Материалы Международной научно-технической конференции, 21 – 25 ноября 2016 г.

МОСКВА **INTERMATIC – 2 0 1 6, часть 1** **МИРЭА**

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С АКУСТИЧЕСКИМИ СРЕДАМИ

© 2016 г. А.В. НАСЕДКИН

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону
e-mail: nasedkin@math.sfedu.ru

Введение

В настоящее время имеется ряд теорий, описывающих изменения модулей нанообъектов по сравнению с модулями обычных материалов. В одной из таких теорий для упругих наноразмерных материалов вводятся поверхностные напряжения по модели Гуртина-Мурдоха. Эта теория стала достаточно популярной, о чем свидетельствуют обзоры [1, 2], и была распространена на пьезоэлектрические и магнитоэлектрические наноразмерные тела ([3-11] и др.). В настоящей работе в развитие подходов [7-11] предлагается модель наноразмерного пьезоэлектрического тела, окруженного акустической средой. Масштабные факторы отражены в модели введением поверхностных напряжений и поверхностной электрической индукции со связанными определяющими соотношениями. Как и в [7-11], в модели учтены демпфирующие свойства, а для численных решений предложены конечно-элементные аппроксимации и алгоритмы, позволяющие сохранять симметричную структуру конечно-элементных квазиопределенных матриц, характерных для задач с седловой точкой.

Математическая модель

Пусть Ω – нанообъем, занимаемый пьезоэлектрическим материалом; $\Gamma = \partial\Omega$ – граница этого объема; $\mathbf{n}$ – вектор единичной внешней нормали к Γ; $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$ – вектор пространственных координат; t – время; $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ – вектор-функция перемещений; $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$ – функция электрического потенциала. Системы дифференциальных уравнений для пьезоэлектрического тела с учетом демпфирующих членов может быть представлена в виде [12]

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = \rho(\ddot{\mathbf{u}} + \alpha_d \dot{\mathbf{u}}), \qquad \nabla \cdot \mathbf{D} = q_\Omega, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : (\boldsymbol{\varepsilon} + \beta_d \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) - \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{E}, \qquad \mathbf{D} + \zeta_d \dot{\mathbf{D}} = \mathbf{e} : (\boldsymbol{\varepsilon} + \zeta_d \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}, \tag{2}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^*)/2, \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \tag{3}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензоры второго ранга механических напряжений и деформаций, соответственно; $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ – векторы электрической индукции и напряженности электрического поля, соответственно; ρ – плотность; $\mathbf{c} = \mathbf{c}^E$ – тензор упругих жесткостей четвертого ранга; $\mathbf{e}$ – тензор пьезомодулей третьего ранга; $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa}^S = \boldsymbol{\varepsilon}^S$ – тензор диэлектрических проницаемостей второго ранга; верхние индексы указывают, при постоянстве каких полей вычислены данные модули (S – деформации, E – напряженность электрического поля); α_d, β_d, ς_d – коэффициенты демпфирования; $\mathbf{f}$ – вектор плотности массовых сил; q_Ω – объемная плотность электрических зарядов; $(...)^*$ – операция транспонирования; $(...):(...)$ – двойное скалярное произведение. Тензоры материальных модулей здесь имеют такие же свойства симметрии и положительной определенности, как и для пьезоэлектрических тел обычных размеров.

Сформулируем граничные условия для системы дифференциальных уравнений (1) с (2), (3). Эти граничные условия подразделяются на два типа (механические и электрические) и будут отличать наноразмерные тела от соответствующих тел макроразмеров.

Для формулировки механических граничных условий предположим, что существует разбиение границы Γ на три подмножества Γ_σ, Γ_{sw} и Γ_u ($\Gamma = \Gamma_\sigma \cup \Gamma_{sw} \cup \Gamma_u$). Будем считать, что на участке границы Γ_σ действуют обычные механические напряжения $\mathbf{p}_\Gamma$ и поверхностные напряжения

$$\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \nabla^s\cdot\boldsymbol{\sigma}^s + \mathbf{p}_\Gamma, \quad \mathbf{x}\in\Gamma_\sigma, \tag{4}$$

где ∇^s – поверхностный оператор градиента, связанный с пространственным набла-оператором формулой $\nabla^s = \nabla - \mathbf{n}\,\partial/\partial r$, r – координата, отсчитываемая по нормали к Γ_σ, $\boldsymbol{\sigma}^s$ – тензор второго ранга поверхностных напряжений, который будет определен позднее.

Участок Γ_{sw} является границей контакта пьезоэлектрического тела с акустической средой, и на нем выполняется интерфейсное граничное условие

$$\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \nabla^s\cdot\boldsymbol{\sigma}^s + \mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_w, \qquad \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{v}_w, \qquad \mathbf{x}\in\Gamma_{sw}, \tag{5}$$

где $\boldsymbol{\sigma}^s$ – тензор второго ранга напряжений в акустической среде, $\mathbf{v}_w$ – вектор скорости в акустической среде.

На оставшейся части границы Γ_u будем считать заданными перемещения $\mathbf{u}_\Gamma$:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_\Gamma, \qquad \mathbf{x}\in\Gamma_u. \tag{6}$$

Для определения электрических граничных условий предположим, что поверхность Γ разбита на два подмножества: Γ_D и Γ_φ ($\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_\varphi$).

Участки Γ_D не электродированы, и на них выполняются условия

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{D} = \nabla^s\cdot\mathbf{D}^s - q_\Gamma, \quad \mathbf{x}\in\Gamma_D, \tag{7}$$

где $\mathbf{D}^s$ – вектор поверхностной электрической индукции, q_Γ – поверхностная плотность электрических зарядов.

Подмножество Γ_φ есть объединение $M+1$ не граничащих друг с другом участков $\Gamma_{\varphi i}$ ($i\in J_Q \cup J_V$), $J_Q = \{1, 2, ..., m\}$, $J_V = \{0, m+1, m+2, ..., M\}$), покрытых бесконечно тонкими электродами. На данных участках зададим следующие граничные условия

$$\varphi = \Phi_i, \qquad \mathbf{x}\in\Gamma_{\varphi i}, \qquad \int_{\Gamma_{\varphi i}} \mathbf{n}\cdot\mathbf{D}\,d\Gamma = -Q_i, \quad I_i = \pm\dot{Q}_i, \qquad i\in J_Q, \tag{8}$$

$$\varphi = V_i, \qquad \mathbf{x}\in\Gamma_{\varphi i}, \qquad \Gamma_{\varphi 0} \neq \wedge, \qquad i\in J_V, \tag{9}$$

где величины Φ_i, Q_i, I_i и V_i зависят только от t, причем значения Φ_i изначально не известны, а знак "+" или "-" в четвертой формуле (8) для выражения тока I_i через заряд Q_i зависит от выбора направления тока во внешней цепи.

Примем, что поверхностные напряжения поверхностная электрическая индукция связаны с поверхностными деформациями $\boldsymbol{\varepsilon}^s$ и поверхностной напряженностью электрического поля $\mathbf{E}^s$ определяющими соотношениями, аналогичными (2)

$$\boldsymbol{\sigma}^s = \mathbf{c}^s : (\boldsymbol{\varepsilon}^s + \beta_d \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^s) - \mathbf{e}^{s*}\cdot\mathbf{E}^s, \qquad \mathbf{D}^s + \zeta_d \dot{\mathbf{D}}^s = \mathbf{e}^s : (\boldsymbol{\varepsilon}^s + \zeta_d \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^s) + \boldsymbol{\kappa}^s\cdot\mathbf{E}^s, \tag{10}$$

где $\mathbf{c}^s$, $\mathbf{e}^s$, $\boldsymbol{\kappa}^s$ – тензоры поверхностных модулей, аналогичные по смыслу и имеющие те же свойства симметрии, что и соответствующие объемные модули. Поверхностные деформации и напряженность электрического поля выражаются через перемещения и электрический потенциал по формулам

$$\boldsymbol{\varepsilon}^s = (\nabla^s \mathbf{u}^s + (\nabla^s \mathbf{u}^s)^*)/2, \qquad \mathbf{u}^s = \mathbf{A}\cdot\mathbf{u}, \qquad \mathbf{E}^s = -\nabla^s \varphi, \tag{11}$$

где $\mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{n}\otimes\mathbf{n}$, $\mathbf{I}$ – единичный тензор в R^3.

Следует также отметить, что тензоры поверхностных модулей $\mathbf{c}^s$, $\mathbf{e}^s$, $\boldsymbol{\kappa}^s$ должны иметь такие структуры, чтобы поля напряжений $\boldsymbol{\sigma}^s$ и электрической индукции $\mathbf{D}^s$ были поверхностными, т.е. чтобы в локальных системах координат на поверхностях их компоненты по нормали обращались бы в нуль. Кроме того, тензоры $\mathbf{c}^s$ и $\boldsymbol{\kappa}^s$ должны иметь аналогичные свойства положительной определенности, что и одноименные объемные модули, но относительно поверхностных полей $\boldsymbol{\varepsilon}^s$ и $\mathbf{E}^s$, соответственно.

Замыкают постановку нестационарных задач для пьезоэлектрических сред начальные условия:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_*(\mathbf{x}), \qquad \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{r}_*(\mathbf{x}), \qquad \varphi = \varphi_*(\mathbf{x}), \qquad t = 0, \;\; \mathbf{x}\in\Omega, \tag{12}$$

причем при $\varsigma_d = 0$ начальное условие на электрический потенциал не требуется.

В модели (1)–(12) в отличие от работ [3-6] введены демпфирующие слагаемые с коэффициентами затухания α_d, β_d, ς_d, а в развитие работ [7-11] здесь использованы связанные определяющие соотношения (10) для поверхностных величин и условия контакта (5) с акустической средой.

Постановка задачи (1)–(12) должна быть дополнена еще и дифференциальными уравнениями и граничными и начальными условиями для акустической среды. Эти формулы можно взять идентичными приведенным в [11, 12]. Поэтому, в силу ограниченность объема статьи, постановка задачи для акустической среды здесь не приводится.

Конечно-элементные аппроксимации

Применяя стандартную конечно-элементную технику для аппроксимации слабой постановки задачи (1)–(12), дополненной соотношениями для акустической среды, можно получить следующую систему конечно-элементных уравнений

$$\mathbf{M}\cdot\ddot{\mathbf{a}} + \mathbf{C}\cdot\dot{\mathbf{a}} + \mathbf{K}\cdot\mathbf{a} = \mathbf{F}, \qquad \mathbf{a} = \{\mathbf{U},\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{\Psi}\}, \qquad \mathbf{F} = \{\mathbf{F}_u, -\mathbf{F}_\varphi - \varsigma_d \mathbf{F}_\varphi^t, 0\}, \tag{13}$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{uu} & 0 & \widetilde{\mathbf{R}}_{u\psi} \\ 0 & 0 & 0 \\ \widetilde{\mathbf{R}}_{u\psi}^* & 0 & -\mathbf{M}_{\psi\psi} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{uu} & 0 & \mathbf{R}_{u\psi} \\ \varsigma_d \mathbf{K}_{u\varphi}^* & 0 & 0 \\ \mathbf{R}_{u\psi}^* & 0 & -\mathbf{C}_{\psi\psi} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\varphi} & 0 \\ \mathbf{K}_{u\varphi}^* & -\mathbf{K}_{\varphi\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{K}_{\psi\psi} \end{bmatrix}, \tag{14}$$

где $\mathbf{U}$, $\boldsymbol{\Phi}$, $\boldsymbol{\Psi}$ – векторы узловых перемещений, электрических потенциалов и потенциала акустической скорости, соответственно, а матрицы и векторы правых частей в основном описаны в [11]. Отличия состоят в поверхностных матрицах и обусловлены связанностью определяющих соотношений (10) для поверхностных величин и наличием интерфейсного граничного условия (5). Именно, помимо входящих в $\mathbf{K}_{uu}$ и $\mathbf{K}_{\varphi\varphi}$ элементных матриц $\mathbf{K}_{\Gamma uu}^{ek}$ и $\mathbf{K}_{\Gamma\varphi\varphi}^{ek}$ по элементным поверхностям Γ_σ^{ek} и Γ_D^{ek}, соответственно, в матрицу $\mathbf{K}_{u\varphi}$ будут входить элементные матрицы

$$\mathbf{K}_{\Gamma u\varphi}^{ek} = \int_{\Gamma_{\sigma D}^{ek}} \mathbf{B}_{su}^{e*}\cdot\mathbf{e}^{s*}\cdot\mathbf{B}_{s\varphi}^{e}\, d\Gamma, \tag{15}$$

где $\Gamma_{\sigma D}^{ek}$ – элементные поверхности из конечно-элементной сетки на границе $\Gamma_{\sigma D} = \Gamma_\sigma \cap \Gamma_D$, т.е. на границе, где заданы как условия (4), так и (7), а матрицы $\mathbf{B}_{su}^e$ и $\mathbf{B}_{s\varphi}^e$ представлены в [11]. Кроме того, элементные матрицы $\mathbf{K}_{\Gamma uu}^{ek}$ теперь должны вычисляться не только по поверхностным элементам, расположенным на Γ_σ, но и по элементам на интерфейсной границе Γ_{sw} контакта твердой и акустической сред.

Несмотря на указанные отличия, блочные структуры входящих в (13), (14) матриц аналогичны структурам матриц, приведенных в [11, 12]. Поэтому можно сделать вывод, что для решения конечно-элементных систем (13), (14) применимы эффективные алгоритмы, описанные в [11, 12] для симметричных квазиопределенных матриц, характерных для задач с седловой точкой.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 15-19-10008.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wang J., Huang Z., Duan H., Yu S., Feng X., Wang G., Zhang W., Wang T*. Surface stress effect in mechanics of nanostructured materials // Acta Mechanica Solida Sinica. – 2011. – V. 24, No. 1. – P. 52–82.
2. *Eremeyev V.A*. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects // Acta Mech. – 2016. – V. 227. – P. 29–42.
3. *Huang G.Y., Yu S.W*. Effect of surface piezoelectricity on the electromechanical behaviour of a piezoelectric ring // Phys. Status Solidi B. – 2006. – V. 243, No 4. – P. R22-R24.
4. *Xiao J.H., Xu Y.L., Zhang F.C*. Size-dependent effective electroelastic moduli of piezoelectric nanocomposites with interface effect // Acta Mechanica. – 2011. – V. 222, No 1-2. – P. 59-67.
5. *Gu S.-T., Qin L*. Variational principles and size-dependent bounds for piezoelectric inhomogeneous materials with piezoelectric coherent imperfect interfaces // International Journal of Engineering Science. – 2014. – V. 78. – P. 89–102.
6. *Gu S.-T., Liu J.-T., He Q.-C*. The strong and weak forms of a general imperfect interface model for linear coupled multifield phenomena // International Journal of Engineering Science. – 2014. – V. 85. – P. 31–46.
7. *Nasedkin A.V., Eremeyev V.A*. Spectral properties of piezoelectric bodies with surface effects / Advanced Structured Materials. V.30. Surface effects in solid mechanics - Models, Simulations and Applications. Eds. H.Altenbach, N.F.Morozov. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. – P. 105-121.
8. *Еремеев В.А., Наседкин А.В*. О собственных колебаниях наноразмерных пьезоэлектрических тел с граничными условиями контактного типа // Известия РАН. МТТ. – 2015. – № 5. – С. 15-32.
9. *Nasedkin A.V., Eremeyev V.A*. Harmonic vibrations of nanosized piezoelectric bodies with surface effects // Z. Angew. Math. Mech. (ZAMM). – 2014. – V. 94, No. 10. – P. 878–892.
10. *Nasedkin A.V., Eremeyev V.A*. Some models for nanosized magnetoelectric bodies with surface effects / Advanced Materials – Manufacturing, Physics, Mechanics and Applications, Series «Springer Proceedings in Physics», Vol. 175, I.A. Parinov, S.-H. Chang, V.Y. Topolov (Eds.). – Springer, Heidelberg, New York, Dordrecht, London, 2016. – Ch. 27. – P. 373-391.
11. *Nasedkin A., Skaliukh A., Soloviev A.* New models of coupled active materials for finite element package ACELAN // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1637. – P. 714-723.
12. *Nasedkin A.V*. Some finite element methods and algorithms for solving acousto-piezoelectric problems / Piezoceramic materials and devices. Ed. I.A. Parinov. – Nova Science Publishers, New York, 2010. – P. 177-218.