

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЖЕСТКОСТИ МЕТАЛЛИЗАЦИИ  
ПОВЕРХНОСТИ ПОР НА СВОЙСТВА МИКРОПОРИСТОЙ ПЬЕЗОКЕРАМИКИ,  
ПОЛУЧЕННОЙ МЕТОДОМ ТРАНСПОРТА МЕТАЛЛОСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ**

© 2016 г. А.В. НАСЕДКИН, А.А. НАСЕДКИНА, А.Н. РЫБЯНЕЦ

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

В [1] был предложен оригинальный метод транспорта частиц различных веществ в пьезокерамические материалы, позволяющий получать микропористые пьезоконпозиты, внутри которых на границах керамической матрицы с порами осаждены микрочастицы из металла. Для численного определения эффективных свойств таких микропористых пьезокерамических материалов, аналогично [2], можно использовать подход, включающий метод эффективных модулей, моделирование представительных объемов и конечно-элементное решение набора статических задач теории пьезоэлектричества со специальными граничными условиями. Методология численного определения эффективных свойств микропористых пьезокерамических материалов с полностью электродированными границами пор была недавно описана в [3], но там не были учтены механические свойства металлизированных границ пор.

В настоящей работе в развитие [3] металлизация пор моделировалась условиями свободных электродов и оболочечными конечными элементами, полностью покрывающими поверхности пор. Вся технология компьютерного дизайна эффективных свойств реализована в конечно-элементном комплексе ANSYS.

Представительный объем  $\Omega$  пористого пьезокерамического композита был построен в виде регулярной конечно-элементной сетки. Вначале генерировалась базовая кубическая ячейка размера  $l_c \times l_c \times l_c$ . В центре ячейки располагался основной кубический конечный элемент с ребром  $l_p$ , определяемым через коэффициент  $k_p$  и длину  $l_c$  стороны ячейки:  $l_p = k_p l_c$ . Этот кубический элемент окружался регулярно 26 гексаэдральными конечными элементами до полного заполнения базовой ячейки. Далее базовая ячейка из 27 гексаэдральных конечных элементов транслировалась по трем координатным осям по  $n_c$  раз. В итоге полученный массив размера  $L \times L \times L$  ( $L = n_c l_c$ ) состоял из  $n_c^3$  базовых ячеек. Затем, исходя из предполагаемой пористости  $p_s$ , датчиком случайных чисел выбирались  $N_p$  центральных конечных элементов ячеек, и их материальные свойства модифицировались на свойства пор. Число  $N_p$  вычислялось по формуле  $N_p = [p_s (k_p / n_c)^3]$ , где [...] – целая часть числа. В этом случае истинная пористость  $p = N_p (k_p / n_c)^3 \approx p_s$ .

В результате получается представительный объем пористого пьезоэлектрического материала с закрытой 3-0 пористостью частично стохастической структуры. В этом объеме имеется  $N_p$  элементов – пор  $\Omega_{pi}$ , все грани  $\Gamma_{pi} = \partial\Omega_{pi}$  которых полностью контактируют с границами соседних элементов матрицы композитного материала. Все элементы задавались как пьезоэлектрические конечные элементы SOLID5 с опцией пьезоэлектрического анализа. Элементы матрицы и элементы–поры отличались только материальными свойствами.

На языке APDL ANSYS была составлена программа, генерирующая представительный объем, решающая пять задач гомогенизации с различными граничными условиями [1], автоматически вычисляющая осредненные характеристики и в итоге определяющая полный набор эффективных модулей. В разных вариантах этой программы дополнительно на границах  $\Gamma_{pi}$  генерировались связанные степени свободы электрического потенциала для моделирования граничного условия эквипотенциальных электродированных поверхностей пор и упругие оболочечные элементы SHELL181 со свойствами металла толщины  $h_s$ .

В качестве примера рассмотрим пористую пьезокерамику PZT-4. Для плотной пьезокерамики PZT-4 возьмем следующие значения ее материальных констант:  $c_{11}^E = 13.9 \cdot 10^{10}$ ,  $c_{12}^E = 7.78 \cdot 10^{10}$ ,  $c_{13}^E = 7.74 \cdot 10^{10}$ ,  $c_{33}^E = 11.5 \cdot 10^{10}$ ,  $c_{44}^E = 2.56 \cdot 10^{10}$  (Н/м<sup>2</sup>);  $e_{33} = 15.1$ ,  $e_{31} = -5.2$ ,  $e_{15} = 12.7$  (Кл/м<sup>2</sup>);  $\epsilon_{11}^S = 730\epsilon_0$ ,  $\epsilon_{33}^S = 635\epsilon_0$ ,  $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$  (Ф/м) – диэлектрическая проницаемость вакуума, плотность  $\rho = 7.5 \cdot 10^3$  (кг/м<sup>3</sup>). Для пор зададим пренебрежимо малые упругие модули  $c_{\alpha\beta}^{E,p} = \kappa c_{\alpha\beta}^E$ , пьезомодули  $e_{i\alpha}^p = \kappa$  (х1 С/м<sup>2</sup>) и  $\epsilon_{ii}^{S,p} = \epsilon_0$ . Будем считать, что границы пор покрыты никелем с плотностью  $\rho^m = 8.8 \cdot 10^3$  (кг/м<sup>3</sup>), модулем Юнга  $E^m = 20.4 \cdot 10^{10}$  (Н/м<sup>2</sup>) и коэффициентом Пуассона  $\nu^m = 0.28$ . Для представительного объема примем следующие геометрические параметры:  $L = 500$  (мкм),  $n_c = 10$ ,  $k_p = 0.9$ . В этом случае поры будут иметь ребра  $l_p = k_p L / n_c = 45$  (мкм).

Рассмотрим три варианта модели пористой пьезокерамики. В варианте 1 учтем металлизацию пор граничным условием свободных электродов [3] и оболочечными упругими элементами на всех границах  $\Gamma_{pi}$ . В варианте 2 металлизация учитывается только граничным условием свободных электродов. Таким образом, вариант 2 можно считать предельным случаем варианта 1, когда толщина  $h_s$  оболочечных элементов пренебрежимо мала. Наконец, в варианте 3 рассматривается обычная пористая пьезокерамика, когда на границах пор нет условий эквипотенциальности и оболочечные элементы отсутствуют.

Для варианта 1 примем достаточно большую толщину оболочечных элементов:  $h_s = 1$  (мкм). При такой толщине массовая доля металла на границах пор по сравнению с массой пьезокерамики в представительном объеме при пористости  $p = 0.1$  составляет 2.24 %, а при пористости  $p = 0.5$  – 6.14 %.

Будем анализировать относительные эффективные модули. Например,  $r(c_{\alpha\beta}^E) = c_{\alpha\beta}^{E,eff} / c_{\alpha\beta}^E$  – значения эффективных модулей  $c_{\alpha\beta}^{E,eff}$ , отнесенные к соответствующим значениям модулей  $c_{\alpha\beta}^E$  сплошной пьезокерамики, и т.д. Также будем использовать индекс  $l = 1, 2, 3$  в уточненных обозначениях  $r(c_{\alpha\beta}^E)_l = (c_{\alpha\beta}^{E,eff})_l / c_{\alpha\beta}^E$  для указания номера варианта  $l$ , для которого проводился расчет модулей.

Типичное поведение эффективных модулей жесткости и диэлектрических проницаемостей показано на рис. 1 на примере модулей  $(c_{33}^{E,eff})_l$  и  $(\epsilon_{33}^{S,eff})_l$ . Как видно (рис. 1, а), модули жесткости убывают с ростом пористости для всех рассматриваемых вариантов, причем одно только появление условия эквипотенциальности при металлизации (вариант 2) дает немного большее убывание по сравнению с вариантом обычной пористой пьезокерамики. Учет жесткости металлизированных границ пор (вариант 3), естественно, приводит к меньшему убыванию эффективных модулей упругости при росте  $p$ .

Между тем (рис. 1, б), эффективные модули диэлектрических проницаемостей обычной пористой пьезокерамики убывают с ростом пористости (кривая 3), но эффективные модули диэлектрических проницаемостей пористой пьезокерамики с металли-

зированными порами, наоборот, возрастают с ростом пористости (кривые 1 и 2), причем учет жесткости приводит к немного меньшему росту диэлектрических проницаемостей.

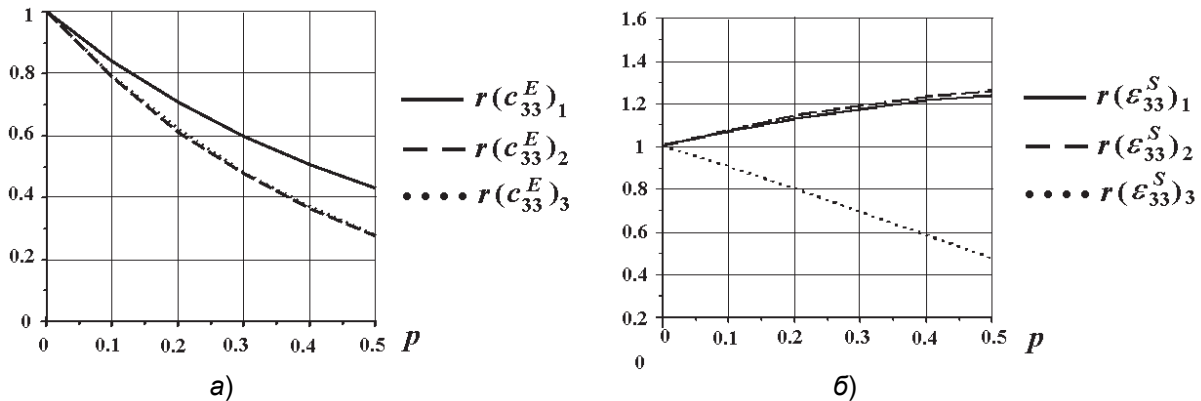


Рис. 1. Зависимости эффективных упругих жесткостей (а) и диэлектрических проницаемостей (б) от пористости.

Еще более интересно поведение пьезомодулей (рис. 2, 3). Так, пьезомодули  $(e_{33}^{\text{eff}})_3$  и  $(e_{31}^{\text{eff}})_3$  для обычной пористой пьезокерамики убывают с ростом пористости. Однако, для пьезокерамики с металлизированными поверхностями пор пьезомодули  $(e_{33}^{\text{eff}})_m$ ,  $m = 1, 2$ , также убывают с ростом  $p$ , причем более быстро, чем  $(e_{33}^{\text{eff}})_3$ , в то время как пьезомодули  $(e_{31}^{\text{eff}})_m$ ,  $m = 1, 2$ , возрастают при увеличении пористости.

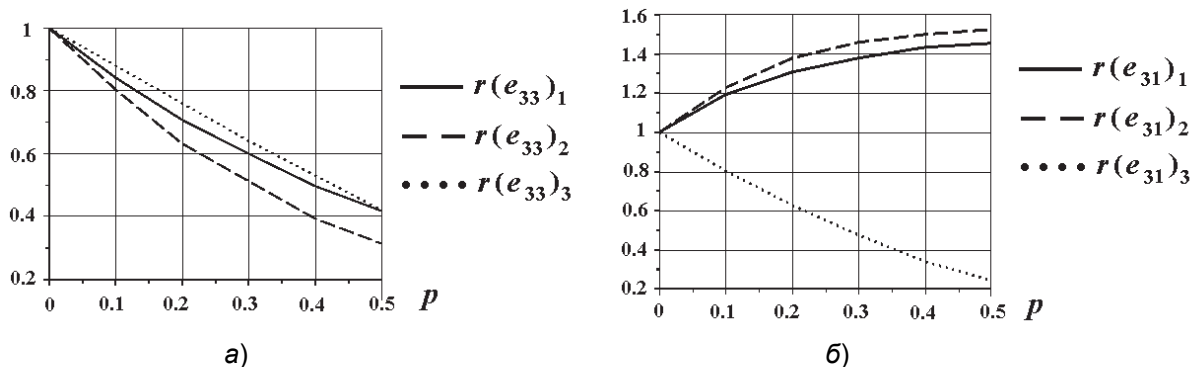


Рис. 2. Зависимости эффективных пьезомодулей  $r(e_{33})_l$  (а) и  $r(e_{31})_l$  (б) от пористости.

Для пьезомодуля  $(d_{33}^{\text{eff}})_3$  обычной пористой пьезокерамики известно его необычное свойство слабой зависимости от пористости, хотя значения пьезомодуля  $(d_{31}^{\text{eff}})_3$  убывают с ростом  $p$ . Для пористой пьезокерамики с металлизированными границами пор, как видно из рис. 3, значения пьезомодулей  $(d_{33}^{\text{eff}})_2$  и  $(|d_{31}^{\text{eff}}|)_2$  возрастают с ростом  $p$ , причем  $(|d_{31}^{\text{eff}}|)_2$  растет быстрее, чем  $(d_{33}^{\text{eff}})_2$ . Так, при пористости 50 % ( $p = 0.5$ ) эффективный пьезомодуль  $(|d_{31}^{\text{eff}}|)_2$  почти в два раза превосходит аналогичное значение  $|d_{31}|$  для сплошной керамики. Модуль  $(|d_{31}^{\text{eff}}|)_1$  растет медленнее, чем  $(|d_{31}^{\text{eff}}|)_2$ , а модуль  $(d_{33}^{\text{eff}})_1$  медленно убывает с ростом пористости.

Таким образом, учет жесткости границ пор уменьшает экстремальность свойств пористой пьезокерамики с металлизированными границами. Точнее говоря, чем мень-

ше толщина поверхностного слоя металла на границах пор, тем лучше проявляется рост или убывание эффективных модулей.

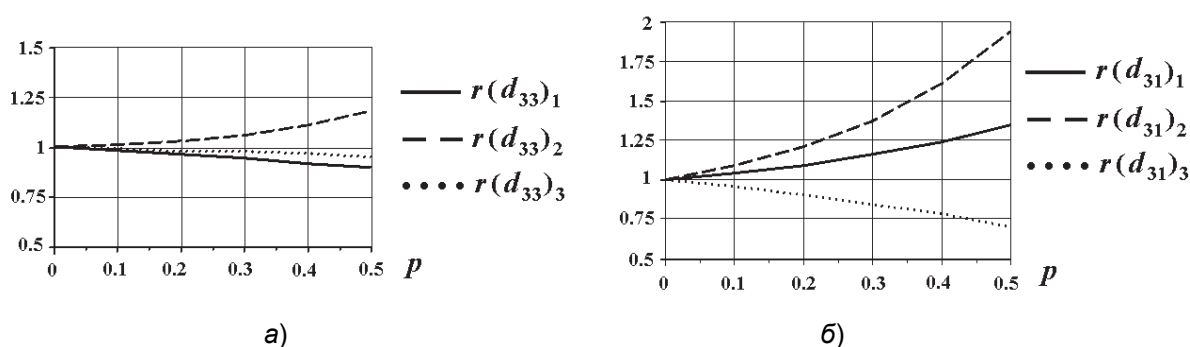


Рис. 3. Зависимости эффективных пьезомодулей  $r(d_{33})_i$  (а) и  $r(d_{31})_i$  (б) от пористости.

Итак, в настоящей работе методами механики композитов и математического моделирования исследованы свойства пористой пьезокерамики с полностью металлизированными поверхностями пор. Металлизация пор учитывалась как электрическими граничными условиями эквипотенциальности, так и размещением упругих оболочек с металлическими свойствами на границах пор. Результаты вычислительных экспериментов показали, что микропористая пьезокерамика с металлизированными поверхностями пор имеет ряд необычных свойств, перспективных для практических применений. При этом наиболее экстремальные свойства получаются при наименьшей толщине слоя металлизации. Дальнейшее развитие исследований может быть связано с более адекватными структурами представительным объемам и с учетом размерных эффектов при переходе на нануровень.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-01-00785.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rybyanets A.N., Naumenko A.A. Nanoparticles transport in ceramic matrixes: a novel approach for ceramic matrix composites fabrication // Journal of Modern Physics. – 2013. – V. 4. – P. 1041–1049.
2. Nasedkin A.V., Shevtsova M.S. Improved finite element approaches for modeling of porous piezocomposite materials with different connectivity / Ferroelectrics and Superconductors: Properties and Applications. Ed. I.A. Parinov. – N.Y.: Nova Science Publ., 2011. – P. 231–254.
3. Наседкин А.В., Наседкина А.А., Рыбьянец А.Н. Численный анализ влияния металлизации поверхностей пор на эффективные свойства микропористой пьезокерамики стохастической структуры // Теория операторов, комплексный анализ и математическое моделирование: тезисы докладов XIII Межд. научн. конф. (пос. Дивноморское, 7-14 сентября 2016). – Владикавказ: ЮМИ ВНЦ РАН, 2016. – С. 168-170.