

УДК 539.3

DOI: 10.32326/1814-9146-2026-88-2-71-88

**АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРИСТОСТИ
И НЕОДНОРОДНОСТИ ПОЛЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ
НА ЭФФЕКТИВНЫЕ СВОЙСТВА
ПОРИСТОЙ СЕГНЕТОЖЕСТКОЙ ПЬЕЗОКЕРАМИКИ ПКР-8***

© 2026 г.

Леднов А.С., Наседкин А.В.

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

nasedkin@math.sfedu.ru

Поступила в редакцию 08.01.2026

Пористая сегнетожесткая пьезокерамика имеет уникальные свойства, определяющие ее эффективность для различных гидроакустических и медицинских применений. Для определения материальных свойств пористой пьезокерамики необходимо расширить методы механики композитов на гетерогенные пьезоэлектрические среды, поскольку поле поляризации неоднородно в окрестности пор. Задача осложняется тем, что как само поле поляризации, так и материальные модули неоднородно поляризованной пьезокерамики могут быть определены только приближенно в силу неопределенности входных данных пористого материала при поляризации. При решении задачи определены эффективные модули пористой сегнетожесткой пьезокерамики с учетом различных упрощенных моделей поляризации, а также проведен сравнительный анализ двух видов структур пористости: простой случайной пористости и гарантированно закрытой пористости. Решение задач гомогенизации осуществлено численно методом конечных элементов в неоднородных представительных объемах. На первом этапе решались задачи электростатики диэлектриков, моделирующие процесс неоднородной поляризации. Затем каждый диэлектрический конечный элемент заменялся на пьезоэлектрический со своими элементными системами координат, связанными с направлениями векторов поляризации, и с материальными модулями, заданными в этих системах координат. На последнем этапе решались краевые задачи теории упругости при линейных по пространственным переменным главных граничных условиях, и из полученных осредненных компонент напряжений и электрической индукции определялся полный набор эффективных модулей. Все этапы моделирования были проведены в конечно-элементном комплексе ANSYS с использованием авторских программ, реализующих нестандартные возможности, предоставляемые языком программирования APDL. Анализ результатов в диапазоне пористости от 0 до 60% показал, что учет неоднородности поля поляризации очень слабо влияет на эффективные модули жесткости, в большей степени – на диэлектрические проницаемости, и приводит к достаточно существ-

* Выполнено при поддержке РФФИ в рамках проекта №22-11-00302-П, <https://rscf.ru/project/22-11-00302/>, в Южном федеральном университете.

венным изменениям пьезомодулей, особенно поперечных пьезомодулей. Виды структуры пористости также важны для прецизионного определения эффективных модулей.

Ключевые слова: электроупругость, пористый пьезокомпозит, неоднородная поляризация, сегнетожесткость, эффективный модуль, представительный объем, случайная пористость, закрытая пористость, гомогенизация, метод конечных элементов.

Введение

Пьезоэлектрические материалы широко используются в различных медицинских устройствах с применением ультразвука [1–3]. Для эффективности излучателей важно, чтобы при прохождении волн через границы контакта материалов с различными свойствами их импедансы были как можно более близкими. Однако обычные сплошные пьезокерамики и внешние акустические среды имеют существенно различные импедансы. Добавление согласующих слоев с понижающими импедансами является одним из путей решения этой проблемы, но при этом конструкция излучателя становится более сложной, а дополнительные клеящие слои могут деградировать в процессе работы. Использование пористой пьезокерамики, которая, очевидно, имеет меньший импеданс по сравнению с плотной пьезокерамикой, является подходящим способом повышения эффективности излучателя без согласующих слоев. Кроме того, излучатели из пористой пьезокерамики имеют широкую полосу пропускания и высокую пьезочувствительность.

Пористая пьезокерамика успешно применяется и для других типов пьезопреобразователей [4–6], в частности, для популярных в последние годы пьезогенераторов «зеленой» энергии [4, 6]. При этом для различных применений определяющими являются отдельные константы пьезокерамического материала, коэффициент электромеханической связи или показатели качества. Так, для фокусирующих сферических излучателей важно значение эффективного толщинного пьезомодуля d_{33}^{eff} , причем в пьезоизлучателях сегнетожесткие пьезокерамики обычно демонстрируют лучшие характеристики. Поскольку пористая пьезокерамика создается искусственно в результате специальных технологий [1, 2, 5–7], то возможно управлять ее характеристиками, пористостью, типом связанности и в результате получать материалы с требуемыми свойствами.

В настоящей статье рассматривается задача об определении полного набора эффективных модулей пористой сегнетожесткой пьезокерамики ПКР-8* по моделям, учитывающим неоднородность поляризации пьезокерамики в окрестности пор. В отличие от [8] здесь используются более полные модели неоднородности, а также анализируется влияние случайной и закрытой структур пористости на эффективные модули. Для генерации представительных объемов, моделирования неоднородного поля поляризации и определения эффективных модулей применялся метод конечных элементов и специально разработанные программы для Mechanical APDL ANSYS.

1. Гомогенизация пористых пьезокерамических материалов

Рассмотрим некоторый представительный объем Ω двухфазного пьезоэлектрического (электроупругого) материала. Обозначим через $\Omega^{(1)}$ объем, занимаемый первой основной фазой; $\Omega^{(2)} = \Omega \setminus \Omega^{(1)}$ – набор пор, которые считаются второй фазой; $\mathbf{x} = \{x^1, x^2, x^3\}$ – вектор пространственных координат; $\Gamma = \partial\Omega$ – внешняя граница

объема Ω ; $\Gamma^p = \partial\Omega^{(1)} \cap \partial\Omega^{(2)}$ – совокупность границ пор внутри Ω ; $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$ – вектор единичной нормали на Γ^p , внешней по отношению к объему $\Omega^{(1)}$ основной фазы. Таким образом, для удобства численных расчетов поры принимаются как включения, состоящие из гипотетического пьезоэлектрического материала с пренебрежимо малыми модулями жесткости, пьезомодулями и с диэлектрическими проницаемостями вакуума $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м.

В общем случае анизотропии для определения полного набора эффективных модулей в неоднородном объеме Ω нужно решить девять задач гомогенизации с $\zeta = \overline{1, 9}$, которые можно сформулировать в виде системы уравнений статической теории пьезоэлектричества с главными линейными граничными условиями относительно вектор-функции перемещений $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$ и функции электрического потенциала $\varphi = \varphi(\mathbf{x})$. Эти краевые задачи представим в общем виде в обозначениях, близких к введенным Барнетом и Лоте [9, 10]:

$$\Lambda^*(\nabla) \cdot \Sigma = 0, \quad \Sigma = \Pi \cdot \mathbf{Z}, \quad \mathbf{Z} = \Lambda(\nabla) \cdot \mathbf{a} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1)$$

$$\mathbf{a} = \Lambda^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{Z}_{0\zeta}, \quad \mathbf{x} \in \Gamma = \partial\Omega, \quad (2)$$

$$\Lambda(\nabla) = \begin{bmatrix} \mathbf{L}(\nabla) & \mathbf{0}_{6 \times 1} \\ \mathbf{0}_{3 \times 3} & -\nabla \end{bmatrix}, \quad \Sigma = \begin{Bmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{D} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{Z} = \begin{Bmatrix} \mathbf{S} \\ \mathbf{E} \end{Bmatrix}, \quad \Pi = \begin{bmatrix} \mathbf{c}^E & -\mathbf{e}^* \\ \mathbf{e} & \boldsymbol{\kappa}^S \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \varphi \end{Bmatrix}, \quad (3)$$

$$\mathbf{L}^*(\nabla) = \begin{bmatrix} \partial_1 & 0 & 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ 0 & \partial_2 & 0 & \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla = \begin{Bmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{Bmatrix}. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{T}^* = [\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}]$, $\mathbf{S}^* = [\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12}]$ – строчные массивы с компонентами напряжений σ_{ij} и деформаций ε_{ij} соответственно; $\mathbf{D}^* = [D_1, D_2, D_3]$, $\mathbf{E}^* = [E_1, E_2, E_3]$ – строчные массивы с компонентами электрической индукции или электрического смещения D_j и напряженности электрического поля E_k соответственно; \mathbf{c}^E – матрица 6×6 упругих жесткостей, измеренных при постоянном электрическом поле E с компонентами $c_{\alpha\beta}^E$; \mathbf{e} – матрица 3×6 пьезомодулей с компонентами $e_{j\beta}$; $\boldsymbol{\kappa}^S$ – матрица 3×3 диэлектрических проницаемостей, измеренных при постоянной деформации S , с компонентами $\kappa_{ij}^S = \varepsilon_{ij}^S$. Звездочкой обозначена операция транспонирования; греческие буквы применяются для индексов, которые могут принимать значения от 1 до 6 (α, β) и от 1 до 9 (ζ, γ), а латинские – для индексов, которые могут изменяться от 1 до 3; фигурные скобки используются для обозначения вектор-столбцов или массивов-столбцов, а прямые угловые скобки – для обозначения строчных векторов или массивов. Кроме модулей $c_{\alpha\beta}^E$, $e_{j\beta}$, κ_{ij}^S , составляющих матрицы \mathbf{c}^E , \mathbf{e} , $\boldsymbol{\kappa}^S$, будем использовать также другие модули и матрицы, определяемые по формулам:

$$\mathbf{s}^E = (\mathbf{c}^E)^{-1}, \quad \mathbf{c}^D = \mathbf{c}^E + \mathbf{e}^* \cdot (\boldsymbol{\kappa}^S)^{-1} \cdot \mathbf{e}, \quad \mathbf{s}^D = (\mathbf{c}^D)^{-1}, \quad \boldsymbol{\kappa}^T = \boldsymbol{\kappa}^S + \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}^*, \quad (5)$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{e} \cdot \mathbf{s}^E, \quad \mathbf{g} = (\boldsymbol{\kappa}^T)^{-1} \cdot \mathbf{d}.$$

Задачи (1)–(4) отличаются друг от друга граничными условиями в (2), названными в [11] условиями постоянных градиентов полей. Именно принимается, что $\mathbf{Z}_{0\zeta}$ – девятимерный массив, в котором все компоненты равны нулю, кроме одной с номером $\zeta = \overline{1, 9}$:

$$Z_{0\zeta} = \delta_{\gamma\zeta} Z_0, \quad \gamma = \overline{1, 9}, \quad (6)$$

где Z_0 – размерная постоянная, имеющая смысл в случае однородной среды, индуцируемой граничными условиями величины деформации для $\zeta = \overline{1, 6}$, или величины электрического поля для $\zeta = \overline{7, 8, 9}$.

Согласно общей теории [10–13] и др., компоненты матрицы эффективных модулей Π^{eff} можно определить по столбцам из решений $\Sigma_\gamma^{(\zeta)}$ задач с номером ζ :

$$\Pi_{\gamma\zeta}^{\text{eff}} = \frac{\langle \Sigma_\gamma^{(\zeta)} \rangle}{\chi^{(\zeta)} Z_0}, \quad (7)$$

где $\chi(\zeta) = 1$ для $\zeta = \overline{1, 2, 3}$ и $\zeta = \overline{7, 8, 9}$; $\chi(\zeta) = 2$ для $\zeta = \overline{4, 5, 6}$; $\langle \dots \rangle$ – операция осреднения по объему

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\dots) d\Omega. \quad (8)$$

Отметим, что полученная в результате матрица эффективных модулей Π^{eff} будет сохранять структуру и основные свойства матрицы Π [13]: матрица модулей жесткости \mathbf{c}^{Eff} и матрица диэлектрических проницаемостей $\mathbf{\kappa}^{\text{Seff}}$ будут симметричны и положительно определены, а модули прямого и обратного пьезоэффекта будут равны, то есть в Π^{eff} , аналогично Π , будут также располагаться блоки \mathbf{e}^{eff} и $-(\mathbf{e}^{\text{eff}})^*$. Если к тому же структура представительного объема соответствует классу анизотропии матрицы композита, то вместо девяти задач (1)–(4), (6)–(8) можно решать меньшее их число. Так, для пористой пьезокерамики со случайной структурой пористости эффективный материал обычно почти сохраняет класс сингонии *btt*, за исключением того, что в случае представительного объема в форме куба следует ожидать нарушение равенства $c_{66}^{\text{Eff}} = (c_{11}^{\text{Eff}} - c_{12}^{\text{Eff}})/2$. Тогда число задач (1)–(4), (6)–(8) можно сократить с девяти до пяти (растяжения вдоль осей x_1 и x_3 , одна сдвиговая задача и две задачи о действии электрического поля вдоль осей x_1 и x_3) или до шести, если необходимо еще оценить величину c_{66}^{Eff} .

В заключение этого раздела заметим, что в случае второй фазы, состоящей из пор, задачу (1)–(4), (6) можно решать только для области $\Omega^{(1)}$, задавая на границах Γ^p соответствующие нулевые компоненты напряжений и электрической индукции

$$\Lambda^*(\mathbf{n}) \cdot \Sigma = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma^p. \quad (9)$$

При этом в задачах (1)–(4), (6) в Ω для пористого композита условия (9) выполняются практически точно, то есть задача (1)–(4), (6) в Ω и задача (1)–(4), (6), (9) в $\Omega^{(1)}$ эквивалентны, но для последней при определении эффективных модулей по (7) надо в (8), естественно, интегрировать по объему $\Omega^{(1)}$.

2. Учет неоднородной поляризации

Задачи (1)–(4), (6)–(8) для пористого пьезоматериала усложняются, если учитывать неоднородность поля поляризации в окрестности пор. При этом возникает ряд проблем, которые не могут быть решены достаточно точно в силу случайности расположения пор и сложности моделирования процесса поляризации. Эти проблемы связаны с неполной поляризацией, с деполяризацией, с изменением материальных модулей в результате необратимых процессов при переходе от неполяризованной

керамики до поляризованной и с другими эффектами. Кроме того, если материальные константы табулированы для большого числа составов однородно поляризованной пьезокерамики, то по модулям неполяризованной керамики имеется значительно меньше информации, и она достаточно разрознена.

Наиболее корректный способ моделирования поляризации состоит в решении нелинейных задач при больших внешних воздействиях, в том числе с использованием конечно-элементных подходов [14–16]. Однако неопределенность во входных данных не позволяет пока использовать такие модели на практике. Для качественного учета неоднородности поля поляризации в пористой пьезокерамике более подходят упрощенные модели, основанные на определении электрического поля поляризации из линейной задачи электростатики [8, 17–20]. Но при любом способе моделирования неоднородной поляризации необходимо иметь данные о модулях неполяризованной керамики, которая обычно считается изотропным упругим диэлектриком [8, 17–20].

Примем, что неполяризованная керамика характеризуется модулем Юнга E^u , модулем сдвига G^u и диэлектрической проницаемостью κ^u . Через модули Юнга и сдвига можно выразить модули жесткости c_{11}^u, c_{12}^u по стандартным формулам: $c_{11}^u = \lambda^u + 2\mu^u, c_{12}^u = \lambda^u, \lambda^u = G^u(E^u - 2G^u)/(3G^u - E^u), \mu^u = G^u$. Следуя известному подходу для поликристаллических анизотропных упругих материалов [21, 22], модули жесткости будем определять в результате осреднения по Фойгту и по Ройсу модулей поляризованной пьезокерамики гексагонального класса сингонии, которые дополнительно осредним по Хиллу. Кроме того, проведем также осреднение модулей, измеренных при постоянном электрическом поле E и при постоянной электрической индукции D . В результате получаем формулы [23, 24]:

$$K_V^B = \frac{2c_{11}^B + c_{33}^B + 2(c_{12}^B + 2c_{13}^B)}{9}, \quad G_V^B = \frac{7c_{11}^B + 2c_{33}^B - 5c_{12}^B - 4c_{13}^B + 12c_{44}^B}{30}, \quad (10)$$

$$K_R^B = \frac{1}{2s_{11}^B + s_{33}^B + 2(s_{12}^B + 2c_{13}^B)}, \quad G_R^B = \frac{15}{2(7s_{11}^B + 2s_{33}^B - 5s_{12}^B - 4s_{13}^B + 3s_{44}^B)}, \quad (11)$$

$$K_H^B = \frac{K_V^B + K_R^B}{2}, \quad G_H^B = \frac{G_V^B + G_R^B}{2}, \quad (12)$$

$$c_{11}^{uB} = K_H^B + \frac{4G_H^B}{3}, \quad c_{12}^{uB} = K_H^B - \frac{2G_H^B}{3}, \quad c_{44}^{uB} = G_H^B, \quad B = E, D, \quad (13)$$

$$c_{11}^u = \frac{c_{11}^{uE} + c_{11}^{uD}}{2}, \quad c_{12}^u = \frac{c_{12}^{uE} + c_{12}^{uD}}{2}, \quad c_{44}^u = \frac{c_{44}^{uE} + c_{44}^{uD}}{2}. \quad (14)$$

Аналогичное осреднение по Хиллу диэлектрических проницаемостей с дополнительным осреднением модулей, измеренных при постоянных деформациях S и напряжениях T , приводит к соотношениям:

$$\kappa_V^{uQ} = \frac{2\kappa_{11}^Q + \kappa_{33}^Q}{3}, \quad \kappa_R^{uQ} = \frac{3}{2(\kappa_{11}^Q)^{-1} + (\kappa_{33}^Q)^{-1}}, \quad Q = S, T, \quad (15)$$

$$\kappa^u = \frac{\kappa_H^{uS} + \kappa_H^{uT}}{2}, \quad \kappa_H^{uQ} = \frac{\kappa_V^{uQ} + \kappa_R^{uQ}}{2}, \quad Q = S, T. \quad (16)$$

Опишем теперь три модели поляризации матрицы пористой пьезокерамики.

В первой модели принимается однородная поляризация в направлении оси x_3 . В этом случае можно считать, что в результате поляризации модули материала матри-

цы пористой пьезокерамики $c_{\alpha\beta}^E$, $e_{j\beta}$, κ_{ij}^S равны модулям соответствующей плотной пьезокерамики.

Две другие модели учитывают распределение электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ при симулировании процесса поляризации в упрощенной линейной постановке. Для этого вначале кубический представительный объем пористой структуры принимаем диэлектрическим с кусочно-однородными изотропными проницаемостями: κ^u – в матрице, ϵ_0 – в порах. Будем считать, что на торцах этой диэлектрической структуры параллельно оси x_3 приложена разность потенциалов, определяющая в однородной среде поле \mathbf{E}_c , достаточное для ее равномерной поляризации. Для неоднородной среды, решая в ANSYS задачу электростатики диэлектриков методом конечных элементов, получаем поля $\mathbf{D}(\mathbf{x})$ и $\mathbf{E}(\mathbf{x})$. Тогда для каждого конечного элемента матрицы пористого диэлектрика с номером m , используя средства постпроцессора ANSYS APDL, находим и запоминаем в центральной точке элемента векторы напряженности электрического поля \mathbf{E}^{cm} , векторы электрической индукции \mathbf{D}^{cm} и векторы поляризации $\mathbf{P}^{cm} = \mathbf{D}^{cm} - \epsilon_0 \mathbf{E}^{cm}$. Для дальнейшего решения задачи пьезоэлектричества в построенной конечно-элементной сетке заменяем диэлектрические элементы на пьезоэлектрические и задаем для них материальные модули: модули плотной пьезокерамики $c_{\alpha\beta}^E$, $e_{j\beta}$, κ_{ij}^S – для элементов матрицы; $f_p c_{\alpha\beta}^E$, $f_p e_{j\beta}$, ϵ_0 – для элементов, имитирующих поры ($f_p = 10^{-10}$). Далее с каждым конечным элементом матрицы связывается своя элементная система координат (ЭСК) $Ox_1^{cm} x_2^{cm} x_3^{cm}$. В ЭСК ось Ox_3^{cm} направлена вдоль вектора поляризации \mathbf{P}^{cm} , а две остальные оси располагаются в перпендикулярной плоскости к этому вектору. Расположение осей Ox_1^{cm} , Ox_2^{cm} в этой плоскости не существенно, поскольку материал матрицы в каждой ЭСК считается трансверсально изотропным, но со своей осью симметрии Ox_3^{cm} . Однако для определенности можно использовать способ задания ЭСК, изложенный в [8]. В итоге согласно технологии, принятой в ANSYS, получается, что пьезоэлектрические конечные элементы матрицы имеют материальные модули плотной пьезокерамики, но заданные в своих ЭСК, повернутых относительно основной декартовой системы координат, в соответствии с направлением вектора поляризации \mathbf{P}^{cm} . Модули в повернутых ЭСК $c_{r\alpha\beta}^{Ecm} = c_{\alpha\beta}^E$, $e_{rj\beta}^{cm} = e_{j\beta}$, $\kappa_{rij}^{Scm} = \kappa_{ij}^S$ можно пересчитать в модули $c_{\alpha\beta}^{Ecm}$, $e_{j\beta}^{cm}$, κ_{ij}^{Scm} по формулам преобразования компонент тензоров четвертого, третьего и второго рангов при переходе из ЭСК в глобальную декартову систему координат $Ox_1 x_2 x_3$. В итоге для каждого конечного элемента с номером m матрицы будем иметь свои модули $c_{\alpha\beta}^{Ecm}$, $e_{j\beta}^{cm}$, κ_{ij}^{Scm} в единой системе координат. В пакете ANSYS операции пересчета материальных модулей реализованы программно, и для этого достаточно только задать соответствующие элементные системы координат ЭСК. Явные формулы для трансформации коэффициентов применительно к матричным коэффициентам приведены в [8], но эти формулы при использовании ANSYS фактически не нужны.

В модели 2 материальные модули определяются только исходными модулями плотной однородно поляризованной пьезокерамики и направлениями вектора поляризации \mathbf{P}^{cm} , однако они не зависят от его длины $|\mathbf{P}^{cm}|$. Модель 3 развивает модель 2, но в этой модели учитывается длина вектора поляризации и используется интерполяция между модулями неполяризованной керамики и однородно поляризованной пьезокерамики с возможностью «сверхполяризации», определяемой значением параметра k_p . Такую интерполяцию будем проводить для модулей податливостей $s_{\alpha\beta}^E$, измеренных при постоянном электрическом поле, для пьезомодулей

заряда $d_{j\beta}$ и для диэлектрических проницаемостей κ_{ij}^T , измеренных при постоянных напряжениях, определяемых по (5), а именно, примем следующие формулы:

$$\mathbf{s}_r^{Ecm} = (1 - k_p^{cm}) \mathbf{s}^u + k_p^{cm} \mathbf{s}^E, \quad \mathbf{d}_r^{cm} = k_p^{cm} \mathbf{d}, \quad \boldsymbol{\kappa}_r^{Scm} = (1 - k_p^{cm}) \boldsymbol{\kappa}^u + k_p^{cm} \boldsymbol{\kappa}^S, \quad (17)$$

$$k_p^{cm} = \begin{cases} |\mathbf{P}^{cm}| / P_{sat}, & |\mathbf{P}^{cm}| \leq k_p P_{sat}, \\ k_p, & |\mathbf{P}^{cm}| > k_p P_{sat}, \end{cases} \quad P_{sat} = (\kappa^u - \varepsilon_0) E_c. \quad (18)$$

Таким образом, в модели 3 вначале по (5) из модулей $c_{\alpha\beta}^E, e_{j\beta}, \kappa_{ij}^S$ вычисляются модули $s_{\alpha\beta}^E, d_{j\beta}, \kappa_{ij}^T$ поляризованной пьезокерамики, если они первоначально не были известны, а также по (10)–(16) определяются модули податливостей $s_{\alpha\beta}^u$ и диэлектрической проницаемости κ_{ij}^u неполяризованной керамики. Затем по найденным модулям $s_{r\alpha\beta}^{Ecm}, d_{rj\beta}^{cm}, \kappa_{rij}^{Tcm}$ из формул, следующих из (5), вычисляются модули $c_{r\alpha\beta}^{Ecm}, e_{rj\beta}^{cm}, \kappa_{rij}^{Scm}$ для ЭСК, и далее эти модули используются в ANSYS, как в модели 2.

Модель 3 кажется наиболее предпочтительной, поскольку она использует неоднородность поля поляризации по направлениям и по длинам векторов \mathbf{P}^{cm} , а также базируется на интерполяции материальных модулей $s_{\alpha\beta}^E, d_{j\beta}, \kappa_{ij}^T$, которые являются основными при описании явлений прямого и обратного пьезоэффектов.

3. Структуры представительных объемов

В качестве представительного объема в пакете ANSYS создавался куб, составленный из $n_a \times n_a \times n_a$ кубических конечных элементов с одинаковыми сторонами a (n_a – число элементов вдоль каждой из осей декартовой системы координат). В зависимости от заданного значения пористости p выбирались $N_p = [pn_a^3 / 100]$ конечных элементов, которые объявлялись порами (здесь значение в квадратных скобках – целая часть числа).

Для формирования пор использовались два алгоритма. В первом алгоритме поры выбирались в ANSYS простым случайным методом, а во втором применялся специальный 3-0 алгоритм пакета ACELAN-COMPOS, обеспечивающий связанность конечных элементов матрицы и закрытую структуру пористости [25]. Примеры таких расположений пор в представительных объемах при $n_a = 16, p = 5\%$ приведены на рис. 1.

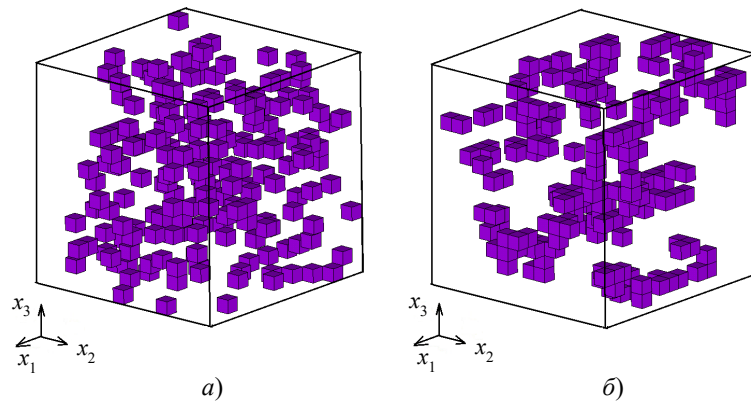


Рис. 1. Примеры распределения пор при случайной пористости (а) и при закрытой пористости (б)

Как можно заметить, при случайном расположении пор отдельные элементы-поры обычно меньше контактируют друг с другом по общим граням, чем при закрытой пористости, генерируемой 3-0 алгоритмом в пакете ACELAN-COMPOS. Кроме того, при втором варианте в представительном объеме имеются, как правило, более крупные поры, чем при первом варианте. Случайный метод выбора пор, очевидно, не обеспечивает связанность каркаса из элементов первой фазы, что является его существенным недостатком. Этот метод при большой пористости может давать ошибочные результаты, когда элементы матрицы оказываются полностью окруженными пористыми элементами. Тогда на эти изолированные элементы матрицы не передаются механические напряжения, и суммарная пористость за счет таких элементов фактически искусственно увеличивается. Поэтому при фиксированной пористости проводилось по три расчета наборов эффективных модулей и вычислялись их средние значения. Если при этом отдельный расчет давал заметно меньшие значения эффективных модулей, чем два других, то такие значения не учитывались. Однако в диапазоне пористости от 0 до 60%, когда имеет смысл использовать пористую пьезокерамику в ультразвуковых излучателях, такие ситуации в проведенных расчетах не наблюдались.

Сходимость результатов расчетов устанавливалась по стабилизации значений эффективных модулей. Численные эксперименты показали [26], что для обоих методов устойчивые результаты при разумном времени расчетов получались для двадцатиузловой гексагонального элемента ANSYS SOLID226 при $n_a = 32$, причем, как уже отмечалось, при нескольких прогонах программы результаты незначительно отличались друг от друга, то есть случайность распределения пор оказывала слабое влияние.

4. Численные результаты и их обсуждение

Для расчетов использовался конечный элемент SOLID226 с опцией пьезоэлектрического анализа, а для решения предварительной задачи электростатики – элемент SOLID122, который имеет также форму гексаэдра и 20 узлов. Размер представительного объема определялся значением $n_a = 32$, обеспечивающим приемлемую точность результатов. Для модели 3 неоднородной поляризации параметр k_p принимался равным 1,2.

В качестве входных данных использовались значения модулей плотной сегнето-жесткой пьезокерамики ПКР-8* [27], приведенные в таблице 1 в строке Polarized. В следующей строке Unpolarized в этой таблице приведены модули неполяризованной керамики ПКР-8*, рассчитанные по формулам (10)–(16).

Таблица 1

Материальные свойства сплошной пьезокерамики ПКР-8* и соответствующей неполяризованной керамики

Вид пьезокерамики	$c_{\alpha\beta}^{E(u)}, 10^{10} \text{ Н/М}^2$					$e_{j\beta}, \text{ Кл/М}^2$			$\tilde{\kappa}_{ji}^{S(u)} = \kappa_{ji}^{S(u)}/\epsilon_0$	
	$c_{11}^{E(u)}$	$c_{12}^{E(u)}$	$c_{13}^{E(u)}$	$c_{33}^{E(u)}$	$c_{44}^{E(u)}$	e_{33}	e_{31}	e_{15}	$\tilde{\kappa}_{11}^{S(u)}$	$\tilde{\kappa}_{33}^{S(u)}$
Polarized	11,2	5,7	5,1	9,9	2,5	15,2	-6,9	11,6	730	690
Unpolarized	11,62	5,15	5,15	11,62	3,23	0	0	0	994	994

Как можно заметить, для пьезокерамики ПКР-8* для модулей жесткости и диэлектрических проницаемостей поляризованного и неполяризованного материалов имеют место следующие неравенства:

$$c_{33}^E < c_{11}^E < c_{11}^u, \quad c_{13}^E < c_{12}^u < c_{12}^E, \quad \tilde{\kappa}_{33}^S < \tilde{\kappa}_{11}^S < \tilde{\kappa}_{11}^u. \quad (19)$$

Для других пьезокерамик неравенства (19) могут не выполняться. Кроме того, продольные модули жесткости и диэлектрические проницаемости неполяризованной керамики оказываются большими, чем аналогичные модули поляризованной пьезокерамики. Это объясняется тем, что при определении модулей неполяризованной керамики в (10)–(16) использовались осреднения между модулями $c_{\alpha\beta}^E, c_{\alpha\beta}^D, s_{\alpha\beta}^E, s_{\alpha\beta}^D$ и $\tilde{\kappa}_{jj}^S, \tilde{\kappa}_{jj}^T, (\tilde{\kappa}_{jj}^S)^{-1}, (\tilde{\kappa}_{jj}^T)^{-1}$, а, например, диэлектрические проницаемости $\tilde{\kappa}_{jj}^T$ существенно больше, чем $\tilde{\kappa}_{jj}^S$.

Результаты расчетов эффективных модулей пористой пьезокерамики ПКР-8* для трех моделей поляризации, описанных выше, представлены в таблицах 2, 3. Значения модулей приведены для диапазона пористости от 10 до 60% с шагом в 10%, причем в таблице 2 даны значения, рассчитанные для случайного распределения пор (R – random), а таблице 3 – для закрытой пористости (C – closed). Группы строк с номерами 1–3 содержат данные, полученные для моделей поляризации с теми же номерами 1–3.

Таблица 2

Материальные свойства различных вариантов пористой пьезокерамики ПКР-8* при случайной пористости (R)

№	p, %	$c_{\alpha\beta}^{E\text{eff}}, 10^{10} \text{ Н/м}^2$					$e_{\beta}^{\text{eff}} \text{ Кл/м}^2$			$\tilde{\kappa}_{jj}^{\text{Seff}} = \kappa_{jj}^{\text{Seff}}/\epsilon_0$	
		$c_{11}^{E\text{eff}}$	$c_{12}^{E\text{eff}}$	$c_{13}^{E\text{eff}}$	$c_{33}^{E\text{eff}}$	$c_{44}^{E\text{eff}}$	e_{33}^{eff}	e_{31}^{eff}	e_{15}^{eff}	$\tilde{\kappa}_{11}^{\text{Seff}}$	$\tilde{\kappa}_{33}^{\text{Seff}}$
1 (R)	10	9,39	4,65	4,10	8,23	2,14	13,46	-5,23	9,76	656,84	617,00
	20	7,62	3,65	3,17	6,61	1,78	11,57	-3,72	7,97	581,61	540,48
	30	5,90	2,72	2,33	5,12	1,43	9,57	-2,44	6,25	500,62	462,03
	40	4,37	1,92	1,63	3,76	1,09	7,47	-1,45	4,64	418,36	378,57
	50	2,95	1,23	1,05	2,56	0,77	5,36	-0,72	3,18	328,68	294,73
	60	1,78	0,71	0,61	1,52	0,48	3,32	-0,29	1,93	238,30	210,54
2 (R)	10	9,38	4,65	4,09	8,21	2,14	13,48	-5,12	9,76	653,91	618,39
	20	7,59	3,64	3,14	6,58	1,78	11,60	-3,51	7,94	575,62	543,26
	30	5,88	2,69	2,31	5,11	1,43	9,63	-2,16	6,23	492,49	466,21
	40	4,34	1,89	1,60	3,72	1,09	7,46	-1,09	4,61	408,41	382,85
	50	2,93	1,21	1,03	2,54	0,77	5,35	-0,38	3,14	319,38	298,68
	60	1,75	0,68	0,59	1,51	0,48	3,26	0,00	1,88	229,17	212,83
3 (R)	10	9,50	4,74	4,24	8,40	2,15	11,23	-5,58	9,44	670,37	576,97
	20	7,54	3,52	3,13	6,64	1,81	11,37	-3,04	7,41	609,44	563,18
	30	4,85	1,58	1,40	3,45	1,06	6,83	-1,16	3,52	493,06	449,82
	40	4,29	1,78	1,59	3,81	1,13	6,86	-0,73	3,82	452,35	415,14
	50	2,90	1,13	1,03	2,61	0,81	4,60	-0,14	2,37	357,65	330,80
	60	1,74	0,64	0,59	1,59	0,51	2,60	0,10	1,25	255,86	239,79

Таблица 3

**Материальные свойства различных вариантов пористой пьезокерамики ПКР-8*
при закрытой пористости (С)**

№	p, %	$c_{\alpha\beta}^{Eff}, 10^{10} \text{ Н/м}^2$					$e_{j\beta}^{eff}, \text{ Кл/м}^2$			$\tilde{\kappa}_{jj}^{Seff} = \kappa_{jj}^{Seff}/\epsilon_0$	
		c_{11}^{Eff}	c_{12}^{Eff}	c_{13}^{Eff}	c_{33}^{Eff}	c_{44}^{Eff}	e_{33}^{eff}	e_{31}^{eff}	e_{15}^{Eff}	$\tilde{\kappa}_{11}^{Seff}$	$\tilde{\kappa}_{33}^{Seff}$
1 (С)	10	9,10	4,44	3,88	7,93	2,09	13,35	-4,87	9,50	656,58	615,93
	20	7,18	3,33	2,86	6,17	1,70	11,27	-3,24	7,56	579,42	537,40
	30	5,43	2,40	2,02	4,61	1,33	9,04	-1,99	5,76	499,73	453,52
	40	3,91	1,64	1,38	3,35	0,99	6,95	-1,11	4,17	410,86	370,34
	50	2,53	0,99	0,86	2,21	0,68	4,84	-0,48	2,80	317,52	286,43
	60	1,45	0,54	0,47	1,29	0,40	2,97	-0,18	1,62	224,06	201,47
2 (С)	10	9,06	4,42	3,85	7,90	2,09	13,41	-4,64	9,48	650,01	619,64
	20	7,12	3,29	2,81	6,13	1,70	11,35	-2,82	7,53	567,65	543,35
	30	5,39	2,36	1,96	4,56	1,32	9,10	-1,46	5,72	484,43	460,28
	40	3,86	1,60	1,33	3,31	0,98	6,96	-0,60	4,12	395,55	376,00
	50	2,50	0,97	0,83	2,19	0,68	4,81	0,01	2,75	304,12	290,35
	60	1,43	0,52	0,45	1,29	0,40	2,87	0,16	1,56	214,74	204,12
3 (С)	10	9,02	4,33	3,85	7,94	2,11	13,33	-4,20	9,09	676,13	633,62
	20	7,06	3,16	2,81	6,19	1,74	11,05	-2,26	6,86	610,91	568,11
	30	5,32	2,21	1,96	4,64	1,37	8,59	-0,98	4,90	533,61	489,27
	40	3,82	1,49	1,33	3,39	1,03	6,33	-0,28	3,31	440,12	405,09
	50	2,48	0,89	0,83	2,26	0,72	4,13	0,16	2,03	339,23	316,95
	60	1,43	0,48	0,45	1,35	0,43	2,27	0,21	1,01	235,84	224,58

Приведенные в таблицах 2, 3 значения эффективных модулей могут оказаться полезными для расчетов излучателей с активными элементами, выполненными из пористой пьезокерамики ПКР-8*. Однако они не очень удобны для анализа. Поэтому на рис. 2–5 продемонстрированы наиболее характерные графики зависимостей от пористости относительных эффективных модулей $r(\dots)$, то есть эффективных модулей, отнесенных к соответствующим модулям плотной пьезокерамики, как например, $r(c_{33}^E) = c_{33}^{Eff}/c_{33}^E$, и т.п. На каждом из этих графиков представлены по шесть кривых, построенных по результатам расчетов для трех моделей поляризации со случайной и с закрытой структурами пористости. Цифрами 1–3 отмечены результаты для моделей поляризации 1–3 соответственно, причем сплошные кривые построены для структур со случайной пористостью, а штриховые – для структур с закрытой пористостью.

Результаты демонстрируют, что относительные значения эффективных модулей жесткости убывают при росте пористости приблизительно так же, как для трансверсально изотропного упругого материала. Например, на рис. 2а приведены зависимости от пористости для относительного модуля $r(c_{33}^E)$. Как видно, для всех моделей поляризации для одинаковых структур поляризации кривые практически совпадают, то есть неоднородность поля поляризации слабо изменяет эффективные модули c_{33}^{Eff} . Однако тип пористости оказывает более заметное влияние на модули жесткости, причем при закрытой пористости значения модулей жесткости оказываются меньше, чем соответствующие значения, полученные при случайной пористости. Это может быть связано с тем, что в материале с более крупными порами площадь границ контакта материала с порами оказывается меньшей по сравнению с площадью границ в том же объеме материала с более мелкими порами, и, соответственно, концентрации напряжений в окрестностях пор также являются меньшими.

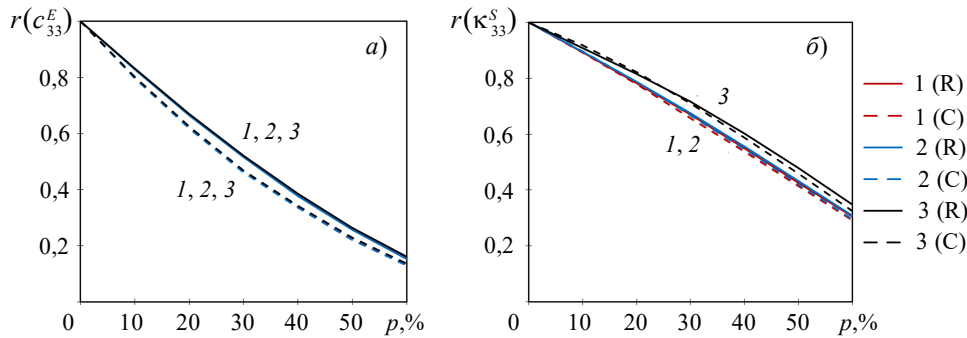


Рис. 2. Зависимости от пористости эффективных модулей жесткости $r(c_{33}^E)$ (а) и диэлектрических проницаемостей $r(\kappa_{33}^S)$ (б)

Из таблиц 2, 3 можно также заметить, что поведение других относительных эффективных модулей жесткости качественно аналогично зависимостям, приведенным на рис. 2а для модуля $r(c_{33}^E)$, причем степень их убывания с ростом пористости в целом соответствует отмеченной в [8] для пьезокерамических материалов PZT-4, PZT-5Н и PZT-8 при случайной структуре пористости. При этом для относительных эффективных модулей жесткости $r(c_{12}^E)$ и $r(c_{44}^E)$ модели поляризации оказывают более заметное влияние, особенно для модели 3, что связано с более существенными различиями для соответствующих модулей поляризованной и неполяризованной керамики и другими модулями жесткости из таблицы 1. При расчетах также вычислялся эффективный модуль $c_{66}^{E\text{eff}}$ и оценивался коэффициент анизотропии Зенера $A = 2c_{66}^{E\text{eff}} / (c_{11}^{E\text{eff}} - c_{12}^{E\text{eff}})$. Как оказалось, коэффициент Зенера находился в пределах от 0,95 до 1, что свидетельствует о том, что эффективный материал рассматриваемой пористой пьезокерамики можно приближенно считать трансверсально-изотропным.

Графики зависимостей от пористости относительных эффективных диэлектрических проницаемостей $r(\kappa_{33}^S)$ приведены на рис. 2б. Как видно, они убывают медленнее, чем модули жесткости. Структура пористости R или C влияет на значения $r(\kappa_{33}^S)$ в меньшей мере, чем на значения $r(c_{33}^E)$. Однако модель поляризации 3 дает заметно бóльшие значения, чем модели 1 и 2. Это и следовало ожидать из (17)–(19) и значений $\tilde{\kappa}_{33}^{S(u)}$ из таблицы 1. Относительные эффективные диэлектрические проницаемости $r(\kappa_{11}^S)$, как видно из таблиц 2, 3, качественно ведут себя аналогично $r(\kappa_{33}^S)$.

На рис. 3 показаны зависимости относительных эффективных пьезомодулей $r(e_{33})$ и $r(e_{31})$ от пористости. Как можно заметить, относительные пьезомодули убывают при возрастании p , что и следовало ожидать при уменьшении доли пьезоактивного материала. Поперечный относительный пьезомодуль $r(e_{31})$ убывает быстрее, чем продольный относительный пьезомодуль $r(e_{33})$. Для обоих относительных значений пьезомодулей наименьшие величины наблюдаются для третьей модели, в которой по (17), (18) для слабо поляризованных элементов используются малые значения пьезомодулей \mathbf{d}_r^{cm} , а следовательно, по (5) – и малые значения пьезомодулей \mathbf{e}_r^{cm} . Представительные объемы с закрытой пористостью дают заметно меньшие значения, чем объемы со случайной пористостью при всех моделях поляризации. Наконец, для третьей модели неоднородной поляризации эффективный пьезомодуль e_{31}^{eff} меняет знак, начиная с $p \approx 46\%$ при случайной структуре пористости и с $p \approx 57\%$ при закрытой пористости. Для второй модели поляризации эта смена знаков также наблю-

дается, но при большой пористости. Этот феномен известен для плотных пьезокерамик типа PbTiO_3 с добавками, а для пористых пьезокерамик и для метаматериалов обсуждался в [8, 23, 24] и в других публикациях.

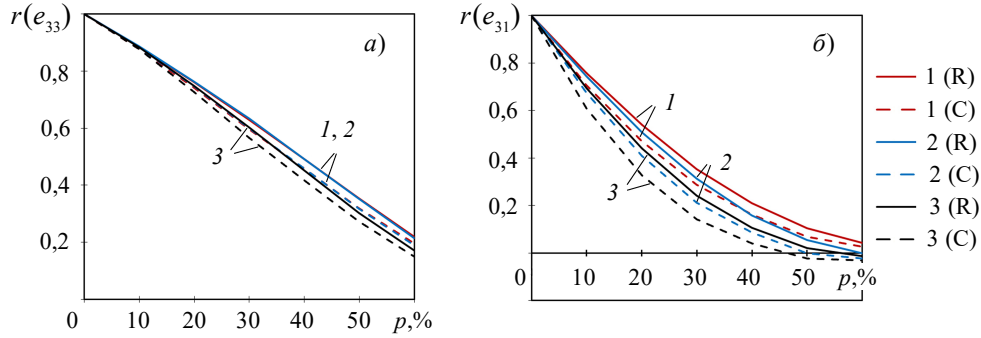


Рис. 3. Зависимости от пористости эффективных пьезомодулей $r(e_{33})$ (а) и $r(e_{31})$ (б)

Для многих практических применений важную роль играют пьезокоэффициенты заряда $d_{j\beta}$ и пьезочувствительности $g_{j\beta}$. Как следует из (5) и из структуры материальных модулей пьезокерамического материала класса bmm , эффективные значения продольных и поперечных пьезокоэффициентов могут быть найдены из приведенных в таблицах 2, 3 модулей по формулам:

$$d_{33}^{\text{eff}} = 2e_{31}^{\text{eff}} s_{13}^{\text{Eff}} + e_{33}^{\text{eff}} s_{33}^{\text{Eff}}, \quad d_{31}^{\text{eff}} = e_{31}^{\text{eff}} (s_{11}^{\text{Eff}} + s_{12}^{\text{Eff}}) + e_{33}^{\text{eff}} s_{13}^{\text{Eff}},$$

$$g_{33}^{\text{eff}} = d_{33}^{\text{eff}} / \kappa_{33}^{\text{Teff}}, \quad g_{31}^{\text{eff}} = d_{31}^{\text{eff}} / \kappa_{33}^{\text{Teff}},$$

где $\kappa_{33}^{\text{Teff}} = \kappa_{33}^{\text{Seff}} + d_{33}^{\text{eff}} e_{33}^{\text{eff}} + 2d_{31}^{\text{eff}} e_{31}^{\text{eff}}$. Как видно из этих формул, эффективные пьезокоэффициенты заряда d_{33}^{eff} и d_{31}^{eff} определяются убывающими при росте пористости пьезомодулями e_{33}^{eff} , e_{31}^{eff} и возрастающими модулями податливостей s_{11}^{Eff} , s_{12}^{Eff} , s_{13}^{Eff} . Поэтому их поведение от пористости зависит от скорости убывания одних величин и возрастания других. Коэффициенты пьезочувствительностей прямо пропорциональны пьезомодулям заряда и обратно пропорциональны проницаемостям $\kappa_{33}^{\text{Teff}}$, которые убывают с ростом пористости. Поэтому пьезочувствительности g_{33}^{eff} и g_{31}^{eff} могут и возрасть с ростом p .

Зависимости от пористости относительных эффективных пьезомодулей заряда $r(d_{33})$, $r(d_{11})$ показаны на рис. 4а, б соответственно.

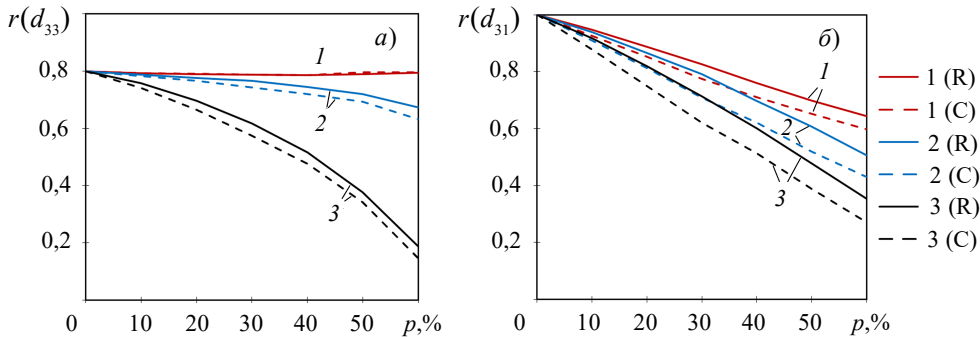


Рис. 4. Зависимости от пористости эффективных пьезомодулей $r(d_{33})$ (а) и $r(d_{31})$ (б)

Как видно из этих рисунков, относительные эффективные пьезокоэффициенты заряда $r(d_{33}), r(d_{31})$ почти во всех случаях уменьшаются с ростом p , но значительно более медленно, чем относительные пьезомодули $r(e_{33}), r(e_{31})$. При случайной структуре пористости значения $r(d_{33}), r(d_{31})$ больше, чем при закрытой пористости. Исключением является модель однородной поляризации, для которой $r(d_{33})$ практически не зависит от p для обеих структур пористости. Отметим, что экспериментальные данные для продольных пьезомодулей заряда пористых пьезокерамик имеют большой разброс. В большинстве экспериментальных исследований [5, 17, 19, 28, 29] и др. приводились результаты, свидетельствующие об убывании с ростом пористости величин $r(d_{33})$, но имеются статьи [3, 30] и др., в которых отмечались их постоянство или слабое убывание, причем указывалось на важность технологии процесса поляризации для обеспечения квазиоднородной поляризации.

Графики зависимостей относительных коэффициентов пьезочувствительности $r(g_{33}), r(g_{31})$ от пористости демонстрируются на рис. 5. Как видно, в соответствии с описанными выше возможностями эти коэффициенты увеличиваются с ростом p , причем для всех моделей поляризации и структур пористости. Наименьшие значения коэффициентов пьезочувствительности получаются для модели 3 неоднородной поляризации. Структура пористости и для этих пьезокоэффициентов оказывает сильное влияние, причем в большей степени – для значений $r(g_{31})$. Для продольных относительных коэффициентов пьезочувствительности $r(g_{33})$ наблюдается редкий случай, когда при закрытой пористости эти величины больше, чем при случайной.

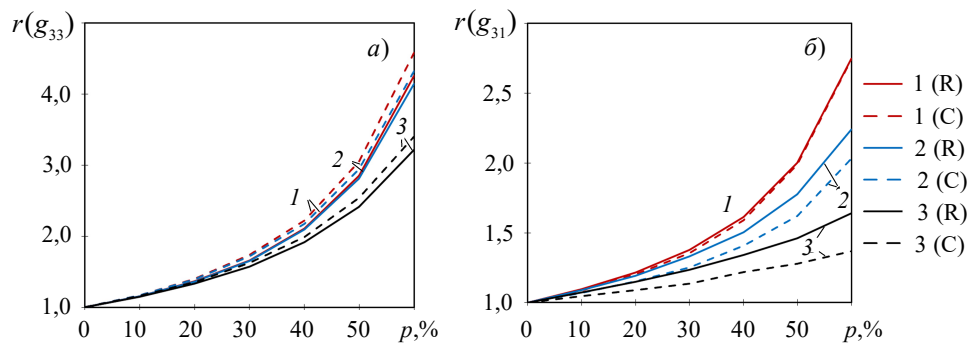


Рис. 5. Зависимости от пористости эффективных пьезомодулей $r(g_{33})$ (а) и $r(g_{31})$ (б)

Из рис. 4б и 5б видно, что пьезомодули d_{31}^{eff} и g_{31}^{eff} не меняют знаки даже в тех случаях, когда пьезомодуль e_{31}^{eff} меняет знак. Однако ситуация со сменой знаков всех этих трех пьезомодулей может иметь место для других пористых пьезокерамик или пьезоэлектрических метаматериалов [23, 24].

Заключение

Описана общая методология гомогенизации пьезокерамических композитов с учетом неоднородной поляризации.

Рассмотрены три модели поляризации пьезокерамической матрицы:

- 1) обычная однородная поляризация;
- 2) поляризация с неоднородностью, вызванной только поворотами элементарных систем координат, связанных с направлениями векторов поляризации;
- 3) неоднородная поляризация как с поворотами элементарных систем координат,

так и с изменением материальных модулей в элементных системах координат между модулями поляризованной пьезокерамики и модулями неполяризованной керамики.

Для определения модулей неполяризованной керамики использовались методы осреднения поликристаллических материалов с дополнительными осреднениями модулей, измеренных при различных постоянных сопряженных полях, и осреднениями по Хиллу. Такая модель обобщает модель, использованную ранее в [8]. Особое внимание уделено влиянию типа пористости, для чего были рассмотрены случайная структура пористости и закрытая пористость. Решения краевых задач гомогенизации и постпроцессорная обработка результатов были проведены методом конечных элементов в пакете ANSYS. Все расчеты проводились для пористой сегнетожесткой пьезокерамики ПКР-8*, применяемой в пьезоустройствах ультразвука, используемых в медицине.

Результаты показали важность учета неоднородности поля поляризации, особенно при нахождении эффективных пьезомодулей, а также структуры пористости.

Дальнейшие направления исследований могут быть связаны с использованием вычисленных эффективных модулей пьезокерамики ПКР-8* в реальных пьезоэлектрических преобразователях.

Список литературы

1. Bai X., Wang D., Zhen L., Cui M., Liu J., Zhao N., Lee C., Yang B. Design and micromanufacturing technologies of focused piezoelectric ultrasound transducers for biomedical applications. *International Journal of Extreme Manufacturing*. 2024. Vol. 6. Iss. 6. Article No 062001. DOI: 10.1088/2631-7990/ad62c6.
2. Ringgaard E., Lautzenhiser F., Bierregaard L.M., Zawada T., Molz E. Development of porous piezoceramics for medical and sensor applications. *Materials*. 2015. Vol. 8. Iss. 12. P. 8877–8889. DOI: 10.3390/ma812549.
3. Rybyanets A.N., Makarev D.I., Shvetsova N.A. Recent advances in porous piezoceramics applications. *Ferroelectrics*. 2019. Vol. 539. Iss. 1. P. 101–111. DOI: 10.1080/00150193.2019.1570019.
4. Bakhtiar S.U.H., Hussain S.a., Ali S., Ismail A., Zada A., Sattar H., Raziq F., Zahid M., Ahmed Al-Fatesh S., Dong W., Fu Q. Innovative perspectives on porous ferroelectric ceramics and their composites: Charting new frontiers in energy applications. *Materials Today Communications*. 2024. Vol. 38. Article No 108388. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2024.108388.
5. Levassort F., Holc J., Ringgaard E., Bove T., Koscec M., Lethiecq M. Fabrication, modelling and use of porous ceramics for ultrasonic transducer applications. *Journal of Electroceramics*. 2007. Vol. 19. P. 127–139. DOI: 10.1007/s10832-007-9117-3.
6. Yan M., Xiao Z., Ye J., Yuan X., Li Z., Bowen C., Zhang Y., Zhang D. Porous ferroelectric materials for energy technologies: current status and future perspectives. *Energy & Environmental Science*. 2021. Vol. 14. Iss. 12. P. 6158–6190. DOI: 10.1039/d1ee03025f.
7. Mercadelli E., Galassi C. How to make porous piezoelectrics? Review on processing strategies. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*. 2021. Vol. 68. Iss. 2. P. 217–228. DOI: 10.1109/TUFFC.2020.3006248.
8. Наседкин А.В., Наседкина А.А., Толмачева Я.В. Компьютерная гомогенизация пористых пьезокерамик различной сегнетожесткости при случайной структуре пористости и неоднородности поля поляризации. *Вычислительная механика сплошных сред*. 2023. Т. 16. №4. С. 476–492. DOI: 10.7242/1999-6691/2023.16.4.40.
9. Barnett D., Lothe J. Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators. *Physica Status Solidi B*. 1975. Vol. 67. Iss. 1. P. 105–111. DOI: 10.1002/pssb.2220670108.
10. Nassar M.E., Saeed N.A., Nasedkin A. Determination of effective properties of porous piezoelectric composite with partially randomly metalized pore boundaries using finite element method. *Applied Mathematical Modelling*. 2023. Vol. 124. P. 241–256. DOI: 10.1016/j.apm.2023.07.025.

11. Yvonnet J. Computational homogenization of heterogeneous materials with finite elements. Part of the Book series: *Solid Mechanics and its Applications*. Vol. 258. Cham: Springer, 2019. 223 p. DOI: 10.1007/978-3-030-18383-7.
12. Hori M., Nemat-Nasser S. Universal bounds for effective piezoelectric moduli. *Mechanics of Materials*. 1998. Vol. 30. Iss. 1. P. 295–308. DOI: 10.1016/S0167-6636(98)00029-5.
13. Наседкин А.В., Наседкина А.А., Нассар М.Э. Гомогенизация пористых пьезоком-позитов с экстремальными свойствами на границах пор методом эффективных модулей. *Известия РАН. МТТ*. 2020. №6. С. 82–92. DOI: 10.31857/S057232992005013X.
14. Скалиух А.С. Возможности модели необратимых процессов деформирования и поляризации на примерах взаимного влияния механических и электрических полей. *Проблемы прочности и пластичности*. 2025. Т. 87. №3. С. 365–380. DOI: 10.32326/1814-9146-2025-87-3-365-380.
15. Pechstein A.S., Meindlumer M., Humer A. High-order mixed finite elements for an energy-based model of the polarization process in ferroelectric materials. *Journal of Intelligent Materials Systems and Structures*. 2021. Vol. 32. Iss. 3. P. 355–368. DOI: 10.1177/1045389X20953895.
16. Schwaab H., Grunbichler H., Supancic P., Kamlah M. Macroscopical non-linear material model for ferroelectric materials inside a hybrid finite element formulation. *International Journal of Solids and Structures*. 2012. Vol. 49. Iss. 3-4. P. 457–469. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.015.
17. Lewis R.W.C., Dent A.C.E., Stevens R., Bowen C.R. Microstructural modelling of the polarization and properties of porous ferroelectrics. *Smart Materials and Structure*. 2011. Vol. 20. No 8. Article No 085002. DOI: 10.1088/0964-1726/20/8/085002.
18. Martinez-Ayuso G., Friswell M.I., Haddad Khodaparast H., Roscow J.I., Bowen C.R. Electric field distribution in porous piezoelectric materials during polarization. *Acta Materialia*. 2019. Vol. 173. P. 332–341. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.04.021.
19. Roscow J.I., Lewis R.W.C., Taylor J., Bowen C.R. Modelling and fabrication of porous sandwich layer barium titanate with improved piezoelectric energy harvesting figures of merit. *Acta Materialia*. 2016. Vol. 128. P. 207–217. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.02.029.
20. Shindo Y., Narita F., Hirama M. Electromechanical field concentrations near the electrode tip in partially poled multilayer piezo-film actuators. *Smart Materials and Structures*. 2009. Vol. 18. Article No 085020. DOI: 10.1088/0964-1726/18/8/085020.
21. den Toonder J.M.J., van Dommelen J.A.W., Baaijens F.P.T. The relation between single crystal elasticity and the effective elastic behaviour of polycrystalline materials: Theory, measurement and computation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 1999. Vol. 7. Iss. 6. P. 909–928. DOI: 10.1088/0965-0393/7/6/301.
22. Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*. 1952. Vol. 65. No 5. P. 349–354. DOI: 10.1088/0370-1298/65/5/307.
23. Kornievsky A., Nasedkin A., Volkov A. Comparative analysis of piezoelectric regular foams from two types of Gibson – Ashby cells with uniform and piecewise homogeneous polarizations. *Acta Materialia*. 2025. Vol. 286. Article No 120744. DOI: 10.1016/j.actamat.2025.120744.
24. Kornievsky A., Nasedkin A., Volkov A. Numerical analysis of the effective properties of piezoceramic metamaterials modeled by Gibson – Ashby cells under various models of inhomogeneous polarization. *Acta Materialia*. 2025. DOI: 10.1007/s00707-025-04352-3.
25. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Finite element homogenization of piezocomposites with isolated inclusions using improved 3-0 algorithm for generating representative volumes in ACELAN-COMPOS package. *Materials Physics and Mechanics*. 2020. Vol. 44. Iss. 3. P. 392–403. DOI: 10.18720/MPM.4432020_10.
26. Леднов А.С., Наседкин А.В. Конечно-элементное исследование зависимостей эффективных модулей пористой пьезокерамики ПКР-8 от структуры и размеров представительных объемов. *Математика, информатика, компьютерные науки, моделирование, образование: Сб. науч. трудов Всерос. научно-практич. конф. МИКМО-2025*. Симферополь, 16–19 апр. 2025 г. Симферополь: ИП Корниенко А.А., 2025. С. 380–386.
27. Данцигер А.Я. и др. *Многокомпонентные системы сегнетоэлектрических сложных оксидов: физика, кристаллохимия, технология. Аспекты дизайна пьезоэлектрических материалов*. Ростов н/Д: МП «Книга», 2002. Т. 2. 365 с.

28. Yang A.K., Wang C.A., Guo R., Huang Y. Microstructure and electrical properties of porous PZT ceramics fabricated by different methods. *Journal of the American Ceramic Society*. 2010. Vol. 93. Iss. 7. P. 1984–1990. DOI: 10.1111/j.1551-2916.2010.03684.x.
29. Zhang H.L., Li J.-F., Zhang B.-P. Microstructure and electrical properties of porous PZT ceramics derived from different pore-forming agents. *Acta Materialia*. 2007. Vol. 55. Iss. 1. P. 171–181. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.07.032.
30. Tan J., Li Z. Microstructures dielectric and piezoelectric properties of unannealed and annealed porous 0.36BiScO₃-0.64PbTiO₃ ceramics. *Journal of Materials Science*. 2016. Vol. 51. Iss. 11. P. 5092–5103. DOI: 10.1007/s10853-016-9812-z.

References

1. Bai X., Wang D., Zhen L., Cui M., Liu J., Zhao N., Lee C., Yang B. Design and micromanufacturing technologies of focused piezoelectric ultrasound transducers for bio-medical applications. *Int. J. Extreme Manuf.* 2024. Vol. 6. Iss. 6. Article No 062001. DOI: 10.1088/2631-7990/ad62c6.
2. Ringgaard E., Lautzenhiser F., Bierregaard L.M., Zawada T., Molz E. Development of porous piezoceramics for medical and sensor applications. *Materials*. 2015. Vol. 8. Iss. 12. P. 8877–8889. DOI: 10.3390/ma812549.
3. Rybyanets A.N., Makarev D.I., Shvetsova N.A. Recent advances in porous piezoceramics applications. *Ferroelectrics*. 2019. Vol. 539. Iss. 1. P. 101–111. DOI: 10.1080/00150193.2019.1570019.
4. Bakhtiar S.U.H., Hussain S.a., Ali S., Ismail A., Zada A., Sattar H., Raziq F., Zahid M., Ahmed Al-Fatesh S., Dong W., Fu Q. Innovative perspectives on porous ferroelectric ceramics and their composites: Charting new frontiers in energy applications. *Mater. Today Commun.* 2024. Vol. 38. Article No 108388. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2024.108388.
5. Levassort F., Holc J., Ringgaard E., Bove T., Kosec M., Lethiecq M. Fabrication, modelling and use of porous ceramics for ultrasonic transducer applications. *J. Electroceramics*. 2007. Vol. 19. P. 127–139. DOI: 10.1007/s10832-007-9117-3.
6. Yan M., Xiao Z., Ye J., Yuan X., Li Z., Bowen C., Zhang Y., Zhang D. Porous ferroelectric materials for energy technologies: current status and future perspectives. *Energy Environ. Sci.* 2021. Vol. 14. Iss. 12. P. 6158–6190. DOI: 10.1039/d1ee03025f.
7. Mercadelli E., Galassi C. How to make porous piezoelectrics? Review on processing strategies. *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*. 2021. Vol. 68. Iss. 2. P. 217–228. DOI: 10.1109/TUFFC.2020.3006248.
8. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Tolmacheva Ya.V. Kompyuternaya gomogenizatsiya poristyykh pyezokeramik razlichnoy segnetozhestkosti pri sluchaynoy strukture poristosti i neodnorodnosti polya polarizatsii [Computer homogenization of porous piezoceramics of different ferrohardness with random porous structure and inhomogeneous polarization field]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred [Computational Continuum Mechanics]*. 2023. Vol. 16. No 4. P. 476–492 (In Russian).
9. Barnett D., Lothe J. Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators. *Physica Status Solidi B*. 1975. Vol. 67. Iss. 1. P. 105–111. DOI: 10.1002/pssb.2220670108.
10. Nassar M.E., Saeed N.A., Nasedkin A. Determination of effective properties of porous piezoelectric composite with partially randomly metalized pore boundaries using finite element method. *Appl. Math. Model.* 2023. Vol. 124. P. 241–256. DOI: 10.1016/j.apm.2023.07.025.
11. Yvonnet J. Computational homogenization of heterogeneous materials with finite elements. Part of the Book series: *Solid Mechanics and its Applications*. Vol. 258. Cham. Springer. 2019. 223 p. DOI: 10.1007/978-3-030-18383-7.
12. Hori M., Nemat-Nasser S. Universal bounds for effective piezoelectric moduli. *Mech. Mater.* 1998. Vol. 30. Iss. 1. P. 295–308. DOI: 10.1016/S0167-6636(98)00029-5.
13. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Nassar M.E. Homogenization of porous piezocomposites with extreme properties at pore boundaries by effective moduli method. *Mech. Solids*. 2020. Vol. 55. No 6. P. 827–836.
14. Skaliukh A.S. Vozmozhnosti modeli neobratimyykh protsessov deformirovaniya i polarizatsii na primerakh vzaimnogo vliyaniya mekhanicheskikh i elektricheskikh poley

[Possibilities of the model of irreversible deformation and polarization processes using examples of the mutual influence of mechanical and electric fields]. *Problemy prochnosti i plastichnosti [Problems of Strength and Plasticity]*. 2025. Vol. 87. No 3. P. 365–380 (In Russian).

15. Pechstein A.S., Meindlhumer M., Humer A. High-order mixed finite elements for an energy-based model of the polarization process in ferroelectric materials. *Journal of Intelligent Materials Systems and Structures*. 2021. Vol. 32. Iss. 3. P. 355–368. DOI: 10.1177/1045389X20953895.

16. Schwaab H., Grunbichler H., Supancic P., Kamlah M. Macroscopical non-linear material model for ferroelectric materials inside a hybrid finite element formulation. *Int. J. Solids Struct.* 2012. Vol. 49. Iss. 3-4. P. 457–469. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.015.

17. Lewis R.W.C., Dent A.C.E., Stevens R., Bowen C.R. Microstructural modelling of the polarization and properties of porous ferroelectrics. *Smart Mater. Struct.* 2011. Vol. 20. No 8. Article No 085002. DOI: 10.1088/0964-1726/20/8/085002.

18. Martinez-Ayuso G., Friswell M.I., Haddad Khodaparast H., Roscow J.I., Bowen C.R. Electric field distribution in porous piezoelectric materials during polarization. *Acta Mater.* 2019. Vol. 173. P. 332–341. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.04.021.

19. Roscow J.I., Lewis R.W.C., Taylor J., Bowen C.R. Modelling and fabrication of porous sandwich layer barium titanate with improved piezoelectric energy harvesting figures of merit. *Acta Mater.* 2016. Vol. 128. P. 207–217. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.02.029.

20. Shindo Y., Narita F., Hiram M. Electromechanical field concentrations near the electrode tip in partially poled multilayer piezo-film actuators. *Smart Mater. Struct.* 2009. Vol. 18. Article No 085020. DOI: 10.1088/0964-1726/18/8/085020.

21. den Toonder J.M.J., van Dommelen J.A.W., Baaijens F.P.T. The relation between single crystal elasticity and the effective elastic behaviour of polycrystalline materials: Theory, measurement and computation. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 1999. Vol. 7. Iss. 6. P. 909–928. DOI: 10.1088/0965-0393/7/6/301.

22. Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc. A*. 1952. Vol. 65. No 5. P. 349–354. DOI: 10.1088/0370-1298/65/5/307.

23. Kornievsky A., Nasedkin A., Volkov A. Comparative analysis of piezoelectric regular foams from two types of Gibson – Ashby cells with uniform and piecewise homogeneous polarizations. *Acta Mater.* 2025. Vol. 286. Article No 120744. DOI: 10.1016/j.actamat.2025.120744.

24. Kornievsky A., Nasedkin A., Volkov A. Numerical analysis of the effective properties of piezoceramic metamaterials modeled by Gibson – Ashby cells under various models of inhomogeneous polarization. *Acta Mater.* 2025. DOI: 10.1007/s00707-025-04352-3.

25. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Finite element homogenization of piezocomposites with isolated inclusions using improved 3-0 algorithm for generating representative volumes in ACELAN-COMPOS package. *Mater. Phys. Mech.* 2020. Vol. 44. Iss. 3. P. 392–403. DOI: 10.18720/MPM.4432020_10.

26. Lednov A.S., Nasedkin A.V. Konechno-elementnoe issledovanie zavisimostey effektivnykh moduley poristoy pyezokeramiki PKR-8 ot struktury i razmerov predstavitelnykh obemov [Finite element investigation of the dependences of the effective moduli for PCR-8 porous piezoceramics on the structure and sizes of representative volumes]. *Matematika, informatika, kompyuternye nauki, modelirovanie, obrazovanie: Sbornik nauchnykh trudov Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii MIKMO-2025 [Mathematics, Informatics, Computer Science, Modeling, Education: Collection of scientific papers of the All-Russian scientific and practical conference MIKMO-2025]*. Simferopol, 16–19 Apr. 2025. Simferopol. IP Kornienko A.A. Publ. 2025. P. 380–386 (In Russian).

27. Dantsiger A.Ya. et al. *Mnogokomponentnye sistemy segnetoelektricheskikh slozhnykh oksidov: fizika, kristalokhimiya, tekhnologiya. Aspekty dizayna pyezoelektricheskikh materialov [Multicomponent Systems of Ferroelectric Complex Oxides: Physics, Crystal Chemistry, Technology. Design Aspects of Piezoelectric Materials]*. Rostov-on-Don. MP “Kniga”. 2002. Vol. 2. 365 p. (In Russian).

28. Yang A.K., Wang C.A., Guo R., Huang Y. Microstructure and electrical properties of porous PZT ceramics fabricated by different methods. *J. Am. Ceram. Soc.* 2010. Vol. 93. Iss. 7. P. 1984–1990. DOI: 10.1111/j.1551-2916.2010.03684.x.

29. Zhang H.L., Li J.-F., Zhang B.-P. Microstructure and electrical properties of porous PZT

ceramics derived from different pore-forming agents. *Acta Mater.* 2007. Vol. 55. Iss. 1. P. 171–181. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.07.032.

30. Tan J., Li Z. Microstructures dielectric and piezoelectric properties of unannealed and annealed porous 0.36BiScO₃-0.64PbTiO₃ ceramics. *J. Mater. Sci.* 2016. Vol. 51. Iss. 11. P. 5092–5103. DOI: 10.1007/s10853-016-9812-z.

**INFLUENCE ANALYSIS OF POROSITY STRUCTURE
AND POLARIZATION FIELD HETEROGENEITY ON THE EFFECTIVE PROPERTIES
OF POROUS FERROELECTRIC HARDNESS PIEZOELECTRIC CERAMICS PCR-8***

Lednov A.S., Nasedkin A.V.

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

nasedkin@math.sfedu.ru

Received by the Editor 2026/01/08

Porous ferroelectric hardness piezoceramics have unique properties that determine their effectiveness for various hydroacoustic and medical applications. To determine the material properties of porous piezoceramics, it is necessary to extend the methods of composite mechanics to heterogeneous piezoelectric media, since the polarization field is non-uniform in the vicinity of the pores. The task is complicated by the fact that both the polarization field itself and the material moduli of non-uniformly polarized piezoceramics can only be determined approximately due to the uncertainty of the porous material's input data during polarization. This paper determines the effective moduli of porous ferroelectric hardness piezoceramics using various simplified polarization models and also conducts a comparative analysis of two types of porosity structures: simple random porosity and guaranteed closed porosity. Homogenization problems were solved numerically using the finite element method in non-uniform representative volumes. In the first stage, dielectric electrostatics problems were solved, modeling the process of non-uniform polarization. Then, each dielectric finite element was replaced by a piezoelectric one with its own element coordinate systems related to the directions of the polarization vectors and with material moduli specified in these element coordinate systems. In the final stage, boundary value problems of electroelasticity theory were solved with essential boundary conditions linear in spatial variables, and a complete set of effective moduli was determined from the resulting average stress components and electrical induction. All modeling stages were implemented in the ANSYS finite element package using the advanced capabilities of the APDL programming language. Analysis of the results in the porosity range from 0 to 60% showed that accounting for polarization field inhomogeneity has little effect on the effective stiffness moduli and permittivities, but leads to significant changes in the piezoelectric moduli, particularly the transverse piezoelectric moduli. The types of porosity structure are also important for the precise determination of effective moduli.

Keywords: electroelasticity, porous piezocomposite, non-uniform polarization, ferroelectric hardness, effective modulus, representative volume, random porosity, closed porosity, homogenization, finite element method.

* This study was supported by the Russian Science Foundation, grant No 22-11-00302-II, <https://rscf.ru/project/22-11-00302/>, at the Southern Federal University.