

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА
В ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КЕРАМИКЕ

В [1—4] рассматривается феноменологическая модель пьезоэлектрической керамики, в которой электромеханический гистерезис связан с перестройкой доменной структуры при сильных механических и электрических воздействиях. Для построения модели используются экспериментальные данные об изменении свойств пьезокерамики при поляризации, термодинамические же соотношения во внимание не принимаются. Влияние доменной структуры учитывается через вектор N , определяемый эффективным числом диполей в направлении поляризации, которое считается неизменным, из-за чего модель не может быть использована для описания многомерного управления пьезоэффектом [5]. Недавно [6, 7] была опубликована существенно более сложная термодинамическая модель нелинейного поведения пьезоэлектрической керамики, в которой для описания гистерезиса наряду с вектором N используется и необратимая часть вектора поляризации, подчиняющаяся законам пластического течения подобно остаточной намагниченности в модели магнитоупругого гистерезиса [8]. В данной работе построена достаточно простая феноменологическая модель многомерного гистерезиса в пьезоэлектрической керамике на основе термодинамической теории сплошной среды с внутренними параметрами [9].

1. Вывод уравнений состояния и кинетического уравнения. Пусть в рамках гипотезы малых деформаций состояние материальной точки пьезокерамической сплошной среды можно параметризовать с помощью внешних параметров — тензора напряжений σ_{ij} , вектора электрической напряженности E_i и внутреннего параметра — вектора ω , описывающего упорядоченность доменной структуры. Внутренний параметр недоступен непосредственному измерению и корректность модели устанавливается из анализа ее макроповедения. Предположим, что скорость изменения ω зависит только от текущего состояния частицы сплошной среды [9]. Пусть в деполяризованном состоянии $\omega = 0$, а $|\omega| = 1$ соответствует полностью поляризованным состояниям, если, конечно, керамика не обладает текстурой. При необходимости можно учесть зависимость предельного состояния частицы от текстуры материала и от внешних параметров. Для улучшения количественного описания поведения пьезокерамики может потребоваться введение внутренних параметров, описывающих различные типы переориентации доменов [2, 3], эффект самопроизвольной разориентации доменов [1, 2, 4], динамику дипольных моментов [3] и так далее. Однако в данной работе анализируются возможности простейшего варианта модели.

Положив в основу вывода уравнений состояния среды соотношение $\rho G^* = -e_{ij}\sigma_{ij} + DE_i - W$ для функции Гиббса $G = G(\sigma_{ij}, E_i, \omega)$ и предположение о независимости внешних параметров, получим определяющие уравнения

$$e_{ij} = -\rho \frac{\partial G}{\partial \sigma_{ij}}, \quad D_i = -\rho \frac{\partial G}{\partial E_i} \quad (1.1)$$

и выражение

$$W = -\rho \left(\frac{\partial G}{\partial \omega_i} \right) \omega_i \quad (1.2)$$

для мощности, рассеиваемой в связи с необратимой доменной перестройкой. Кинетическое уравнение для ω нельзя строить как в [1—3] только на основе эмпирических соображений, выбор должен быть ограничен термодинамическим условием $W \geq 0$. Если считать W квадратичной формой от термодинамических потоков, то по принципу Онзагера из (1.2) будет следовать кинетическое уравнение

$$\dot{\omega}_i = -\rho \Omega_{ij} \frac{\partial G}{\partial \omega_j} \quad (1.3)$$

с положительно определенной матрицей коэффициентов $\Omega_{ij} = \Omega_{ij}(\sigma_{ij}, E_i, \omega_j)$.

Если принять функцию Гиббса G квадратичной по внешним параметрам

$$\rho G = -e_{ij}^{(0)} \sigma_{ij} - D_i^{(0)} E_i - 1/2 s_{ijkl} \sigma_{ij} \sigma_{kl} - d_{ijk} E_i \sigma_{jk} - 1/2 \varepsilon_{ij}^{\sigma} E_i E_j \quad (1.4)$$

то из (1.1) получатся следующие уравнения состояния пьезокерамики

$$e_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl} + d_{kij} E_k + e_{ij}^{(0)}, \quad D_i = d_{ikl} \sigma_{kl} + \varepsilon_{ik}^{\sigma} E_k + D_i^{(0)} \quad (1.5)$$

Эти уравнения являются линейными, если не происходит перестройка доменной структуры пьезокерамики. Результаты же экспериментов по определению свойств пьезокерамики *PZT 65/35* в деполяризованном и в полностью поляризованном состоянии указывают на зависимость от внутреннего состояния ω материала податливостей s_{ijkl} пьезомодулей d_{ijk} , диэлектрических проницаемостей $\varepsilon_{ik}^{\sigma}$, а также дополнительных деформаций $e_{ij}^{(0)}$ и дополнительных электрических смещений $D_i^{(0)}$, возникающих при доменной перестройке [4]. Обобщая эти результаты, предположим, что каждая частица среды в ходе поляризации становится анизотропной и обладает осевой симметрией $\infty \cdot m$, ось которой определяется направлением вектора ω в этой частице. В таком случае зависимость перечисленных материальных констант от ω можно описать следующим образом [10]:

$$s_{ijkl} = s_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + s_2 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + s_3 (\delta_{ik} \omega_j \omega_l + \delta_{il} \omega_j \omega_k + \delta_{jk} \omega_l \omega_i + \delta_{jl} \omega_k \omega_i) + s_4 (\delta_{ij} \omega_k \omega_l + \delta_{kl} \omega_i \omega_j) + s_5 \omega_j \omega_k \omega_l \quad (1.6)$$

$$d_{ijk} = d_1 \delta_{ik} \omega_j + d_2 (\delta_{ik} \omega_l + \delta_{il} \omega_k) + d_3 \omega_j \omega_k \omega_l$$

$$\varepsilon_{ij}^{\sigma} = (\varepsilon + \varepsilon_1^{\sigma} \omega_k \omega_k) \delta_{ij} + \varepsilon_2^{\sigma} \omega_j \omega_i$$

$$e_{ij}^{(0)} = e_1^{(0)} \omega_k \omega_k \delta_{ij} + e_2^{(0)} \omega_j \omega_i, \quad D_i^{(0)} = D^{(0)} \omega_i$$

Коэффициенты в формулах (1.6), вообще говоря, могут зависеть от $|\omega|$, но для описания приведенных в [4] данных об изменении свойств пьезокерамики при поляризации эти коэффициенты можно считать постоянными. Отметим, что все константы в (1.6) могут быть рассчитаны по результатам измерений свойств пьезокерамического образца в деполяризованном состоянии и после одноосной поляризации [4]. В [4, 7] приняты линейные зависимости упругих модулей и диэлектрических проницаемостей от компонент вектора N , следствием чего является зависимость коэффициентов от знака N_i . Соотношения (1.6) свободны от такого недостатка.

Структура кинетического уравнения (1.3) также подчиняется условию осевой симметрии, поэтому можно принять выражение $\Omega_{ij} = \Omega_1 \delta_{ij} + \Omega_2 \omega_j \omega_i$, с неотрицательными Ω_1 и Ω_2 , зависящими только от инвариантов параметров

i	$s_i \cdot 10^{12}$	$d_i \cdot 10^{11}$	$\varepsilon_i^{\sigma} \cdot 10^9$	$e_i^{(0)} \cdot 10^3$
1	-2,624	-7,782	-0,109	-0,860
2	5,847	10,781	-1,531	2,717
3	-0,580	3,371		
4	-0,958			
5	7,081			

состояния. Окончательный вид кинетического уравнения определяется из (1.3), (1.4) и (1.6):

$$\begin{aligned} \omega_i^* = & \Omega_{ij} (2e_1^{(0)}\sigma_{kk}\omega_j + 2e_2^{(0)}\sigma_{kj}\omega_k + D^{(0)}E_j + 4s_3\sigma_{kj}\sigma_{kk}\omega_l + 2s_4\sigma_{kk}\sigma_{jl}\omega_l + \\ & + 2s_5\sigma_{jk}\sigma_{lm}\omega_k\omega_m + 2d_1\sigma_{kk}E_j + 2d_2E_k\sigma_{kj} + d_3E_j\sigma_{kk}\omega_l + \\ & + 2d_3E_k\sigma_{jl}\omega_k\omega_l + \varepsilon_1^{\sigma}E_kE_k\omega_j + \varepsilon_2^{\sigma}E_jE_k\omega_k) \end{aligned} \quad (1.7)$$

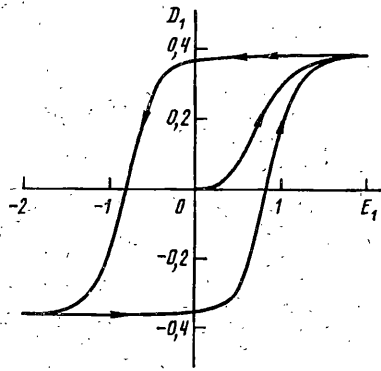
Термодинамический подход, таким образом, указывает на тесную взаимосвязь структур определяющих уравнений (1.5), (1.6) и кинетического уравнения (1.7). После конкретизации вида Ω_1 и Ω_2 на основе эмпирических соображений мы получаем возможность количественного описания электроуправляемого пьезоэффекта при многомерных воздействиях.

2. Электромеханический гистерезис в механически свободной пьезокерамике. Рассмотрим случай квазистатического нагружения электрическим полем, в ходе которого происходит однородная деформация образца, но механические напряжения не возникают, т. е. $\sigma_{ij} = 0$. Примем для простоты тензор Ω_{ij} шаровым $\Omega_{ij} = \Omega\delta_{ij}$ и, кроме того, при $|E| \geq E_c - \Omega = A/D^{(0)}t_p E_c$, а при $|E| < E_c - \Omega = A \exp(1 - E_c/|E|)/D^{(0)}t_p |E|$.

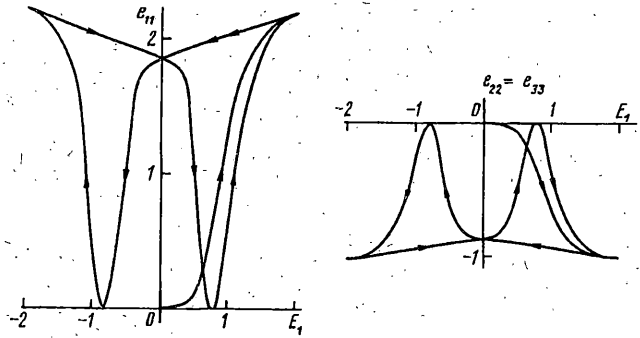
При построении этих зависимостей учтены следующие эмпирические соображения. Во-первых, принято считать [11], что в электрических полях интенсивность которых меньше критической E_c , поляризация происходит в основном за счет зарождения доменов и поэтому зависимость времени переполаризации от $|E|$ носит экспоненциальный характер. В полях же большей интенсивности доминирует прорастание доменов и время переполаризации обратно пропорционально $|E|$. Во-вторых, при приближении к состоянию насыщения $|\vec{\omega}| = 1$ скорость изменения $|\omega|$ снижается из-за уменьшения числа еще не переключившихся доменов [1—3].

Последнее обстоятельство учитывается введением при $|\vec{\omega}| \cdot > 0$ множителя $A = 1 - |\vec{\omega}| \cos \gamma$, где γ — угол между векторами $\vec{\omega}$ и $\vec{\omega}^*$. Этот множитель показывает относительное число доменов, которые еще могут переключиться в направлении роста $\vec{\omega}$. При убывании $|\vec{\omega}|$ будем считать, что $A = 1$.

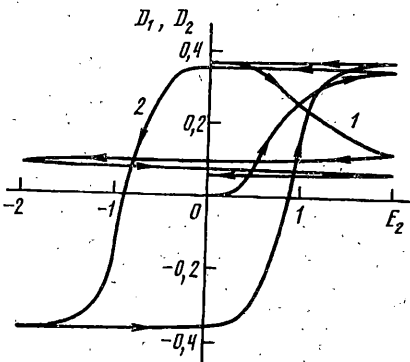
При расчете гистерезисных кривых были использованы материальные константы, вычисленные по формулам (1.6) для пьезокерамики PZT 65/35 [4]. В таблице приведены значения s_i — в м²/Н, d_i — в м/В, ε_i^{σ} — в Ф/м и безразмерные $e_i^{(0)}$, кроме того, $\varepsilon = 6,673 \cdot 10^{-9}$ Ф/м и $D^{(0)} = 0,365$ К/м². Предполагалось так же, как и в экспериментах [1, 2], что электрическое поле $E = \{E(t), 0, 0\}$ меняется в течение 150 с по кусочно-линейному закону между значениями 0, $+2E_c$, $-2E_c$, $+2E_c$, 0. Приняты значения $E_c = 10^6$ В/м и $t_p = 0,5$ с, при которых постоянное поле $E = E_c$ практически полностью переполаризует образец приблизительно за 20 с. Сопоставление расчетных кривых диэлектрического (D_j , К/м² — E_j , 10^6 В/м) гистерезиса (фиг.1) и электромеханического (e_{11} , 10^{-3} — E_j , 10^6 В/м) гистерезиса (фиг. 2) с экспериментальными [1, 2] дает качественное подтверждение использованной модели. Количественные же расхождения можно



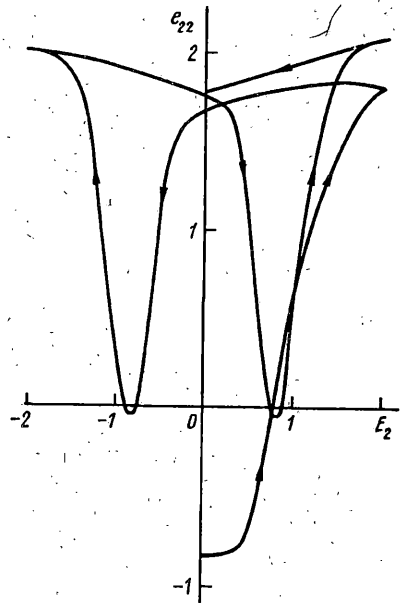
Фиг. 1



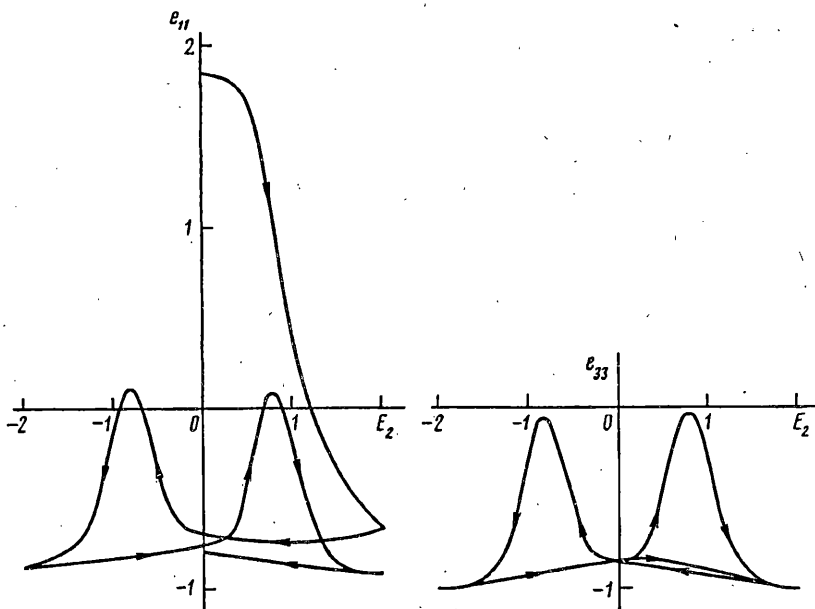
Фиг. 2



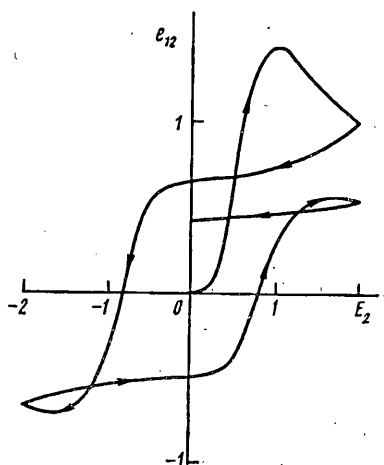
Фиг. 3



Фиг. 4



Фиг. 5



Фиг. 6

отнести за счет различия материальных констант [4] и [1, 2], а также за счет того, что в предлагаемой простейшей модели не учитываются такие эффекты, как самопроизвольная разориентация части доменов [1, 2].

Для иллюстрации возможностей данной модели в описании пространственной переполяризации (пьезокерамики) приведем расчетные гистерезисные кривые, полученные при последовательном приложении вдоль осей 1, 2 и 3 одноосного электрического поля, меняющегося по упомянутому кусочно-линейному закону. На втором этапе нагружения $E = \{0, E(t), 0\}$ продольная компонента электрического смещения $D_2(E_2)$ опишет петлю диэлектрического гистерезиса (кривая 2, фиг 3), близкую к петле $D_1(E_1)$ (фиг. 1), а поперечная компонента $D_1(E_2)$ (кривая 1, фиг. 3) будет монотонно убывать. Продольная деформация e_{22} (фиг. 4) и поперечные деформации e_{11} и e_{33} (фиг. 5) опишут петли типа бабочки [1,

2], кроме того, должна наблюдаться и петля гистерезиса сдвиговой деформации e_{12} (фиг. 6). На третьем этапе нагружения $E = \{0, 0, E(t)\}$ картина гистерезиса еще более усложнится и ее из-за громоздкости графиков приводить не будем. Отметим только, что петля диэлектрического гистерезиса $D_3(E_3)$ близка к петлям $D_1(E_1)$ (фиг. 1) и $D_2(E_2)$ (фиг. 3). Поведение поперечной компоненты электрического смещения $D_2(E_3)$ почти полностью повторяет поведение $D_1(E_2)$ на предыдущем этапе нагружения (фиг. 3) и, наконец, компонента $D_1(E_3)$ продолжает быстро монотонно убывать. Петли электромеханического гистерезиса $e_{11}(E_3)$, $e_{22}(E_3)$, $e_{33}(E_3)$, $e_{23}(E_3)$ с точностью порядка 1—2% повторяют соответственно кривые $e_{33}(E_2)$, $e_{11}(E_2)$ (фиг. 5), $e_{22}(E_2)$ (фиг. 4) и $e_{12}(E_2)$ (фиг. 6). Кривая $e_{13}(E_3)$ ведет себя аналогично $e_{12}(E_2)$, но значения e_{13} примерно в 6 раз меньше соответствующих значений e_{12} . Сдвиговая деформация e_{12} на третьем этапе гистерезиса не испытывает, а монотонно убывает почти до нуля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Chen P. J., Montgomery S. T.* A macroscopic theory for the existence of the hysteresis and butterfly loops in ferroelectricity // *Ferroelectrics*, 1980. V. 23. No. 3—4. P. 199—207.
2. *Chen P. J., Tucker T. J.* One dimensional polar mechanical and dielectric response of the ferroelectric ceramic PZT 65/35 due to domain switching // *Intern. J. Eng. Sci.* 1981. V. 19. No. 1. P. 147—158.
3. *Chen P. J.* Three dimensional dynamic electromechanical constitutive relations for ferroelectric materials // *Intern. J. Solid. Structure*. 1980. V. 16. No. 12. P. 1059—1067.
4. *Chen P. J.* Three dimensional constitutive relations for ferroelectric materials in the presence of quasistatic domain switching // *Acta mech.* 1983. V. 48. No. 1—2. P. 31—42.
5. *Плужников В. М., Семенов В. С.* Пьезокерамические твердые схемы. М.: Энергия, 1971. 168 с.
6. *Bassiouny E., Ghaleb A. F., Maugin G. A.* Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects. 1. Basic equations // *Intern. J. Eng. Sci.* 1988. V. 26. No. 12. P. 1279—1295.
7. *Bassiouny E., Ghaleb A. F., Maugin G. A.* Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects. 2. Poling of ceramics // *Intern. J. Eng. Sci.* 1988. V. 26. No. 12. P. 1297—1306.
8. *Черный Л. Т.* Построение моделей магнитоупругих сплошных сред с учетом магнитного гистерезиса и пластических деформаций // *Науч. тр. Ин-та механики МГУ*, 1974. № 31. С. 100—119.
9. *Петров Н., Бранков Й.* Современные проблемы термодинамики. М.: Мир, 1986. 285 с.
10. *Лохин В. В., Седов Л. И.* Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов // *ПММ*. 1963. Т. 27. Вып. 3. С. 393—417.
11. *Желудев И. С.* Физика кристаллических диэлектриков. М.: Наука, 1968. 463 с.

Москва

Поступила в редакцию
7.VIII.1990