} d\Omega, \\ \Delta A_{0\sigma} &= - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}^{ef} d\Omega, & \Delta A_{0P} &= d \int_{\Omega} \frac{\alpha(\mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{P}_0)}{2} d\Omega, & \Delta A_{0\varepsilon} &= d \int_{\Omega} \frac{\beta(\boldsymbol{\varepsilon}_0 : \boldsymbol{\varepsilon}_0)}{2} d\Omega, \\ \Delta A_E &= d \int_{\Omega} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_* \cdot \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}}{2} d\Omega, & \Delta A_{EE} &= -d \int_{\Omega} \frac{(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{E})}{2} d\Omega, & \Delta A_{E\sigma} &= -d \int_{\Omega} \frac{(\mathbf{E} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma})}{2} d\Omega, \\ \Delta A_{\sigma\sigma} &= -d \int_{\Omega} \frac{(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma})}{2} d\Omega, & \Delta A_{EEM} &= \int_{\Omega} \frac{\mathbf{E} \cdot (\mathbf{M} : d\boldsymbol{\varepsilon}_0) \cdot \mathbf{E}}{2} d\Omega, \\ \Delta A_{E\sigma N} &= \int_{\Omega} \frac{\mathbf{E} \cdot (\mathbf{N}_1 \cdot d\mathbf{P}_0) : \boldsymbol{\sigma}}{2} d\Omega, & \Delta A_{\sigma\sigma K} &= \int_{\Omega} \frac{\boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{K} : d\boldsymbol{\varepsilon}_0) : \boldsymbol{\sigma}}{2} d\Omega. \end{aligned}$$

Пусть рассматривается циклический процесс, тогда

$$A = \oint \Delta A = \oint \Delta A_{EP} + \oint \Delta A_{\sigma\varepsilon} + \dots + \oint \Delta A_{\sigma\sigma K}.$$

За один цикл нагружающие электрическое поле и механические напряжения возвращаются к своим начальным значениям. То же можно сказать и о полной и остаточной поляризации и деформации. Отсюда следует, что интегралы 1-й, 2-й, а также с 5-го по 10-й будут равны нулю, поскольку

представляют собой полные дифференциалы. Относительно последних трех интегралов можно сказать, что они представляют собой дополнительную работу электрического поля и механических напряжений только за счет изменения физических модулей керамики. Они имеют более высокий порядок малости, чем остальные слагаемые. Таким образом, для кругового процесса полная работа описывается третьим и четвертым интегралами. Окончательно можно сказать, что за потери в циклическом процессе отвечают именно эти интегралы. А выражение для работы электрического поля и механических напряжений принимает вид

$$\Delta A = - \int_{\Omega} \mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{ef} d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}^{ef} d\Omega. \quad (15)$$

#### 4.4. Энергетический баланс

Отметим, если бы не приходилось затрачивать работу на преодоление механизмов запира-ния доменов, то энергетические потери в системе были бы значительно меньше и определялись бы идеальным (или предельным) случаем, в котором переключения доменов не зависят от влияния и расположения остальных доменов. Тогда потери в идеальном случае легко находятся заменой остаточных параметров на предельные, т. е.

$$\Delta A_{\infty} = - \int_{\Omega} \mathbf{P}_{\infty} \cdot d\mathbf{E}^{ef} d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_{\infty} : d\boldsymbol{\sigma}^{ef} d\Omega. \quad (16)$$

Вместе с тем в реальном процессе энергетические потери в системе значительно больше, чем в идеальном случае, поскольку приходится разрушать механизмы запира-ния доменных стенок. Приведенные энергетические оценки позволяют считать, что выполняется следующий энергетический баланс: *реальные энергетические потери в процессе поляризации и деформирования складываются из потерь в идеальном (предельном) случае и энергетических затрат, необходимых на слом механизмов запира-ния доменных стенок.*

Уравнение баланса можно представить в виде

$$\Delta A = \Delta A_{\infty} + \Delta U.$$

Подставляя сюда выражения (14)–(16) и учитывая, что  $\Omega$  — произвольный объем интегрирования, получаем

$$(\mathbf{P}_{\infty} - \mathbf{P}_0) \cdot d\mathbf{E}^{ef} + (\boldsymbol{\varepsilon}_{\infty} - \boldsymbol{\varepsilon}_0) : d\boldsymbol{\sigma}^{ef} = \frac{d\mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{ef} + d\boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}^{ef}}{\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{1}{k_2} (d\sigma_{III}^{ef} - d\sigma_I^{ef})}.$$

В этом выражении приращения эффективных нагрузок также являются независимыми и произвольными, поэтому при них равны и коэффициенты:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\infty} - \mathbf{P}_0 &= \frac{d\mathbf{P}_0}{\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{1}{k_2} (d\sigma_{III}^{ef} - d\sigma_I^{ef})}, \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\infty} - \boldsymbol{\varepsilon}_0 &= \frac{d\boldsymbol{\varepsilon}_0}{\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{ef}| + \frac{1}{k_2} (d\sigma_{III}^{ef} - d\sigma_I^{ef})}. \end{aligned} \quad (17)$$

Соотношения (17) представляют собой искомые определяющие соотношения для необратимых параметров. Они получены в виде системы девяти скалярных уравнений в дифференциалах.

## 5. Анализ модели и численные эксперименты

Построенная модель состоит из двух взаимосвязанных частей, в которых находятся обратимые и необратимые искомые параметры. Для квазистатического процесса рассматривается последовательность равновесных состояний. Вместо непрерывного изменения внешних нагрузок рассматривается последовательность их приращений. Для рассматриваемого равновесного состояния для текущих значений остаточных параметров вначале по формулам (6)–(9) определяются упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические модули. Затем осуществляется переход к следующему равновесному состоянию, в котором внешние нагрузки получают приращения, и по формулам (17) определяются приращения остаточных параметров. Таким образом, построенная модель позволяет находить приращения искомых характеристик при переходе от одного равновесного состояния к другому. Алгоритм вкратце выглядит следующим образом. Пусть на данном этапе известны компоненты электрического поля и механических напряжений и компоненты вектора остаточной поляризации и остаточной деформации. Переход к следующему состоянию связан с заданием приращений внешних электрических и механических нагрузок. По ним находятся эффективные поля следующего состояния. При этом используются остаточные параметры предыдущего состояния. Затем по формулам (17) вычисляются приращения остаточной поляризации и остаточной деформации и определяются сами остаточные параметры. Далее по (6)–(9) находятся физические модули текущего состояния, и происходит переход к следующему равновесному состоянию. Для организации пошаговых вычислений необходимо в начале процесса задать значения остаточных параметров, по которым можно определить физические модули первого шага. Если на первом шаге керамика была термически деполяризована, то начальные значения необратимых параметров нулевые. Переход от одного равновесного состояния к другому позволяет полностью определять и обратимые, и необратимые параметры на каждом шаге. При циклических процессах окончанием вычислений служит обнуление нагрузок. Изменения компонент вектора электрического поля и тензора механических напряжений удовлетворяют условиям простого нагружения. Это значит, что они зависят от одного параметра, например от времени. Если по оси абсцисс откладывать одну из компонент нагружающих факторов, к которым относятся компоненты вектора электрического поля и тензора механических напряжений, а по оси ординат — одну из компонент искомых параметров, к которым относится вектор электрической индукции и тензор деформации, то будем получать кривые, называемые гистерезисными. По нагрузке и отклику такие кривые имеют свои названия. Следует различать:

- диэлектрические гистерезисные кривые:  $P_k = P_k(E_m)$ ,  $k, m = 1, 2, 3$ ;
- пьезоэлектрические:  $\varepsilon_{km} = \varepsilon_{km}(E_n)$ ,  $P_k = P_k(\sigma_{mn})$ ,  $k, m, n = 1, 2, 3$ ;
- деформационные:  $\varepsilon_{km} = \varepsilon_{km}(\sigma_{ns})$ ,  $k, m, n, s = 1, 2, 3$ ;
- комбинированные:  $\varepsilon_{km} = \varepsilon_{km}(E_n, \sigma_{ns})$ ,  $P_k = P_k(E_n, \sigma_{ns})$ ,  $k, m, n, s = 1, 2, 3$ .

Построенная модель обладает большой общностью, она позволяет строить любые из указанных кривых, в том числе и комбинированные. Очевидно, что некоторые из таких зависимостей будут нулевыми, а некоторые никогда не используются. Так, в литературе автор не нашел гистерезисных зависимостей для поликристаллических сегнетоэлектрических сред при сдвиговых напряжениях, хотя для монокристаллов чистых сегнетоэластиков такие зависимости встречаются в работах С. А. Гриднева и Л. А. Шувалова. Для иллюстрации возможностей модели будут приведены деформационные, диэлектрические и пьезоэлектрические петли гистерезиса и отмечено влияние некоторых параметров на их форму поведения при одинаковых циклических нагрузках.



Модель имеет 8 параметров —  $p_s$ ,  $\varepsilon_s$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $k_1$ ,  $k_2$ , — каждый из которых влияет на вид и форму гистерезисных кривых. Оценим порядки этих параметров в системе СИ и проанализируем их влияние на вид гистерезисных кривых. Параметры  $p_s$  [Кл/м<sup>2</sup>],  $\varepsilon_s$  — это значения спонтанной поляризации и спонтанной деформации. Для разных материалов они могут варьироваться в следующих границах:  $0,01 < p_s < 0,5$ ,  $0,005 < \varepsilon_s < 0,03$ . Они стоят множителями при предельных значениях поляризации и деформации, поэтому чем больше будут их значения, тем более будут растянуты кривые. Параметры  $a$  [в/м],  $b$  [Дж/м<sup>3</sup>] появляются при выводе предельных значений и определены формулами (11). Для численной оценки надо учесть постоянную Больцмана, температуру эксперимента (если это комнатная температура, то около 300° С), спонтанную поляризацию в районе 0,1 и спонтанную деформацию около 0,01. За элементарный объем можно взять как размер атомной ячейки — около 4 Å, так и объем домена, равный нескольким нанометрам. Получим следующие оценки для этих параметров:  $1 \cdot 10^5 < a < 9 \cdot 10^8$ ,  $1 \cdot 10^5 < b < 9 \cdot 10^8$ . Оба параметра связаны с энергией поворота доменов и, как уже отмечалось, встречаются при вычислении предельных значений поляризации и деформации. Поэтому их увеличение будет приводить к тому, что петли будут уменьшаться по амплитуде и, соответственно, наклоняться. Так, на рис. 4 показаны три деформационные петли для трех значений параметра  $b$ , когда механические напряжения изменяются в пределах  $\sigma \in [-1,3 \cdot 10^7, 1,3 \cdot 10^7]$ , а численные значения остальных параметров таковы:  $\beta = 3,6 \cdot 10^6$ ,  $k_2 = 3,9 \cdot 10^6$ ,  $\varepsilon_s = 0,01$ .

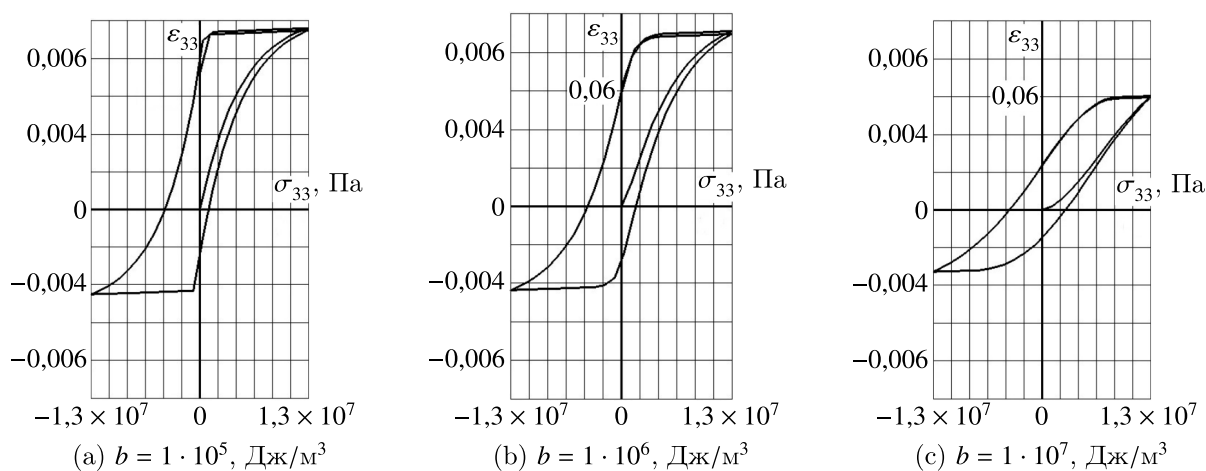


Рис. 4. Влияние параметра  $b$  на деформационные петли гистерезиса

Параметры  $\alpha$  [в · м/Кл],  $\beta$  [н/м<sup>2</sup>] входят в выражения для эффективных полей при остаточных параметрах. Эти добавочные поля, как правило, значительно меньше основных внешних нагрузок, поэтому эти параметры оказывают значительно меньшее влияние на переключения доменов, чем внешние нагрузки. Следовательно, для параметров  $\alpha$ ,  $\beta$  имеем следующие ограничения:  $1 \cdot 10^6 < \alpha < 5 \cdot 10^6$ ,  $1 \cdot 10^6 < \beta < 5 \cdot 10^6$ . Их влияние будет незначительно сказываться на амплитудах кривых гистерезиса и на поведении кривых в точках, где внешние нагрузки меняют направление на противоположное. А вот параметры  $k_1$  [в/м],  $k_2$  [н/м<sup>2</sup>] оказывают на поведение кривых наибольшее влияние. Они входят в выражение энергии (14) для слома механизмов закрепления стенок доменов и связаны с плотностью распределения различных доменов в представительном объеме. Поэтому их величины варьируются в районе коэрцитивных значений электрического поля и механических напряжений. Для них могут быть получены следующие оценки:  $1 \cdot 10^6 < k_1 < 1 \cdot 10^7$ ,  $1 \cdot 10^7 < k_2 < 1 \cdot 10^8$ . Отсюда сразу же следует: чем больше их значения, тем большее значение коэрцитивного поля. Это означает, что при их увеличении увеличивается ширина, но уменьшается амплитуда петли, и наоборот. С другой стороны,

увеличение значения коэрцитивного поля приводит к уменьшению амплитуды петель при фиксированном максимальном значении внешнего поля. Для иллюстрации этого положения на рис. 5 приводятся три диэлектрические петли гистерезиса для трех различных значений параметра  $k_1$ , когда электрическое поле изменяется в пределах  $E \in [-3 \cdot 10^6, 3 \cdot 10^6]$ , а остальные параметры принимают следующие значения:  $a = 0,56 \cdot 10^6$ ,  $\alpha = 3,2 \cdot 10^7$ ,  $p_s = 0,45$ .

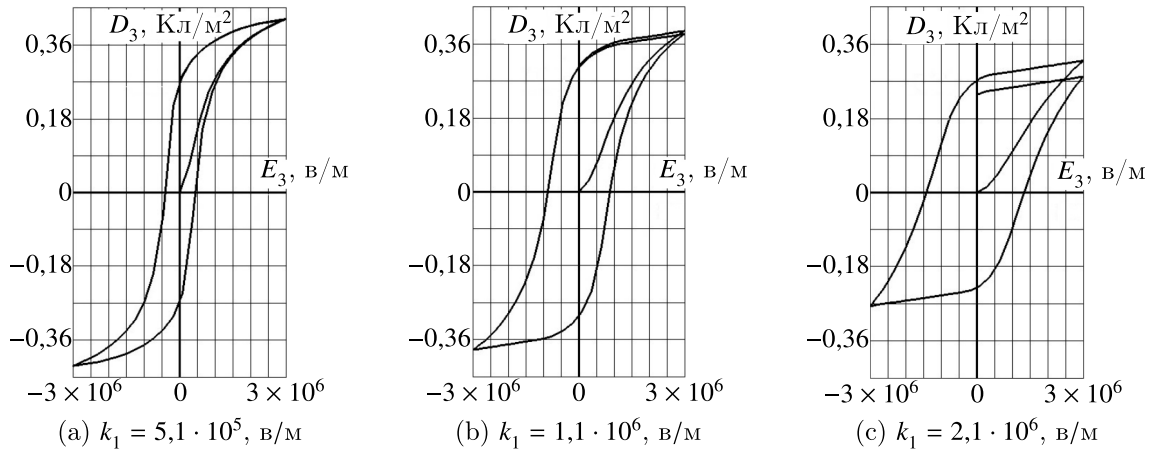


Рис. 5. Влияние параметра  $k_1$  на диэлектрические петли гистерезиса

Наравне с диэлектрическими петлями модель позволяет находить и пьезоэлектрические петли. Так, на рис. 6 приводятся графики пьезоэлектрических петель типа «бабочка», когда электрическое поле изменяется в пределах  $E \in [-3 \cdot 10^6, 3 \cdot 10^6]$ , а механические напряжения равны нулю. Параметры  $b, \beta, k_2$  в данных расчетах не участвуют, так как механические напряжения отсутствуют.

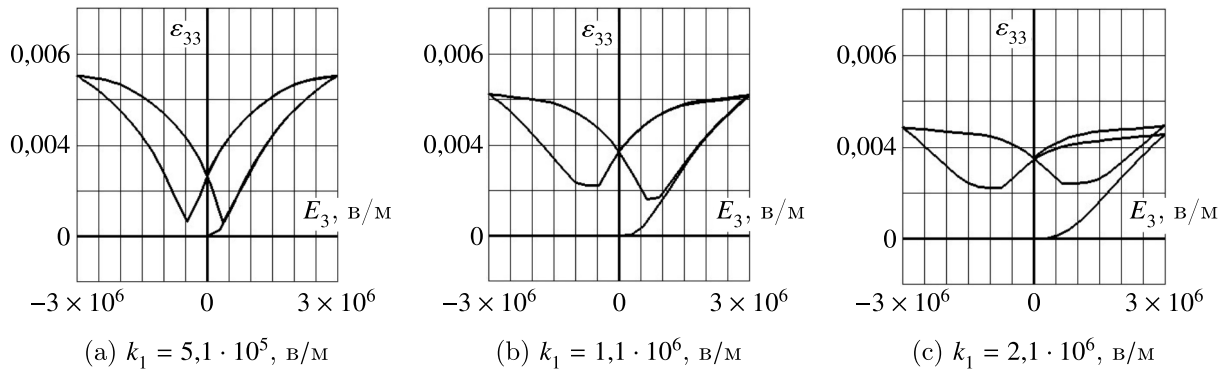


Рис. 6. Влияние параметра  $k_1$  на пьезоэлектрические петли «бабочка»

Изучалась зависимость продольной деформации от электрического поля. Изменялся параметр  $k_1$ , остальные параметры были такими же, как в предыдущем случае. При любых значениях электрического поля деформации принимают только положительные значения, что соответствует физике задачи.

Среди недостатков модели отметим следующее. Для некоторых значений параметров после первого цикла значения в точке смены направления поля не совпадают с первоначальными значениями. При последующих циклах этих отличий нет, все значения ложатся одни на другие. Различие проявляется только при первом проходе цикла, что хорошо видно на рис. 5, с и 6, с.

Для решения уравнений (17) необходимо привлекать численные методы. Наиболее простым методом является метод замены дифференциалов соответствующими приращениями искомых параметров, и вычислять эти приращения необходимо на каждом шаге. В таком случае надо идти с очень малым шагом во избежание накапливающейся погрешности. Если использовать более грубый шаг, то можно уравнения (17) решать методом последовательных приближений, оставляя неизменными значения остаточных параметров, а итерации организовывать для нахождения приращений функций.

## 6. Заключение

Построенная трехмерная модель поляризации поликристаллических сегнетоэлектрических материалов при одновременном воздействии механических и электрических нагрузок является существенным продвижением по сравнению с одномерной моделью Джилса – Атертона. Она является трехмерной и учитывает любые электрические и механические поля, в том числе и такие, когда ни одно из главных значений тензора напряжений не совпадает с направлением электрического поля. Модель содержит восемь параметров, распоряжаясь которыми можно изменять амплитуды, наклон и ширину кривых гистерезиса. На первый взгляд определение этих параметров по известным экспериментальным данным затруднительно и относится к некорректным обратным задачам. Но оказалось, что малые изменения параметров приводят к малым изменениям кривых. Это позволяет простым методом проб и ошибок приблизить форму той или иной кривой к экспериментальной. Кроме того, выбор подходящих параметров можно осуществить на основе генетических алгоритмов. Однако объем данной работы не позволяет включить в себя этот раздел исследования. Отметим также, что в модели учтены физические особенности поляризации и деформирования поликристаллических сегнетоэлектриков, но с математической точки зрения дан строгий вывод операторных соотношений, представляющих собой определяющие соотношения нелинейных задач необратимых процессов поляризации. Модель учитывает доменную структуру материала и позволяет находить все параметры для представительного объема. В ее основе лежит положение о предельно возможных значениях поляризации и деформации, для определения которых вводится плотность распределения векторов спонтанной поляризации из статистического закона Больцмана. Для этого уровня рассмотрены эффективные поля Вейсса; они использованы при выводе предельных значений и при оценке энергетических затрат на слом механизмов закрепления доменных стенок. Поэтому и в дальнейших оценках пришлось учитывать именно эти эффективные поля. В модели исследуется энергетический баланс между затратами энергии, необходимой для слома механизмов закрепления доменных стенок, и работой внешних полей нагружения в реальном и идеальном случае. При его выводе учитывались перекрестные слагаемые, содержащие как электрические, так и механические составляющие. Построены определяющие соотношения для обратимых и необратимых искомых характеристик, к которым относятся вектор электрической индукции и тензор деформации. Определяющие соотношения для обратимых параметров построены в виде линейных уравнений, связывающих вектор электрической индукции и тензор деформаций с вектором электрического поля и тензором механических напряжений. В отличие от задач пластичности, где упругие модули не зависят от пластических деформаций, здесь упругие податливости и диэлектрические коэффициенты являются функциями от остаточной деформации. А пьезоэлектрические модули являются функциями остаточной поляризации. Установлен вид этих функциональных зависимостей. Определяющие соотношения для необратимых составляющих выводятся из энергетического баланса и представляют собой соотношения в дифференциалах, что соответствует задачам с необратимыми процессами. Для построения гистерезисных зависимостей предложен метод последовательных приближений. Численные эксперименты выполнены для диэлектрических, деформационных и пьезо-

электрических гистерезисных зависимостей. Проанализированы влияния параметров модели на вид и форму кривых гистерезиса.

Предложенная модель может быть имплантирована в конечно-элементный комплекс для расчетов остаточных полей поляризации и деформаций. Она позволяет определять все физические модули неоднородно поляризованных керамических образцов, которые при неоднородной поляризации становятся локально анизотропными материалами.

## Список литературы (References)

- Алешин В. И., Лучанинов А. Г.* Моделирование переполаризации кристалла и керамики типа  $\text{BaTiO}_3$  // Изв. АН. Сер. Физическая. — 2001. — Т. 65, № 8. — С. 1114–1118.
- Aleshin V. I., Luchaninov A. G.* Modelirovanie perepolyarizatsii kristalla i keramiki tipa  $\text{BaTiO}_3$  [Simulation of the repolarization of a crystal and ceramics of the  $\text{BaTiO}_3$  type] // Izv. AN. Ser. Fizicheskaya [Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics]. — 2001. — Vol. 65, No. 8. — P. 1114–1118 (in Russian).
- Можен М.* Механика электромагнитных сплошных сред. — М.: Мир, 1991. — 560 с.
- Mozhen M.* Mekhanika elektromagnitnykh sploshnykh sred [Mechanics of electromagnetic continuous media]. — Moscow: Mir, 1991. — 560 p. (in Russian).
- Осипова Н. Г., Семёнов А. С.* Моделирование нелинейного поведения пьезокерамики тетрагональной структуры методами конечно-элементной гомогенизации // Научно-технические ведомости СПбГПУ, физико-математические науки. — 2011. — № 4 (134). — С. 56–64.
- Osipova N. G., Semenov A. S.* Modelirovanie nelineinogo povedeniya p'ezokeramiki tetragonal'noi struktury metodami konechno-elementnoi gomogenizatsii [The simulation of nonlinear behavior for ferroelectric ceramics with tetragonal structure by finite-element homogenizing] // Nauchno-tekhnicheskie ведомosti SPbGPU, fiziko-matematicheskie nauki [St. Petersburg Polytechnic University. Journal. Physics and Mathematics]. — 2011. — No. 4 (134). — P. 56–64 (in Russian).
- Семенов А. С.* Микромеханическая модель поликристаллического сегнетоэлектроругого материала с учетом дефектов // Прикладная механика и техническая физика. — 2019. — Т. 60, № 6. — С. 173–191.
- Semenov A. S.* Mikromekhanicheskaya model' polikristallicheskogo segnetoelektrouprugogo materiala s uchetom defektov [Micromechanical model of a polycrystalline ferroelectrelastic material with consideration of defects] // Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika [Journal of Applied Mechanics and Technical Physics]. — 2019. — Vol. 60, No. 6. — P. 173–191 (in Russian).
- Семенов А. С., Бальке Х., Мельников Б. Е.* Моделирование поликристаллической пьезокерамики методом конечно-элементной гомогенизации // Морские интеллектуальные технологии. — 2011. — № 3 (спецвыпуск). — С. 106–112.
- Semenov A. S., Bal'ke Kh., Mel'nikov B. E.* Modelirovanie polikristallicheskoi p'ezokeramiki metodom konechno-elementnoi gomogenizatsii [Simulation of polycrystalline piezoceramics by finite element homogenization] // Morskie intellektual'nye tekhnologii [Marine Intellectual Technologies]. — 2011. — No. 3 (spetsvypusk [special issue]). — P. 106–112 (in Russian).
- Семенов А. С., Лисковски А. Ч., Ноймайстер П., Бальке Х., Ле-Захаров С. А., Додонов П. А., Мельников Б. Е.* Эффективные методы решения нелинейных краевых задач сегнето-электроругого // Морские интеллектуальные технологии. — 2010. — № 1. — С. 55–61.
- Semenov A. S., Liskovski A. Ch., Noimaister P., Bal'ke Kh., Le-Zakharov S. A., Dodonov P. A., Mel'nikov B. E.* Effektivnye metody resheniya nelineinykh kraevykh zadach segneto-elektrouprugosti [Effective methods for solving nonlinear boundary value problems of ferroelectroelasticity] // Morskie Intellektual'nye Tekhnologii [Marine Intellectual Technologies]. — 2010. — No. 1. — P. 55–61 (in Russian).
- Скалиух А. С.* Функциональная зависимость физических характеристик от необратимых параметров при электромеханическом воздействии на сегнетоэлектрические керамики // Вестник томского государственного университета, Математика и механика. — 2019. — № 58. С. 128–141. — DOI: 10.17223/19988621/58/11
- Skaliukh A. S.* Funktsional'naya zavisimost' fizicheskikh kharakteristik ot neobratimyykh parametrov pri elektromekhanicheskom vozdeistvii na segnetoelektricheskie keramiki [Functional dependence of 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]. — 2019. — No. 58. — P. 128–141. — DOI: 10.17223/19988621/58/11 (in Russian).
- Тамм И. Е.* Основы теории электричества: учеб. пособие для вузов. — 11-е изд., испр. и доп. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. — 616 с.
- Tamm I. E.* Osnovy teorii elektrichestva: ucheb. posobie dlya vuzov [Fundamentals of the theory of electricity. Textbook manual for universities]. — 11-e izd., ispr. i dop. — Moscow: FIZMATLIT, 2003. — 616 p. (in Russian).

- Aleshin V.I., Luchaninov A.G.* Modeling of domain processes in piezoceramic materials // *Ferroelectrics*. — 2002. — Vol. 266. — P. 111–124. — <https://doi.org/10.1080/00150190211447>
- Chen P.J.* Characterization of the three dimensional properties of poled PZT 65/35 in the absence of losses // *Acta Mechanica*. — 1983. — Vol. 47. — P. 95–106.
- 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
- Dunn V.L.* Effects of grain shape anisotropy, porosity, and microcracks on the elastic and dielectric constants of polycrystalline piezoelectric ceramics // *Journal of applied physics*. — 1995. — Vol. 78, No. 3. — P. 1533–1541.
- Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E.* Constitutive Law for Ferroelastic and Ferroelectric Piezoceramics // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. — 2005. — Vol. 16. — P. 221–236. — DOI: 10.1177/1045389X05049650
- Haug A., Knoblauch V., McMeeking R.M.* Combined isotropic and kinematic hardening in phenomenological switching models for ferroelectric ceramics // *International Journal of Engineering Science*. — 2003. — No. 41. — P. 867–901. — DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00320-8
- Haug A., Onck P.R., Giessen E.V.* Development of inter- and intragranular stresses during switching of ferroelectric polycrystals // *International Journal of Solids and Structures*. — 2007. — No. 44. — P. 2066–2078. — DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2006.07.024
- Huber J.E., Fleck N.A.* Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behaviour // *European Journal of Mechanics – A/Solids*. — 2004. — No. 23. — P. 203–217. — DOI: 10.1016/j.euromechsol.2003.11.006
- Huber J.E., Fleck N.A.* Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. — 2001. — No. 49. — P. 785–811. — DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00052-1
- Huber J.E., Fleck N.A., Landis C.M., McMeeking R.M.* A constitutive model for ferroelectric polycrystals // *J. Mech. Phys. Solids*. — 1999. — Vol. 47. — P. 1663–1697.
- Jiles D.C., Atherton D.L.* Theory of magnetic hysteresis // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1986. — No. 61. — P. 48–60.
- 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. — Vol. 48, No. 4. — P. 421–435. — DOI: 10.1007/s00466-011-0595-4
- Kaliappan J., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M.* Micromechanical Modelling of Switching Phenomena in Polycrystalline Piezoceramics: Application of a Polygonal Finite Element Approach *Computational Mechanics* // *Computational Mechanics*. — 2011. — Vol. 48, No. 4. — P. 421–435.
- Kamlah M., Bohle U.* Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior // *International Journal of Solids and Structures*. — 2001. — No. 38. — P. 605–633. — DOI: 10.1016/S0020-7683(00)00055-X
- 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 // *International Journal of Solids and Structures*. — 2005. — No. 42. — P. 2949–2964. — DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2004.09.045
- Landis C.M.* Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. — 2002. — No. 50. — P. 127–152. — DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00021-7
- Marutake M.A.* A calculation of physical constants of ceramic barium titanate // *J. Phys. Soc. Japan*. — 1956. — No. 11. — P. 807–914.

- McMeeking R. M., Landis C. M.* A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics // *International Journal of Engineering Science*. — 2002. — No. 40. — P. 1553–1577. — DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00033-2
- Muller R., Schroder J., Lupascu D. C.* Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics // *GAMM-Mitt.* — 2008. — Vol. 31, No. 2. — P. 133–150. — DOI: 10.1002/gamm.200890007
- 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 Journal of Mechanics A/Solids*. — 2009. — No. 28. — P. 195–201. — DOI: 10.1016/j.euromechsol.2008.09.002
- Semenov A. S., Liskowsky A. C., Balke H.* Return mapping algorithms and consistent tangent operators in ferroelectroelasticity // *Int. J. Numer. Meth. Eng.* — 2010. — Vol. 81. — P. 1298–1340.
- Skaliukh A. S.* Mathematical 3d models of irreversible polarization processes of a ferroelectrics and ferroelastics polycrystal materials // *Physics and mechanics*. — 2019. — Vol. 42, No. 1. — P. 74–102. [http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4212019\\_8](http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4212019_8)
- Smith R. C., Hom C. L.* A domain wall model for ferroelectric hysteresis // Center for Research in Scientific Computation (CRSC) technical report CRSC-TR99-01, *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. — 1999.
- Smith R. C., Ounaies Z.* A Domain Wall Model for Hysteresis in Piezoelectric Materials // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. — 2000. — Vol. 11, No. 1. — P. 62–79. — DOI: 10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY