МЕХАНИКА
ТВЕРДОГО ТЕЛА
№ 5 • 1997

УДК 539.3

© 1997 г. В.М. ЛЕВИН, М.И. РАКОВСКАЯ

ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ ТЕРМОПЬЕЗОАКТИВНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Рассматриваются поликристаллические материалы, состоящие из пьезоэлектрических зерен (кристаллитов). Один из методов самосогласования (метод эффективного поля) используется для теоретического определения эффективных электроупругих и тепловых постоянных таких материалов с учетом электроупругой связанности. Получены явные выражения для таких характеристик поликристаллов, представляющих собой макроскопически изотропный агрегат гексагональных кристаллитов, а также приближенные формулы для детальных упругих и электрических полей в произвольном зерне.

Поликристаллические материалы, состоящие из однофазных зерен (кристаллитов) со случайно ориентированными кристаллографическими осями, принадлежат к широкому классу микронеоднородных сред случайной микроструктуры. Одной из центральных задач механики и физики таких материалов является теоретическое предсказание их эффективных или макроскопических свойств по известным свойствам кристаллитов и некоторым данным о распределении их ориентаций в пространстве. Многочисленные публикации на эту тему касались в основном определения упругих или электрических характеристик поликристаллов в несвязанной задаче электроупругости. Если однако кристаллиты обладают свойствами электромеханической связанности (пьезоактивны, например), то чисто механическое или электрическое воздействия порождают в таком теле электрическое и упругое поля, которые могут влиять на его макроскопические характеристики. Поэтому эффекты электроупругой связанности должны быть учтены при определении эффективных электроупругих постоянных поликристаллов с пьезоактивными кристаллитами.

Систематическое исследование макроскопических диэлектрических и упругих свойств пьезоэлектрических поликристаллов содержится в работах, приведенных ниже[1,2], где использовалось обобщение вариационного принципа Хашина – Стрикмана на связанные задачи для получения оценок для эффективных характеристик, а также один из методов самосогласования (метод эффективной среды) для их приближенного определения. В публикуемой работе для определения макроскопических электроупругих констант пьезоактивных поликристаллов используется другая самосогласованная схема (метод эффективного поля), приводящая к более простым и удобным для приложений выражениям для этих констант. При этом, в отличие от указанных работ, здесь рассматривается неизотермическая задача, что позволяет найти и тепловые упругие и электрические характеристики поликристаллов.

---

[1] *Avellaneda M.* Physical constants of polycristalline solids: microgeometries and bounds // Microstructure and effective properties of random particulate solids. European mechanics colloquium 278, 1991. Abstracts. P. 4.

[2] *Olson T.* Overall properties of granular piezoelectrics: Bounds and effective medium approximations // A dissertation for the degree of Doctor of Philosophy. New York University. 1991. 57 p.

1. Линейные определяющие соотношения для однородного пьезоэлектрического кристалла в неизотермических условиях имеют вид [1, 2]:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} - e_{ijk}E_k - \beta_{ij}\theta \qquad (1.1)$$

$$\frac{1}{4\pi}D_i = e^t_{ikl}\varepsilon_{kl} + \chi_{ik}E_k + \pi_i\theta$$

Здесь σ и ε – тензоры напряжений и деформаций, E и D – векторы напряженности электрического поля и индукции соответственно, $C = C^E$ – тензор упругих модулей при фиксированном векторе E, $\chi = \chi^\varepsilon$ – тензор коэффициентов диэлектрической проницаемости при фиксированных деформациях, e – тензор пьезоэлектрических констант, характеризующий связанные электроупругие эффекты (индекс t означает операцию транспонирования), β – тензор коэффициентов температурных напряжений, π – вектор пироэлектрических постоянных, θ – приращение температуры, вызванное внешним нагревом.

Соотношения (1.1) удобно записывать в следующей краткой форме:

$$J = \mathbf{L}F + b\theta, \quad J = \left\| \begin{matrix} \sigma \\ D/(4\pi) \end{matrix} \right\|, \quad F = \left\| \begin{matrix} \varepsilon \\ E \end{matrix} \right\| \qquad (1.2)$$

$$\mathbf{L} = \left\| \begin{matrix} C & -e \\ e^t & \chi \end{matrix} \right\|, \quad b = \left\| \begin{matrix} -\beta \\ \pi \end{matrix} \right\|$$

где матрицу $\mathbf{L}$ следует рассматривать как линейный оператор, переводящий тензорно-векторную пару $[\sigma, D]$ в аналогичную пару $[\varepsilon, E]$ и имеющий симметрию электроупругих констант.

Соотношения, обратные (1.1), представляются в форме

$$F = \mathbf{M}(J - b\theta), \quad \mathbf{M} = \left\| \begin{matrix} S & d \\ -d^t & \eta \end{matrix} \right\| \qquad (1.3)$$

$$S = (C + e\chi^{-1}e^t)^{-1}, \quad \eta = (\chi + e^t C^{-1} e)^{-1}, \quad d = Se\chi^{-1} = C^{-1}e\eta$$

Для однофазного поликристалла со случайной ориентацией зерен термоэлектроупругие характеристики $L(x)$ и $b(x)$ являются случайными функциями координат, допускающими следующие представления:

$$\mathbf{L}(x) = \mathbf{L}^0 + \mathbf{L}'(x), \quad \mathbf{L}^0 = \langle \mathbf{L}(x) \rangle, \quad \mathbf{L}'(x) = \sum_n \mathbf{L}'(\omega_n)V_n(x)$$

$$b(x) = b^0 + b'(x), \quad b^0 = \langle b(x) \rangle, \quad b'(x) = \sum_n b'(\omega_n)V_n(x) \qquad (1.4)$$

$$\mathbf{L}'(\omega_n) = \mathbf{L}(\omega_n) - \mathbf{L}^0, \quad b'(\omega_n) = b(\omega_n) - b^0$$

Здесь усреднение предполагается по представительному объему поликристалла, а суммирование – по всем кристаллитам в этом объеме, $V_n(x)$ – характеристическая функция n-го зерна, ω_n – совокупность углов Эйлера, определяющих ориентацию кристаллографических осей n-го зерна относительно лабораторной системы координат. При статистической однородности случайного множества кристаллитов, которая предполагается в дальнейшем, величины $\mathbf{L}^0$ и b^0 являются постоянными.

Поле температуры $\theta(x)$ в материале будем считать детерминированным и известным. Электрическое же и упругое поля являются случайными функциями координат и удовлетворяют следующим уравнениям равновесия неизотермической теории связанной электроупругости:

$$\nabla \mathbf{L}(x) \nabla f(x) + \nabla b(x)\theta(x) = 0, \quad f(x) = \left\| \begin{matrix} u_i(x) \\ -\varphi(x) \end{matrix} \right\| \qquad (1.5)$$

где $u_i(x)$ – компоненты вектора перемещений, $\varphi(x)$ – потенциал электрического поля в произвольной точке x поликристалла, $\nabla = \partial / \partial x_i$. С учетом представления (1.4) эта система уравнений принимает вид

$$\nabla \mathbf{L}^0 \nabla f(x) + \nabla b^0 \theta(x) = -\nabla[\mathbf{L}'(x) F(x) + b'(x)\theta(x)] \tag{1.6}$$

Преобразуем теперь эту систему дифференциальных уравнений в эквивалентную ей систему интегральных уравнений. Для этой цели введем функцию Грина $\mathbf{G}(x)$ оператора $\nabla \mathbf{L}^0 \nabla$ с постоянными коэффициентами, удовлетворяющую уравнению

$$\nabla \mathbf{L}^0 \nabla \mathbf{G}(x,\ x') + \bar{I}\delta(x - x') = 0,\quad \bar{I} = \begin{Vmatrix} \delta_{ik} & 0 \\ 0 & -1 \end{Vmatrix} \tag{1.7}$$

и нулевым условиям на границе характерного объема. Это позволяет записать

$$f(x) = f^0(x) + \int \mathbf{G}(x,\ x')\nabla'[\mathbf{L}'(x')F(x') + b'(x')\theta(x')]dx' \tag{1.8}$$

Здесь $f^0(x)$ – упругое и электрическое поля, которые являются решением уравнения

$$\nabla \mathbf{L}^0 \nabla f^0(x) + \nabla b^0 \theta(x) = 0 \tag{1.9}$$

при заданных граничных условиях.

Применив к обоим частям равенства (1.8) оператор

$$\mathbf{D} = \begin{Vmatrix} \mathrm{def} & 0 \\ 0 & \mathrm{grad} \end{Vmatrix}$$

и воспользовавшись теоремой Гаусса, получим

$$F(x) = F^0(x) + \int \mathbf{P}(x,\ x')[\mathbf{L}'(x')F(x') + b'(x')\theta(x')]dx' \tag{1.10}$$

$$\mathbf{P}(x,\ x') = \mathbf{D}\mathbf{G}(x,\ x')\mathbf{D},\quad F^0(x) = \mathbf{D}f^0(x)$$

В дальнейшем будем считать характерный объем поликристалла достаточно большим для того, чтобы заменить функцию Грина $\mathbf{G}(x, x')$ функцией $\mathbf{G}(x - x')$ для бесконечной среды. Это может привести к ошибке порядка l/L, где l – средний размер зерна, L – характерный размер представительного объема. Такая ошибка максимальна у границы этого объема и становится пренебрежимо малой при удалении от границы на расстояние в несколько размеров зерен. При произвольной анизотропии среды с электроупругими характеристиками $\mathbf{L}^0$ функция $\mathbf{G}(x - x')$ определяется выражениями

$$\mathbf{G}(x - x') = \frac{1}{8\pi^2} \int\limits_{|\xi|=1} \mathbf{G}(\xi)\delta[\xi(x - x')]dS_\xi,\quad \mathbf{G}(\xi) = \begin{Vmatrix} G_{ij}(\xi) & \Gamma_i(\xi) \\ -\gamma_j(\xi) & g(\xi) \end{Vmatrix} \tag{1.11}$$

$$G_{ij} = (\Lambda_{ij} - \frac{1}{\lambda} H_i h_j)^{-1},\quad \gamma_j = \frac{1}{\lambda} h_i G_{ij},\quad \Lambda_{ij}(\xi) = C^0_{ikjl}\xi_k \xi_l$$

$$g = -(\lambda + h_i \Lambda^{-1}_{ij} H_j)^{-1},\quad \Gamma_i = \Lambda^{-1}_{ij} H_j g,\quad H_i(\xi) = e^0_{ikl}\xi_k \xi_l,$$

$$h_j(\xi) = e^{0t}_{ljk}\xi_l \xi_k,\quad \lambda(\xi) = \chi^0_{ij}\xi_i \xi_j$$

где через C^0, e^0 и χ^0 обозначены осредненные по характерному представительному объему поликристалла тензоры упругих модулей, пьезоупругих констант и диэлектрических постоянных соответственно.

2. Для решения задачи гомогенизации и построения системы макроскопических уравнений связанной электроупругости воспользуемся самосогласованной схемой, которая ранее была использована для решения несвязанных электрической и упругой задач для композитных материалов матричного типа [3, 4]. Зафиксируем одну из типичных реализаций случайного множества кристаллитов в поликристалле и пусть точка x находится в зерне V_k с ориентацией ω_k. Перепишем уравнение (1.10) следующим образом:

$$F(x) = F^*_{(k)}(x) + \int_{V_k} \mathbf{P}(x - x')[\mathbf{L}'(\omega_k)F(x') + b'(\omega_k)\theta(x')]dx' \qquad (2.1)$$

$$F^*_{(k)}(x) = F^0(x) + \sum_{i \neq k} \int_{V_i} \mathbf{P}(x - x')[\mathbf{L}'(\omega_i)F(x') + b'(\omega_i)\theta(x')]dx' \qquad (2.2)$$

Как это следует из уравнения (2.1), задача определения упругого и электрического полей $F(x)$ в кристаллите с ориентацией кристаллографических осей ω_k сводится к определению этих полей в изолированной неоднородности с термоэлектроупругими характеристиками $\mathbf{L}(\omega_k)$ и $b(\omega_k)$, занимающей область V_k в неограниченной однородной среде с характеристиками $\mathbf{L}^0$ и b^0. Величина $F^*_{(k)}(x)$ при этом играет роль локального внешнего поля, действующего на эту неоднородность.

Предположим теперь, что изменением локального внешнего поля $F^*_{(k)}(x)$ и поля температуры $\theta(x)$ можно пренебречь в области V_k, а сама эта область имеет форму шара радиуса a. Можно показать, что электрическое и упругое поля $F(x)$ в V_k в этом случае однородны. Действительно, если $F = \text{const}$, $\theta = \text{const}$ в V_k, задача сводится к вычислению интеграла [5]:

$$\int_V \mathbf{P}(x - x')dx' = \frac{1}{8\pi^2} \int_{|\xi|=1} \mathbf{P}(\xi)dS_\xi \; \frac{\partial^2}{\partial p^2} \int_{V_k} \delta(p - \xi x)dx' \qquad (2.3)$$

$$p = \xi x, \;\; \mathbf{P}(x) = \xi\mathbf{G}(\xi)\xi$$

Интеграл по области V_k в правой части (2.3) равен площади круга, образующегося при сечении шара плоскостью $\xi x = p$, т.е. $\pi^2(a^2 - p^2)$, если $|p| \leqslant a$ и нулю, если $p > a$. При $x \in V_k$ вторая производная от этого интеграла равна -2π и правая часть в (2.3) является постоянной и независящей от a. При этом из (2.1) следует

$$F(x) = \mathbf{A}(\omega_k)[F^*_{(k)}(x) - \mathbf{P}b'(\omega_k)\theta(x)], \;\; x \in V_k \qquad (2.4)$$

$$\mathbf{A}(\omega_k) = (\mathbf{I} + \mathbf{P}\mathbf{L}'(\omega_k))^{-1}, \;\; \mathbf{P} = \frac{1}{4\pi} \int_{|\xi|=1} \mathbf{P}(\xi)dS_\xi \qquad (2.5)$$

$$\mathbf{I} = \begin{Vmatrix} I_{ijkl} & 0 \\ 0 & \delta_{ik} \end{Vmatrix}, \;\; I_{ijkl} = \delta_{i(k}\delta_{l)j}$$

Заметим, что поля $F(x)$ остаются постоянными и в зерне эллипсоидальной формы [5].

Будем считать, что локальное внешнее поле и температура постоянны в каждой из областей, занятых кристаллитами, (но могут меняться от зерна к зерну). Введем поле $F^*(x)$, которое совпадает с постоянной величиной $F^*_{(k)}(x)$ при $x \in V_k$. Это позволяет записать

$$F(x) = \mathbf{A}(x)[F^*(x) - \mathbf{P}b'(x)\theta(x)] \qquad (2.6)$$

где $\mathbf{A}(x)$ – функция, равная постоянной величине (2.5) при $x \in V_k$.

Подстановка соотношения (2.6) в правые части уравнений (1.10) и (2.2) дает возможность выразить электроупругие поля $F(x)$ в произвольной точке x поликристалла через $F^0(x)$, $F^*(x)$ и $\theta(x)$:

$$F(x) = F^0(x) + \int \mathbf{P}(x-x')[\mathbf{L}^A(x')F^*(x') + b^A(x')\theta(x')]dx' \tag{2.7}$$

$$\mathbf{L}^A(x) = \mathbf{L}'(x)\mathbf{A}(x), \quad b^A(x) = \mathbf{A}^t(x)b'(x)$$

а также получить самосогласованное уравнение для определения поля $F^*(x)$:

$$F^*(x) = F^0(x) + \int \mathbf{P}(x-x')[\mathbf{L}^A(x,\ x')F^*(x') + b^A(x,\ x')\theta(x')]dx' \tag{2.8}$$

Здесь обозначено

$$\mathbf{L}^A(x,\ x') = \Sigma_{i\neq k}\mathbf{L}'(\omega_i)\mathbf{A}(\omega_i)V_i(x')$$
$$b^A(x,\ x') = \Sigma_{i\neq j}\mathbf{A}^t(\omega_i)b'(\omega_i)V_i(x') \quad \text{при} \quad x \in V_k \tag{2.9}$$

Для случайно ориентированных зерен в поликристалле поля $F(x)$ и $F^*(x)$ – случайные функции. Осреднив обе стороны уравнений (2.7) и (2.8) по ансамблю реализаций случайного множества кристаллитов и используя основные гипотезы метода эффективного поля [3, 4], получим

$$\langle F(x)\rangle = F^0(x) + \int \mathbf{P}(x-x')[\mathbf{L}^A\langle F^*(x')\rangle + b^A\theta(x')]dx' \tag{2.10}$$

$$\langle F^*(x)\rangle = F^0(x) + \int \mathbf{P}(x-x')[\langle \mathbf{L}^A(x;\ x')|x\rangle\langle F^*(x')\rangle + < b^A(x;\ x')|x\rangle\theta(x')]dx' \tag{2.11}$$

Здесь учтено, что для статистически однородного множества кристаллитов $\mathbf{L}^A = \langle \mathbf{L}^A(x)\rangle$ и $b^A = \langle b^A(x)\rangle$ – постоянные величины, а символом $\langle f(x)|x\rangle$ обозначено ансамблевое среднее функции $f(x)$ при условии, что точка x фиксирована в области ее определения. При этом условные средние $\langle \mathbf{L}^A(x;\ x')|x\rangle$ и $\langle b^A(x;\ x')|x\rangle$ зависят только от разности аргументов и могут быть представлены в виде

$$\langle \mathbf{L}^A(x;\ x')|x\rangle = \mathbf{L}^A\Psi(x-x'),\ \langle b^A(x;\ x')|x\rangle = b^A\Psi(x-x') \tag{2.12}$$

где функция $\Psi(x)$ определяется конкретной геометрической структурой случайного множества зерен в поликристалле. В дальнейшем будем считать, что это множество изотропно (в поликристалле отсутствует текстура). В этом случае функция $\Psi(x)$ сферически симметрична ($\Psi(x) = \Psi(|x|)$).

Исключая внешнее поле $F^0(x)$ из уравнений (2.10) и (2.11), найдем

$$\langle F^*(x)\rangle = \langle F(x)\rangle - \int \mathbf{P}(x-x')\Phi(x-x')[\mathbf{L}^A\langle F^*(x')\rangle + b^A\theta(x')]dx'$$
$$\Phi(x) = 1 - \Psi(x) \tag{2.13}$$

Здесь $\Phi(x)$ – гладкая функция, быстро стремящаяся к нулю вне области порядка среднего размера кристаллита. Пренебрегая изменением полей $\langle F^*(x)\rangle$ и $\theta(x)$ в этой области, получим алгебраическое уравнение, связывающее средние поля в поликристалле $\langle F(x)\rangle$ с эффективным полем $\langle F^*(x)\rangle$ и температурой $\theta(x)$:

$$\langle F^*(x)\rangle = \langle F(x)\rangle + \mathbf{P}[\mathbf{L}^A\langle F^*(x)\rangle + b^A\theta(x)] \tag{2.14}$$

При этом учтено, что

$$\int \mathbf{P}(x)\Phi(|x|)dx = -\mathbf{P} \tag{2.15}$$

где постоянный оператор P определен в (2.5).

Разрешив уравнение (2.14) относительно $\langle F^*(x)\rangle$, получим

$$\langle F^*(x)\rangle = \mathbf{A}^{-1}(\langle F(x)\rangle + \mathbf{P}b^A\theta(x)), \quad \mathbf{A} = \langle \mathbf{A}(x)\rangle \tag{2.16}$$

Подстановка этого выражения в правую часть (2.10) дает

$$\langle F(x)\rangle = F^0(x) + \int \mathbf{P}(x-x')[\mathbf{L}^A\mathbf{A}^{-1}\langle F(x')\rangle + (\mathbf{A}^t)^{-1}b^A\theta(x')]dx' \tag{2.17}$$

Подействуем на обе стороны этого уравнения оператором $\nabla\mathbf{L}^0$. Учитывая соотношения (1.7) и (1.9), получим, что средние упругое и электрическое поля в поликристалле удовлетворяют системе уравнений

$$\nabla[\mathbf{L}^*\nabla\langle f(x)\rangle + b^*\theta(x)] = 0 \tag{2.18}$$

$$\mathbf{L}^* = \mathbf{L}^0 + \mathbf{L}^A\mathbf{A}^{-1}, \quad b^* = b^0 + (\mathbf{A}^t)^{-1}b^A$$

в которой величины $\mathbf{L}^*$ и b^* представляют собой операторы эффективных термоэлектроупругих постоянных пьезоактивного поликристалла. Фигурирующие в этих формулах ансамблевые средние можно заменить средними по достаточно большому (представительному) объему поликристалла. Предполагая статистическую независимость ориентаций кристаллографических осей зерен от их положения в пространстве, имеем

$$\mathbf{A} = \langle \mathbf{A}(\omega)\rangle_\omega, \quad \mathbf{L}^A = \langle \mathbf{L}'(\omega)\mathbf{A}(\omega)\rangle_\omega \tag{2.19}$$

где символом $\langle ...\rangle_\omega$ обозначено осреднение по ориентациям зерен.

3. Допустим, что ориентации зерен в поликристалле равновероятны и, следовательно, поликристаллический агрегат макроскопически изотропен. Средние от тензоров нечетной валентности в этом случае равны нулю и операторы L^0 и b^0 в (1.4) принимают вид

$$L^0 = \begin{Vmatrix} C^0_{ijkl} & 0 \\ 0 & \chi^0_{ik} \end{Vmatrix}, \quad b^0 = \begin{Vmatrix} -\beta^0_{ij} \\ 0 \end{Vmatrix} \tag{3.1}$$

$$C^0_{ijkl} = k_0\delta_{ij}\delta_{kl} + 2\mu_0(I_{ijkl} - \tfrac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl})$$

$$\chi^0_{ik} = \chi_0\delta_{ik}, \quad \beta^0_{ij} = \beta_0\delta_{ij}$$

В матрице $\mathbf{G}(\xi)$ в (1.10) для такой среды остаются только диагональные элементы, которые определяются выражениями

$$G_{ij}(\xi) = \frac{1}{\mu_0}\left(\delta_{ij} - \frac{3k_0+\mu_0}{3k_0+4\mu_0}\xi_i\xi_j\right), \quad g(\xi) = \frac{1}{\chi_0} \tag{3.2}$$

а вычисление интеграла по сфере в (2.5) дает

$$\mathbf{P} = \begin{Vmatrix} P_{ijkl} & 0 \\ 0 & p_{ik} \end{Vmatrix} \tag{3.3}$$

$$P_{ijkl} = \frac{1}{9k_P}\delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{1}{2\mu_P}\left(I_{ijkl} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}\right), \quad p_{ik} = \frac{1}{3\chi_0}\delta_{ik}$$

$$k_P = k_0 + \frac{4}{3}\mu_0, \quad \mu_P = \frac{5\mu_0(3k_0+4\mu_0)}{6(k_0+2\mu_0)}$$

Наконец, операторы $\mathbf{A}$ и $\mathbf{L}^A$ для макроскопически изотропного поликристалла могут быть представлены в следующей компактной форме:

$$\mathbf{A} = \begin{Vmatrix} \overline{A} & H \\ -h^t & \overline{\alpha} \end{Vmatrix}, \quad \mathbf{L}^A = \begin{Vmatrix} C^A & -e^A \\ e^{At} & \chi^A \end{Vmatrix} \tag{3.4}$$

$$A = (I + P\overline{C})^{-1}, \quad \overline{C} = C' + ep\alpha^t e^t, \quad \alpha^t = (\overline{1} + \chi' p)^{-1}, \quad \overline{1} = \delta_{ij}$$

$$\overline{\alpha} = (\overline{1} + p\overline{\chi})^{-1}, \quad \overline{\chi} = \chi' + e^t PA^t e, \quad A^t = (I + C'P)^{-1} \tag{3.5}$$

$$H = PA^t e\overline{\alpha}, \quad h^t = p\alpha^t e^t \overline{A}, \quad C^A = \overline{CA}, \quad e^A = A^t e\overline{\alpha}, \quad \chi^A = \overline{\chi\alpha}$$

Рассмотрим поликристалл, состоящий из зерен, обладающих гексагональной симметрией класса 6mm. Тензоры C, e, χ, β и π для отдельного кристаллита можно представить в виде

$$C_{ijkl} = kT^2_{ijkl} + 2m(T^1_{ijkl} - \tfrac{1}{2}T^2_{ijkl}) + l(T^3_{ijkl} + T^4_{ijkl}) + 4\mu T^5_{ijkl} + nT^5_{ijkl}$$

$$e_{ijk} = e_1 U^1_{ijk} + e_2 U^2_{ijk} + e_3 U^3_{ijk} \tag{3.6}$$

$$\chi_{ij} = \chi_1 t^1_{ij} + \chi_2 t^2_{ij}, \quad \beta_{ij} = \beta_1 t^1_{ij} + \beta_2 t^2_{ij}, \quad \pi_i = \pi m_i$$

Здесь m_i – орт оси симметрии бесконечного порядка гексагонального кристаллита, а T^m_{ijkl}, U^n_{ijk} и t^r_{ij} – элементы следующих тензорных базисов

$$T^1_{ijkl} = \theta_{i(k}\theta_{l)j}, \quad T^2_{ijkl} = \theta_{ij}\theta_{kl}, \quad T^3_{ijkl} = \theta_{ij}m_k m_l, \quad T^4_{ijkl} = m_i m_j \theta_{kl}$$

$$T^5_{ijkl} = \theta_{i)(k}m_{l)}m_{(j}, \quad T^6_{ijkl} = m_i m_j m_k m_l, \quad \theta_{ij} = \delta_{ij} - m_i m_j \tag{3.7}$$

$$U^1_{ijkl} = \theta_{ij}m_k, \quad U^2_{ijk} = 2m_{(i}\theta_{j)k}, \quad U^3_{ijk} = m_i m_j m_k, \quad t^1_{ij} = m_i m_j, \quad t^2_{ij} = \theta_{ij}$$

Удобство этих базисов заключается в том, что свертка тензоров T^m по двум индексам образует замкнутую алгебру, свертка тензоров U^n по одному индексу $(U^k_{ij\alpha}, U^{tl}_{\alpha kl})$ порождает тензоры, принадлежащие базису T^m, а свертка по двум индексам $(U^{tk}_{i\alpha\beta}U^l_{\alpha\beta j})$ – базису t^r. Что касается последнего, то он является ортогональным, т.е. $t^r_{i\alpha}t^s_{\alpha j} = \delta_{rs}t^r_{ij}$ (по r не суммировать!).

Заметим, что коэффициенты разложений (3.6) следующим образом выражаются через "обычные" компоненты тензоров C, e и χ, наиболее часто встречающиеся в литературе [1, 2]:

$$k = \tfrac{1}{2}(c_{11} + c_{12}), \quad m = \tfrac{1}{2}(c_{11} - c_{12}), \quad l = c_{13}, \quad n = c_{33}, \quad \mu = c_{44} \tag{3.8}$$

$$e_1 = e_{31}, \quad e_2 = e_{15}, \quad e_3 = e_{33}, \quad \chi_1 = \chi_{33}, \quad \chi_2 = \chi_{11} = \chi_{22}$$

Ориентация гексагонального кристаллита в пространстве однозначно определяется ориентацией вектора m. При случайной ориентации кристаллитов построенные на этом векторе тензоры базисов (3.7) являются случайными. Осреднение по ориентациям тензоров C, χ и β с использованием формул

$$\langle T^1(m)\rangle = \tfrac{1}{45}(10E^1 + 21E^2), \quad \langle T^2(m)\rangle = \tfrac{2}{45}(10E^1 + 3E^2)$$

$$\langle T^3(m)\rangle = \langle T^4(m)\rangle = \tfrac{2}{45}(5E^1 - E^2), \quad \langle T^5(m)\rangle = \tfrac{1}{5}E^2 \tag{3.9}$$

$$\langle T^6(m)\rangle = \tfrac{1}{45}(5E^1 + 6E^2), \quad E^1_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{kl}, \quad E^2_{ijkl} = I_{ijkl} - \tfrac{1}{2}E^1_{ijkl}$$

$$\langle t^1_{ij}(m)\rangle = \tfrac{1}{3}\delta_{ij}, \quad \langle t^2_{ij}(m)\rangle = \tfrac{2}{3}\delta_{ij}$$

приводит к выражениям (3.1), в которых

$$k_0 = \tfrac{1}{9}(4k+4l+n), \quad \mu_0 = \tfrac{1}{15}(k+3m-2l+6\mu+n)$$

$$\chi_0 = \tfrac{1}{3}(\chi_1+2\chi_2), \quad \beta_0 = \tfrac{1}{3}(\beta_1+2\beta_2) \tag{3.10}$$

Осуществив тензорные операции, предусмотренные формулами (3.5), получим[3]

$$\overline{A} = \overline{A}_1T^2 + \overline{A}_2(T^1 - \tfrac{1}{2}T^2) + \overline{A}_3T^3 + \overline{A}_4T^4 + \overline{A}_5T^5 + \overline{A}_6T^6 \tag{3.11}$$

$$\overline{A}_1 = \frac{1}{2\Delta}(1+P_6\overline{n}+2P_3\overline{l}), \quad \overline{A}_2 = (1+2m'P_2)^{-1}, \quad \overline{A}_3 = -\frac{1}{\Delta}(2P_1\overline{l}+P_2\overline{n})$$

$$\overline{A}_4 = -\frac{1}{\Delta}(2P_3\overline{k}+P_6\overline{l}), \quad \overline{A}_5 = 2(1+\overline{\mu}P_5)^{-1}, \quad \overline{A}_6 = \frac{2}{\Delta}\left(\frac{1}{2}+2P_1\overline{k}+P_3\overline{l}\right)$$

$$\Delta = 2[(\tfrac{1}{2}+2P_1\overline{k}+P_3\overline{l})(1+P_6\overline{n}+2P_3\overline{l}) - (2P_1\overline{l}+P_3\overline{n})(2P_3\overline{k}+P_6\overline{l})]$$

$$\overline{k} = k' + p\alpha_1e_1^2, \quad \overline{l} = l' + p\alpha_1e_1e_3, \quad \overline{\mu} = \mu' + p\alpha_2e_2^2, \quad \overline{n} = n' + p\alpha_1e_3^2$$

$$\alpha_1 = (1+p\chi_1)^{-1}, \quad \alpha_2 = (1+p\chi_2^1)^{-1}, \quad p = \frac{1}{3\chi_0}, \quad k' = k-k_0-\tfrac{1}{3}\mu_0 \tag{3.12}$$

$$l' = l-k_0+\tfrac{2}{3}\mu_0, \quad \mu' = \mu-\mu_0, \quad n' = n-k_0-\tfrac{4}{3}\mu_0$$

$$\chi_1' = \chi_1-\chi_0, \quad \chi_2' = \chi_2-\chi_0$$

а величины $P_1, P_2, \ldots, P_6$ определяются выражениями

$$P_1+\frac{1}{2}P_3 = \frac{1}{9k_P}, \quad P_1-P_3 = \frac{1}{4\mu_P}, \quad P_2 = \frac{1}{2}P_5 = \frac{1}{2\mu_P}, \quad P_6 = P_1+\frac{1}{2}P_2 \tag{3.13}$$

Остальные тензоры, входящие в оператор A в (3.4), имеют вид

$$\overline{\alpha} = \overline{\alpha}_1t^1 + \overline{\alpha}_2t^2, \quad \overline{\alpha}_1 = (1+p\overline{\chi}_1)^{-1}, \quad \overline{\alpha}_2 = (1+p\overline{\chi}_2^1)^{-1}$$

$$\overline{\chi}_1 = \chi_1' + 4(2P_1A_1+P_3A_4)e_1^2 + 4(2P_1A_3+P_3A_6)e_1e_3 + (P_6A_6+2P_3A_3)e_3^2,$$

$$\overline{\chi}_2 = \chi_2' + \tfrac{1}{2}P_2e_2^2 \tag{3.14}$$

$$H = H_1U^1 + H_2U^2 + H_3U^3, \quad h^t = h_1U^{1t} + h_2U^{2t} + h_3U^{3t}$$

$$H_1 = \overline{\alpha}_1[2(2P_1A_1+P_3A_4)e_1 + (2P_1A_3+P_3A_6)e_3], \quad H_2 = \tfrac{1}{4}\overline{\alpha}_2P_5A_5e_2$$

$$H_3 = \overline{\alpha}_1[2(2P_1A_3+P_3A_6)e_1 + (P_6A_6+2P_3A_3)e_3]$$

$$h_1 = \alpha_1p(2\overline{A}_1e_1+\overline{A}_3e_3), \quad h_2 = \tfrac{1}{2}\alpha_2p\overline{A}_5e_2, \quad h_3 = \alpha_1p(2\overline{A}_3e_1+\overline{A}_6e_3)$$

где компоненты тензора A_{ijkl} $(A_1, A_2, \ldots, A_6)$ получаются из выражений для компонент тензора $\overline{A}_{ijkl}$ (3.11) после его транспонирования и замены величин $\overline{k}, \overline{l}, \overline{\mu}, \overline{n}$ на $k', l', \overline{\mu}$ и n'.

Приведем, наконец, формулы для компонентов тензоров, входящих в оператор $\mathbf{L}^A$ в (3.4):

$$C^A = k_AT^2 + 2m_A(T^1 - \tfrac{1}{2}T^2) + l_A(T^3+T^4) + 4\mu_AT^5 + n_AT^6$$

$$k_A = \frac{\overline{k}}{\Delta}\left[1+P_6\left(\overline{n}-\frac{\overline{l}^2}{\overline{k}}\right)\right], \quad m_A = m'(1+2m'P_2)^{-1}, \quad \mu_A = \frac{\overline{\mu}}{4}(1+P_5\overline{\mu})^{-1}$$

---

[3] Удобные для реализации этих расчетов таблицы "произведений" тензоров базисов (3.7) можно найти в работе: *Левин В.М.* Эффективные свойства пьезоактивных матричных композитных материалов. М., 1995. 87 с. – Деп. в ВИНИТИ № 531–В95.

$$l_A = \frac{1}{\Delta}[\bar{l} - 2P_3(\bar{k}\bar{n} - \bar{l}^2)], \quad n_A = \frac{1}{\Delta}[\bar{n} + 4P_1(\bar{k}\bar{n} - \bar{l}^2)] \tag{3.15}$$

$$e^A = e_1^A U^1 + e_2^A U^2 + e_3^A U^3, \quad e_1^A = (2A_1e_1 + A_3e_3)\overline{\alpha}_1$$

$$e_2^A = \frac{1}{2}A_5\overline{\alpha}_2 e_2, \quad e_3^A = (2A_4e_1 + A_6e_3)\overline{\alpha}_1$$

$$\chi^A = \chi_1^A t^1 + \chi_2^A t^2, \quad \chi_1^A = \overline{\chi}_1(1 + p\overline{\chi}_1)^{-1}, \quad \chi_2^A = \overline{\chi}_2(1 + p\overline{\chi}_2)^{-1}$$

Аналогичные вычисления позволяют определить и b^A:

$$b^A = \begin{Vmatrix} -\beta_{ij}^A \\ \pi_i^A \end{Vmatrix} \tag{3.16}$$

$$\beta_{ij}^A = \beta_1^A t_{ij}^1 + \beta_2^A t_{ij}^2, \quad \beta_1^A = \beta_1\overline{A}_6 + \beta_2\overline{A}_3 - \pi h_3$$

$$\beta_2^A = 2(\beta_1\overline{A}_4 + \beta_2\overline{A}_1) - \pi h_1, \quad \pi_i^A = \pi_A m_i, \quad \pi_A = \pi\overline{\alpha}_1 + \beta_1 H_3 + 2\beta_2 H_1$$

Окончательные выражения для эффективных термоэлектроупругих характеристик макроскопически изотропного агрегата гексагональных кристаллитов получаются путем осреднения приведенных выражений по множеству ориентаций кристаллографических осей зерен. Эти характеристики определяются выражениями

$$\mathbf{L}^* = \begin{Vmatrix} C^* & 0 \\ 0 & \chi^* \end{Vmatrix}, \quad b^* = \begin{Vmatrix} -\beta^* \\ 0 \end{Vmatrix} \tag{3.17}$$

$$C_{ijkl}^* = k^*\delta_{ij}\delta_{kl} + 2\mu^*(I_{ijkl} - \tfrac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}), \quad \chi_{ij}^* = \chi^*\delta_{ij}, \quad \beta_{ij}^* = \beta^*\delta_{ij}$$

$$k^* = k_0 + \frac{b_k}{B_k}, \quad \mu^* = \mu_0 + \frac{b_\mu}{B_\mu}, \quad \chi^* = \chi_0 + \frac{b_\chi}{B_\chi}, \quad \beta^* = \beta_0 + \frac{b_\beta}{B_\beta} \tag{3.18}$$

$$b_k = \tfrac{1}{9}(4k_A + 4l_A + n_A), \quad b_\mu = k_A + 3m_A - 2l_A + 6\mu_A + n_A$$

$$B_k = 4\overline{A}_1 + 2\overline{A}_1 + 2\overline{A}_4 + \overline{A}_6, \quad B_\mu = \overline{A}_1 + 3\overline{A}_2 - \overline{A}_3 - \overline{A}_4 + 6\overline{A}_5 + \overline{A}_6$$

$$b_\chi = \chi_1^A + 2\chi_2^A, \quad B_\chi = \overline{\alpha}_1 + 2\overline{\alpha}_2, \quad \beta_0 = \tfrac{1}{3}(\beta_1 + 2\beta_2), \quad b_\beta = \beta_1^A + 2\beta_2^A$$

4. Заметим, что в рамках рассматриваемого метода можно определить не только электрические и термоупругие константы, но и более тонкие характеристики внутренних электроупругих полей в пьезоактивных поликристаллах. Действительно, в силу одной из основных гипотез метода эффективного поля [3, 4] каждое зерно в поликристалле ведет себя как изолированное сферическое включение в однородной среде и в постоянных внешних полях $F_{(k)}^*(x)$ и $\theta_{(k)}(x)$, где k – "номер" кристаллита. Из решения связанной электроупругой задачи для одного включения следует соотношение (2.6), позволяющее выразить упругое и электрическое поля $F(x)$ внутри произвольного зерна через локальное внешнее поле $F^*(x)$ и температуру $\theta(x)$. Величину $F^*(x)$ в этом соотношении заменим в первом приближении ее средним значением $\langle F^*(x)\rangle$. Воспользовавшись формулой (2.16), можно следующим образом оценить упругое и электрическое поля в зерне с ориентацией ω_k:

$$F(\omega_k) = \mathbf{A}(\omega_k)\mathbf{A}^{-1}\langle F(x)\rangle + \mathbf{P}\mathbf{A}^t(\omega_k)[b^* - b(\omega_k)]\theta \tag{4.1}$$

Рассмотрим в качестве примера макроскопически изотропный агрегат гексагональных кристаллитов, находящийся в однородном температурном поле θ. Пусть, в частности, смещения и электрический потенциал на границе образца равны нулю. Тогда $< F(x) > = 0$ и внутренние электроупругие поля в кристаллите с ориентацией m определяются выражениями, которые следуют из (4.1):

$$\varepsilon_{ij} = -[D_1 t_{ij}^1(m) + D_2 t_{ij}^2(m)]\theta, \quad \frac{1}{4\pi} D_i = dm_i\theta \tag{4.2}$$

$$D_1 = \frac{2}{\Delta_0}[(\bar{k} - \bar{l} + \mu_p)(\beta^* - \beta_1) + \pi(-d_2 e_1 + d_3 e_3)(\chi_1' + 3\chi_0)^{-1}]$$

$$D_2 = \frac{1}{\Delta_0}[(\bar{n} - \bar{l} + 2\mu_p)(\beta^* - \beta_2) + \pi(d_1 e_1 - d_2 e_3)(\chi_1' + 3\chi_0)^{-1}] \tag{4.3}$$

$$d = \frac{2}{\Delta_0}[(d_1 e_1 - d_2 e_3)(\beta^* - \beta_2) + (d_1 e_3 - d_2 e_1)(\beta^* - \beta_1)] - \pi(\overline{\chi}_1 + 3\chi_0)^{-1}$$

$$d_1 = \bar{n} + k_P + 4/3\,\mu_P, \quad d_2 = \bar{l} + k_P - 2/3\,\mu_P$$

$$d_3 = \bar{k} + k_P + 1/3\,\mu_P, \quad \Delta_0 = 2(d_1 d_3 - d_2^2)$$

где величины $\bar{k}, \bar{l}, \bar{n}$ и β^* определены в (3.12) и (3.18)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 623 с.
2. *Партон В.З., Кудрявцев Б.А.* Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. М.: Наука, 1988. 472 с.
3. *Канаун С.К., Левин В.М.* Метод эффективного поля в механике композитных материалов. Петрозаводск: Изд-во ПГУ, 1993. 600 с.
4. *Kanaun S.K., Levin V.M.* Effective field method in mechanics of matrix composite materials // Advance in Mathematical Modeling of Composite Materials, World Sci. Pub. Co., 1994. P. 4–59.
5. *Willis J.R.* Variational and related methods for the overall properties of composites // Advances in Applied Mechanics. N.Y.: Acad. Press. 1981. V. 21. P. 1–78.

Петрозаводск

Поступила в редакцию
24.I.1996