

УДК 539.3

О МОДЕЛЯХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ СО СВЯЗАННЫМИ ПОВЕРХНОСТНЫМИ ЭФФЕКТАМИ*

© 2017 г.

Наседкин А.В.¹, Еремеев В.А.^{1,2,3}

¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация

²Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Российская Федерация

³Гданьский политехнический университет, Гданьск, Польша

nasedkin@math.sfedu.ru

Поступила в редакцию 11.08.2017

Рассматриваются динамические задачи для пьезоэлектрических наноразмерных тел с учетом поверхностных эффектов и затухания. Для этих задач предложена новая математическая модель, обобщающая модель упругой среды с демпфированием по Рэлею и модель Гуртина – Мурдоха учета поверхностных эффектов. Новая постановка задачи учитывает электромеханическую связанность механизмов затухания и поверхностных эффектов как в объеме тела, так и на поверхности. Обсуждаются особенности использования метода конечных элементов для численного решения рассматриваемых задач. Показано, что для статических и нестационарных задач уравнения, полученные методом конечных элементов, можно привести к формам, содержащим только симметричные квазиопределенные матрицы. Отмечается, что для нестационарных задач и для задач об установившихся колебаниях возможно применение метода суперпозиции, приводящего к независимым уравнениям для амплитуд колебаний отдельных мод. Численные примеры демонстрируют влияние поверхностных модулей на локальные и на интегральные характеристики колебательных процессов наноразмерных пьезоэлектрических тел.

Ключевые слова: пьезоэлектричество, наномеханика, поверхностные напряжения, пьезоэлектрические поверхностные эффекты, модель Гуртина – Мурдоха, метод конечных элементов, квазиопределенные матрицы.

Введение

В настоящее время имеется ряд моделей, отражающих экспериментально установленный факт изменения модулей нанообъектов по сравнению с модулями обычных материалов. Среди этих моделей для упругих наноразмерных тел наиболее популярной является модель Гуртина – Мурдоха с введением поверхностных напряжений [1–7]. Эта модель была распространена на пьезоэлектрические и магнитоэлектрические наноразмерные тела (см., например, [8–17]). В настоящей статье в

* Выполнено при поддержке РФФ (проект № 15-19-10008) в части разработки общей модели и РФФИ (грант № 16-01-00785) в части конечно-элементной реализации.

развитие подходов [12–17] предлагается модель наноразмерного пьезоэлектрического тела, в которой введены поверхностные напряжения и электрическая индукция со связанными определяющими соотношениями для поверхностных полей. Аналогично [12–17], в модели учтены демпфирующие свойства, а для численных решений представлен конечно-элементный подход, приводящий к симметричным структурам конечно-элементных квазиопределенных матриц, характерных для задач с седловой точкой [18].

1. Модели пьезоэлектрической среды с учетом демпфирования и поверхностных эффектов

Рассмотрим объем Ω , занимаемый пьезоэлектрическим материалом. Пусть $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$ – вектор пространственных координат; t – время; $\Gamma = \partial\Omega$ – граница тела; $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$ – вектор внешней единичной нормали; $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ – вектор перемещений; $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$ – электрический потенциал. Следуя [19], примем в объеме Ω в векторно-матричных обозначениях следующую систему уравнений электроупругости с обобщенным демпфированием по Рэлею:

$$\mathbf{L}^T(\nabla) \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{f} = \rho(\ddot{\mathbf{u}} + \alpha_d \dot{\mathbf{u}}), \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = q_\Omega, \quad (1)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{S} + \beta_d \dot{\mathbf{S}}) - \mathbf{e}^T \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{D} + \zeta_d \dot{\mathbf{D}} = \mathbf{e} \cdot (\mathbf{S} + \zeta_d \dot{\mathbf{S}}) + \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}, \quad (2)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{L}(\nabla) \cdot \mathbf{u}, \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (3)$$

$$\mathbf{L}^T(\nabla) = \begin{bmatrix} \partial_1 & 0 & 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ 0 & \partial_2 & 0 & \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla = \begin{Bmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{Bmatrix}, \quad (4)$$

где $\mathbf{T} = \{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}\}$, $\mathbf{S} = \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12}\}$ – массивы компонент напряжений σ_{ij} и деформаций ε_{ij} ; \mathbf{D} и \mathbf{E} – векторы электрической индукции и напряженности электрического поля; ρ – плотность; \mathbf{f} – вектор плотности массовых сил; q_Ω – объемная плотность свободных зарядов (обычно $q_\Omega = 0$); $\mathbf{c} = \mathbf{c}^E$ – матрица модулей жесткости размером 6×6 ; \mathbf{e} – матрица пьезомодулей размером 3×6 ; $\mathbf{k} = \mathbf{k}^S = \mathbf{e}^S$ – матрица диэлектрических проницаемостей размером 3×3 ; $\alpha_d, \beta_d, \zeta_d$ – коэффициенты демпфирования; $(\dots) \cdot (\dots)$ – операция скалярного умножения векторов, матриц или векторов и матриц.

Как обычно в теории электроупругости [19], предполагается, что материальные модули имеют свойства симметрии $c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$, $\kappa_{ij} = \kappa_{ji}$ и выполняется условие положительной определенности внутренней энергии:

$$\forall \mathbf{S}, \mathbf{E} \quad \exists W_{\Omega 1}, W_{\Omega 2} > 0: \quad \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{E}^T \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \geq W_{\Omega 1} \mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S} + W_{\Omega 2} \mathbf{E}^T \cdot \mathbf{E}. \quad (5)$$

Для учета наноразмерных факторов в развитие модели Гуртина – Мурдоха примем, что на границе Γ действуют поверхностные напряжения \mathbf{T}^s , поверхностная электрическая индукция \mathbf{D}^s и выполняются соотношения

$$\mathbf{L}^T(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{T} = \mathbf{L}^T(\nabla^s) \cdot \mathbf{T}^s + \mathbf{p}, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \nabla^s \cdot \mathbf{D}^s - q, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (6)$$

где ∇^s – поверхностный набла-оператор, $\nabla^s = \nabla - \mathbf{n}(\partial/\partial r)$; r – координата, отсчитываемая вдоль нормали к поверхности; \mathbf{p}, q – известные (активные) или неизвестные (реактивные) вектор напряжений и поверхностная плотность электрических

зарядов. Будем считать, что поверхностные напряжения \mathbf{T}^s и электрическая индукция \mathbf{D}^s связаны с поверхностными деформациями \mathbf{S}^s и поверхностной напряженностью электрического поля $\hat{\mathbf{E}}^s$ определяющими соотношениями, по структуре аналогичными (2):

$$\mathbf{T}^s = \mathbf{c}^s \cdot (\mathbf{S}^s + \beta_d \dot{\mathbf{S}}^s) - \mathbf{e}^{sT} \cdot \mathbf{E}^s, \quad \mathbf{D}^s + \zeta_d \dot{\mathbf{D}}^s = \mathbf{e}^s \cdot (\mathbf{S}^s + \zeta_d \dot{\mathbf{S}}^s) + \mathbf{k}^s \cdot \mathbf{E}^s, \quad (7)$$

где

$$\mathbf{S}^s = \mathbf{L}(\nabla^s) \cdot \mathbf{u}^s, \quad \mathbf{u}^s = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad \mathbf{E}^s = -\nabla^s \phi, \quad (8)$$

\mathbf{I} – единичная матрица; \mathbf{c}^s , \mathbf{e}^s , \mathbf{k}^s – матрицы поверхностных модулей упругих жесткостей, пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей соответственно.

Для поверхностных материальных модулей выполняются свойства симметрии $c_{\alpha\beta}^s = c_{\beta\alpha}^s$, $\kappa_{ij}^s = \kappa_{ji}^s$ и $\forall \mathbf{x} \in \Gamma$ в локальной системе координат, связанной с тангенциальными ортами $\boldsymbol{\tau}_1$, $\boldsymbol{\tau}_2$ и нормалью \mathbf{n} , выполняется условие положительной определенности внутренней поверхностной энергии:

$$\forall \hat{\mathbf{S}}^s, \hat{\mathbf{E}}^s \quad \exists W_{\Gamma_1}, W_{\Gamma_2} > 0: \quad \hat{\mathbf{S}}^{sT} \cdot \hat{\mathbf{c}}^s \cdot \hat{\mathbf{S}}^s + \hat{\mathbf{E}}^{sT} \cdot \hat{\mathbf{k}}^s \cdot \hat{\mathbf{E}}^s \geq W_{\Gamma_1} \hat{\mathbf{S}}^{sT} \cdot \hat{\mathbf{S}}^s + W_{\Gamma_2} \hat{\mathbf{E}}^{sT} \cdot \hat{\mathbf{E}}^s, \quad (9)$$

где $\hat{\mathbf{c}}^s$, $\hat{\mathbf{k}}^s$ – матрицы поверхностных модулей жесткости и диэлектрических проницаемостей, пересчитанных в системе координат $\boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2 \mathbf{n}$; $\hat{\mathbf{S}}^s = \{\hat{S}_1^s, \hat{S}_2^s, 0, 0, 0, \tilde{S}_6^s\}$, $\hat{\mathbf{E}}^s = \{\hat{E}_1^s, \hat{E}_2^s, 0\}$ – массивы компонент поверхностных деформаций и напряженности электрического поля в той же системе координат.

2. Граничные и начальные условия

Для постановки начально-краевых задач требуются граничные и начальные условия. Для пьезоэлектрического тела граничные условия можно подразделить на два типа: механические и электрические.

Для формулировки механических граничных условий предположим, что граница Γ подразделена на две части: Γ_σ и Γ_u ($\Gamma = \Gamma_\sigma \cup \Gamma_u$). На части Γ_σ действуют поверхностные напряжения \mathbf{T}^s и задан вектор механических напряжений \mathbf{p}_Γ , то есть $\mathbf{p} = \mathbf{p}_\Gamma$, и в соответствии с (6) имеем следующее граничное условие:

$$\mathbf{L}^T(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{T} = \mathbf{L}^T(\nabla^s) \cdot \mathbf{T}^s + \mathbf{p}_\Gamma, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\sigma. \quad (10)$$

На части Γ_u предполагается, что задан вектор перемещений \mathbf{u}_Γ , то есть

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_\Gamma, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_u. \quad (11)$$

Для формулировки электрических граничных условий предположим, что существует другое разбиение границы Γ на два подмножества: Γ_D и Γ_ϕ .

Участок Γ_D свободен от электродов, и на нем известна поверхностная плотность электрических зарядов q_Γ , то есть в (6) $q = q_\Gamma$, и поэтому имеем

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \nabla^s \cdot \mathbf{D}^s - q_\Gamma, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad (12)$$

причем обычно $q_\Gamma = 0$.

Подмножество Γ_ϕ есть объединение $M+1$ не граничащих друг с другом участков Γ_{ϕ_j} ($j \in J_Q \cup J_V$, $J_Q = \{1, 2, \dots, m\}$, $J_V = \{0, m+1, m+2, \dots, M\}$), покрытых бесконечно тонкими электродами. На этих участках зададим следующие граничные условия:

$$\varphi = \Phi_j, \quad \int_{\Gamma_{\varphi j}} q d\Gamma = -Q_j, \quad I_j = \pm \dot{Q}_j, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\varphi j}, \quad j \in J_Q, \quad (13)$$

$$\varphi = V_j, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\varphi j}, \quad \Gamma_{\varphi 0} \neq \wedge, \quad j \in J_V, \quad (14)$$

где величины Φ_j , Q_j , I_j и V_j зависят только от t , причем значения электрического потенциала Φ_j изначально не известны, а знак + или – в третьей формуле (13) зависит от выбора направления тока во внешней цепи.

Заканчивают постановку нестационарных задач начальные условия

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_*(\mathbf{x}), \quad \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{r}_*(\mathbf{x}), \quad \varphi = \varphi_*(\mathbf{x}), \quad t = 0, \quad \mathbf{x} = \Omega, \quad (15)$$

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

В настоящей статье, в отличие от публикаций [7–11], в модели (1)–(15) введены демпфирующие слагаемые с коэффициентами затухания α_d , β_d , ζ_d , а в развитие работ [12–17] здесь приняты связанные определяющие соотношения (7) для поверхностных величин.

3. Конечно-элементные аппроксимации

Применяя стандартную конечно-элементную технику для аппроксимации слабой постановки задачи (1)–(15), можно получить систему уравнений

$$\mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{a}} + \mathbf{C} \cdot \dot{\mathbf{a}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{F}, \quad \mathbf{a} = \{\mathbf{U}, \Phi\}, \quad \mathbf{F} = \{\mathbf{F}_u, -\mathbf{F}_\varphi - \zeta_d \mathbf{F}_\varphi^t\}, \quad (16)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{uu} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{uu} & 0 \\ \zeta_d \mathbf{K}_{u\varphi}^T & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\varphi} \\ \mathbf{K}_{u\varphi}^T & -\mathbf{K}_{\varphi\varphi} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

где \mathbf{U} , Φ – векторы узловых перемещений и электрических потенциалов, матрицы описаны в [16, 17], а векторы правых частей определяются внешними воздействиями. В отличие от задач для тел обычных размеров [19], здесь в матрицы \mathbf{K}_{uu} , $\mathbf{K}_{u\varphi}$ и $\mathbf{K}_{\varphi\varphi}$ входят матрицы $\mathbf{K}_{\Gamma_{uu}}$, $\mathbf{K}_{\Gamma_{u\varphi}}$ и $\mathbf{K}_{\Gamma_{\varphi\varphi}}$, обусловленные граничными условиями (10), (12) и определяющими соотношениями (7) для поверхностных величин. Эти матрицы собираются в результате ансамблирования элементных матриц $\mathbf{K}_{\Gamma_{uu}}^{ek}$, $\mathbf{K}_{\Gamma_{u\varphi}}^{ek}$ и $\mathbf{K}_{\Gamma_{\varphi\varphi}}^{ek}$:

$$\mathbf{K}_{\Gamma_{uu}}^{ek} = \int_{\Gamma_{\sigma}^{ek}} \mathbf{B}_u^{seT} \cdot \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{B}_u^{se} d\Gamma, \quad \mathbf{K}_{\Gamma_{u\varphi}}^{ek} = \int_{\Gamma_{\sigma D}^{ek}} \mathbf{B}_u^{seT} \cdot \mathbf{e}^{sT} \cdot \mathbf{B}_\varphi^{se} d\Gamma, \\ \mathbf{K}_{\Gamma_{\varphi\varphi}}^{ek} = \int_{\Gamma_D^{ek}} \mathbf{B}_\varphi^{seT} \cdot \mathbf{\kappa}^s \cdot \mathbf{B}_\varphi^{se} d\Gamma, \quad \mathbf{B}_u^{se} = \mathbf{L}(\nabla^s) \cdot \mathbf{N}_u^{sT}, \quad \mathbf{B}_\varphi^{se} = \nabla^s \mathbf{N}_\varphi^{sT},$$

где Γ_{σ}^{ek} , Γ_D^{ek} , $\Gamma_{\sigma D}^{ek}$ – элементные поверхности из конечно-элементной сетки на границах Γ_{σ} , Γ_D , $\Gamma_{\sigma D} = \Gamma_{\sigma} \cap \Gamma_D$ соответственно; \mathbf{N}_u^{sT} – матрица элементных базисных функций для поверхностных перемещений; \mathbf{N}_φ^{sT} – вектор-строка элементных базисных функций для электрического потенциала на поверхности.

Отметим, что в силу свойств положительной определенности объемной и поверхностной энергий (5), (9) матрицы \mathbf{K}_{uu} и $\mathbf{K}_{\varphi\varphi}$ будут положительно определенными (для \mathbf{K}_{uu} – при наличии главных граничных условий, исключающих движение тела как жесткого целого). Поэтому симметричная матрица \mathbf{K} в (17) будет иметь свойства квазиопределенной матрицы, характерной для задач с седловой точкой [18]. Как известно, для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с симметричными квазиопределенными матрицами существуют экономичные пря-

мые и итерационные методы [18]. При применении прямых схем интегрирования по времени нестационарных задач (16), (17) на j -м временном слое можно использовать аппроксимирующие операторы [19]: $\ddot{\mathbf{a}}_j \approx a_0 \mathbf{a}_{j+1} + a_1 \mathbf{a}_j + a_2 \mathbf{a}_{j-1}$, $\dot{\mathbf{a}}_j \approx b_0 \mathbf{a}_{j+1} + b_1 \mathbf{a}_j + b_2 \mathbf{a}_{j-1}$, $\mathbf{a}_j \approx c_0 \mathbf{a}_{j+1} + c_1 \mathbf{a}_j + c_2 \mathbf{a}_{j-1}$, $\mathbf{a}_j = \mathbf{a}(t_j)$, $t_{j+1} = t_j + \Delta t$. Тогда после умножения групп уравнений (16) для Φ на $\chi = c_0(b_0 \zeta_d + c_0)^{-1}$ получается СЛАУ вида

$$\mathbf{K}^{eff} \cdot \mathbf{a}_{j+1} = \mathbf{F}^{eff}(\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_{j-1}), \quad \mathbf{K}^{eff} = \begin{bmatrix} a_0 \mathbf{M}_{uu} + b_0 \mathbf{C}_{uu} + c_0 \mathbf{K}_{uu} & c_0 \mathbf{K}_{u\varphi} \\ c_0 \mathbf{K}_{u\varphi}^T & -\chi c_0 \mathbf{K}_{\varphi\varphi} \end{bmatrix},$$

в которой матрица \mathbf{K}^{eff} также симметрична и квазиопределена.

Наконец, в пользу предложенной модели говорит то, что для нестационарных задач и задач об установившихся колебаниях в случае $\beta_d = \zeta_d$ применим метод суперпозиции, разделяющий уравнения метода конечных элементов (МКЭ) на независимые уравнения для амплитуд колебаний отдельных мод [17].

4. Численные эксперименты

Рассмотрим задачу о собственных колебаниях по закону $\exp(i\omega t)$ продольно поляризованного пьезоэлектрического бруса, выполненного из оксида цинка (ZnO). Пусть стержень имеет длину $l = 10^{-6}$ м и полуширину $a = 0,025 \cdot 10^{-6}$ м. Для оксида цинка (материала класса *bmm*) примем следующие объемные модули [20]:

$$\begin{aligned} \rho &= 5,676 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3, & c_{11}^E &= 2,097 \cdot 10^{11}, & c_{12}^E &= 1,211 \cdot 10^{11}, & c_{13}^E &= 1,051 \cdot 10^{11}, \\ c_{33}^E &= 2,109 \cdot 10^{11}, & c_{44}^E &= 0,425 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2, & e_{31} &= -0,61, & e_{33} &= 1,14, \\ e_{15} &= -0,59 \text{ Кл/м}^2, & \varepsilon_{11}^S &= 7,38 \varepsilon_0, & \varepsilon_{33}^S &= 7,83 \varepsilon_0, & \varepsilon_0 &= 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}. \end{aligned}$$

Предположим, что брус совершает продольные колебания в условиях плоской деформации в плоскости Oxz декартовой системы координат $Oxyz$, где ось z направлена вдоль длины бруса, а начало системы координат выбрано в плоскости нижнего торца, причем брус располагается в области $|x| \leq a$, $0 \leq z \leq l$. Будем считать, что торцы бруса электродированы, на верхнем электроде $z = l$ ($\Gamma_{\varphi 0}$) электрический потенциал равен нулю $\varphi = 0$, то есть выполняются однородные главные граничные условия (14) с $V_0 = 0$, для нижнего электрода $z = 0$ ($\Gamma_{\varphi 1}$) в задаче об определении частот f_{rk} электрических резонансов $\varphi = 0$, а для задачи об определении частот f_{ak} электрических антирезонансов выполняются граничные условия (13) с $Q_1 = 0$, где $f = \omega/(2\pi)$. Нижний торец бруса считается жестко зашпеленным (то есть является поверхностью Γ_u с $\mathbf{u}_{\Gamma} = 0$ в (11)), а верхний торец и боковая поверхность являются поверхностями Γ_{σ} с $\mathbf{p}_{\Gamma} = 0$ в (10). Будем также считать боковую поверхность $x = a$, $0 \leq z \leq l$ поверхностью Γ_D , на которой выполняются условия (12) с $q_{\Gamma} = 0$, на грани $x = 0$ примем условия симметрии.

Отметим, что для обеспечения точности конечно-элементных расчетов в силу малости геометрических размеров бруса здесь удобно перейти к безразмерным координатам и параметрам, которые можно ввести следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{l}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{l}, \quad \tilde{\varphi} = \frac{\varphi}{E_d l}, \quad \tilde{\mathbf{c}}^E = \frac{\mathbf{c}^E}{c_{33}^E}, \quad \tilde{\mathbf{e}} = \frac{\mathbf{e} E_d}{c_{33}^E}, \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^S = \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^S}{\varepsilon_{11}^S}, \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{c_{33}^E},$$

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{\mathbf{E}}{E_d}, \quad \tilde{\mathbf{D}} = \frac{\mathbf{D}E_d}{c_{33}^E}, \quad \tilde{\omega} = \omega T_d, \quad T_d = \frac{l}{v_3^E}, \quad v_3^E = \sqrt{\frac{c_{33}^E}{\rho}}, \quad E_d = \sqrt{\frac{c_{33}^E}{\varepsilon_{11}^S}}.$$

Тогда задача может решаться в безразмерном виде для величин, помеченных знаком тильда, и после ее решения можно вернуться к размерным величинам.

Для решения задачи будем использовать конечно-элементный комплекс ANSYS, определяя частоты электрических резонансов и антирезонансов по методологии, описанной в [21]. Для области $|x| \leq a$, $0 \leq z \leq l$ строилась каноническая сетка из четырехузловых элементов PLANE13 с опциями пьезоэлектрического анализа и плоской деформации при разбиении по x на $n_x = 4$ элемента, а по z – на $n_z = 40$ элементов. Для учета связанных поверхностных эффектов дорабатывались дополнительные области

$$\Omega_x^s = \{a \leq x \leq a + h^s, 0 \leq z \leq l\} \text{ и } \Omega_z^s = \{|x| \leq a, l \leq z \leq l + h^s\},$$

где при расчетах принималось $h^s = 0,01 \cdot 10^{-6}$ м. В этих областях генерировались согласованные регулярные конечно-элементные сетки из элементов PLANE13 с теми же опциями, но с материальными модулями $\bar{c}_{\alpha\beta}^E = \eta_c c_{\alpha\beta}^E$, $\bar{e}_{k\beta}^E = \eta_e e_{k\beta}^E$ и $\bar{\kappa}_{km}^E = \eta_\kappa \kappa_{km}^E$, причем по h^s помещалось только по одному конечному элементу, а множители η_c , η_e , η_κ при расчетах варьировались. В дополнительных областях для имитации поверхностных эффектов связывались степени свободы U_{xj} , U_{yj} , Φ_j для узлов $\{x_j, z_j\}$ с одинаковыми координатами по z в области Ω_x^s и по x в области Ω_z^s . Как несложно показать, такая технология эквивалентна использованию линейных двухузловых пьезоэлектрических элементов с поверхностными модулями $c_{\alpha\beta}^s = h^s \bar{c}_{\alpha\beta}^E$, $e_{k\beta}^s = h^s \bar{e}_{k\beta}^E$ и $\kappa_{km}^s = h^s \bar{\kappa}_{km}^E$.

На рис. 1а приведены графики зависимостей первых двух частот электрических резонансов f_{r1} и f_{r2} от коэффициента $\eta = \eta_c = \eta_e = \eta_\kappa$, откладываемого по оси абсцисс с логарифмической шкалой. В данном случае рассматриваются связанные поверхностные эффекты с единым коэффициентом пропорциональности η между поверхностными и объемными упругими, пьезоэлектрическими и диэлектрическими модулями. Из рис. 1а видно, что при возрастании поверхностных модулей собственные частоты также возрастают, причем наиболее существенно при $\lg \eta > 0$.

Определив наряду с частотами электрических резонансов и частоты электрических антирезонансов f_{a1} и f_{a2} , можно найти динамические коэффициенты электромеханической связи $k_{dj} = \sqrt{1 - (f_{rj}/f_{aj})^2}$, отвечающие за электрическую активность соответствующих мод колебаний и за эффективность преобразования механической и электрической энергий. Соответствующие графики зависимости коэффициентов связи k_{dj} от η приведены на рис. 1б. Видно, что для рассматриваемого примера коэффициенты электромеханической связи k_{d1} и k_{d2} убывают с ростом величин поверхностных модулей, причем наиболее существенно при $\eta > 10^{-1}$.

Если учитывать только поверхностные напряжения, положив $\eta_e = \eta_\kappa = 10^{-6}$ и варьируя коэффициент η_c , то графики для резонансных частот будут близкими к приведенным на рис. 1а, но коэффициенты связи будут убывать значительно быстрее, чем на рис. 1б при $\lg \eta > 0$, поскольку антирезонансные частоты при учете только механических поверхностных эффектов будут существенно больше, чем соответствующие частоты, полученные при учете связанных поверхностных эффектов с единым множителем η . Как показывают расчеты, учет поверхностных пьезомодулей приводит к росту резонансных частот, большей их электрической активно-

сти и большим амплитудам колебаний в окрестности свободного торца, а учет поверхностных диэлектрических проницаемостей приводит к уменьшению резонансных частот, но влияние пьезомодулей оказывается большим.

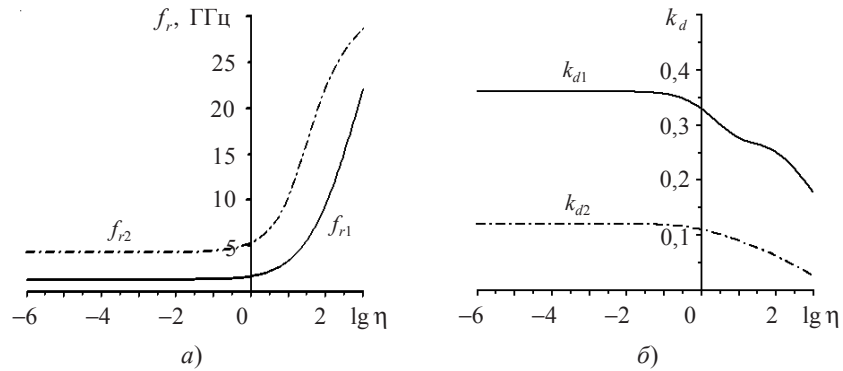


Рис. 1

Влияние поверхностных диэлектрических проницаемостей показано на рис. 2, где изображены зависимости первых резонансных частот и коэффициентов связи от η_k при пренебрежимо малых упругих жесткостях и пьезомодулях ($\eta_c = \eta_e = 10^{-6}$). Как видно из рис. 2а, при возрастании поверхностных диэлектрических проницаемостей собственные частоты убывают. Малое убывание резонансных частот объясняется небольшими коэффициентами диэлектрических проницаемостей и пьезомодулей для оксида цинка. Между тем коэффициенты электромеханической связи для рассматриваемого примера убывают с ростом η_k быстрее, чем резонансные частоты (рис. 2б).

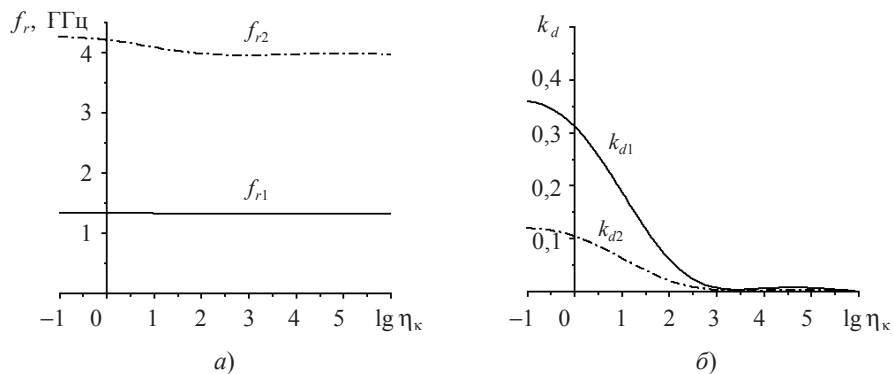


Рис. 2

Аналогичные результаты при несвязанных механических и электрических поверхностных эффектах, а также результаты, иллюстрирующие влияние механических и электрических граничных условий для задачи о колебаниях наноразмерного стержня, приведены в [12, 13].

Заключение

В статье представлены математические и конечно-элементные модели для пьезоэлектрических тел со связанными электромеханическими поверхностными эффектами, описывающие колебания наноразмерных устройств. Результаты численных

расчетов показывают различное влияние поверхностных модулей упругости, пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей на характеристики колебаний наноразмерных пьезоэлектрических тел. Для дальнейших исследований по определению величин поверхностных модулей необходимы экспериментальные данные, а также формулировки и решения серии задач для канонических тел с поверхностными эффектами, позволяющие по резонансным частотам определять соответствующие объемные и поверхностные модули.

Список литературы

1. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of elasticity at the nanoscale. *Advances in Applied Mechanics*. 2008. Vol. 42. P. 1–68.
2. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects. *Acta Mechanica*. 2016. Vol. 227. No 1. P. 29–42.
3. Gurtin M.E., Murdoch A.I. A continuum theory of elastic material surfaces. *Arch. Rat. Mech. Analysis*. 1975. Vol. 57. No 4. P. 291–323.
4. Hamilton J.C., Wolfer W.G. Theories of surface elasticity for nanoscale objects. *Surface Science*. 2009. Vol. 603. P. 1284–1291.
5. Povstenko Y.Z. Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface-tension in solids. *J. Mech. Phys. Solids*. 1993. Vol. 41. P. 1499–1514.
6. 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. Vol. 24. No 1. P. 52–82.
7. Wang K.F., Wang B.L., Kitamura T. A review on the application of modified continuum models in modeling and simulation of nanostructures. *Acta Mechanica Sinica*. 2016. Vol. 32. No 1. P. 83–100.
8. Huang G.Y., Yu S.W. Effect of surface piezoelectricity on the electromechanical behaviour of a piezoelectric ring. *Phys. Status Solidi B*. 2006. Vol. 243. No 4. P. R22–R24.
9. Xiao J.H., Xu Y.L., Zhang F.C. Size-dependent effective electroelastic moduli of piezoelectric nanocomposites with interface effect. *Acta Mechanica*. 2011. Vol. 222. No 1–2. P. 59–67.
10. Gu S.-T., Qin L. Variational principles and size-dependent bounds for piezoelectric inhomogeneous materials with piezoelectric coherent imperfect interfaces. *Int. J. Eng. Sci.* 2014. Vol. 78. P. 89–102.
11. 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. *Int. J. Eng. Sci.* 2014. Vol. 85. P. 31–46.
12. Еремеев В.А., Наседкин А.В. О собственных колебаниях наноразмерных пьезоэлектрических тел с граничными условиями контактного типа. *Изв. РАН. Механика твердого тела*. 2015. №5. С. 15–32.
13. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. Harmonic vibrations of nanosized piezoelectric bodies with surface effects. *Z. Angew. Math. Mech. (ZAMM)*. 2014. Vol. 94. No 10. P. 878–892.
14. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. Some models for nanosized magnetoelectric bodies with surface effects. *Advanced Materials – Manufacturing, Physics, Mechanics and Applications. Ser. Springer Proceedings in Physics*. Vol. 175. I.A. Parinov, S.-H. Chang, V.Y. Topolov (Eds.). Heidelberg – New York – Dordrecht – London: Springer, 2016. Ch. 27. P. 373–391.
15. Наседкин А.В. Моделирование наноразмерных пьезоэлектрических элементов, взаимодействующих с акустическими средами. *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения*. 2016. Т. 16. №1. С. 31–34.
16. Nasedkin A.V. Models and finite element approximations for interacting nanosized piezoelectric bodies and acoustic medium. *AIP Conf. Proc.* 2017. Vol. 1798. P. 020181–1–7.
17. Eremeyev V.A., Nasedkin A.V. Mathematical models and finite element approaches for nanosized piezoelectric bodies with uncoupled and coupled surface effects. *Methods of Wave Dynamics and Mechanics of Composites for Analysis of Microstructured Materials and Metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials*. Vol. 59. M.A. Sumbatyan (Ed.). Singapore: Springer, 2017. Ch. 1. P. 1–18.

18. Benzi M., Golub G.H., Liesen J. Numerical solution of saddle point problems. *Acta Numerica*. 2005. Vol. 14. P. 1–137.
19. Nasedkin A.V. Some finite element methods and algorithms for solving acoustopiezoelectric problems. *Piezoceramic Materials and Devices*. Ed. I.A. Parinov. N.Y.: Nova Science Publ., 2010. P. 177–218.
20. Дьелесан Э., Руайе Д. *Упругие волны в твердых телах. Применение для обработки сигналов*. М.: Наука, 1982. 424 с.
21. Наседкин А.В. *Моделирование пьезоэлектрических преобразователей в ANSYS: Учеб. пособие*. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2015. 176 с.

References

1. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of elasticity at the nanoscale. *Advances in Applied Mechanics*. 2008. Vol. 42. P. 1–68.
2. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects. *Acta Mechanica*. 2016. Vol. 227. No 1. P. 29–42.
3. Gurtin M.E., Murdoch A.I. A continuum theory of elastic material surfaces. *Arch. Rat. Mech. Analysis*. 1975. Vol. 57. No 4. P. 291–323.
4. Hamilton J.C., Wolfer W.G. Theories of surface elasticity for nanoscale objects. *Surface Science*. 2009. Vol. 603. P. 1284–1291.
5. Povstenko Y.Z. Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface-tension in solids. *J. Mech. Phys. Solids*. 1993. Vol. 41. P. 1499–1514.
6. 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 Sinica*. 2011. Vol. 24. No 1. P. 52–82.
7. Wang K.F., Wang B.L., Kitamura T. A review on the application of modified continuum models in modeling and simulation of nanostructures. *Acta Mechanica Sinica*. 2016. Vol. 32. No 1. P. 83–100.
8. Huang G.Y., Yu S.W. Effect of surface piezoelectricity on the electromechanical behaviour of a piezoelectric ring. *Phys. Status Solidi B*. 2006. Vol. 243. No 4. P. R22–R24.
9. Xiao J.H., Xu Y.L., Zhang F.C. Size-dependent effective electroelastic moduli of piezoelectric nanocomposites with interface effect. *Acta Mechanica*. 2011. Vol. 222. No 1–2. P. 59–67.
10. Gu S.-T., Qin L. Variational principles and size-dependent bounds for piezoelectric inhomogeneous materials with piezoelectric coherent imperfect interfaces. *Int. J. Eng. Sci.* 2014. Vol. 78. P. 89–102.
11. 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. *Int. J. Eng. Sci.* 2014. Vol. 85. P. 31–46.
12. Eremeev V.A., Nasedkin A.V. Natural vibrations of nanodimensional piezoelectric bodies with contact-type boundary conditions. *Mechanics of Solids*. 2015. Vol. 50. No 5. P. 495–507.
13. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. Harmonic vibrations of nanosized piezoelectric bodies with surface effects. *Z. Angew. Math. Mech. (ZAMM)*. 2014. Vol. 94. No 10. P. 878–892.
14. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. Some models for nanosized magnetolectric bodies with surface effects. *Advanced Materials – Manufacturing, Physics, Mechanics and Applications. Ser. Springer Proceedings in Physics*. Vol. 175. I.A. Parinov, S.-H. Chang, V.Y. Topolov (Eds.). Heidelberg – New York – Dordrecht – London: Springer, 2016. Ch. 27. P. 373–391.
15. Nasedkin A.V. Modelirovanie nanorazmernykh pyezoelektricheskikh elementov, vzaimodeystviyushchikh s akusticheskimi sredami [Modeling of nanoscale piezoelectric elements interacting with acoustic media]. *Fundamentalnye problemy radioelektronnogo priborostroeniya [Fundamental Problems of Radioengineering and Device Construction]*. 2016. Vol. 16. No 1. P. 31–34 (In Russian).
16. Nasedkin A.V. Models and finite element approximations for interacting nanosized piezoelectric bodies and acoustic medium. *AIP Conf. Proc.* 2017. Vol. 1798. P. 020181–1–7.
17. Eremeyev V.A., Nasedkin A.V. Mathematical models and finite element approaches for nanosized piezoelectric bodies with uncoupled and coupled surface effects. *Methods of Wave Dynamics and Mechanics of Composites for Analysis of Microstructured Materials and*

Metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials. Vol. 59. M.A. Sumbatyan (Ed.). Singapore. Springer. 2017. Ch.1. P. 1–18.

18. Benzi M., Golub G.H., Liesen J. Numerical solution of saddle point problems. *Acta Numerica*. 2005. Vol. 14. P. 1–137.

19. Nasedkin A.V. Some finite element methods and algorithms for solving acoustopiezoelectric problems. *Piezoceramic Materials and Devices*. Ed. I.A. Parinov. N.Y. Nova Science Publ. 2010. P. 177–218.

20. Dieulesaint E., Royer D. *Ondes Elastiques Dans les Solides, Application au Traitement du Signal*. Masson. 1974. 407 p.

21. Nasedkin A.V. *Modelirovanie pyzoelektricheskikh preobrazovatelei v ANSYS [Modeling of Piezoelectric Transducers in ANSYS]*. Rostov-na-Donu. Yuzhnyi Federalnyi universitet Publ. 2015. 176 p. (In Russian).

ABOUT MODELS OF NANOSIZED PIEZOELECTRIC MATERIALS WITH COUPLED SURFACE EFFECTS

Nasedkin A.V.¹, Eremeyev V.A.^{1,2,3}

¹*Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation*

²*Southern Scientific Center of the Russian Academy of Sciences,
Rostov-on-Don, Russian Federation*

³*Gdansk University of Technology, Gdańsk, Poland*

The present paper considers the dynamic problems for piezoelectric nanosized bodies with damping and surface effects. For these problems the new mathematical model which generalizes the models of the elastic medium with the Rayleigh damping and with the Gurtin – Murdoch model of surface effects is proposed. The new model takes into account the electromechanical coupling of damping mechanisms and surface effects, both in the volume and on the surface. For numerical solving the problems stated the peculiar properties of the finite element method are discussed. We note that for transient and static problems we can transform the systems of finite element equations to the forms with symmetric quasi-definite matrices. In addition, for transient and harmonic problems, we observe that the application of the mode superposition method leads to independent equations for the amplitudes of separate modes. Numerical examples demonstrate the effect of surface moduli on both local and integral characteristics of the vibrational processes in nanoscale piezoelectric bodies.

Keywords: piezoelectricity, nanomechanics, surface stress, piezoelectric surface effects, Gurtin – Murdoch model, finite element method, quasi-definite matrix.