



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-18-0004

Optimálny návrh mikro/nano konštrukcií pre metamateriály

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Ján Sládek, DrSc.**

Príjemca **Ústav stavebníctva a architektúry SAV, v. v. i.**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Ústav stavebníctva a architektúry SAV

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

žiadne

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

žiadne

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

- [1] J. Sládek, V. Sládek, M. Repka, E. Pan: A novel gradient theory for thermoelectric material structures. International Journal of Solids and Structures, 206 (2020) 292-303. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2020.09.023>
- [2] J. Sládek, V. Sládek, M. Hrytsyna, T. Profant: Application of the gradient theory to interface crack between two dissimilar dielectric materials, Engineering Fracture Mechanics 276 (2022) 108895. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2022.108895>
- [3] X. Tian, M. Xu, H. Zhou, Q. Li, J. Sládek, V. Sládek: Analytical studies on mode III fracture in flexoelectric solids. Journal of Applied Mechanics 89(4) (2022) 041006. <https://doi.org/10.1115/1.4053268>
- [4] T. Profant, J. Sládek, V. Sládek, M. Kotoul: Asymptotic solution for interface crack between two materials governed by dipolar gradient elasticity: Amplitude factor evaluation. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 120 (2022) 103378. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2022.103378>
- [5] J. Sládek, V. Sládek, M. Repka, S. Schmauder: Gradient theory of thermoelasticity for interface crack problems with a quasicrystal layer, International Journal of Solids and Structures, 264 (2023) 112097. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2022.112097>
- [6] V. Sládek, J. Sládek, L. Sator, Y. Li: Micro-structural effects in phononic dielectric structures, Composite Structures 309 (2023) 116548. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.116548>
- [7] T. Profant, J. Sládek, V. Sládek, M. Kotoul: Assessment of amplitude factors of asymptotic expansion at crack tip in flexoelectric solid under mode I and II loadings. International Journal of Solids and Structures, 269 (2023) 112194.

Uplatnenie výsledkov projektu

Nové poznatky získané z analyzovania pokročilých metamateriálov využívajúce flexoelektricitu majú veľkú perspektívu pre navrhovanie nových senzorov „zdravia“ konštrukcií. Flexoelektrické javy sa prejavujú hlavne v nano-rozmerných konštrukciách, kde sú veľké deformácie. Ak gradient deformácií vytvorený v dielektrickom materiáli je dostatočne veľký, nastane porušenie centrosymetrie materiálu v atomistickej škále, čím sa oddelia kladne a záporne nabitú centrá v dôsledku narušenia centrosymetrie. Teda, flexoelektrický efekt je multiškálový jav. Klasická mechanika kontinua nie je aplikovateľná pre takéto štruktúry, pretože nezohľadňuje mikroštruktúru. Vnútorne obmedzenia klasickej elasticity sú prekonané v pokročilých modeloch kontinua a nano-rozmerné štruktúry s flexoelektrickými vlastnosťami.

Naše výsledky vo flexoelektrickej analýze dielektrík umožnia lepšie monitorovať trhliny. Mikro alebo nano trhliny v dielektrikách zvyčajne vedú k veľkým pretvoreniam okolo koreňa trhliny a indukujú tam silný flexoelektrický efekt. Indukovaný flexoelektrický efekt reverzne ovplyvňuje šírenie trhlín. Pre nanoštruktúry je pomer ich povrchu k objemu veľký, a preto je potrebné zahrnúť efekt povrchovej energie v simuláciách. Je to spôsobené rozdielnym pôsobením okolia na atómy, ktoré sú blízko voľného povrchu v porovnaní s tými, čo sú v objeme materiálu. Preto je potrebné uvážiť v matematických modeloch špecifické konštitutívne vzťahy na povrchu. Vykonali sme prvý pokus uváženia povrchových efektov v gradientnej teórii pre popis flexoelektricity pre trhlinu pri mode III, kde sme odvodili asymptotické vzťahy pre polia v okolí koreňa trhliny s uvažovaním povrchových efektov. Projekt prináša nové pokročilé modely kontinua zahrňujúce veľkostný efekt. Vplyv tohoto efektu na vlastnosti kompozitu prinášajú originálne publikácie tohoto projektu.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Cieľom projektu bolo vybudovať matematický model pre analýzu piezoelektrickej odozvy v nano-rozmerných konštrukciách, aby zahrňal aj veľkostný efekt. Piezoelektrická odozva v nano-rozmerných metamateriáloch je ovplyvňovaná geometrickou a štrukturálnou konfiguráciou a tiež flexoelektricitou. Klasická mechanika kontinua nezahŕňa informácie o materiálovej mikroštruktúre. Vnútorne obmedzenia klasickej elasticity sú prekonané v navrhovaných pokročilých modeloch kontinua, ktoré dovoľujú veľmi efektívne analyzovať nano-rozmerné štruktúry aj s flexoelektrickými vlastnosťami. Pre úspešnú aplikáciu gradientnej teórie vo flexoelektricitě je potrebné určiť elastické a flexoelektrické koeficienty vyšších rádo. V tomto projekte bola použitá stratégia korelovania výsledkov mikroštruktúrneho modelovania klasickej teóriou s výsledkami gradientnej teórie s rôznymi hodnotami flexoelektrických koeficientov. Tento multiškálový a multifyzikálny prístup umožňuje určiť dĺžkovo-škálové koeficienty. Pre optimálny návrh metamateriálov je potrebné vyvinúť spoľahlivú výpočtovú metódu založenú na gradientnej teórii, kde veľkostný efekt je uvažovaný zahrnutím gradientov deformácií do konštitutívnych rovníc pre gradientný tenzor napätí a elektrickú indukciu a podobne gradientu vektora elektrickej intenzity do konštitutívnej rovnice pre napätia a kvadrupólový moment. Bezprvkové formulácie a zmiešaná metóda konečných prvkov (FEM) sa ukázali byť vhodnými pre numerické simulácie. Špeciálne povrchové konštitutívne rovnice sa uvažili v gradientnej teórii pre flexoelektricitu pri odvodení asymptotických vzťahov pre polia v okolí koreňa trhliny pri mode III. Výsledky výskumu môžu byť užitočné pri návrhu nových nano-rozmerných elektronických zariadení.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The goal of the project is to develop a size-dependent model characterizing the piezoelectric responses in nano-sized structures. The piezoelectric response in nano-sized metamaterials originates from their special geometrical or structural constellation and flexoelectricity. The classical continuum mechanics is indifferent to the material microstructure. To overcome

intrinsic limitations of classical elasticity, enriched continuum models have to be developed, which allow to analyze nano-sized structures with flexoelectric properties very effectively. For a successful application of gradient theory in flexoelectricity it is needed to determine the higher-order elastic and flexoelectric parameters. In this project, we adopt the strategy to correlate the results of microstructural modelling by classical theory and the results of strain gradient theory with various values of the flexoelectric coefficient. This multiscale and multiphysics approach is capable of determining the length-scale coefficients. For optimal design of metamaterials there are developed reliable computational methods based on gradient theory, where the size-effect is considered by including the strain gradients into the constitutive equations for the double stress tensor and electric displacements as well as the gradient of electric intensity vector into the constitutive equation for stress a quadrupole. The meshless formulations and mixed finite element method (FEM) have been developed for numerical simulations. Special surface constitutive equations are considered in the gradient theory for flexoelectricity in derivation of asymptotic expressions for fields at the crack tip vicinity under mode III. The research results may be useful for the design and application of nano-sized electronic devices.