

Статическая модель предельно поляризованной керамики

© М.Г. Минчина, О.И. Янковский

(Поступило в Редакцию 9 января 2001 г.)

Предложена статическая модель предельно поляризованной керамики (находящейся под действием продольного сжатия σ), основанная на условии полной и частичной устойчивости полярных осей \mathbf{c} с учетом их неоднородного распределения для 180° - и 90° -ных переориентаций доменов. На основе статической модели керамики вычислены пьезокоэффициент d_{33} керамики, поведение пьезокоэффициента d_{33} в зависимости от напряжения σ , когда керамика находится под действием продольного сжатия, а также относительное количество 90° - и 180° -ных доменных переключений, совершенных под действием напряжения σ .

1. Модель керамики

Рассмотрим поляризованную сегнетокерамику ($\infty * m$), в которой (однодоменные) кристаллиты расположены полярными осями \mathbf{c} вдоль тех допустимых направлений вектора спонтанной поляризации \mathbf{P}_s , что наиболее близко к направлению поляризующего поля \mathbf{E} [1]. Геометрико-статическим образом поляризованной керамикой будем считать сферу единичного радиуса, поверхность которой покрыта с разной плотностью концами полярных осей \mathbf{c} доменов, идущих от центра этой сферы. В случае предельно поляризованной керамики (пьезокерамику представим как систему N поляризованных до насыщения однодоменных кристаллитов) все полярные оси \mathbf{c} доменов оказываются распределенными в верхней части сферы ориентаций в телесном угле $2\pi(1 - \cos\theta)$ вокруг направления поля \mathbf{E} [2]. Учитывая все возможные 180° - и 90° -ные переориентации, наиболее удаленными от поля будут домены, полярные оси которых составляют с направлением поляризующего поля \mathbf{E} угол $\theta = 54^\circ 44'$ [1–4]. Условия переориентации полярных осей на 180° и 90° были получены из условия полной и частичной устойчивости осей \mathbf{c} на направление поляризующего поля \mathbf{E} с учетом геометрической связи углов γ_c , γ_a и ψ [2]

$$\cos \gamma_a = \sin \gamma_c \cos \psi. \quad (1)$$

Для областей полной устойчивости полярных осей \mathbf{c} будет выполняться условие

$$\cos \gamma_c - \cos \gamma_a \geq 0. \quad (2)$$

Подставив условие (1) в (2)

$$\cos \gamma_c - \sin \gamma_c \cos \psi \geq 0 \quad (3)$$

и анализируя неравенство (3), получим, что зона полной устойчивости осей \mathbf{c} будет находиться в области

$$0 \leq \gamma_c \leq 45^\circ, \quad (4)$$

оси \mathbf{a} всех кристаллов с данными γ_c в исходном состоянии равномерно распределены по кругу, ближние к полю \mathbf{E} оси \mathbf{a} сосредоточены в четверти этого круга ($\psi = -45^\circ$ до $\psi = 45^\circ$). В зоне полной устойчивости

осей \mathbf{c} оси \mathbf{a} наиболее близки к направлению поляризующего поля \mathbf{E} ($\psi = 0$). Зона частичной устойчивости осей \mathbf{c} для случая предельно поляризованной керамики будем называть областью, в которой при выполнении (2) оси \mathbf{a} кристаллитов наиболее удалены от направления поляризующего поля \mathbf{E} ($\psi = 45^\circ$). Зона частичной устойчивости полярных осей \mathbf{c} расположена в интервале углов

$$45^\circ \leq \gamma_c \leq 54^\circ 44' \quad (5)$$

с плотностью осей \mathbf{c} в этой зоне (после всех возможных переключений [5])

$$\rho_c'' = (3N/2\pi)((1 - |\arccos(\operatorname{ctg} \gamma_c)|)/\pi). \quad (6)$$

Пьезокоэффициент d_{33}^{theor} был вычислен с помощью интегрирования по сфере ориентации с учетом плотности распределения полярных осей \mathbf{c} и усреднения по всем кристаллитам (доменам). Формула, по которой был вычислен пьезокоэффициент d_{33}^{theor} (для керамики, например, дискообразной формы), имеет вид

$$\begin{aligned} d_{33}^{\text{theor}} = & 1/N \int_{\theta=0^\circ}^{45^\circ} \int_{\varphi=0^\circ}^{2\pi} d_{33}(\theta) 3N/2\pi \sin \theta d\theta d\varphi \\ & + 1/N \int_{\theta=45^\circ}^{54^\circ 44'} \int_{\varphi=0^\circ}^{2\pi} d_{33}(\theta) (3N/2\pi) \\ & \times (1 - |\arccos(\operatorname{ctg} \gamma_c)|/\pi) \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (7) \end{aligned}$$

где

$$d_{33}(\theta) = (d_{15} + d_{31}) \cos \theta \sin^2 \theta + d_{33} \cos^3 \theta, \quad (8)$$

где θ — угол между осью Z и Z' .

2. Модель керамики, находящейся под действием продольного сжатия σ

Рассмотрим пьезокерамическую пластину в главной кристаллофизической системе координат XYZ (вектор поляризации \mathbf{P} совпадает по направлению с осью OZ).

Приложим к пластине одноосное механическое напряжение σ . Полярные оси \mathbf{c} имеют преимущественную ориентацию и располагаются в верхней части сферы ориентаций в телесном угле θ . Распределение полярных осей \mathbf{c} в зонах полной и частичной устойчивости, учитывая все возможные 180° - и 90° -ные переориентации, является неоднородным. Условие полной устойчивости полярных осей \mathbf{c} в керамике, к которой приложено внешнее напряжение σ_{33} , имеет вид

$$\cos \gamma_c - \cos \gamma_a \geq \sigma_c / \sigma, \quad (9)$$

где γ_c — угол между направлением поля \mathbf{E} и осью \mathbf{c} домена; γ_a — угол между осью \mathbf{a} , ближайшей к полю, и полем \mathbf{E} ; σ_c — коэцитивное напряжение; σ — внешнее напряжение и

$$0 \leq \gamma_c \leq (\arccos(\sigma_c / \sigma)(\sqrt{2}/2)) - 45^\circ. \quad (10)$$

Неравенство (10) соответствует угловым границам зоны полной устойчивости полярных осей \mathbf{c} , когда к керамике приложено продольное напряжение σ . Условие частичной устойчивости полярных осей \mathbf{c} , когда оси \mathbf{a} наиболее удалены от направления поляризирующего поля \mathbf{E} ($\varphi = 45^\circ$), имеет вид

$$\cos \gamma_c - (\sqrt{2}/2) \sin \gamma_c \geq \sigma_c / \sigma. \quad (11)$$

Уравнение (11) можно привести к виду

$$45^\circ \leq \gamma_c \leq 54.733^\circ - \arcsin((\sigma_c / \sigma)(\sqrt{2}/\sqrt{3})). \quad (12)$$

Величина Δd_{33}^T , на которую изменился пьезокоэффициент d_{33} под действием продольного напряжения σ , была вычислена с помощью интегрирования по сфере ориентаций полярных осей \mathbf{c} и усреднения пьезоэлектрических констант d'_{33} , d'_{31} и d'_{15} по всем кристаллитам по формуле

$$\begin{aligned} \Delta d_{33}^T = & 1/N \int_{\varphi=0^\circ}^{2\pi} \int_{\theta=0^\circ}^{\arccos((\sqrt{2}/2)(\sigma_c/\sigma) \cdot 45^\circ)} d_{33}(\theta)(3N/2\pi) \sin \theta d\theta d\varphi \\ & + 1/N \int_{\varphi=0^\circ}^{2\pi} \int_{\theta=0^\circ}^{54^\circ 44' - \arcsin(\sqrt{2}/\sqrt{3})(\sigma_c/\sigma)} d_{33}(\theta)(3N/2\pi) \\ & \times \{1 - 4 \arccos[\operatorname{ctg} \theta + \sigma_c / (\sigma \sin \theta)] / \pi\} \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (13) \end{aligned}$$

Разделив вклады 90° - и 180° -ных доменных переключений (по формуле (8), например, для зоны полной устойчивости осей \mathbf{c} при 180° -ном переключении плотность осей $\mathbf{c}^{\rho 180^\circ} = N/2\pi$, а при 90° -ном переключении $\rho^{90^\circ} = N/\pi$), определили относительное количество 90° - и 180° -ных доменных переключений, совершенных под действием напряжения σ (для данного σ , в %), — A^{90° , A^{180° [6]. Пьезокоэффициент d_3^T керамической

пластины, находящейся под действием напряжения σ , в окончательном виде вычислен по формуле

$$d_{33}^T = d_{33} - \Delta d_{33}^T, \quad (14)$$

где d_{33} — пьезокоэффициент, полученный по формуле (8).

Выводы

1. Предложена статическая модель предельно поляризованной керамики, основанная на условии полной и частичной устойчивости полярных осей \mathbf{c} с учетом их неоднородного распределения для 180° - и 90° -ных переориентаций доменов.

2. Рассмотрена статическая модель для предельно поляризованной керамики, находящейся под действием продольного сжатия σ .

3. На основе статической модели керамики вычислены пьезокоэффициент d_{33} керамики, поведение пьезокоэффициента d_{33} в зависимости от напряжения σ , когда керамика находится под действием продольного сжатия, а также относительное количество 90° - и 180° -ных доменных переключений, совершенных под действием напряжения σ .

Список литературы

- [1] Яффе Б., Кук У., Яффе Г. Пьезоэлектрическая керамика. М., Мир, 1974. 400 с.
- [2] Поляризация пьезокерамики / Под ред. Е.Г. Фесенко. Изд-во РГУ, 1962. 300 с.
- [3] Богданов С.В., Вул Б.М., Тимонин А.М. // Изв. АН СССР. Сер. физич. 1957. Т. XXI. № 3. С. 374.
- [4] Шувалов Л.А. // Кристаллография. 1957. Т. 2. № 1. С. 119.
- [5] Минчина М.Г., Дудкевич В.П. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 7. С. 75.
- [6] Минчина М.Г., Янковский О.И. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 6. С. 46.