

УДК 539.389.4, 539.87

DOI: 10.32326/1814-9146-2025-87-3-365-380

**ВОЗМОЖНОСТИ МОДЕЛИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ
ДЕФОРМИРОВАНИЯ И ПОЛЯРИЗАЦИИ
НА ПРИМЕРАХ ВЗАИМНОГО ВЛИЯНИЯ
МЕХАНИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ**

© 2025 г.

Скалиух А.С.

*Институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича
Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Российская Федерация*

a.s.skaliukh@gmail.com

Поступила в редакцию 23.05.2025

Показаны возможности модели необратимых процессов деформирования и поляризации поликристаллических сегнетоэлектрических материалов при воздействии интенсивных механических напряжений и электрических полей. Приведены основные положения обобщенной трехмерной модели, явившейся развитием одномерной модели поляризации Джилса – Атертона на случай взаимного воздействия механических напряжений и электрических полей. В основе лежит статистический подход учета микро-механических переключений доменов электрическим полем, предложенный И.Е. Таммом, который дополнен влиянием на этот процесс механических напряжений. Рассмотрены основные этапы, для каждого из которых проведены оценки энергетических затрат. Определена энергия, требуемая для слома механизмов закрепления доменов, подсчитана работа, необходимая для простого поворота их к новому направлению, определены общие энергетические потери в реальном процессе деформирования и поляризации. Все энергетические оценки осуществлены для представительного объема и выражены через интегральные характеристики обратимых и необратимых параметров. Получен энергетический баланс, позволивший получить определяющие соотношения для остаточного тензора деформаций и остаточного вектора поляризации в виде системы уравнений в дифференциалах. К остаточным параметрам добавлены обратимые составляющие в виде алгебраических тензорных уравнений, полученных методами термодинамики необратимых процессов. Итогом модели выступают определяющие соотношения, которые складываются из уравнений в дифференциалах для необратимых составляющих и алгебраических тензорных соотношений для обратимых составляющих, с тем отличием, что физические модули в тензорных уравнениях зависят от текущих значений остаточных параметров. Последовательным интегрированием строятся общие зависимости между искомыми и определяющими параметрами. Для циклических внешних полей таким зависимостям даны названия гистерезисных кривых. Предложенная модель позволяет рассчитать все известные на данный момент экспериментальные зависимости и подобрать параметры модели так, что получаются не только качественные, но и количественные совпадения. Приведены гистерезисные

зависимости для различных механических напряжений и электрических полей.

Ключевые слова: определяющие соотношения, сегнетоэлектрики, модель поляризации, гистерезис, домены, необратимый процесс.

Введение

Предметом исследования являются поликристаллические сегнетоэлектрические материалы (или керамики) в условиях необратимых процессов, при которых меняется структура, электрические и механические свойства материала, а отклик на циклические нагрузки представляет собой гистерезисные зависимости. Необратимость процесса приводит к нелинейным определяющим соотношениям, а явления сегнетоэлектричества – к анизотропии материала.

В поликристаллических сегнетоэлектриках необратимость наблюдается от воздействия как электрического поля, так и механических напряжений, причем экспериментальные данные в основном приводятся для случаев простого осевого растяжения-сжатия при условиях, когда электрическое поле либо совпадает с этим направлением, либо ему перпендикулярно. Очевидно, что это связано со сложностью и затратностью подобных экспериментов, но тем не менее результаты показывают существенное взаимовлияние механических и электрических полей на отклик материала [1, 2].

Интерес к подобным моделям не ослабевает уже на протяжении многих лет. Сами процессы поляризации, намагничивания и пластичности в меняющихся структурах материала являются в математическом плане родственными проблемами в том смысле, что каждый из них изучается посредством исследования отклика индуцированных и остаточных параметров на внешние нагрузки. Разработкой подобных моделей занимались одни и те же авторы, а результаты моделирования из одной области с успехом переходили в другую. Примером может служить модель Прейзаха [3], построенная для процессов намагничивания ферромагнетиков, которая позже использовалась в моделировании пластичности кристаллов [4] и в явлениях поляризации сегнетоэлектриков [5]. И хотя эта модель была разработана девяносто лет тому назад, она по-прежнему успешно применяется в динамике сложных механических систем с гистерезисной зависимостью восстанавливающей силы. Все же в каждом материале присутствуют их отличительные от других признаки, которые проявляются при сильных внешних воздействиях. Так, для сегнетоэлектриков именно доменная структура и тесно связанное с ней явление двойникования в кристаллах положены в основу моделирования необратимых процессов деформирования и поляризации, а наиболее полный обзор одномерных и трехмерных моделей представлен в [6, 7].

Трехмерные математические модели для поликристаллических сегнетоэлектриков можно разделить на три основных направления: феноменологическое, микромеханическое и составное.

Первое (феноменологическое) направление относится к теории, где методы теории пластичности переносятся на поликристаллические сегнетоэлектрические среды и дополняются электрическими характеристиками [8–13]. Линейные соотношения для индуцированных составляющих получаются из квадратичной функции Гиббса, уравнений термодинамики и неравенства Клаузиуса – Дюгема. Формулируется поверхность поляризации, позволяющая находить дифференциалы остаточной деформации и остаточной поляризации с помощью ассоциированного закона. Модели отличаются друг от друга различным видом поверхности поляризации.

Второе (микромеханическое) направление основано на изучении условий переключения доменов на микроуровне, а результирующие характеристики остаточной деформации и остаточной поляризации представительного объема находят методами осреднения [14–17]. К этому же направлению можно отнести и модели пластического деформирования кристаллов [18, 19], в которых вводится объемная доля возможной реализации доменов того или иного вида. Скорость изменения объемной доли определяется через кинематические переменные, которые, в свою очередь, определяются из эволюционных уравнений, априорно вводимых условиями термодинамических ограничений. Сюда же можно отнести и энергетическую модель переключений, в которой в представительном объеме условия переключения доменов формулируются на основе энергетического критерия [20–22] с последующим усреднением по представительному объему. Работы этого направления различаются формулировкой критерия переключения и способами усреднения.

Третье (составное) направление основывается на одномерной модели Джилса – Атертона [23], в которой процесс деформирования и поляризации складывается из идеальных вращений доменов и энергетического баланса. Усредненная деформация и поляризация простых поворотов находится с помощью статистического закона, а энергетический баланс включает энергию слома механизмов закрепления и энергетические затраты поворотов этих доменов [24, 25]. Такой подход приводит к уравнению в дифференциалах относительно остаточной деформации и остаточной поляризации.

В настоящей статье был взят за основу третий подход, который подвергся переработке и обобщению, и были разработаны и представлены новые положения. Во-первых, модель была обобщена на трехмерный случай; во-вторых, построены трехмерные определяющие соотношения для индуцированных составляющих и получены функциональные зависимости материальных модулей от остаточных параметров деформации и поляризации; в-третьих, построены трехмерные определяющие соотношения для остаточных параметров в виде системы девяти уравнений в дифференциалах. На основе такого подхода появилась возможность находить отклик материала для любых значений внешних механических напряжений и электрического поля.

1. Предварительные замечания

Поликристаллическая сегнетоэлектрическая керамика состоит из огромного числа кристаллитов размером порядка 10^{-6} – 10^{-5} м, кристаллографические оси которых в деполяризованном состоянии ориентированы произвольно. На линейном размере кристаллита помещается в среднем от одного до сотни доменов, каждый из которых способен содержать десятки, сотни и более атомных ячеек сегнетоэлектрика. Поэтому как в мелкозернистых, так и в крупнозернистых керамиках количество атомных ячеек по линейному размеру кристаллита составляет число порядка 10^4 . В каждой атомной ячейке в низкотемпературной сегнетоэлектрической фазе вследствие спонтанной поляризации центры положительных и отрицательных зарядов не совпадают. Такой электрический диполь характеризуется вектором спонтанной поляризации $\mathbf{p}_s$ и тензором спонтанной деформации $\boldsymbol{\epsilon}_s$. Для сегнетоэлектриков типа перовскита одна из главных осей тензора деформации (ось растяжения) совпадает с направлением вектора $\mathbf{p}_s$, две другие оси – оси сжатия. Тензор спонтанной деформации удовлетворяет условию несжимаемости.

Для оценки механических и электрических свойств материала рассматривают усредненные характеристики представительного объема, линейные размеры которого значительно меньше линейных размеров конечного тела, но значительно больше размера кристаллитов:

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

Керамика после изготовления находится в состоянии, в котором она в силу произвольной ориентации кристаллитов и в силу огромного количества доменов является изотропным телом и не проявляет пьезоэлектрических свойств, при этом $\boldsymbol{\varepsilon}_0 = 0$ и $\mathbf{P}_0 = 0$. Для придания пьезоэлектрических свойств ее подвергают поляризации, то есть выдерживают в электрическом поле либо на стадии охлаждения (горячая поляризация), либо после охлаждения (холодная поляризация). В любом случае векторы спонтанной поляризации переключаются на направление, наиболее близкое к направлению электрического поля. Кристаллографическое строение каждого кристаллита не позволяет ему в точности совершить поворот к направлению электрического поля, но эффект таких переключений приводит к тому, что $\boldsymbol{\varepsilon}_0 \neq 0$ и $\mathbf{P}_0 \neq 0$. Именно эти остаточные величины оказывают влияние на упругие, диэлектрические и пьезоэлектрические свойства материала. Остаточная деформация иногда называется пластической, но ее величина не может превышать величины спонтанной деформации, чем и обусловлено название остаточная. Наличие вектора $\mathbf{P}_0$ свидетельствует о том, что материал приобрел осевую симметрию; перешел из изотропного состояния в анизотропное, то есть стал трансверсально-изотропным. В таком поляризованном виде керамика становится пьезоэлектриком и может применяться в малых внешних механических и электрических полях как преобразователь электрической энергии в механическую и наоборот.

В сегнетоэлектриках не только электрическое поле, но и интенсивные механические напряжения могут менять направления векторов спонтанной поляризации и тоже изменять структуру материала. Например, сильное сжатие образца вдоль оси поляризации может обнулить остаточную поляризацию и изменить тензор остаточной деформации. Основной проблемой в моделировании таких явлений является задача формулировки определяющих соотношений между деформацией и поляризацией, с одной стороны, и между механическими напряжениями и электрическим полем, с другой стороны, в квазистатическом приближении. Деформация и поляризация складываются из индуцированной (упругой) $\boldsymbol{\varepsilon}_e$, $\mathbf{P}_e$ и остаточной (пластической) $\boldsymbol{\varepsilon}_0$, $\mathbf{P}_0$ составляющих:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_0, \quad \mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_0. \quad (1)$$

Поэтому определяющие соотношения формулируют отдельно для этих составляющих.

2. Об индуцированных составляющих модели

Индукцированные составляющие модели являются параметрами состояния, поэтому определяющие соотношения для них получают из термодинамики необратимых процессов в виде линейных тензорных соотношений [9–11, 26], где вместо индуцированной поляризации $\mathbf{P}_e$ вводят индуцированную электрическую индукцию $\mathbf{D}_e = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_e$ (ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума):

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_e &= \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \mathbf{S}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{d}^T(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) \cdot \mathbf{E}, \\ \mathbf{D}_e &= \mathbf{D} - \mathbf{P}_0 = \mathbf{d}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0) \cdot \mathbf{E}.\end{aligned}\quad (2)$$

Тензоры упругих податливостей $\mathbf{S}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0)$, пьезоэлектрических модулей $\mathbf{d}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0)$ и диэлектрических проницаемостей $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0)$ зависят от остаточных параметров текущего состояния $\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0$. В частности, для состояния насыщения $\boldsymbol{\varepsilon}_{0\text{sat}}, \mathbf{P}_{0\text{sat}}$ выписанные уравнения используются в модели электроупругости. Подробный вывод и функциональные зависимости их от остаточных параметров даны в [26]. Выражения для компонент этих тензоров были выписаны с использованием матричного представления Фойгта в локальной системе координат с осью Oz , направленной по вектору остаточной поляризации, в следующем виде:

$$\begin{aligned}\hat{S}_{\alpha\beta}(\varepsilon_0) &= \hat{S}_{0\alpha\beta} + \frac{\hat{S}_{\alpha\beta} - \hat{S}_{0\alpha\beta}}{\varepsilon_{\text{sat}}} \hat{\varepsilon}_{0\text{III}}, \\ \hat{\varepsilon}_{\alpha\beta}(\varepsilon_0) &= \hat{\varepsilon}_{0\alpha\beta} + \frac{\hat{\varepsilon}_{\alpha\beta} - \hat{\varepsilon}_{0\alpha\beta}}{\varepsilon_{\text{sat}}} \hat{\varepsilon}_{0\text{III}}, \\ \hat{d}_{mn}(p_0) &= \hat{d}_{mn} \frac{\hat{p}_{03}}{p_{\text{sat}}}.\end{aligned}$$

Здесь $\varepsilon_{\text{sat}}, p_{\text{sat}}$ – численные значения остаточной деформации и поляризации в состоянии насыщения (saturation); $\hat{S}_{0\alpha\beta} = \hat{S}_{\alpha\beta}(0)$, $\hat{\varepsilon}_{0\alpha\beta} = \hat{\varepsilon}_{\alpha\beta}(0)$ – компоненты упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей в начальном состоянии; $\hat{S}_{\alpha\beta} = \hat{S}_{\alpha\beta}(\varepsilon_{\text{sat}})$, $\hat{\varepsilon}_{\alpha\beta} = \hat{\varepsilon}_{\alpha\beta}(\varepsilon_{\text{sat}})$, $\hat{d}_{mn} = \hat{d}_{mn}(p_{\text{sat}})$ – значения компонент в состоянии поляризации насыщения; $\hat{\varepsilon}_{0\text{III}}$ – главное значение тензора остаточной деформации, направление которого совпадает с направлением вектора остаточной поляризации; $\hat{p}_{03}$ – модуль вектора остаточной поляризации в текущем значении. Из соотношений следует, что упругие податливости и диэлектрические проницаемости зависят только от остаточной деформации, в то время как пьезоэлектрические модули – только от остаточной поляризации. На первый взгляд эти зависимости кажутся простыми в силу линейности, но остаточные параметры ведут себя гистерезисным образом при изменении электрического поля и механических напряжений, поэтому такое же поведение будет и у всех физических модулей. Эти соотношения были получены в локальных осях, в условиях, когда механическая нагрузка является одноосной, и эта ось совпадает с направлением электрического поля.

3. Об остаточных составляющих модели

Для построения определяющих соотношений для необратимых частей будем придерживаться положений одномерной модели Джилса – Атертона. Содержательная часть этой модели была выдвинута академиком И.Е. Таммом и изложена в известной книге [27]. Авторы [23] воспользовались основными результатами и дополнили ее до модели намагничивания. Позже ее применили к сегнетоэлектрикам, но в одномерном случае [24, 25].

В основу указанной модели положена кинематическая часть, описывающая повороты полярного вектора подобно вращению полярной молекулы в поле. Обобщим эту часть следующим образом: во-первых, учтем кроме электрического поля еще и механические напряжения и, во-вторых, будем рассматривать трехмерную теорию.

Для этого полярную молекулу ассоциируем с вектором спонтанной поляризации $\mathbf{p}_s$ и сопутствующей ей спонтанной деформацией $\boldsymbol{\varepsilon}_s$. На наноуровне вместо внешних полей, к которым относим электрическое $\mathbf{E}$ и механические $\boldsymbol{\sigma}$ напряжения, согласно теории Вейсса, рассматриваем эффективные поля

$$\mathbf{E}^{\text{ef}} = \mathbf{E} + \alpha \mathbf{P}_0, \quad \boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} = \boldsymbol{\sigma} + \beta \boldsymbol{\varepsilon}_0, \quad (3)$$

зависящие от остаточных значений поляризации и деформации. Добавленные слагаемые $\alpha \mathbf{P}_0$ для напряженности электрического поля называют молекулярным полем, а аналогичную добавку $\beta \boldsymbol{\varepsilon}_0$ для механических напряжений можно интерпретировать как напряжения стеснения. Константы α, β подлежат в дальнейшем определению.

Кинематическая часть относится к тому случаю, когда внешние поля разрушили механизмы закрепления доменов и начинается массовое переключение доменов к новому направлению. Эта искусственно отделенная от общей картины переключений часть затрагивает только переключения или повороты доменов, почему и получила название кинематической. В таком состоянии считается, что эффективные поля способны поворачивать векторы спонтанной поляризации и изменять тензоры спонтанной деформации (подобно тому, как магнитное поле поворачивает железные опилки). Такие трансформации доменов в смысле поворотов и деформирования рассматриваем как простые, которые никоим образом не связаны с соседними доменами, не способны закрепляться в новых местах, но которые подвержены влиянию тепловых полей, препятствующих их движениям. В таких условиях и только в рамках кинематической части применим статистический закон Больцмана, позволяющий оценить деформацию и поляризацию, а после процесса осреднения по представительному объему найти результирующие значения деформации и поляризации. Эти значения называются предельными, а такой процесс идеальным в том смысле, что он описывает только безгистерезисные процессы. Проводя аналогично [26] соответствующие выкладки и включив наравне с электрическим полем и механические напряжения, получим предельные зависимости деформации и поляризации в виде интегралов:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_\infty &= p_s \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \exp[(\mathbf{E}^{\text{ef}} \cdot \mathbf{p}_s / p_s) / a + (\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s) / b] \mathbf{p}_s / p_s \sin \psi \, d\psi}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \exp[(\mathbf{E}^{\text{ef}} \cdot \mathbf{p}_s / p_s) / a + (\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s) / b] \sin \psi \, d\psi}, \\ \boldsymbol{\varepsilon}_\infty &= \varepsilon_s \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \exp[(\mathbf{E}^{\text{ef}} \cdot \mathbf{p}_s / p_s) / a + (\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s) / b] \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s \sin \psi \, d\psi}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \exp[(\mathbf{E}^{\text{ef}} \cdot \mathbf{p}_s / p_s) / a + (\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} : \boldsymbol{\varepsilon}_s / \varepsilon_s) / b] \sin \psi \, d\psi}. \end{aligned} \quad (4)$$

Далее приводятся энергетические оценки: определяются затраты на слом механизмов закрепления доменных стенок, находятся затраты на описанные трансформации в реальном процессе деформирования и поляризации и затраты на трансформации идеального случая. Все энергетические оценки приводятся для произвольного представительного объема. В результате формулируется энергетический баланс: реальные затраты в процессе деформирования и поляризации равны энергетическим затратам на слом механизмов закрепления стенок доменов плюс работа электрических и механических полей в идеальном случае.

Выражение для энергии, необходимой для слома механизмов закрепления стенок доменов для произвольной области Ω , можно представить в виде

$$\Delta U = \int_{\Omega} \frac{d\mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{\text{ef}} + d\boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}}}{(1/k_1)|d\mathbf{E}^{\text{ef}}| + (1/k_2)|d\boldsymbol{\sigma}_I^{\text{ef}} - d\boldsymbol{\sigma}_{III}^{\text{ef}}|} d\Omega, \quad (5)$$

где слагаемые $d\boldsymbol{\sigma}_I^{\text{ef}}$, $d\boldsymbol{\sigma}_{III}^{\text{ef}}$ представляют собой главные значения тензора $d\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}}$.

Выражение затрачиваемой работы на поляризацию и деформирование в истинных процессах деформирования и поляризации получается из общего вида работы электрических и механических полей в представительном объеме

$$\Delta A = \int_{\Omega} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon} d\Omega,$$

которое после учета обратимых и необратимых частей искомых параметров и некоторых преобразований приводится к выражению

$$\Delta A = - \int_{\Omega} \mathbf{P}_0 \cdot d\mathbf{E}^{\text{ef}} d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_0 : d\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} d\Omega. \quad (6)$$

Для получения работы внешних полей в идеальном (предельном) случае достаточно заменить в (6) остаточные параметры на предельные, то есть

$$\Delta A_{\infty} = - \int_{\Omega} \mathbf{P}_{\infty} \cdot d\mathbf{E}^{\text{ef}} d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_{\infty} : d\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}} d\Omega. \quad (7)$$

Теперь выражение энергетического баланса можно представить в виде:

$$\Delta A = \Delta A_{\infty} + \Delta U. \quad (8)$$

Подставляя в (8) выражения (4)–(7) и учитывая произвольность объема Ω и независимость $d\mathbf{E}^{\text{ef}}$ и $d\boldsymbol{\sigma}^{\text{ef}}$, получаем искомые уравнения

$$\begin{aligned} d\mathbf{P}_0 &= \left(\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{\text{ef}}| + \frac{1}{k_2} (d\boldsymbol{\sigma}_{III}^{\text{ef}} - d\boldsymbol{\sigma}_I^{\text{ef}}) \right) (\mathbf{P}_{\infty} - \mathbf{P}_0), \\ d\boldsymbol{\varepsilon}_0 &= \left(\frac{1}{k_1} |d\mathbf{E}^{\text{ef}}| + \frac{1}{k_2} (d\boldsymbol{\sigma}_{III}^{\text{ef}} - d\boldsymbol{\sigma}_I^{\text{ef}}) \right) (\boldsymbol{\varepsilon}_{\infty} - \boldsymbol{\varepsilon}_0). \end{aligned} \quad (9)$$

В них входит десять параметров: ε_s , p_s , ε_{sat} , p_{sat} , k_1 , k_2 , a , b , α , β , выбор которых позволяет настроить модель под конкретный материал, то есть с некоторой погрешностью добиться соответствия экспериментальных данных с расчетными на гистерезисных кривых. Каждый из параметров имеет определенный физический смысл и оказывает влияние на поведение расчетных кривых. Когда внешние поля изменяются циклически, это влияние сводится к следующему: ε_s , p_s увеличивают амплитуду кривых; ε_{sat} , p_{sat} определяют максимальные значения; k_1 , k_2 управляют раздвижением или сближением стенок петель гистерезиса; a , b изменяют наклоны петель гистерезиса по отношению к оси абсцисс; α , β влияют и на раздвижение стенок, и на их крутизну.

4. Метод последовательных приближений

Пусть механические и электрические нагрузки изменяются независимо друг от друга, сохраняя лишь пропорциональность каждой своей функции времени:

$$\sigma_{mn}(t) = \sigma_{\max} F_{\sigma}(t), \quad E_m(t) = E_{\max} F_E(t). \quad (10)$$

Пусть начальные условия имеют вид

$$\varepsilon_{0mn}(\sigma_{ij}, E_j) \Big|_{\sigma_{ij}=0, E_j=0} = \varepsilon_{0mn}^*, \quad P_{0m}(\sigma_{ij}, E_j) \Big|_{\sigma_{ij}=0, E_j=0} = P_{0mn}^*,$$

причем для термически деполяризованной керамики $\varepsilon_{0mn}^* = 0, P_{0mn}^* = 0$.

Для квазистатического процесса в виде последовательности N равновесных состояний $C^{(0)}, C^{(1)}, \dots, C^{(i)}, \dots, C^{(N)}$ задаются приращения внешних нагрузок при переходе от одного равновесного состояния к другому и вычисляются приращения искоемых величин, то есть для приращений $\Delta \sigma^{(i)} = \sigma(t_{i+1}) - \sigma(t_i), \Delta E^{(i)} = E(t_{i+1}) - E(t_i)$ необходимо определить приращения $(\Delta \varepsilon_0^{(i)}), (\Delta P_0^{(i)})$ из (9), где дифференциалы заменяются на разности. Учитывая, что искоемые приращения входят неявно в правые части этих девяти скалярных уравнений, воспользуемся для их определения методом последовательных приближений. Пусть в состоянии $C^{(i-1)}$ приращения $(\Delta \varepsilon_0^{(i-1)}), (\Delta P_0^{(i-1)})$ известны. Организуем вычисления в $C^{(i)}$. Для этого на k -й итерации вычисляем последовательно:

– приращения эффективных полей (3)

$$(\Delta E^{\text{eff}(i)})^{(k+1)} = \Delta E^{(i)} + \alpha (\Delta P_0^{(i)})^{(k)}, \quad (\Delta \sigma^{\text{eff}(i)})^{(k+1)} = \Delta \sigma^{(i)} + \beta (\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k)};$$

– главные значения тензора приращений эффективных механических полей

$$(\Delta \sigma_{\text{III}}^{\text{eff}(i)})^{(k+1)}, \quad (\Delta \sigma_{\text{I}}^{\text{eff}(i)})^{(k+1)};$$

– текущие значения остаточных параметров

$$(\mathbf{P}_0^{(i)})^{(k+1)} = \mathbf{P}_0^{(i)} + (\Delta \mathbf{P}_0^{(i)})^{(k)}, \quad (\varepsilon_0^{(i)})^{(k+1)} = \varepsilon_0^{(i)} + (\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k)};$$

– предельные значения остаточных параметров (4)

$$(\mathbf{P}_{\infty}^{(i)})^{(k+1)} = \mathbf{P}_{\infty}^{(i)} ((\mathbf{E}^{\text{eff}(i)})^{(k+1)}, (\sigma^{\text{eff}(i)})^{(k+1)}),$$

$$(\varepsilon_{\infty}^{(i)})^{(k+1)} = \varepsilon_{\infty}^{(i)} ((\mathbf{E}^{\text{eff}(i)})^{(k+1)}, (\sigma^{\text{eff}(i)})^{(k+1)});$$

– искоемые приращения (9)

$$(\Delta \mathbf{P}_0^{(i)})^{(k+1)} = \left(\frac{1}{k_1} |\Delta \mathbf{E}^{\text{eff}(i)}| \frac{1}{k_2} (\Delta \sigma_{\text{III}}^{\text{eff}(i)} - \Delta \sigma_{\text{I}}^{\text{eff}(i)}) \right) ((\mathbf{P}_{\infty}^{(i)})^{(k+1)} - (\mathbf{P}_0^{(i)})^{(k+1)}),$$

$$(\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k+1)} = \left(\frac{1}{k_1} |\Delta \mathbf{E}^{\text{eff}(i)}| \frac{1}{k_2} (\Delta \sigma_{\text{III}}^{\text{eff}(i)} - \Delta \sigma_{\text{I}}^{\text{eff}(i)}) \right) ((\varepsilon_{\infty}^{(i)})^{(k+1)} - (\varepsilon_0^{(i)})^{(k+1)}).$$

Выход из итерационного процесса осуществляется по достижении условий

$$\delta P < \delta_p, \quad \delta \varepsilon < \delta_{\varepsilon},$$

$$\delta P = \sqrt{((\Delta \mathbf{P}_0^{(i)})^{(k+1)} - (\Delta \mathbf{P}_0^{(i)})^{(k)}) \cdot ((\Delta \mathbf{P}_0^{(i)})^{(k+1)} - (\Delta \mathbf{P}_0^{(i)})^{(k)})},$$

$$\delta \varepsilon = \sqrt{((\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k+1)} - (\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k)}) : ((\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k+1)} - (\Delta \varepsilon_0^{(i)})^{(k)})}.$$

Далее осуществляется переход к новому равновесному состоянию. В вычислениях принимались значения: $N = 100, \delta_p = \delta_{\varepsilon} = 0,001$. Установлено, что для достижения заданной точности достаточно использовать не более 5 итераций.

По найденным остаточным параметрам находятся физические модули (2) и определяются индуцированные значения, которые вместе с остаточными дают полные значения деформаций и электрической индукции (1).

5. Численные эксперименты

Экспериментальные данные для циклически меняющихся электрических полей и одноосных механических напряжений в литературе представляют в виде гистерезисных зависимостей, называемых диэлектрическими и деформационными петлями. Однако разработанная модель дает возможность получать более общие зависимости, которые не укладываются в рамки установленных ранее названий. В связи с этим предлагается более информативная классификация гистерезисных зависимостей по характеру воздействий и отклику в следующей интерпретации:

- диэлектрические $D_k = D_k(E_m)$, $k, m = 1, 2, 3$;
- деформационные $\varepsilon_{km} = \varepsilon_{km}(\sigma_{ns})$, $k, m, n, s = 1, 2, 3$;
- смешанные $\varepsilon_{km} = \varepsilon_{km}(E_n)$, $D_k = D_k(\sigma_{mn})$, $k, m, n = 1, 2, 3$;
- комбинированные $\varepsilon_{km} = \varepsilon_{km}(E_n, \sigma_{ps})$, $D_k = D_k(E_n, \sigma_{ps})$, $k, m, n, p, s = 1, 2, 3$.

Приведем результаты расчетов, представляющие универсальность разработанной модели при визуализации отклика материала на различные нагрузки. В качестве материала была выбрана керамика ЦТС-19, для которой деполяризованный и поляризованный до состояния насыщения физические модули известны. Обращаясь к моделям пластичности, замечаем, что в них используются параметры функции поверхности нагружения и зависимости для одноосных испытаний. В предлагаемой модели также необходимо подбирать ряд отмеченных выше параметров, выбор которых основан на совпадении, например в равномерной метрике, рассчитанных и экспериментальных данных простых испытаний, скажем, по петлям диэлектрического и деформационного гистерезиса.

Циклическая электрическая нагрузка, показанная на рис. 1а, вызывает отклик в виде диэлектрической петли гистерезиса (рис. 2) и смешанных петель осевой (рис. 3) и поперечной (рис. 4) деформации, где для расчетов параметры модели принимали значения, указанные в таблице 1, а экспериментальные данные отмечены кружками. Насколько результаты моделирования совпадают с результатами эксперимента, можно судить по рис. 2. В настоящей статье не рассматривается математическая задача определения параметров модели по экспериментальным данным, а преследуется цель иллюстрации различных откликов материала на всевозможные нагрузки. Параметры p_s , ε_s – это значения спонтанной поляризации и спонтанной деформации для разных материалов, поэтому они варьируются в границах $0,01 < p_s < 0,5$; $0,005 < \varepsilon_s < 0,03$. Параметры a , b появляются при выводе предельных значений (4) и определяются формулами $a = kT/(\omega_s p_s)$, $b = kT/(\omega_s \varepsilon_s)$. Учитывая постоянную Больцмана, температуру эксперимента 300°C , спонтанную поляризацию и спонтанную деформацию и элементарный объем атомной ячейки около $4 \text{ \AA}$, получаем интервалы: $10^5 < a < 9 \cdot 10^8$, $10^5 < b < 9 \cdot 10^8$. Параметры α , β образуют добавочные поля (3). Они могут достигать больших значений, но порождаемые ими поля не могут превышать коэрцитивных значений. В силу этого получаем: $0 < \alpha < 6 \cdot 10^6$, $0 < \beta < 10^8$. Параметры k_1 , k_2 появляются в (5) и представляют собой отношение энергии, необходимой для поворота домена, к спонтанной поляризации и спонтанной деформации, соответственно $k_1 = \Delta U_{\pi, \pi/2}/(2p_s)$, $k_2 = \Delta U_{\pi, \pi/2}/(3\varepsilon_s/2)$. Они тесно связаны с плотностью распределения доменов различной ориентации, включенных в представительный объем, и их величины варьируются в районе коэрцитивных значений полей $2 \cdot 10^5 < k_1 < 3 \cdot 10^6$, $5 \cdot 10^5 < k_2 < 10^7$.

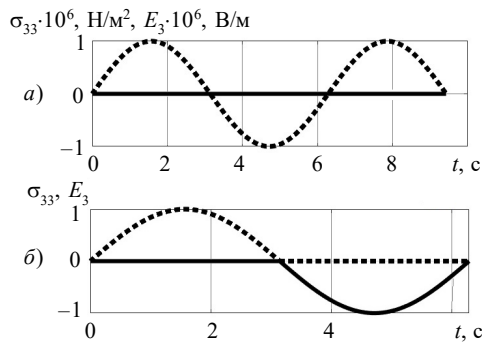


Рис. 1. Зависимости нагрузок от времени:
 $\cdots E/E_{\max}$, $\text{— } \sigma/\sigma_{\max}$

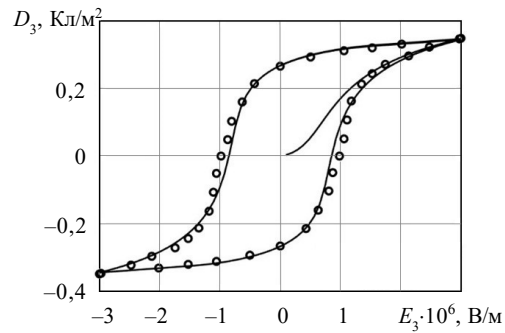


Рис. 2. Диэлектрическая петля:
 $\circ\circ$ эксперимент, — модель

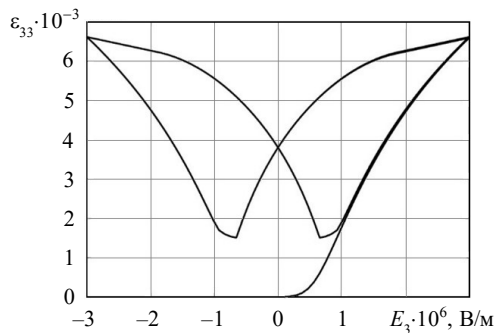


Рис. 3. Смешанная петля
 осевой деформации

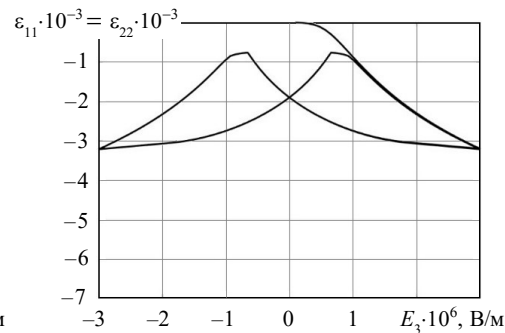


Рис. 4. Смешанная петля
 поперечной деформации

Таблица 1

ε_s	p_s , Кл/м²	ε_s	p_{sat} , Кл/м²	k_1 , В/м	k_2 , Н/м²	a , В/м	b , Дж/м³	α , В·м/Кл	β , Н/м²
0,01	0,383	0,008	0,27	$0,99 \cdot 10^6$	$0,89 \cdot 10^6$	$0,60 \cdot 10^6$	$0,54 \cdot 10^6$	$0,50 \cdot 10^7$	$0,10 \cdot 10^7$

Отметим, что буквально за пять-шесть пробных вычислений получаются результаты рис. 2, которые, как видно, не только качественно, но и количественно соответствуют результатам эксперимента.

Следующий пример показывает ситуацию, когда вначале электрическое поле при нулевых механических напряжениях поляризует керамику, а затем механические напряжения сжатия при нулевом электрическом поле ее деполяризуют; такой характер нагрузок показан на рис. 1б. Диэлектрические, деформационные и смешанные зависимости этого случая показаны на рис. 5, 6.

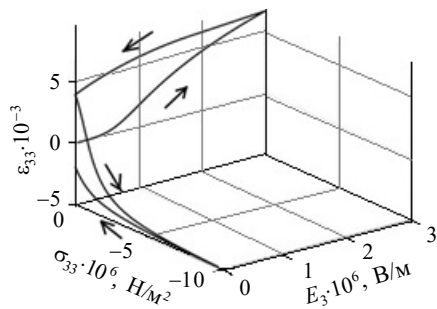


Рис. 5. Осевая деформация

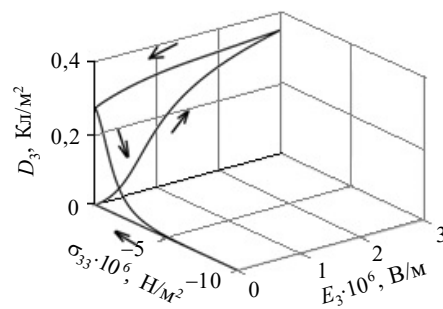


Рис. 6. Электрическая индукция

Далее рассматривается случай диэлектрического отклика при действии сжимающих напряжений различной интенсивности, как показано на рис. 7.

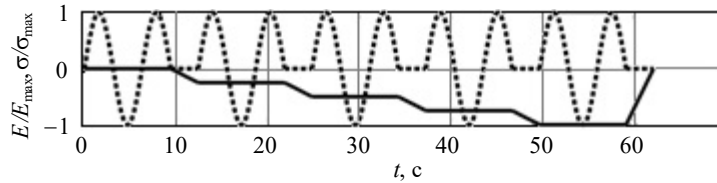


Рис. 7. Характер изменения внешних нагрузок от времени при комбинированном нагружении: $\cdots$ — $E/E_{\max}$, — — $\sigma/\sigma_{\max}$

Комбинированные петли диэлектрической проницаемости и осевой деформации для такого нагружения показаны на рис. 8, 9.

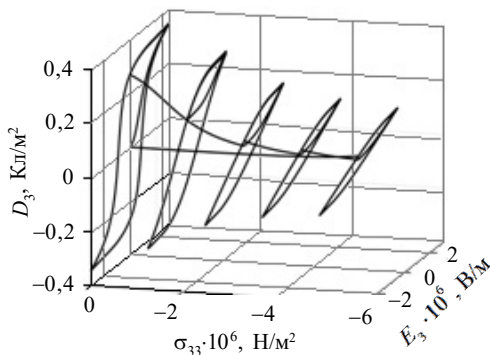


Рис. 8. Комбинированные петли диэлектрической проницаемости

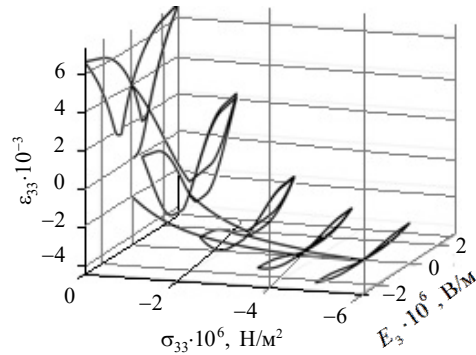


Рис. 9. Комбинированные петли осевой деформации

В литературе приводятся экспериментальные данные в виде проекций этих петель на плоскость $\sigma_{33} = 0$ и при этом отсутствуют участки, где меняются механические напряжения. Однако для необратимых процессов интересен весь путь изменения внешних нагрузок, что и показано на рисунках.

6. Анализ результатов

Почти все экспериментальные данные для сегнетоэлектриков включают в себя диэлектрические петли подобно той, которая изображена на рис. 2. Смешанные петли изменения осевой и поперечной деформации по отношению к электрическому полю приводятся не всегда, потому что в этом случае приходится дополнительно снимать показания датчиков деформаций. На рис. 5, 6 показано изменение электрической индукции и осевой деформации в зависимости от приложенного вначале электрического поля при нулевых механических напряжениях, а затем сжимающего напряжения при нулевом электрическом поле. В публикациях, освещающих эксперименты, обычно такие кривые разбивают на два плоских рисунка, где на одном изображены зависимости от электрического поля, а на другом — зависимости от воздействия механических напряжений. Здесь представлена графическая информация, обладающая большей информативностью в том смысле, что процесс нагружения не разрывается на части, связанные с разными силовыми воздействиями, а представляет единую технологическую операцию. Характерно, что при обнулении электрического поля после

полного цикла выходные характеристики становятся начальными для следующего механического воздействия. В этом случае нет необходимости оговаривать начальные условия второй половины эксперимента. Кстати, ни в одной работе, связанной с экспериментами, такие начальные условия не приводятся. Аналогичная ситуация имеет место и с комплексным воздействием, показанным на рис. 7. В литературе обычно диэлектрические или комбинированные петли приводятся на одном рисунке, где отмечаются только числовые значения сжимающих напряжений. Однако, как следует из комбинированной нагрузки рис. 7, общий процесс не прерывается, а только разделяется на активные части либо электрического поля при некотором постоянном значении механических напряжений, либо механических напряжений при нулевом значении электрического поля. Необходимо добавить, что петли, изображенные на рис. 8, 9, на самом деле лежат в параллельных плоскостях (E_3, D_3), каждая из которых ортогональна оси $O\sigma_{33}$. Кажущийся эффект наклона вперед этих петель связан с тем, что каждый раз они принимают все меньшую амплитуду. А при очень больших напряжениях обращаются практически в горизонтальную кривую, что соответствует случаю невозможности поворота их электрическим полем к другому направлению, поскольку сжимающие напряжения настолько велики, что не позволяют им изменять свои положения. Это в равной мере относится и к комбинированной петле осевой деформации на рис. 9.

Приведенные рисунки представляют собой лишь малую часть возможностей разработанной модели. Можно построить также и деформационные петли при нулевом электрическом поле. Но такие эксперименты не проводятся в связи с тем, что керамика является хрупким материалом: она хорошо выдерживает напряжения сжатия, но не выдерживает даже небольших напряжений растяжения. К такому же случаю можно отнести и воздействие напряжений сдвига, который можно представить в виде сжимающих и растягивающих напряжений в главных осях тензора напряжений. А поскольку сравнить такие численные эксперименты будет не с чем, подобные кривые представлены не были. Модель также позволяет рассматривать случай, когда направление электрического поля не совпадает ни с одним из главных направлений тензора напряжений, но в этом случае активизируются сразу несколько компонент вектора электрической индукции и тензора деформации, что затрудняет их визуализацию. Подобные численные эксперименты здесь не приводятся в связи с ограничением объема статьи.

Заключение

Предложены результаты работы модели, описывающей необратимые процессы деформирования и поляризации поликристаллических сегнетоэлектрических сред для квазистатических процессов. Отправляясь от одномерной модели Джилса – Атертона, удалось построить обладающую достаточной общностью трехмерную модель, учитывающую воздействие не только электрического поля, но и механических напряжений. Общность модели проявляется в том, что механические напряжения и электрическое поле не связаны между собой и задача решается в трехмерной постановке. Основным стержнем модели является статистический подход, предложенный И.Е. Таммом, для оценки количества переключившихся доменов. Зависимости для предельной деформации и предельной поляризации практически выступают направляющим «каркасом» при построении гистерезисных зависимостей. Именно в них заложен статистический подход, учитывающий огромное количество переключений

доменов, влияющих на интегральные характеристики того или иного гистерезиса. Полученный энергетический баланс позволил получить уравнения в дифференциалах для остаточных параметров аналогично тому, как в теории пластичности ассоциированный закон приводит к подобным уравнениям. Необходимо также отметить, что физические модули в определяющих соотношениях, связывающих упругие деформации и поляризацию с механическими напряжениями и электрическим полем, зависят от текущих значений остаточных параметров. Поэтому индуцированные и остаточные параметры взаимосвязаны между собой. Только найдя остаточные параметры, можно определить физические модули и установить функциональную зависимость между определяющими и искомыми параметрами. При произвольном изменении внешних нагрузок модель предоставляет определяющие соотношения, необходимые при численном решении конкретных задач для керамических материалов, подверженных механическим и электрическим нагрузкам различной интенсивности.

Список литературы

1. Lynch C.S. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT. *Acta Materialia*. 1996. Vol. 44. Iss. 10. P. 4137–4148.
2. Zhou D.Y., Kamlah M., Munz D. Uniaxial compressive stress dependence of the high-field dielectric and piezoelectric performance of soft PZT piezoceramics. *Journal of Materials Research*. 2004. Vol. 19. Iss. 3. P. 834–842. <https://doi.org/10.1557/jmr.2004.19.3.834>.
3. Preisach F. Über die magnetische Nachwirkung. *Zeitschrift für Physik*. 1935. Vol. 94. Iss. 5, 6. P. 277–302. <https://doi.org/10.1007/BF01349418>.
4. Красносельский М.А., Покровский А.В. *Системы с гистерезисом*. М.: Наука, 1983. 272 с.
5. Robert G., Damjanovic D., Setter N., Turik A.V. Preisach modeling of piezoelectric non-linearity in ferroelectric ceramics. *Journal of Applied Physics*. 2001. Vol. 89. Iss. 9. P. 5067–5074. <https://doi.org/10.1063/1.1359166>.
6. Skaliukh A.S. Mathematical 3D models of irreversible polarization processes of a ferroelectrics and ferroelastics polycrystal. In: *Materials Physics and Mechanics*. 2019. Vol. 42. Iss. 1. P. 74–102. http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4212019_8.
7. Hall D.A. Review nonlinearity in piezoelectric ceramics. *Journal of Materials Science*. 2001. Vol. 36. P. 4575–4601. <https://doi.org/10.1023/A:1017959111402>.
8. Muller R., Schröder J., Lupascu D.C. Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics. *GAMM-Mitteilungen*. 2008. Vol. 31. Iss. 2. P. 133–150. <https://doi.org/10.1002/gamm.200890007>.
9. McMeeking R.M., Landis C.M. A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics. *International Journal of Engineering Science*. 2002. Vol. 40. Iss. 14. P. 1553–1577. [https://doi.org/10.1016/S0020-7225\(02\)00033-2](https://doi.org/10.1016/S0020-7225(02)00033-2).
10. Landis C.M. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2002. Vol. 50. Iss. 1. P. 127–152. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(01\)00021-7](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(01)00021-7).
11. Huber J.E., Fleck N.A., Landis C.M., McMeeking R.M. A constitutive model for ferroelectric polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1999. Vol. 47. Iss. 8. P. 1663–1697. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(98\)00122-7](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(98)00122-7).
12. Elhadrouz M., Ben Zineb T., Patoor E. Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2005. Vol. 16. Iss. 3. P. 221–236.
13. Kamlah M., Böhle U. Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior. *International Journal of Solids and Structures*. 2001. Vol. 38. Iss. 4. P. 605–633. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(00\)00055-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(00)00055-X).
14. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model. *International*

Journal of Solids and Structures. 2005. Vol. 42. Iss. 9-10. P. 2949–2964. <https://doi.org/10.1016/j.jssolstr.2004.09.045>.

15. Huber J.E., Fleck N.A. Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behaviour. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 2004. Vol. 23. Iss. 2. P. 203–217. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2003.11.006>.

16. Jayabal K., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M. Micromechanical modelling of switching phenomena in polycrystalline piezoceramics: application of a polygonal finite element approach. *Computational Mechanics*. 2011. Vol. 48. Iss. 4. P. 421–435. <https://doi.org/10.1007/s00466-011-0595-4>.

17. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. A multiscale model for reversible ferroelectric behaviour of polycrystalline ceramics. *Mechanics of Materials*. 2014. Vol. 71. P. 85–100. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2014.01.006>.

18. Osipova N.G. The simulation of nonlinear behavior for ferroelectric ceramics with tetragonal structure by finite-element homogenizing. *St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics*. 2011. Vol. 134. Iss. 4. P. 56–64.

19. Jayabal K., Arockiarajan A., Sivakumar S.M. A micromechanical model for polycrystal ferroelectrics with grain boundary effects. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*. 2008. Vol. 27. Iss. 1-2. P. 111–124. <https://doi.org/10.3970/cmcs.2008.027.111>.

20. Shindo Y., Narita F., Horiguchi K., Magara Y., Yoshida M. Electric fracture and polarization switching properties of piezoelectric ceramic PZT studied by the modified small punch test. *Acta Materialia*. 2003. Vol. 51. Iss. 16. P. 4773–4782. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(03\)00303-3](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00303-3).

21. Hwang S.C., McMeeking R.M. A finite element model of ferroelastic polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*. 1999. Vol. 36. Iss. 10. P. 1541–1556. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(98\)00051-1](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(98)00051-1).

22. Hwang S.C., Waser R. Study of electrical and mechanical contribution to switching in ferroelectric/ferroelastic polycrystals. *Acta Materialia*. 2000. Vol. 48. Iss. 12. P. 3271–3282. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(00\)00092-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00092-6).

23. Jiles D.C., Atherton D.L. Theory of ferromagnetic hysteresis. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1986. Vol. 61. Iss. 1-2. P. 48–60. [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(86\)90066-1](https://doi.org/10.1016/0304-8853(86)90066-1).

24. Smith R.C. A nonlinear optimal control method for magnetostrictive actuators. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 1998. Vol. 9. Iss. 6. P. 468–486. <https://doi.org/10.1177/1045389X9800900608>.

25. Smith R.C., Ounaies Z. A Domain wall model for hysteresis in piezoelectric materials. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 2000. Vol. 11. Iss. 1. P. 62–79. <https://doi.org/10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY>.

26. Скалиух А.С. Функциональная зависимость физических характеристик от необратимых параметров при электромеханическом воздействии на сегнетоэлектрические керамики. *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2019. Вып. 58. С. 128–141. DOI: 10.17223/19988621/58/11.

27. Тамм И.Е. *Основы теории электричества*. М.: Наука, 1966. 624 с.

References

1. Lynch C.S. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT. *Acta Mater*. 1996. Vol. 44. Iss. 10. P. 4137–4148.

2. Zhou D.Y., Kamlah M., Munz D. Uniaxial compressive stress dependence of the high-field dielectric and piezoelectric performance of soft PZT piezoceramics. *J. Mater. Res*. 2004. Vol. 19. Iss. 3. P. 834–842. <https://doi.org/10.1557/jmr.2004.19.3.834>.

3. Preisach F. Über die magnetische Nachwirkung. *Zeitschrift für Physik*. 1935. Vol. 94. Iss. 5, 6. P. 277–302. <https://doi.org/10.1007/BF01349418>.

4. Krasnoselskiy M.A., Pokrovskiy A.V. *Sistemy s gisterезisom [Systems with Hysteresis]*. Moscow. Nauka Publ. 1983. 272 p. (In Russian).

5. Robert G., Damjanovic D., Setter N., Turik A.V. Preisach modeling of piezoelectric nonlinearity in ferroelectric ceramics. *J. Appl. Phys*. 2001. Vol. 89. Iss. 9. P. 5067–5074. <https://doi.org/10.1063/1.1359166>.

6. Skaliukh A.S. Mathematical 3D models of irreversible polarization processes of a ferroelectrics and ferroelastics polycrystal. In: *Materials Physics and Mechanics*. 2019. Vol. 42. Iss. 1. P. 74–102. http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4212019_8.
7. Hall D.A. Review nonlinearity in piezoelectric ceramics. *J. Mater. Sci.* 2001. Vol. 36. P. 4575–4601. <https://doi.org/10.1023/A:1017959111402>.
8. Muller R., Schröder J., Lupascu D.C. Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics. *GAMM-Mitteilungen*. 2008. Vol. 31. Iss. 2. P. 133–150. <https://doi.org/10.1002/gamm.200890007>.
9. McMeeking R.M., Landis C.M. A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics. *Int. J. Eng. Sci.* 2002. Vol. 40. Iss. 14. P. 1553–1577. [https://doi.org/10.1016/S0020-7225\(02\)00033-2](https://doi.org/10.1016/S0020-7225(02)00033-2).
10. Landis C.M. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2002. Vol. 50. Iss. 1. P. 127–152. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(01\)00021-7](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(01)00021-7).
11. Huber J.E., Fleck N.A., Landis C.M., McMeeking R.M. A constitutive model for ferroelectric polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1999. Vol. 47. Iss. 8. P. 1663–1697. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(98\)00122-7](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(98)00122-7).
12. Elhadrouz M., Ben Zineb T., Patoor E. Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics. *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 2005. Vol. 16. Iss. 3. P. 221–236.
13. Kamlah M., Böhle U. Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior. *Int. J. Solids Struct.* 2001. Vol. 38. Iss. 4. P. 605–633. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(00\)00055-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(00)00055-X).
14. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model. *International Int. J. Solids Struct.* 2005. Vol. 42. Iss. 9-10. P. 2949–2964. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2004.09.045>.
15. Huber J.E., Fleck N.A. Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behaviour. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 2004. Vol. 23. Iss. 2. P. 203–217. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2003.11.006>.
16. Jayabal K., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M. Micromechanical modelling of switching phenomena in polycrystalline piezoceramics: application of a polygonal finite element approach. *Computational Mechanics*. 2011. Vol. 48. Iss. 4. P. 421–435. <https://doi.org/10.1007/s00466-011-0595-4>.
17. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. A multiscale model for reversible ferroelectric behaviour of polycrystalline ceramics. *Mech. Mater.* 2014. Vol. 71. P. 85–100. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2014.01.006>.
18. Osipova N.G. The simulation of nonlinear behavior for ferroelectric ceramics with tetragonal structure by finite-element homogenizing. *St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics*. 2011. Vol. 134. Iss. 4. P. 56–64.
19. Jayabal K., Arockiarajan A., Sivakumar S.M. A micromechanical model for polycrystal ferroelectrics with grain boundary effects. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*. 2008. Vol. 27. Iss. 1-2. P. 111–124. <https://doi.org/10.3970/cmcs.2008.027.111>.
20. Shindo Y., Narita F., Horiguchi K., Magara Y., Yoshida M. Electric fracture and polarization switching properties of piezoelectric ceramic PZT studied by the modified small punch test. *Acta Mater.* 2003. Vol. 51. Iss. 16. P. 4773–4782. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(03\)00303-3](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00303-3).
21. Hwang S.C., McMeeking R.M. A finite element model of ferroelastic polycrystals. *Int. J. Solids Struct.* 1999. Vol. 36. Iss. 10. P. 1541–1556. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(98\)00051-1](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(98)00051-1).
22. Hwang S.C., Waser R. Study of electrical and mechanical contribution to switching in ferroelectric/ferroelastic polycrystals. *Acta Mater.* 2000. Vol. 48. Iss. 12. P. 3271–3282. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(00\)00092-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00092-6).
23. Jiles D.C., Atherton D.L. Theory of ferromagnetic hysteresis. *J. Magn. Magn. Mat.* 1986. Vol. 61. Iss. 1-2. P. 48–60. [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(86\)90066-1](https://doi.org/10.1016/0304-8853(86)90066-1).
24. Smith R.C. A nonlinear optimal control method for magnetostrictive actuators. *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 1998. Vol. 9. Iss. 6. P. 468–486. <https://doi.org/10.1177/1045389X9800900608>.

25. Smith R.C., Ounaies Z. A Domain wall model for hysteresis in piezoelectric materials. *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 2000. Vol. 11. Iss. 1. P. 62–79. <https://doi.org/10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY>.

26. Skaliukh A.S. Funktsionalnaya zavisimost fizicheskikh kharakteristik ot neobratimyykh parametrov pri elektromekhanicheskom vozdeystvii na segnetoelektricheskie keramiki [Functional dependence of the physical characteristics on irreversible parameters under electromechanical action on the ferroelectric ceramics]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Bulletin of Tomsk State University, Mathematics and Mechanics]. 2019. No 58. P. 128–141 (In Russian).

27. Tamm I.E. *Osnovy teorii elektrichestva* [Fundamentals of the Theory of Electricity]. Moscow. Nauka Publ. 1966. 624 p. (In Russian).

POSSIBILITIES OF THE MODEL OF IRREVERSIBLE DEFORMATION AND POLARIZATION PROCESSES USING EXAMPLES OF THE MUTUAL INFLUENCE OF MECHANICAL AND ELECTRIC FIELDS

Skaliukh A.S.

*Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences named after I.I.Vorovich
Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation*

a.s.skaliukh@gmail.com

Received by the Editor 2025/05/23

The paper presents the capabilities of a model for irreversible deformation and polarization processes in polycrystalline ferroelectric materials exposed to intense mechanical stresses and electric fields. The paper presents the main provisions of a generalized three-dimensional model, which is a development of the one-dimensional Giles – Atherton polarization model for the case of mutual action of mechanical stresses and electric fields. It is based on a statistical approach of accounting the micromechanical switching of domains by an electric field, proposed by I.E. Tamm, which is supplemented by the effect of mechanical stresses on this process. The main stages are considered, and energy costs are estimated for each of them. The energy required to break the domain pinning mechanisms is determined, the work required for their simple rotation to a new direction is calculated, and the total energy losses in the real process of deformation and polarization are determined. All energy estimates are made for a representative volume and expressed through the integral characteristics of reversible and irreversible parameters. An energy balance has been obtained, which has made it possible to obtain constitutive relations for the residual strain tensor and residual polarization vector in the form of a system of equations in differentials. Reversible components in the form of algebraic tensor equations obtained by the methods of thermodynamics of irreversible processes have been added to the residual parameters. The result of the model are constitutive relations, which consist of equations in differentials for irreversible components and algebraic tensor relations for reversible components, with the difference that the physical modules in the tensor equations depend on the current values of the residual parameters. General dependencies between the sought and constitutive parameters are constructed by successive integration. For cyclic external fields, such dependencies are called hysteresis curves. The proposed model allows one to calculate all currently known experimental dependencies and select the model parameters so that not only qualitative but also quantitative coincidences are obtained. Hysteresis dependencies for various mechanical stresses and electric fields are given.

Keywords: constitutive relations, ferroelectrics, polarization model, hysteresis, domains, irreversible process.