

УДК 539.3

DOI: 10.32326/1814-9146-2019-81-1-5-18

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ЭФФЕКТИВНЫЕ СВОЙСТВА НАНОПРИСТЫХ ПЬЕЗОКОМПОЗИТОВ*

© 2019 г.

Наседкин А.В.

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

nasedkin@math.sfedu.ru

Поступила в редакцию 15.11.2018

Рассматривается задача гомогенизации смесевых пьезоэлектрических композитных материалов со стохастически распределенными включениями или порами при наличии механически несовершенных межфазных границ. Принятые интерфейсные условия соответствуют модели Гуртина – Мурдоха и дают существенный вклад только для наноструктурированных композитов. Для определения эффективных свойств использован комплексный подход, основанный на теории эффективных модулей, моделировании представительных объемов и на методе конечных элементов. Описана совокупность краевых задач, позволяющих найти полный набор эффективных модулей жесткости, пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей пьезокомпозита произвольного класса анизотропии. Численное решение задач гомогенизации осуществлено в конечно-элементном комплексе ANSYS, который использовался как для моделирования представительных объемов композита, так и для расчета его эффективных свойств. Представительный объем состоял из регулярного кубического массива пьезоэлектрических конечных элементов с материальными свойствами двух фаз. Границы контакта между материалами различных фаз покрывались упругими мембранными элементами, которые моделировали интерфейсные поверхностные напряжения.

Конкретная реализация проведена для нанопористых пьезокерамических композитов, для которых исходные фазы и гомогенный материал являлись материалами гексагонального класса симметрии, причем поры рассматривались как пьезоэлектрический материал с пренебрежимо малыми модулями жесткости и пьезомодулями. Для такого композита мембранные элементы наследовали структуру анизотропии объемных элементов на их общих границах. В качестве примера представлены результаты расчетов эффективных модулей пористой сегнетомягкой пьезокерамики PZT-5Н. Отмечено, что поверхностные напряжения на границах пор могут существенно повысить значения эффективных модулей жесткости. Однако они оказывают слабое влияние на значения эффективных пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей.

Ключевые слова: пьезоэлектричество, композит, пористая пьезокерамика, наномеханика, поверхностные напряжения, модель Гуртина – Мурдоха, эффективные модули, метод конечных элементов.

* Выполнено при поддержке Министерством науки и высшего образования РФ (проект №9.5070.2017/ВУ) и РФФИ (грант № 16-01-00785).

Введение

Пористые пьезокерамические материалы находят эффективные применения в гидроакустике, медицинских ультразвуковых устройствах и имеют другие приложения [1, 2]. Основные их преимущества заключаются в меньшем акустическом импедансе по сравнению с плотной керамикой при достаточно высоком значении толщинного пьезомодуля d_{33} . Пьезоэлектрические материалы являются анизотропными, поскольку пьезоэффект может существовать только в кристаллах без центра симметрии. Кроме того, из-за наличия электромеханической связанности пьезоэлектрические материалы характеризуются большим числом материальных модулей. В связи с этим задачи гомогенизации, то есть задачи определения эффективных констант пьезоэлектрических композитных материалов, являются более сложными по сравнению с аналогичными задачами для упругих материалов. При решении задач гомогенизации пьезоэлектрических композитов должна также учитываться структура распределения включений или пор [3–6]. Все это приводит к тому, что, несмотря на достаточно давнюю историю исследований пьезоэлектрических композитов, задачи их математического моделирования остаются актуальными и в настоящее время [3–8].

Если включения или поры в пьезоэлектрической матрице имеют наноразмеры, то, подобно аналогичным упругим композитам, проявляются размерные эффекты. В этих случаях эффективные модули наноструктурированных композитов не равны эффективным модулям обычных композитов. Соответственно задачи гомогенизации наноструктурированных композитов должны отличаться от классических задач гомогенизации. В наномеханике имеется несколько теорий учета размерных эффектов. В настоящей статье для учета размерных эффектов используется модель Гуртина – Мурдоха с поверхностными напряжениями, которые вводятся на интерфейсных межфазных границах. О популярности этой модели в наномеханике можно судить, например, по публикациям обзорного характера [9–12]. Указанная модель использовалась и для наноразмерных или наноструктурированных пьезоэлектрических композитов в ряде недавних работ [13–18]. В настоящей статье используется комплексный подход, включающий метод эффективных модулей, моделирование представительных объемов с учетом интерфейсных элементов и конечно-элементное решение задач гомогенизации.

1. Гомогенизация пьезоэлектрических нанокомпозитов по методу эффективных модулей с учетом механических поверхностных эффектов

Рассмотрим представительный объем Ω двухфазного пьезоэлектрического композита. Будем считать, что основная фаза или матрица композита занимает объем $\Omega^{(1)}$, а вторая фаза состоит из наноразмерных включений или пор и занимает, вообще говоря, многосвязную область $\Omega^{(2)} = \Omega \setminus \Omega^{(1)}$. Пусть $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$ – вектор пространственных координат; $\Gamma = \partial\Omega$ – внешняя граница объема Ω ; $\Gamma^s = \partial\Omega^{(1)} \cap \partial\Omega^{(2)}$ – совокупность межфазных поверхностей или интерфейсов; $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$ – вектор единичной нормали на Γ^s , внешней по отношению к объему $\Omega^{(1)}$.

Здесь и далее поры будем рассматривать как включения из пьезоэлектрического материала с пренебрежимо малыми модулями жесткости, пьезомодулями и с диэлектрическими проницаемостями, равными диэлектрическим проницаемостям

вакуума. Таким образом, можно считать, что представительный объем Ω заполнен пьезоэлектрическим материалом с кусочно-однородными свойствами. Тогда в предположениях линейной статической теории пьезоэлектричества (электроупругости) можно рассматривать в Ω следующую систему дифференциальных уравнений относительно вектор-функции перемещений $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ и функции электрического потенциала $\varphi = \varphi(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{L}^T(\nabla) \cdot \mathbf{T} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (1)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{e}^T \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{e} \cdot \mathbf{S} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}, \quad (2)$$

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

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, состоящие из компонент тензоров напряжений σ_{ij} и деформаций ε_{ij} ; \mathbf{D} и \mathbf{E} – векторы электрической индукции и напряженности электрического поля; $\mathbf{c} = \mathbf{c}^E$ – матрица модулей жесткости $c_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}^E$ размером 6×6 ; \mathbf{e} – матрица пьезомодулей $e_{i\beta}$ размером 3×6 ; $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa}^S = \boldsymbol{\varepsilon}^S$ – матрица диэлектрических проницаемостей размером 3×3 ; $(\dots)^T$ – операция транспонирования; $(\dots) \cdot (\dots)$ – операция скалярного умножения векторов, матриц или векторов и матриц; $\mathbf{L}(\mathbf{a})$ – матричный оператор размером 6×3 относительно компонент вектора \mathbf{a} . В транспонированной форме матричный оператор $\mathbf{L}^T(\nabla)$ относительно компонент набла-оператора $\nabla = \{\partial_1, \partial_2, \partial_3\}$ имеет вид:

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

Матрицы упругих жесткостей и диэлектрических проницаемостей являются симметричными ($c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$, $\kappa_{ij} = \kappa_{ji}$) и положительно определенными, что следует из свойства положительной определенности внутренней энергии $U_\Omega(\mathbf{S}, \mathbf{E})$, представляемой в виде функции компонент шестимерного массива \mathbf{S} и вектора \mathbf{E} :

$$\exists W_\Omega > 0, \quad \forall \mathbf{S}, \mathbf{E}: 2U_\Omega(\mathbf{S}, \mathbf{E}) = (\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{E}^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{E}) \geq W_\Omega(\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{S} + \mathbf{E}^T \cdot \mathbf{E}).$$

Для учета наноразмерных факторов в развитии модели Гуртина – Мурдоха примем, что на межфазных границах Γ^s действуют поверхностные напряжения \mathbf{T}^s и выполняются соотношения:

$$\mathbf{L}^T(\mathbf{n}) \cdot [\mathbf{T}] = \mathbf{L}^T(\nabla^s) \cdot \mathbf{T}^s, \quad \mathbf{n} \cdot [\mathbf{D}] = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma^s, \quad (4)$$

$$\mathbf{T}^s = \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{S}^s, \quad \mathbf{S}^s = \mathbf{L}(\nabla^s) \cdot \mathbf{u}^s, \quad \mathbf{u}^s = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad (5)$$

где $[\mathbf{T}] = \mathbf{T}^{(1)} - \mathbf{T}^{(2)}$, $[\mathbf{D}] = \mathbf{D}^{(1)} - \mathbf{D}^{(2)}$ – скачки полей напряжений и электрической индукции при переходе через интерфейсную границу; $\mathbf{T}^s = \{\sigma_{11}^s, \sigma_{22}^s, \sigma_{33}^s, \sigma_{23}^s, \sigma_{13}^s, \sigma_{12}^s\}$, $\mathbf{S}^s = \{\varepsilon_{11}^s, \varepsilon_{22}^s, \varepsilon_{33}^s, 2\varepsilon_{23}^s, 2\varepsilon_{13}^s, 2\varepsilon_{12}^s\}$ – массивы компонент тензоров поверхностных напряжений σ_{ij}^s и деформаций ε_{ij}^s ; $\nabla^s = \nabla - \mathbf{n}\partial/\partial n$ – поверхностный набла-оператор; \mathbf{I} – единичная матрица; \mathbf{c}^s – матрица поверхностных модулей упругих жесткостей размером 6×6 .

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

$$\exists W_\Gamma > 0, \forall \tilde{\mathbf{S}}^s = \{\tilde{S}_1^s, \tilde{S}_2^s, 0, 0, 0, \tilde{S}_6^s\}: 2U_\Gamma(\tilde{\mathbf{S}}^s) = \tilde{\mathbf{S}}^{sT} \cdot \tilde{\mathbf{c}}^s \cdot \tilde{\mathbf{S}}^s \geq W_\Gamma \tilde{\mathbf{S}}^{sT} \cdot \tilde{\mathbf{S}}^s,$$

где $\tilde{\mathbf{c}}^s$ – матрица поверхностных модулей жесткости, представленная в системе координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{n}$; \tilde{S}_β^s – компоненты поверхностных деформаций в той же системе координат.

Постановку задачи гомогенизации по методу эффективных модулей завершают граничные условия на внешней границе Γ представительного объема Ω . Эти граничные условия для однородной среды сравнения с эффективными модулями \mathbf{c}^{eff} , \mathbf{e}^{eff} и \mathbf{k}^{eff} должны обеспечивать постоянные поля напряжений, деформаций, электрической индукции и постоянное электрическое поле. Среди четырех возможных вариантов таких граничных условий [19, 20] наиболее удобными и часто используемыми являются линейные по пространственным переменным главные граничные условия

$$\mathbf{u} = \mathbf{L}^T(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \varphi = -\mathbf{x} \cdot \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (6)$$

где $\mathbf{S}_0 = \{S_{01}, S_{02}, S_{03}, S_{04}, S_{05}, S_{06}\}$, $S_{0\beta}$ – некоторые величины, не зависящие от пространственных переменных \mathbf{x} ; \mathbf{E}_0 – постоянный вектор.

Действительно, формулы

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{L}^T(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \varphi = -\mathbf{x} \cdot \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_0, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}_0 = \mathbf{c}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_0 - \mathbf{e}^{\text{eff}T} \cdot \mathbf{E}_0, \\ \mathbf{D} &= \mathbf{D}_0 = \mathbf{e}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_0 + \mathbf{k}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{E}_0 \end{aligned}$$

дают решение задачи (1)–(6) для однородной среды сравнения с постоянными модулями \mathbf{c}^{eff} , \mathbf{e}^{eff} и \mathbf{k}^{eff} . Кроме того, имеют место равенства $\langle \mathbf{S} \rangle_\Omega = \mathbf{S}_0$, $\langle \mathbf{E} \rangle_\Omega = \mathbf{E}_0$, где

$$\langle (\dots) \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega (\dots) d\Omega. \quad (7)$$

Тогда условиями для определения эффективных модулей логично принять равенства $\langle \mathbf{T} \rangle_{\Omega\Gamma} = \mathbf{T}_0$, $\langle \mathbf{D} \rangle_\Omega = \mathbf{D}_0$, где \mathbf{T} и \mathbf{D} – поля напряжений и электрической индукции в задаче (1)–(6) для неоднородной среды, а выражения $\langle \dots \rangle_{\Omega\Gamma}$ означают, в отличие от (7), осреднение не только по объему Ω , но и по интерфейсной границе Γ^s :

$$\langle (\dots) \rangle_{\Omega\Gamma} = \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_\Omega (\dots) d\Omega + \int_{\Gamma^s} (\dots)^s d\Gamma \right). \quad (8)$$

Обоснование использования выражения (8) вместо (7) для композитов с поверхностными или интерфейсными напряжениями (4), (5) приведено в ряде работ [21, 22] и очевидно переносится на задачи гомогенизации (1)–(6) для пьезоэлектрических композитов.

Формулы

$$\mathbf{T}_0 = \mathbf{c}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_0 - \mathbf{e}^{\text{eff}T} \cdot \mathbf{E}_0 = \langle \mathbf{T} \rangle_{\Omega\Gamma}, \quad \mathbf{D}_0 = \mathbf{e}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_0 + \mathbf{k}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{E}_0 = \langle \mathbf{D} \rangle_\Omega$$

являются ключевыми для определения эффективных модулей. Действительно, в предположении анизотропии общего вида полный набор эффективных модулей жесткости $c_{\alpha\beta}^{\text{eff}}$, пьезомодулей $e_{i\beta}^{\text{eff}}$ и диэлектрических проницаемостей k_{ij}^{eff} можно найти из решений девяти краевых задач (1)–(6), если полагать в (6) одну из компонент $S_{0\zeta}$ или E_{0k} ($\zeta = \overline{1, 6}$, $k = \overline{1, 3}$) отличной от нуля:

$$- \text{задачи I–VI} \quad (\beta = \overline{1, 6})$$

$$S_{0\zeta} = S_0 \delta_{\beta\zeta}, \quad E_{0k} = 0 \Rightarrow c_{\alpha\beta}^{\text{eff}} = \langle T_\alpha \rangle_{\Omega\Gamma} / S_0, \quad e_{i\beta}^{\text{eff}} = \langle D_i \rangle_\Omega / S_0, \quad (9)$$

– задачи VII–IX ($j = \overline{1, 3}$)

$$S_{0\zeta} = 0, \quad E_{0k} = E_0 \delta_{jk} \Rightarrow e_{j\alpha}^{\text{eff}} = -\langle T_\alpha \rangle_{\Omega\Gamma} / E_0, \quad \kappa_{ij}^{\text{eff}} = \langle D_i \rangle_\Omega / E_0, \quad (10)$$

где $\alpha = \overline{1, 6}$; $i = \overline{1, 3}$; δ_{ij} – символ Кронекера.

В случае пористой пьезокерамики класса *btt*, когда ее внутренняя структура пористости не имеет ярко выраженной геометрической анизотропии в Ω , для определения десяти независимых ненулевых материальных модулей ($c_{11}^{\text{eff}}, c_{12}^{\text{eff}}, c_{13}^{\text{eff}}, c_{33}^{\text{eff}}, c_{44}^{\text{eff}}, e_{31}^{\text{eff}}, e_{33}^{\text{eff}}, e_{15}^{\text{eff}}, \kappa_{11}^{\text{eff}}, \kappa_{33}^{\text{eff}}$) можно решить только пять краевых задач (1)–(6), полагая в (6) одну из следующих компонент $S_{0\beta}, E_{0l}$ ($\beta = \overline{1, 6}; l = \overline{1, 3}$) отличной от нуля:

$$S_{0\beta} = S_0 \delta_{1\beta}, \quad \mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow c_{1k}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{kk} \rangle_{\Omega\Gamma} / S_0, \quad k = 1, 2, 3; \quad e_{31}^{\text{eff}} = \langle D_3 \rangle_\Omega / S_0, \quad (11)$$

$$S_{0\beta} = S_0 \delta_{3\beta}, \quad \mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow c_{k3}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{kk} \rangle_{\Omega\Gamma} / S_0, \quad k = 1, 2, 3; \quad e_{33}^{\text{eff}} = \langle D_3 \rangle_\Omega / S_0, \quad (12)$$

$$S_{0\beta} = S_0 \delta_{4\beta}, \quad \mathbf{E}_0 = 0 \Rightarrow c_{44}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{23} \rangle_{\Omega\Gamma} / S_0, \quad e_{15}^{\text{eff}} = \langle D_2 \rangle_\Omega / S_0, \quad (13)$$

$$\mathbf{S}_0 = 0, \quad E_{0l} = E_0 \delta_{1l} \Rightarrow e_{15}^{\text{eff}} = -\langle \sigma_{13} \rangle_{\Omega\Gamma} / E_0, \quad \kappa_{11}^{\text{eff}} = \langle D_1 \rangle_\Omega / E_0, \quad (14)$$

$$\mathbf{S}_0 = 0, \quad E_{0l} = E_0 \delta_{3l} \Rightarrow e_{3k}^{\text{eff}} = -\langle \sigma_{kk} \rangle_{\Omega\Gamma} / E_0, \quad k = 1, 2, 3; \quad \kappa_{33}^{\text{eff}} = \langle D_3 \rangle_\Omega / E_0. \quad (15)$$

Отметим, что задачи (1)–(6) с (9), (10) или с (11)–(15) отличаются от обычных задач гомогенизации для неоднородного пьезоэлектрического материала наличием интерфейсных граничных условий (4), (5) и выражением $\langle \dots \rangle_{\Omega\Gamma}$ (8), что является типичным для модели Гуртина – Мурдоха, в которой учитываются поверхностные напряжения в наноструктурированных композитах.

Заметим, что более полные интерфейсные условия должны учитывать связанные поверхностные электромеханические поля по соотношениям, следующим из [23, 24]:

$$\mathbf{L}^T(\mathbf{n}) \cdot [\mathbf{T}] = \mathbf{L}^T(\nabla^s) \cdot \mathbf{T}^s, \quad \mathbf{n} \cdot [\mathbf{D}] = \nabla^s \cdot \mathbf{D}^s, \quad \mathbf{x} \in \Gamma^s, \quad (16)$$

$$\mathbf{T}^s = \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{S}^s - \mathbf{e}^{sT} \cdot \mathbf{E}^s, \quad \mathbf{D}^s = \mathbf{e}^s \cdot \mathbf{S}^s + \boldsymbol{\kappa}^s \cdot \mathbf{E}^s, \quad \mathbf{E}^s = -\nabla^s \varphi. \quad (17)$$

Здесь, однако, использованы несвязанные интерфейсные условия (4), (5), которые получаются из (16), (17) при равных нулю поверхностных пьезомодулях и диэлектрических проницаемостях: $\mathbf{e}^s = 0, \boldsymbol{\kappa}^s = 0$.

2. Переход к безразмерной постановке

Анализ размерности показывает, что поверхностные модули жесткости $c_{\alpha\beta}^s$ отличаются по размерности от соответствующих величин $c_{\alpha\beta}$ в объеме. Так, в системе СИ модули $c_{\alpha\beta}$, как и напряжения σ_{ij} , измеряются в Н/м², тогда как модули $c_{\alpha\beta}^s$, как и поверхностные напряжения σ_{ij}^s , измеряются в Н/м. Экспериментальные данные также свидетельствуют, что значения соответствующих поверхностных и объемных величин различаются так, что они оказываются сопоставимыми $c_{\alpha\beta}^s \sim c_{\alpha\beta}^s / d$ при характерных пространственных размерах d порядка 10^{-9} м и меньше. В рассматриваемой задаче таким параметром d является характерный размер a включения или пор, и поэтому следует ожидать, что поверхностные или интерфейсные эффекты будут оказывать влияние только при наноразмерных включениях или порах.

Тогда для обеспечения точности вычислений при численном решении задачи (1)–(6) из-за малости геометрических размеров включений или пор удобно перейти к безразмерным координатам и параметрам. Например, выбрав характерные размерные параметры задачи – минимальный размер включения или поры a , модуль жесткости $c = c_{33}^E$ и диэлектрическую проницаемость $\kappa = \varepsilon_{33}^S$, – можно ввести следующие безразмерные величины и переменные:

$$\tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{a}, \quad \tilde{\varphi} = \frac{\varphi}{E_d a}, \quad E_d = \sqrt{\frac{c}{\kappa}}, \quad (18)$$

$$\tilde{\mathbf{c}} = \frac{\mathbf{c}}{c}, \quad \tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{\kappa}, \quad \tilde{\mathbf{e}} = \frac{\mathbf{e} E_d}{c}, \quad \tilde{\mathbf{c}}^s = \frac{\mathbf{c}^s}{ac}, \quad (19)$$

$$\tilde{\mathbf{T}} = \frac{\mathbf{T}}{c}, \quad \tilde{\mathbf{E}} = \frac{\mathbf{E}}{E_d}, \quad \tilde{\mathbf{D}} = \frac{\mathbf{D} E_d}{c}, \quad \tilde{\mathbf{T}}^s = \frac{\mathbf{T}^s}{ac}. \quad (20)$$

Теперь задача (1)–(6) может быть решена в безразмерной форме в обозначениях (18)–(20) с символом «тильда», а после ее решения можно вернуться к размерным величинам.

3. Моделирование представительных объемов и конечно-элементная техника

Для решения задач гомогенизации пьезоэлектрических композитов с интерфейсными напряжениями будем использовать технику, описанную в [25, 26]. Такой подход включает в себя моделирование структуры представительного объема в виде массива кубических конечных элементов и конечно-элементное решение в пакете ANSYS набора краевых задач (1)–(6) с вариантами граничных условий (9), (10) или (11)–(15). Здесь представительные объемы создавались в форме куба, равномерно разбитого на геометрически одинаковые кубические конечные элементы SOLID5 с опциями пьезоэлектрического анализа. Далее, принимая случайную структуру элементов второй фазы, по простому случайному алгоритму части объемных конечных элементов присваивались свойства материала матрицы, а оставшимся элементам – свойства включений или пор. Отметим, что этот алгоритм наиболее прост в реализации, но он не поддерживает связность каркаса матрицы. Более сложные алгоритмы, поддерживающие связность одной или обеих фаз, использовались для других типов композитов в [4, 5, 19, 20], и было установлено, что для небольших долей вхождения материала второй фазы простой случайный метод дает вполне удовлетворительные результаты.

На следующем этапе автоматически генерировались упругие оболочечные элементы SHELL181 с опциями мембранных напряжений, имитирующие интерфейсные границы. Подробности работы алгоритма приведены в [25, 26].

Отметим, что для мембранного элемента ANSYS нужно задавать модули жесткости $c_{\alpha\beta}^m$ и толщину h^m . Как отмечалось в [25, 26], мембранный элемент ANSYS можно использовать в качестве интерфейсного элемента, получаемого при учете условий (4), (5), если положить $c_{\alpha\beta}^s = h^m c_{\alpha\beta}^m$. Таким образом, при расчетах в ANSYS важны произведения модулей жесткости мембранного элемента $c_{\alpha\beta}^m$ на его толщину h^m , а не сами значения $c_{\alpha\beta}^m$ и h^m по отдельности. В отличие от [25, 26] здесь, согласно предыдущему разделу, представительный объем задавался в безразмерном виде, причем сторона отдельного конечного элемента принималась равной 1.

Таким образом, параметр обезразмеривания по пространству равнялся минимальному размеру элемента второй фазы a . Поскольку данных по значениям поверхностных модулей различных материалов пока очень мало и они достаточно противоречивы, то в соответствии с исследованиями для других материалов в случае нанопористой пьезокерамики принимается, что поверхностные модули жесткости связаны с объемными модулями пьезокерамики по формуле $c_{\alpha\beta}^s = l_c c_{\alpha\beta}$, где $l_c = 10^{-10}$ м. Примем также, что $h^m = a$, $c_{\alpha\beta}^m = k^s c_{\alpha\beta}$, где k^s – безразмерный коэффициент. Тогда $c_{\alpha\beta}^s = h^m c_{\alpha\beta}^m = k^s a c_{\alpha\beta} = (k^s a / l_c) c_{\alpha\beta}^s$, то есть $a = l_c / k^s$, поэтому коэффициент k^s обратно пропорционален минимальному размеру пор a . Далее при численных экспериментах при постоянных поверхностных модулях $c_{\alpha\beta}^s$ варьировались коэффициент k^s и пористость p , причем при $k^s > 1$ значение a становится меньше, чем $l_c = 10^{-10}$ м.

Для оболочечных элементов ANSYS SHELL181 необходимо еще обеспечить тип анизотропии, согласованный с анизотропией объемных конечных элементов. Как известно, материальные свойства элементов ANSYS задаются в элементных системах координат $Ox^{ek}y^{ek}z^{ek}$, и для мембранного элемента с номером k важны материальные свойства в плоскости $Ox^{ek}y^{ek}$. Для кубического представительного объема с элементами-кубиками, грани которых параллельны координатным осям основной декартовой системы координат, мембранные элементы могут располагаться в плоскостях, параллельных плоскостям Oxy , Oxz и Oyz . Тогда в случае пьезокерамического материала класса *bmm* для согласования его объемной анизотропии с анизотропией мембранных элементов нужно изменять модули жесткости мембранных элементов, расположенных перпендикулярно плоскости изотропии Oxy . Как несложно показать, эта процедура для мембранных элементов, расположенных перпендикулярно плоскости Oxy , может быть реализована путем перестановки исходных коэффициентов жесткости по строкам и столбцам, соответствующим осям z и y .

Один из примеров представительного объема из $20 \times 20 \times 20$ элементов при пористости $p = 2,5\%$ приведен на рис. 1, где слева показан весь объем; в центре – элементы второй фазы; а справа – интерфейсные мембранные элементы. При этом мембранные элементы, расположенные перпендикулярно плоскости Oxy , показаны малиновым цветом, а элементы, расположенные параллельно плоскости Oxy , – синим цветом.

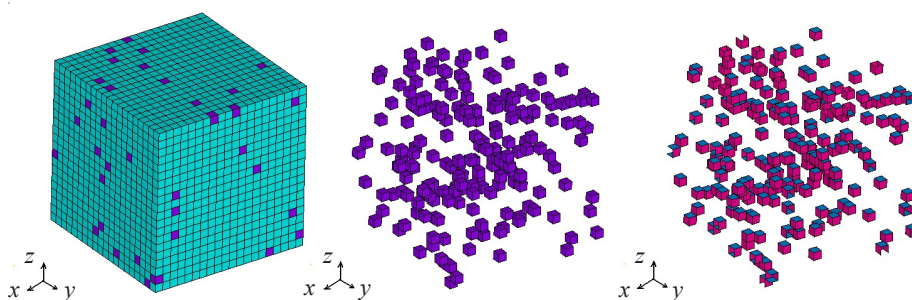


Рис. 1

После построения представительного объема в ANSYS решались статические задачи (1)–(6) с вариантами граничных условий (9), (10) или (11)–(15), после чего в постпроцессоре вычислялись напряжения в соответствии с (8) и электрические индукции в соответствии с (7), причем для напряжений, согласно (8), проводилось дополнительное интегрирование по поверхностным элементам. Наконец, по соот-

ветствующим формулам, например по (9), (10) или (11)–(15), через найденные напряжения и электрические индукции вычислялись эффективные модули жесткости, пьезомодули и диэлектрические проницаемости нанопористого пьезоэлектрического композита.

Так как поры выбираются с помощью простого случайного алгоритма, то при следующем запуске программы они будут располагаться, вообще говоря, в других местах. Тогда даже при одинаковой пористости общая площадь мембранных элементов Γ^s может меняться, а следовательно, может изменяться и суммарная жесткость всего объема. Однако при небольшой пористости p эти эффекты не будут существенно влиять на значения эффективных модулей, получаемых при различных запусках программы.

4. Численные эксперименты

В качестве примера рассмотрим нанопористый пьезокерамический материал (материал класса *btm*). Материал каркаса – сегнетомягкая пьезокерамика PZT-5Н с объемными модулями:

$$\begin{aligned} c_{11}^E &= 12,72 \cdot 10^{10}, & c_{12}^E &= 8,02 \cdot 10^{10}, & c_{13}^E &= 8,47 \cdot 10^{10}, & c_{33}^E &= 11,74 \cdot 10^{10}, \\ c_{44}^E &= 2,298 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, & e_{31} &= -6,62, & e_{33} &= 23,24, & e_{15} &= 17,03 \text{ Кл/м}^2, \\ \varepsilon_{11}^S &= 1704,4 \varepsilon_0, & \varepsilon_{33}^S &= 1433,6 \varepsilon_0, & \varepsilon_0 &= 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}. \end{aligned}$$

Для пор материалы константы, отмеченные верхним индексом p , выбирались равными следующим величинам: $c_{\alpha\beta}^{Ep} = \chi c_{\alpha\beta}^E$, $e_{i\alpha}^p = \chi e_{i\alpha}$, $\chi = 10^{-10}$, $\varepsilon_{11}^{Sp} = \varepsilon_{33}^{Sp} = \varepsilon_0$.

Для анализа влияния пористости и поверхностного эффекта на эффективные модули были проведены расчеты относительных эффективных модулей при фиксированном числе элементов по осям представительного объема $n_i = 20$, но при различной пористости p и при различных, но не слишком больших, значениях множителя k^s . Результаты расчетов представлены на рис. 2–5. Здесь и далее через $r(\dots)$ обозначены относительные значения эффективных величин, отнесенные к соответствующим значениям модулей при нулевой пористости. Так, $r(c_{11}) = c_{11}^{\text{eff}} / c_{11}$, где c_{11}^{eff} – эффективный модуль жесткости нанопористой пьезокерамики с учетом поверхностных напряжений, а $c_{11} = c_{11}^E$ – значение модуля жесткости обычного материала пьезокерамики и т.д. Кривые 1 соответствуют случаю $k^s = 0$, кривые 2 – случаю $k^s = 0,1$, кривые 3 – случаю $k^s = 0,5$, а кривые 4 – случаю $k^s = 1$.

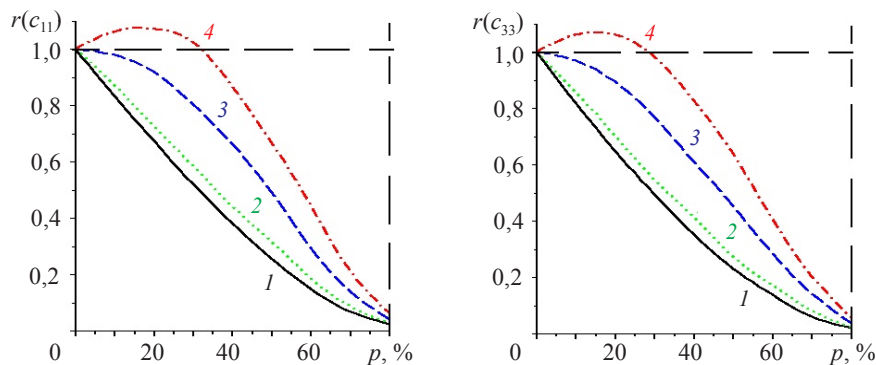


Рис. 2

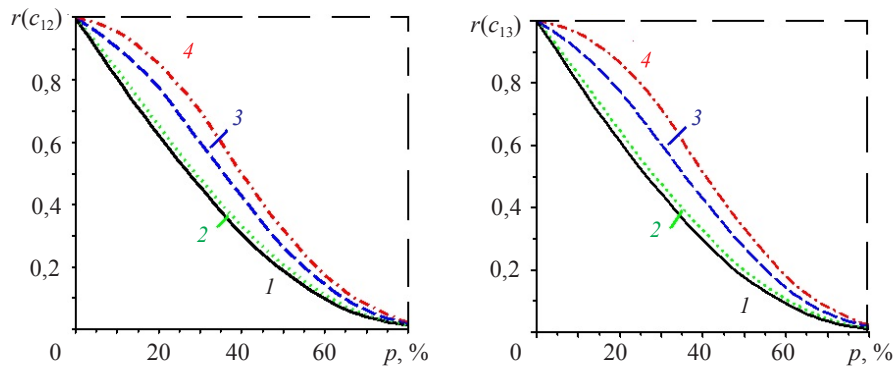


Рис. 3

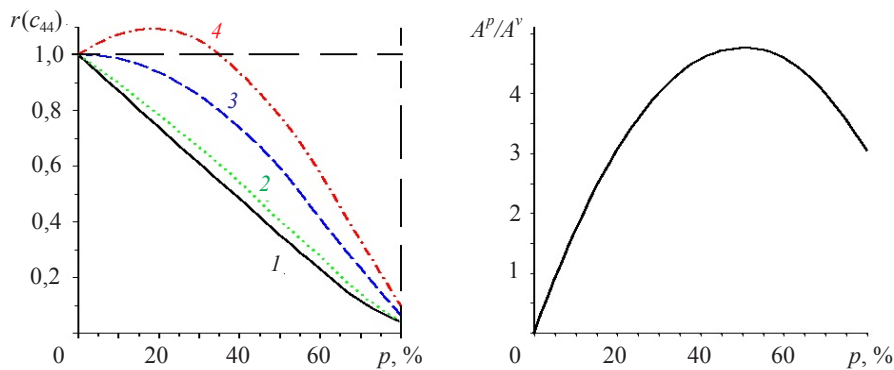


Рис. 4

Как видно из рисунков, при относительно малых значениях множителя k^s (кривые 1 и 2) поверхностные напряжения достаточно слабо влияют на модули жесткости. Однако при любой пористости поверхностные напряжения увеличивают эффективные жесткости пористого материала. Более того, здесь возможны случаи, когда нанопористый материал будет иметь большую жесткость, чем аналогичный сплошной материал. Такая ситуация наблюдается при $k^s = 1$ для модулей жесткости c_{11}^{eff} , c_{33}^{eff} и c_{44}^{eff} для пористости $p \leq 33\%$. Между тем, модули жесткости c_{12}^{eff} и c_{13}^{eff} не превосходят значений c_{12}^E и c_{13}^E соответственно даже при $k^s = 1$.

Как отмечалось в [9, 10, 25–28] и в других публикациях, пористость и поверхностные напряжения оказывают противоположное влияние на эффективные жесткости. Рост пористости приводит к уменьшению модулей жесткости, в то время как поверхностные напряжения увеличивают жесткость. Для нанопористых материалов поверхностные напряжения будут существенно возрастать при больших значениях k^s , что эквивалентно очень малым наноразмерам пор. Кроме того, для нанопористых материалов начальное увеличение пористости влечет за собой и увеличение площади границ пор с поверхностными напряжениями. Так, из графика, расположенного справа на рис. 4, видно, что для рассматриваемой кубической структуры представительного объема площади интерфейсных границ вначале сильно возрастают, затем их рост уменьшается, максимум достигается при $p = 50\%$. Отмеченные выше тенденции объясняют феномен увеличения модулей жесткости наноматериалов при не слишком большой пористости и при малых наноразмерах пор (см. также [9, 10, 25–28]).

Несвязанные поверхностные напряжения в значительно меньшей степени оказывают влияние на эффективные пьезомодули e_{31}^{eff} , e_{33}^{eff} и e_{15}^{eff} и практически не влияют на диэлектрические проницаемости κ_{11}^{eff} и κ_{33}^{eff} (рис. 5).

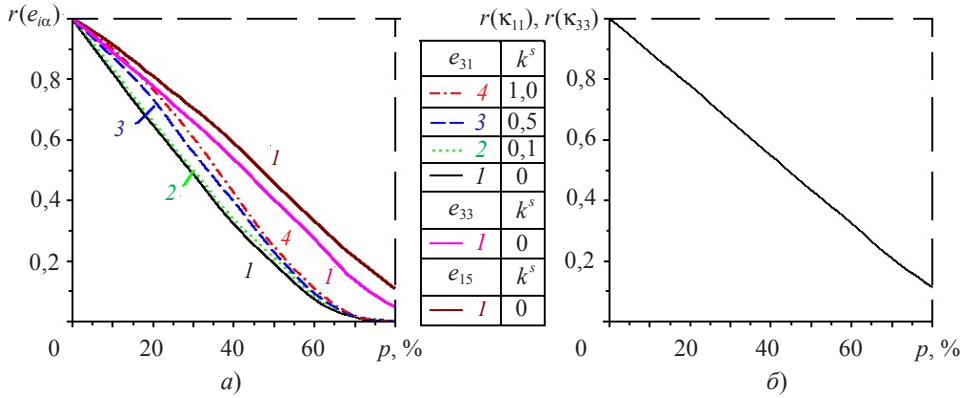


Рис. 5

Как видно из рис. 5а, влияние поверхностных напряжений наиболее заметно для относительных значений поперечного пьезомодуля $r(e_{31})$, тогда как кривые для других пьезомодулей и для диэлектрических проницаемостей при различных коэффициентах k^s ($0 \leq k^s \leq 1$) практически совпадают и на рис. 5б выглядят как одна кривая.

Очевидно, что эффективные пьезомодули и диэлектрические проницаемости должны изменяться гораздо более существенно, если вместо несвязанных механических поверхностных напряжений на интерфейсе учитывать полностью или частично связанные электромеханические поверхностные эффекты по моделям [23, 24, 29].

Заключение

Представлены задачи об определении эффективных свойств двухфазного пьезоэлектрического композита с поверхностными (интерфейсными) напряжениями на межфазных границах. Используемые интерфейсные условия описывают размерные эффекты для наноструктурированных композитов. Представленный подход переносится на пористые электроупругие материалы, когда вторая фаза является набором пор, моделируемых пьезоэлектрическими материалами с пренебрежимо малыми модулями жесткости и пьезомодулями. Разработанная модель применена для расчета эффективных модулей нанопористой сегнетомягкой пьезокерамики PZT-5Н. Решения задач гомогенизации проведены численно в конечно-элементном пакете ANSYS для представительного объема с равномерным разбиением на гексаэдральные пьезоэлектрические элементы со случайной пористостью. В построенном объеме на интерфейсных границах дополнительно были сгенерированы упругие мембранные элементы, имитирующие условия на интерфейсе.

Для высокопористых пьезоэлектрических материалов представленные результаты нуждаются в корректировке по причине использования модели представительного объема со стохастической пористостью, не поддерживающей связность элементов каркаса и не отражающей структуры связности элементов второй фазы (закрытой или открытой пористости).

Дальнейшие исследования могут быть связаны с анализом влияния структур связности представительных объемов на эффективные модули нанопористых пьезоэлектрических материалов. Такой анализ может быть проведен аналогично представленному в [4, 5, 19, 20] для композитов без интерфейсных эффектов. Остаются также актуальными задачи разработки поверхностных электромеханически связанных конечных элементов для более полного учета поверхностных интерфейсных эффектов в задачах гомогенизации наноструктурированных пьезоэлектрических композитов.

Список литературы

1. Ringgaard E., Lautzenhiser F., Bierregaard L.M., Zawada T., Molz E. Development of porous piezoceramics for medical and sensor applications. *Materials*. 2015. Vol. 8. No 12. P. 8877–8889.
2. Rybyanets A.N. Porous piezoceramics: theory, technology, and properties. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2011. Vol. 58. P. 1492–1507.
3. Iyer S., Venkatesh T.A. Electromechanical response of (3-0, 3-1) particulate, fibrous, and porous piezoelectric composites with anisotropic constituents: A model based on the homogenization method. *International Journal of Solids and Structures*. 2014. Vol. 51. P. 1221–1234.
4. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Models of porous piezocomposites with 3-3 connectivity type in ACELAN finite element package. *Materials Physics and Mechanics*. 2018. Vol. 37. No 1. P. 16–24.
5. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Finite element homogenization models of bulk mixed piezocomposites with granular elastic inclusions in ACELAN package. *Materials Physics and Mechanics*. 2018. Vol. 37. No 1. P. 25–33.
6. Nguyen B.V., Challagulla K.S., Venkatesh T.A., Hadjiloizi D.A., Georgiades A.V. Effects of porosity distribution and porosity volume fraction on the electromechanical properties of 3-3 piezoelectric foams. *Smart Materials and Structures*. 2016. Vol. 25. No 12. P. 125028.
7. Gandarilla-Pérez C.A., Rodríguez-Ramos R., Sevostianov I., Sabina F.J., Bravo-Castillero J., Guinovart-Díaz R., Lau-Alfonso L. Extension of Maxwell homogenization scheme for piezoelectric composites containing spheroidal inhomogeneities. *International Journal of Solids and Structures*. 2018. Vol. 135. P. 125–136.
8. Martinez-Ayuso G., Friswell M.I., Adhikari S., Khodaparast H.H., Berger H. Homogenization of porous piezoelectric materials. *International Journal of Solids and Structures*. 2017. Vol. 113–114. P. 218–229.
9. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of elasticity at the nanoscale. *Advances in Applied Mechanics*. 2008. Vol. 42. P. 1–68.
10. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects. *Acta Mechanica*. 2016. Vol. 227. P. 29–42.
11. 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.
12. 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 Solida Sinica*. 2016. Vol. 32. No 1. P. 83–100.
13. Chen T. Exact size-dependent connections between effective moduli of fibrous piezoelectric nanocomposites with interface effects. *Acta Mechanica*. 2008. Vol. 196. P. 205–217.
14. Gu S.-T., He Q.-C., Pensée V. Homogenization of fibrous piezoelectric composites with general imperfect interfaces under anti-plane mechanical and in-plane electrical loadings. *Mechanics of Materials*. 2015. Vol. 88. P. 12–29.
15. Gu S.-T., Liu J.-T., He Q.-C. Piezoelectric composites: Imperfect interface models, weak formulations and benchmark problems. *Computational Materials Science*. 2014. Vol. 94. P. 182–190.

16. Wang Z., Zhu J., Jin X.Y., Chen W.Q., Zhang Ch. Effective moduli of ellipsoidal particle reinforced piezoelectric composites with imperfect interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2014. Vol. 65. P. 138–156.
17. 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.
18. Xiao J.H., Xu Y.L., Zhang F.C. Evaluation of effective electroelastic properties of piezoelectric coated nano-inclusion composites with interface effect under antiplane shear. *International Journal of Engineering Science*. 2013. Vol. 69. P. 61–68.
19. 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*. I.A. Parinov (Ed.) N.-Y.: Nova Science Publ., 2011. Ch. 7. P. 231–254.
20. Nasedkin A.V., Shevtsova M.S. Multiscale computer simulation of piezoelectric devices with elements from porous piezoceramics. *Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications*. I.A. Parinov, S.-H. Chang (Eds.) N.-Y.: Nova Science Publ., 2013. Ch. 16. P. 185–202.
21. Chatzigeorgiou G., Javili A., Steinmann P. Multiscale modelling for composites with energetic interfaces at the micro-or nanoscale. *Mathematics and Mechanics of Solids*. 2015. Vol. 20. No 9. P. 1130–1145.
22. Javili A., McBride A., Mergheima J., Steinmann P., Schmidt U. Micro-to-macro transitions for continua with surface structure at the microscale. *International Journal of Solids and Structures*. 2013. Vol. 50. P. 2561–2572.
23. Наседкин А.В., Еремеев В.А. О моделях наноразмерных пьезоэлектрических материалов со связанными поверхностными эффектами. *Проблемы прочности и пластичности*. 2017. Т. 79. №4. С. 375–384.
24. Eremeyev V.A., Nasedkin A.V. Mathematical models and finite element approaches for nanosized piezoelectric bodies with uncoupled and coupled surface effects. *Wave Dynamics and Composite Mechanics for Microstructured Materials and Metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials*. Vol. 59. M.A. Sumbatyan (Ed.). Singapore: Springer, 2017. Ch.1. P. 1–18.
25. Наседкин А.В., Корниевский А.С. Конечно-элементное моделирование эффективных свойств анизотропных упругих материалов со случайной наноразмерной пористостью. *Вычислительная механика сплошных сред*. 2017. Т. 10. №4. С. 375–387.
26. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Finite element modeling and computer design of anisotropic elastic porous composites with surface stresses. *Wave Dynamics and Composite Mechanics for Microstructured Materials and Metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials*. Vol. 59. M.A. Sumbatyan (Ed.). Singapore: Springer, 2017. Ch. 6. P. 107–122.
27. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L., Huang Z.P. Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification. *Acta Materialia*. 2006. Vol. 54. P. 2983–2990.
28. Еремеев В.А., Морозов Н.Ф. Об эффективной жесткости нанопористого стержня. *Доклады РАН*. 2010. Т. 432. №4. С. 473–476.
29. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. Harmonic vibrations of nanosized piezoelectric bodies with surface effects. *ZAMM*. 2014. Vol. 94. No 10. P. 878–892.

References

1. Ringgaard E., Lautzenhiser F., Bierregaard L.M., Zawada T., Molz E. Development of porous piezoceramics for medical and sensor applications. *Materials*. 2015. Vol. 8. No 12. P. 8877–8889.
2. Rybyanets A.N. Porous piezoceramics: theory, technology, and properties. *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*. 2011. Vol. 58. P. 1492–1507.
3. Iyer S., Venkatesh T.A. Electromechanical response of (3-0, 3-1) particulate, fibrous, and porous piezoelectric composites with anisotropic constituents: A model based on the homogenization method. *Int. J. Solids Struct.* 2014. Vol. 51. P. 1221–1234.
4. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Models of porous piezocomposites with 3-3 connectivity type in ACELAN finite element package. *Mater. Phys. Mech.* 2018. Vol. 37. No 1. P. 16–24.

5. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Finite element homogenization models of bulk mixed piezocomposites with granular elastic inclusions in ACELAN package. *Mater. Phys. Mech.* 2018. Vol. 37. No 1. P. 25–33.
6. Nguyen B.V., Challagulla K.S., Venkatesh T.A., Hadjiloizi D.A., Georgiades A.V. Effects of porosity distribution and porosity volume fraction on the electromechanical properties of 3-3 piezoelectric foams. *Smart Mater. Struct.* 2016. Vol. 25. No 12. P. 125028.
7. Gandarilla-Pérez C.A., Rodríguez-Ramos R., Sevostianov I., Sabina F.J., Bravo-Castillero J., Guinovart-Díaz R., Lau-Alfonso L. Extension of Maxwell homogenization scheme for piezoelectric composites containing spheroidal inhomogeneities. *Int. J. Solids Struct.* 2018. Vol. 135. P. 125–136.
8. Martínez-Ayuso G., Friswell M.I., Adhikari S., Khodaparast H.H., Berger H. Homogenization of porous piezoelectric materials. *Int. J. Solids Struct.* 2017. Vol. 113–114. P. 218–229.
9. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of elasticity at the nanoscale. *Advances in Applied Mechanics.* 2008. Vol. 42. P. 1–68.
10. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects. *Acta Mech.* 2016. Vol. 227. P. 29–42.
11. 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 Mech. Solida Sin.* 2011. Vol. 24. No 1. P. 52–82.
12. Wang K.F., Wang B.L., Kitamura T. A review on the application of modified continuum models in modeling and simulation of nanostructures. *Acta Mech. Solida Sin.* 2016. Vol. 32. No 1. P. 83–100.
13. Chen T. Exact size-dependent connections between effective moduli of fibrous piezoelectric nanocomposites with interface effects. *Acta Mech.* 2008. Vol. 196. P. 205–217.
14. Gu S.-T., He Q.C., Pensée V. Homogenization of fibrous piezoelectric composites with general imperfect interfaces under anti-plane mechanical and in-plane electrical loadings. *Mech. Mater.* 2015. Vol. 88. P. 12–29.
15. Gu S.-T., Liu J.-T., He Q.-C. Piezoelectric composites: Imperfect interface models, weak formulations and benchmark problems. *Comp. Mater. Sci.* 2014. Vol. 94. P. 182–190.
16. Wang Z., Zhu J., Jin X.Y., Chen W.Q., Zhang Ch. Effective moduli of ellipsoidal particle reinforced piezoelectric composites with imperfect interfaces. *J. Mech. Phys. Solids.* 2014. Vol. 65. P. 138–156.
17. Xiao J.H., Xu Y.L., Zhang F.C. Size-dependent effective electroelastic moduli of piezoelectric nanocomposites with interface effect. *Acta Mech.* 2011. Vol. 222. No 1–2. P. 59–67.
18. Xiao J.H., Xu Y.L., Zhang F.C. Evaluation of effective electroelastic properties of piezoelectric coated nano-inclusion composites with interface effect under antiplane shear. *Int. J. Eng. Sci.* 2013. Vol. 69. P. 61–68.
19. 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.* I.A. Parinov (Ed.) N.-Y. Nova Science Publ. 2011. Ch. 7. P. 231–254.
20. Nasedkin A.V., Shevtsova M.S. Multiscale computer simulation of piezoelectric devices with elements from porous piezoceramics. *Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications.* I.A. Parinov, S.-H. Chang (Eds.) N.-Y. Nova Science Publ. 2013. Ch. 16. P. 185–202.
21. Chatzigeorgiou G., Javili A., Steinmann P. Multiscale modelling for composites with energetic interfaces at the micro-or nanoscale. *Math. Mech. Solids.* 2015. Vol. 20. No 9. P. 1130–1145.
22. Javili A., McBride A., Mergheima J., Steinmann P., Schmidt U. Micro-to-macro transitions for continua with surface structure at the microscale. *Int. J. Solids Struct.* 2013. Vol. 50. P. 2561–2572.
23. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. O modelyah nanorazmernykh p'ezoelektricheskikh materialov so svyazannymi poverhnostnyimi effektami [About models of nanosized piezoelectric materials with coupled surface effects]. *Problemy prochnosti i plastichnosti [Problems of Strength and Plasticity]*. 2017. Vol. 79. No 4. P. 375–384 (In Russian).
24. Eremeyev V.A., Nasedkin A.V. Mathematical models and finite element approaches for nanosized piezoelectric bodies with uncoupled and coupled surface effects. *Wave Dynamics and*

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

25. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Konechno-elementnoe modelirovanie effektivnykh svoystv anizotropnykh uprugih materialov so sluchajnoj nanorazmernoj poristost'yu [Finite element modeling of effective properties of elastic materials with random nanosized porosities]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred* [Computational Continuum Mechanics]. 2017. Vol. 10. No 4. P. 375–387 (In Russian).

26. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Finite element modeling and computer design of anisotropic elastic porous composites with surface stresses. *Wave Dynamics and Composite Mechanics for Microstructured Materials and Metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials*. Vol. 59. M.A. Sumbatyan (Ed.). Singapore. Springer. 2017. Ch. 6. P. 107–122.

27. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L., Huang Z.P. Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification. *Acta Mater*. 2006. Vol. 54. P. 2983–2990.

28. Eremeyev V., Morozov N. The effective stiffness of a nanoporous rod. *Doklady Physics*. 2010. Vol. 55. No 6. P. 279–282.

29. Nasedkin A.V., Eremeyev V.A. Harmonic vibrations of nanosized piezoelectric bodies with surface effects. *ZAMM*. 2014. Vol. 94. No 10. P. 878–892.

ANALYSIS OF SURFACE STRESS INFLUENCE ON THE EFFECTIVE PROPERTIES OF NANOPOROUS PIEZOCOMPOSITES

Nasedkin A.V.

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

The present paper considers the homogenization problems for mixed piezoelectric composite materials with stochastic distributions of inclusions or pores and with taking into account the mechanical imperfect interphase boundaries. The accepted interface statements correspond to the Gurtin – Murdoch model and give a significant contribution only for nanostructured composites. To determine the effective properties, an integrated approach was used, based on the theory of effective moduli, on the modelling of representative element volumes and on the finite element method. An aggregate of boundary value problems was described, which allow one to find a complete set of effective stiffness moduli, piezomoduli, and dielectric constants for a piezocomposite of arbitrary anisotropy class. The numerical solution of homogenization problems was carried out in the ANSYS finite-element package, which was used both for modelling of representative element volumes and for computation of the effective properties of composite material. The representative volume consisted of a regular cubic array of piezoelectric finite elements with the material properties of the two phases. The contact boundaries between materials of different phases were covered with elastic membrane elements that simulated interface surface stresses.

Specific implementation was performed for nanoporous piezoceramic composites, for which both the initial phases and the homogeneous material were materials of the hexagonal symmetry class, and the pores were considered as piezoelectric material with negligibly small stiffness moduli and piezomoduli. For this composite the membrane elements inherited the anisotropy structure of volume elements on their common edges. As an example, the results of calculations of effective moduli for porous ferroelectric soft piezoceramics PZT-5H were presented. It was noted that the surface stresses on the boundaries of the pores can significantly increase the values of the effective stiffness moduli. However, they had a weak influence on the values of the effective piezomoduli and dielectric constants.

Keywords: piezoelectricity, composite, porous piezoceramics, nanomechanics, surface stress, Gurtin – Murdoch model, effective modulus, finite element method.