

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

AUTOREFERÁT DISERTAČNÍ PRÁCE

**Aplikace metody konečných prvků
v problémech piezoelektrických
a feroelektrických struktur**

2004

Josef Novák

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: P 2612 Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 3901V025 Přírodovědné inženýrství

Aplikace metody konečných prvků v problémech piezoelektrických a feroelektrických struktur

Ing. Josef Novák

Školitel: Doc. Dr. Ing. Jiří Maryška, CSc.

Rozsah práce a příloh:

Počet stran textu: 78
Počet příloh: 5 stran + CD
Počet obrázků: 44
Počet tabulek: 10

Datum: 29. 10. 2004

Anotace

Disertační práce se zabývá aplikací metody konečných prvků v modelování vybraných problémů piezoelektrických a feroelektrických struktur. Obsahuje fyzikální popis piezoelektrik a feroelektrik, matematický popis modelovaných dějů, odvození slabého řešení problému. Je ukázáno testování úlohy na základních úlohách a aplikace modelu. Model je aplikován na výpočet elektrických a elastických polí v okolí 90^0 doménové stěny v tenkém filmu feroelektrika a na analýzu mechanických poměrů v piezoelektrickém měniči po jeho polarizaci. Hlavním přínosem je počítačová implementace modelu, jeho testování a aplikace.

Abstract

The aim of the thesis is the application of the finite element method in modelling of the problems of piezoelectric and ferroelectric structures. It includes physical description of piezoelectric and ferroelectric materials, mathematical description of modelled phenomenons and derivation of weak formulation of the problem. It deals with testing of the model on simple examples and application of the model. Model is applied in modelling of spatial distributions of electric and elastic fields in ferroelectric thin film with two domains separated by a 90^0 domain wall and in analysis of mechanical properties in piezoelectric transducer after its polarisation. The main results are computer implementation of the model, its testing and application.

Obsah

1	Úvod	5
2	Fyzikální vlastnosti krystalů	7
2.1	Dielektrické vlastnosti	7
2.2	Elastické vlastnosti	7
2.3	Piezoelektrické vlastnosti	8
2.4	Piezoelektrické stavové rovnice	8
3	Matematická formulace úlohy	8
3.1	Matematicko-fyzikální popis elektrického a elastického pole	9
3.2	Slabé řešení	9
4	Testování	9
4.1	Testování piezoelektrické části modelu	10
5	Aplikace modelu pro výpočet elektrických a elastických polí na doménovém rozhraní feroelektrika	11
5.1	Zadání úlohy	11
5.2	Výsledky a jejich diskuse	12
6	Aplikace modelu při analýze poměrů v piezoelektrickém měniči při jeho polarizaci	14
6.1	Zadání úlohy	15
6.2	Výsledky a jejich diskuse	15
6.3	Analýza elastických polí	16
6.4	Zadání úlohy	17
6.5	Výsledky a jejich diskuse	17
7	Závěr	19

1 Úvod

Výzkum vlastností piezoelektrických prvků a jejich aplikace má na Technické univerzitě v Liberci dlouholetou tradici, která je spojena především se jménem prof. Jiřího Zelenky. O dosahovaných výsledcích svědčí i úspěšnost při získávání prostředků na financování výzkumu, z nejvýznamnějších jmenujme MŠMT VS 96006 (Fousek, Nosek), MSM 242200002 (Nosek).

Vzhledem k výjimečným vlastnostem feroelektrických a piezoelektrických látek roste zájem o jejich využití v reálných aplikacích a stává se stále aktuálnější další výzkum jejich vlastností. Z aplikací můžeme jmenovat například využití v oblasti paměťových médií, kdy při zvyšování kapacity velkou roli hraje jejich fyzická velikost, piezoelektrické měniče z piezoelektrických keramik užívané v řadě mechatronických systémů nebo laditelné obvodové prvky.

Vlastnosti paměťových médií z tenkých feroelektrických vrstev jsou z velké části limitovány chováním domén a doménových stěn, které tvoří vlastní paměťové buňky. Podstatným vlivem je rozložení elektrických a elastických polí, které na tyto struktury působí.

Praktické nasazení piezoelektrických měničů je omezeno technologickými možnostmi jejich výroby. Při polarizaci měničů, která je důležitá pro jejich funkci, může vlivem změn v strukturní mřížce docházet ke vzniku mechanických defektů.

Analýza všech uvedených jevů za použití prostředků současné výpočetní techniky a numerických metod je velmi efektivním nástrojem ke zlepšení parametrů piezoelektrických a feroelektrických prvků. Oblasti zkoumání těchto vlastností za pomoci modelů byla věnována pozornost již před několika desítkami let, jak je patrné např. z [1]. V této práci je publikován model popisující rozložení elektrického pole v okolí devadesátistupňové doménové stěny. Principem modelu je nahrazení domén a jejich rozhraní sítí vodičů s vodivostí rozdílnou ve dvou na sebe kolmých směrech.

Podobný model je uveden i v [2], kde je ale již na základě energetických úvah popsán princip přepolarizace domén. V práci [3] je uveden model pohybu doménových stěn v PZT keramikách ve slabém elektrickém poli. Tento je založen na popisu jevu obyčejnou diferenciální rovnicí - pohybovou rovnicí. Jsou též samozřejmě publikovány práce, viz [4], ve kterých je feroelektrikum popsáno pomocí svého náhradního elektrického obvodu složeného z diskrétních R, L, C prvků.

S rozvojem možností výpočetní techniky byly v posledních letech publikovány modely, které již využívají metodu konečných diferencí [5] či metodu konečných prvků [6], [7]. V těchto pracech je ale pro výpočet užito komerčního MKP systému ANSYS, který má implementovány základní moduly pro práci s piezoelektrickými strukturami. Tento software má velmi příjemné uživatelské rozhraní, neumožňuje ale přímo zasahovat do implementovaného programového kódu a upravovat ho pro speciální účely.

Přínosem a cílem disertační práce je implementace vlastního programového kódu

primární formulace MKP a jeho aplikace při výzkumu vlastností feroelektrických struktur a optimalizaci výrobního procesu piezoelektrických měničů. Konkrétně se jedná o prostorová rozložení elektrických a mechanických polí v okolí doménových rozhraní a minimalizaci elastických napětí při polarizaci piezoelektrických měničů.

Obsah disertační práce je koncipován s ohledem na hlavní přínosy a cíle práce, kterým je věnována největší pozornost, do následujících kapitol.

Nejprve jsou ve druhé kapitole popsány základní fyzikální vlastnosti krystalů, které užijeme při návrhu modelu. Popsány jsou především vlastnosti, kterými se projevují piezoelektrické a feroelektrické materiály. Podrobně popíšeme dielektrické, elastické a piezoelektrické vlastnosti.

Třetí kapitola je zaměřena na matematickou formulaci řešených a odvození jejich slabého řešení. V první části kapitoly je popsána matematicko-fyzikální podstata modelovaných dějů. Poté je formulováno slabé řešení problému definovaném v první části. Závěrečná část kapitoly je věnována aproximaci řešení metodou konečných prvků.

Čtvrtá kapitola obsahuje stručný popis implementace navrženého modelu. Popsány jsou především formáty vstupních a výstupních souborů a hlavní datové struktury.

Úkolem páté kapitoly je otestování všech částí modelu na jednoduchých úlohách tak, aby byla zaručena relevantnost výsledků, které model poskytuje. Vzhledem k primární MKP formulaci, která je užita k sestavení modelu budou testovány především primární veličiny (elektrický potenciál, mechanická posunutí).

Disertační práce je uplatněna ve dvou z mnoha aplikací, které lze postihnout obdobným matematicko-fyzikálním popisem. Jedna je z oblasti teoretického materiálového výzkumu feroelektrických tenkých filmů s jednou nebo více doménovými stěnami. Druhá aplikace je tématem z průmyslové praxe a je zaměřena na optimalizaci technologických parametrů výroby piezoelektrických měničů. Obě témata úzce navazují na institucionální výzkum Fakulty mechatroniky a mezioborových inženýrských studií.

Šestá kapitola se zabývá výpočtem elektrických a elastických polí na doménovém rozhraní feroelektrik. V důsledku jejich dielektrických, piezoelektrických a elastických vlastností patří mezi v současné době nejvíce zkoumané materiály. Zatížení vzorků materiálu obsahujících různé doménové stavy elektrickým polem či elastickým napětím vede k rozložení elektrických a elastických polí, která vykazují značnou prostorovou nehomogenitu. Je nanejvýš vhodné, uvažovat zásadní roli prostorového rozložení elektrických a elastických polí na jejich materiálové vlastnosti.

Sedmá kapitola je zaměřena na analýzu poměrů v piezoelektrickém měniči při jeho polarizaci. V důsledku nehomogenního rozložení elektrického pole v piezoelektrických měničích dochází při jejich polarizaci vlivem změny strukturní mřížky materiálu ke vzniku elastických deformací a napětí. Tato elastická napětí jsou zodpovědná za mechanické defekty v měniči.

Eliminace nejvýraznějších nehomogenit v rozložení elektrického pole povede k rovnoměrnější polarizaci a tím i k rovnoměrnějšímu rozložení elastických napětí, k menšímu riziku vzniku strukturních defektů.

2 Fyzikální vlastnosti krystalů

Obsahem této kapitoly v disertační práci je popis základních fyzikálních vlastností, které jsou užity při návrhu modelu. Je čerpáno z publikací [8], [9], [10], [11], kde lze nalézt další podrobnosti.

2.1 Dielektrické vlastnosti

Působením vnějšího elektrického pole na dielektrikum dochází k elektrické indukci. Jsou definovány vztahy mezi vektorem elektrického pole a vektorem elektrické indukce a mezi vektorem elektrického pole a elektrickým potenciálem, které jsou uvedeny v části 2.2 práce.

Elektrická polarizace vyvolaná vnějším elektrickým polem \mathbf{E} je definovaná jako rozdíl vektoru elektrické indukce a vektoru vnějšího elektrického pole.

Působí-li na polarizovatelný krystal elektrické pole \mathbf{E}_a , je v krystalu indukováno vnitřní, tzv. depolarizační pole \mathbf{E}_i . Výsledné elektrické pole je dáno součtem těchto elektrických polí.

U paramagnetických a diamagnetických látek, u kterých dielektrická susceptibilita je nízká, je vliv krystalu na elektrické pole nízký. Toto však neplatí pro feromagnetické látky, kde dielektrická susceptibilita je vysoká. Elektrická pole \mathbf{E}_a i \mathbf{E}_i jsou často stejného řádu. Velikost \mathbf{E}_i je závislé na tvaru krystalu.

Platnost výše uvedených závislostí je zaručena pro krystaly, které se chovají jako ideální izolátor. Tedy pro krystaly, pro které jejich elektrický odpor je $R = \infty$. Reálně dochází vlivem příměsí v každém materiálu k pohybu elektrického náboje, který způsobuje alespoň minimální vodivost.

2.2 Elastické vlastnosti

Napjatost tělesa v okolí bodu je tedy popsána devíti složkami T_{ij} . Tyto složky označujeme jako složky tenzoru napětí \mathbf{T} , např. [11].

Ze zákona zachování momentů sil, viz [11] plyne symetrie tenzoru napětí, platí tedy $T_{ij} = T_{ji}$ $i, j = 1, 2, 3$. Má tedy šest nezávislých složek.

Vlivem napětí dojde k posunutí elementárních částí, které vyjadřujeme vektorem posunutí \mathbf{u} . Složky vektoru posunutí vyjadřují posunutí ve směrech os x_1, x_2, x_3 ortogonálního systému.

Tato posunutí vyvolají deformaci, která je reprezentována symetrickým tenzorem deformace \mathbf{S} . Má obecně také šest nezávislých složek, stejně jako tenzor napětí.

V případě obecné napjatosti je napětí a deformace v každém bodě tělesa charakterizována tenzorem napětí a tenzorem deformace. Lineární teorie pružnosti předpokládá, že každá složka tenzoru napětí je lineární funkcí všech složek tenzoru defor-

mace. Můžeme tedy psát, že $T_{ij} = c_{ijkl}S_{kl}$. Koeficienty c_{ijkl} nazýváme elastickými moduly. Jsou složkami tenzoru čtvrtého řádu, který má obecně 81 prvků. Vzhledem k symetrii tenzoru napětí i deformace a z energetických úvah, viz [11] plyne, že tenzor elastických modulů je symetrický. Celkem je tedy nejvýše 21 nezávislých elastických modulů. Se vzrůstající symetrií krystalové mřížky počet nezávislých složek tenzoru elastických modulů dále klesá, viz [8].

2.3 Piezoelektrické vlastnosti

U piezoelektrických látek je elektrická polarizace vyvolána nejen působením elektrického pole, ale též působením elastického napětí, resp. v důsledku deformace. Tento jev nazýváme přímým piezoelektrickým jevem.

Obdobně lze vyjádřit i tzv. převrácený piezoelektrický jev, který vyvolává elastické napětí resp. deformaci v důsledku působení elektrického pole na piezoelektrický materiál

2.4 Piezoelektrické stavové rovnice

Jak již bylo uvedeno výše, u piezoelektrických látek lze elektrickou polarizaci vyvolat nejen působením elektrického pole, ale též působením elastického napětí resp. v důsledku deformace. Vzájemný vztah mezi těmito dvěma silovými poli lze vyjádřit takzvanými piezoelektrickými stavovými rovnicemi. Při odvození těchto vztahů se vychází např. z vnitřní energie, jak je ukázáno v [8], či z jiného termodynamického potenciálu.

Budeme uvažovat lineární případ, tedy že koeficienty vystupující v těchto rovnicích jsou nezávislé na velikosti nezávisle proměnných a budeme uvažovat pouze izotermické a adiabatické děje. Potom se piezoelektrické stavové rovnice redukují na čtyři možné dvojice, kde rovnice ve dvojici popisují vždy přímý a převrácený piezoelektrický jev.

Piezoelektrické stavové rovnice budeme dále využívat při formulaci úlohy. Budeme však muset respektovat všechna omezení, která limitují platnost lineárních piezoelektrických stavových rovnic. Přesto jsou však pro řadu aplikací, ke kterým je model určen, lineární stavové rovnice vyhovující.

3 Matematická formulace úlohy

Tato kapitola práce je věnována matematicko-fyzikálním popisu řešených úloh a odvození jejich slabého řešení. V první části kapitoly je shrnut matematicko-fyzikální popis modelovaných dějů. V druhé části kapitoly je formulováno slabé řešení problému definovaném v první části. Závěrečná část kapitoly je věnována aproximaci řešení metodou konečných prvků.

3.1 Matematicko-fyzikální popis elektrického a elastického pole

Chování elektrického pole v obecném anizotropním dielektriku popisují Maxwellovy rovnice, např. [10]. Předpokládáme, že hranice řešené oblasti je rozdělena na dvě části na kterých jsou zadány okrajové podmínky. Na části hranice jsou definovány Dirichletovy okrajové podmínky a na části hranice jsou definovány Neumannovy okrajové podmínky.

Vlastnosti elastického tělesa jsou popsány Newtonovým zákonem zachování sil, např. [10]. Na části hranice jsou definovány Dirichletovy okrajové podmínky a jsou značeny indexem, na části hranice jsou definovány Neumannovy okrajové podmínky.

3.2 Slabé řešení

V práci je v tomto odstavci je zformulováno slabé řešení úlohy definované v předchozí části. Řešení podobné úlohy je podrobně matematicky formulováno např. v [15] a není cílem disertační práce jeho odvození, proto jsou zde zavedeny pouze základní pojmy nutné k formulaci slabého řešení, nejsou zde diskutovány vlastnosti samotného slabého řešení. Otázky jednoznačnosti řešení a konvergence aproximací lze nalézt např. v [13].

Nejprve jsou zavedeny prostory funkcí, kterých je dále využíváno. Při zavedení značení vycházíme i pojmů vycházíme z [13]. Jsou to především prostory funkcí $C_0^{(\infty)}(\bar{\Omega})$, $L_2(\Omega)$, $W_2^{(1)}$.

Dále jsou odvozeny následující integrální rovnosti pro rovnice popisující elektrické a elastické chování, které zapsány v operátorovém tvaru jsou

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) + \mathbf{D}(\varphi, \mathbf{w}) &= \mathbf{r}(\mathbf{w}), \\ \widetilde{\mathbf{D}}(u, \mathbf{w}) + \mathbf{E}(\varphi, \phi) &= \mathbf{q}(\phi), \end{aligned} \tag{1}$$

kde \mathbf{A} je operátor elastické části, \mathbf{D} operátor piezoelektrické části, \mathbf{E} operátor elektrické části. \mathbf{r} a \mathbf{q} jsou funkcionály charakterizující slabé splnění Neumannových okrajových podmínek.

Stavovou matici problému lze zapsat ve tvaru

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{D}^T \\ \mathbf{D} & \mathbf{E} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \Phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

kde submatice \mathbf{K} vyjadřuje elastické vlastnosti modelovaného systému, \mathbf{P} piezoelektrické vlastnosti, \mathbf{E} vlastnosti dielektrické. Vektory \mathbf{R} a \mathbf{Q} reprezentují Neumannovy okrajové podmínky.

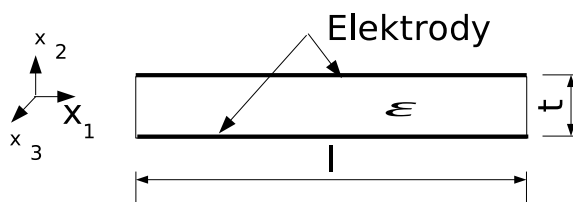
4 Testování

V této kapitole jsou ověřeny všechny části modelu na základních úlohách tak, aby byla zaručena relevantnost výsledků, které model poskytuje. V autoreferátu je ukázána pouze část testů piezoelektrické části modelu.

4.1 Testování piezoelektrické části modelu

Zásadní význam pro celý model má testování piezoelektrické části. Je testována nejen samotná implementace modulu reprezentující piezoelektrické vlastnosti struktury, ale piezoelektrická část též zprostředkovává přenos elektrické energie na mechanickou a opačně. Je tedy testována i správná interakce mechanické a elektrické části a jejich implementace v globální matici soustavy.

Parametry jednotlivých testů jsou shrnuty v tab. 5.1 v příslušné kapitole práce. Testy budou prováděny na vzorku, jehož schéma je na obrázku 1.



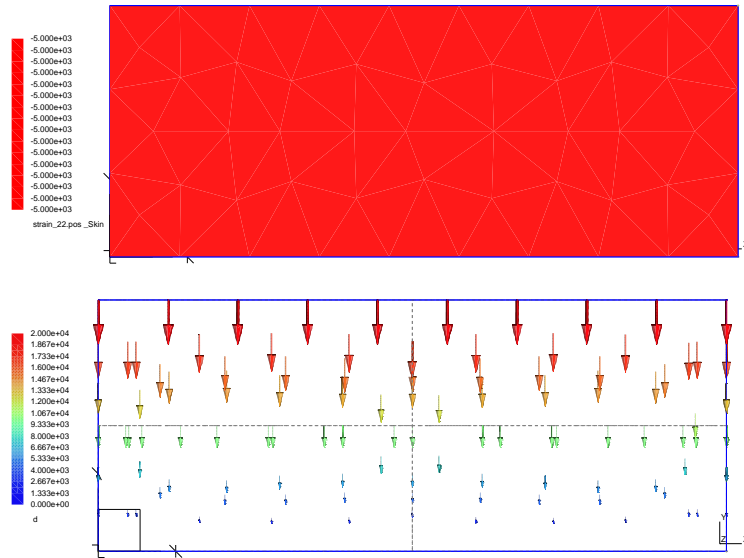
Obrázek 1: Schéma první úlohy pro testování piezoelektrické části.

Pro první test můžeme vzhledem ke geometrii vzorku a materiálovým parametřům napsat analytické řešení. Vzhledem k charakteru řešené úlohy - kombinaci elektrických a elastických polí - je nutné zadat jak elastické tak elektrické okrajové podmínky. Vzorek je mechanicky upevněn na dolní elektrodě - je zadána Dirichletova okrajová podmínka $u_D = 0$. Na ostatních stěnách je zadána homogenní Neumannova okrajová podmínka $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = 0$. V elektrické části jsou elektrody reprezentovány Dirichletovými okrajovými podmínkami - na horní elektrodě $\varphi_{D1} = \text{const}_1$, na dolní elektrodě $\varphi_{D2} = \text{const}_2$. Na ostatních stěnách je zadána homogenní Neumannova podmínka $D_N = 0$.

Prostorové rozložení složek vypočtených veličin můžeme vidět na obr. 2. Zobrazené výsledky modelu se plně shodují s analytickým řešením.

Druhý test se od prvního liší obsazením prvku e_{211} v matici piezoelektrických modulů. Tento prvek zprostředkovává přenos složky E_2 elektrického pole do mechanického působení ve směru osy x_1 . Mechanické okrajové podmínky jsou: $u_D = 0$ na levé straně vzorku, ostatní stěny $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = 0$. Elektrické okrajové podmínky jsou stejné jako v případě prvního testu. Opět můžeme vyjádřit analytické řešení, které je uvedeno v kapitole 5.3 práce.

Vypočtené veličiny jsou na obr. 3. Výsledky se opět shodují s analytickým řešením.



Obrázek 2: Rozložení složek S_{22} (nahore) a u_2 (dole) pro první piezoelektrický test.

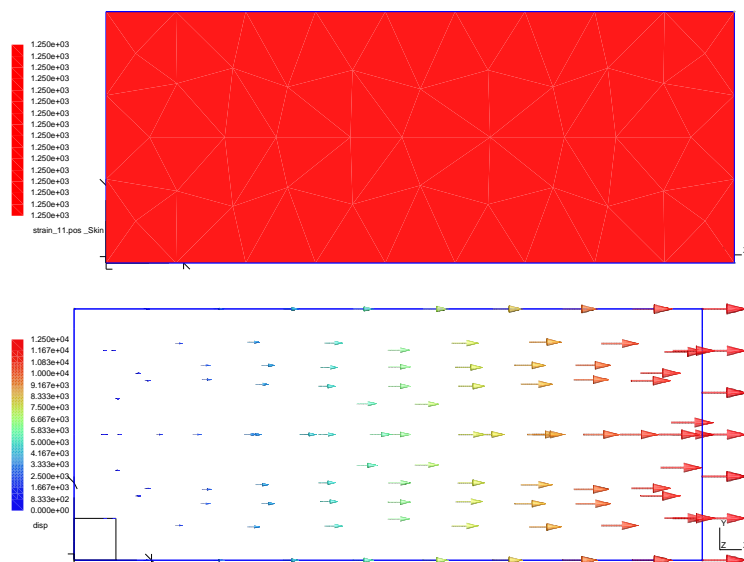
5 Aplikace modelu pro výpočet elektrických a elastických polí na doménovém rozhraní feroelektrika

Makroskopické vlastnosti feroelektrických a feroelastických materiálů hrají důležitou roli v jejich aplikacích. V důsledku jejich dielektrických, piezoelektrických a elastických vlastností patří mezi v současné době nejvíce zkoumané materiály. Zatížení vzorků materiálu obsahujících různé doménové stavy elektrickým polem či elastickým napětím vede k rozložení elektrických a elastických polí, která vykazují značnou prostorovou nehomogenitu. Je nanejvýš vhodné uvažovat zásadní roli prostorového rozložení elektrických a elastických polí na jejich materiálové vlastnosti.

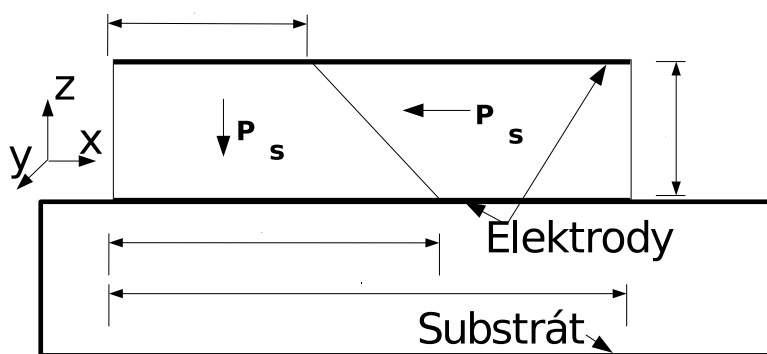
5.1 Zadání úlohy

Model je aplikován pro výpočet rozložení elektrických a mechanických veličin v okolí 90° doménové stěny. Schéma modelu je na obr. 4. Na obrázku je znázorněn řez vzorkem. Symbol P_s se šipkou značí směr spontánní polarizace. Jedná se o jednotlivý případ, který se běžně vyskytuje v multidoménových strukturách, 90° doménovou stěnu v tzv. "tail to head" uspořádání spontánní polarizace. Podobný případ je popsán i v literatuře, např. [5], je ale řešen metodou konečných diferencí, nikoliv metodou konečných prvků.

Jak je patrné z obrázku, feroelektrický film je upevněn na tuhém substrátu. Na elektrody, které jsou umístěny na protilehlých stranách vzorku je přivedeno elektrické napětí. Materiál je $BaTiO_3$. Důležité parametry vzorku, naznačené na obr. 4 a materiálové vlastnosti jsou uvedeny v tabulce 6.1 v disertační práci. Materiálové parametry byly převzaty z publikace [18].



Obrázek 3: Rozložení složek S_{11} (nahore) a u_1 (dole) pro první piezoelektrický test.



Obrázek 4: Schéma zadání úlohy.

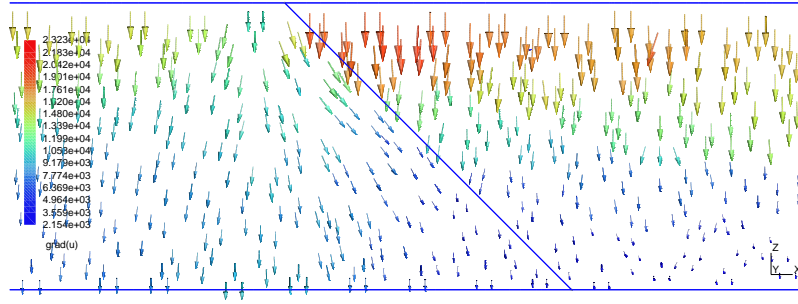
Úkolem je zjistit rozložení elektrického pole, mechanických posunutí, elastických napětí a deformací v řezu, který je specifikován schématem na obr. 4.

5.2 Výsledky a jejich diskuse

Úvodem této části se zaměříme na výsledky rozložení elektrických veličin v okolí doménového rozhraní. Na obr. 5 je znázorněno prostorové rozložení vektoru elektrického pole. Je zobrazen pouze detail v okolí doménové stěny, v okrajových částech vzorku je elektrické pole již homogenní a tedy již méně zajímavé z hlediska jevů, který zkoumáme.

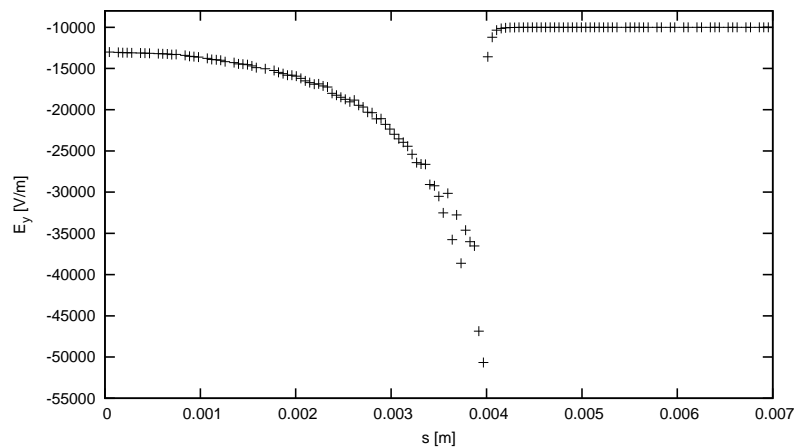
Z grafických výsledků je patrné, že výrazné nehomogenity elektrického pole jsou především v místech styku domén s elektrodou. Zajímavé je též rozložení elektrického pole podél celého doménového rozhraní, kde je výrazná složka elektrického pole kolmá k elektrickému poli působícímu na vzorek.

Z obrázku, kde je znázorněn vektor elektrického pole získáváme přehled o oblas-



Obrázek 5: Prostorové rozložení vektoru elektrického pole v okolí 90° doménové stěny.

tech, kde je jeho rozložení z hlediska vlastností struktury nejzajímavější. Nyní těmto oblastem věnujme pozornost. Jedná se především o oblasti s extrémními hodnotami vektoru elektrického pole, tedy oblastem v okolí doménového rozhraní a elektrod. V grafu na obrázku 6 jsou znázorněny složky E_y elektrického pole v okolí horní. Doménové rozhraní probíhá v těchto grafech mezi délkovými souřadnicemi 0,003m - 0,004m.

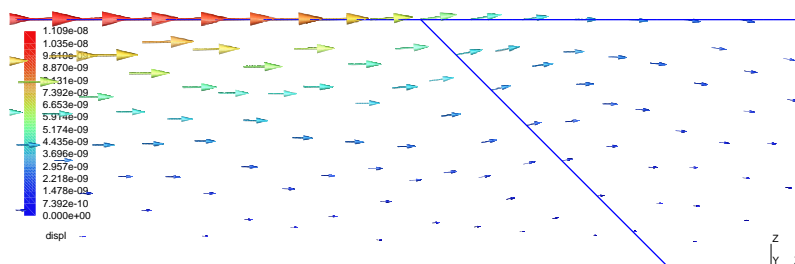


Obrázek 6: Rozložení složek E_y podél horní elektrody v okolí doménové stěny. Doménová stěna je mezi délkovými souřadnicemi s 0,003m - 0,004m.

V grafu názorně vidíme oblasti, kde je překročena velikost koercitivního elektrického pole E_c . Důsledkem překročení koercitivního elektrického pole je 180° změna směru spontánní polarizace feroelektrika. Pokud uvažíme přepolarizaci v oblastech s polem $E_y > E_c$, bude na doménové stěně generován elektrický náboj, který vyvolá dodatečné elektrické pole působící na vzorek. Pokud přepolarizaci uvažíme, model ztrácí vypovídací schopnost, protože náboje na stěnách neuvažujeme.

Budeme tedy dále uvažovat, že ke změně polarizace nedojde. Potom můžeme v důsledku sil, které elektrické pole vyvolává očekávat deformaci doménové stěny. Tento předpoklad bude diskutován dále, kde se budeme věnovat prostorovému rozložení mechanických veličin. Uvedené výsledky a závěry jsou publikovány v [28], [29].

Dále ukážeme výsledky rozložení mechanických veličin. Na obr. 7 jsou znázorněny vektory posunutí.



Obrázek 7: Prostorové rozložení vektoru posunutí v okolí 90° doménové stěny.

Vzhledem k zadání okrajových podmínek - nulové posuny zadané na dolní elektrodě - dochází k výraznějším posunům pouze v oblasti horní elektrody. Významný gradient posunutí na rozhraní domén u rozhraní elektrod může mít důsledek v deformaci doménové stěny. Tato hypotéza je v disertační práci dále sledována u rozložení dalších mechanických veličin.

Na základě prezentovaných výsledků můžeme však tvrdit, že rozložení elektrických a mechanických polí má významné důsledky na makroskopické vlastnosti ferroelektrických tenkých filmů. Velmi diskutabilní je tedy ustředování vlastností podle průměrných hodnot polí, která se v uvedených strukturách vyskytují pouze v nezanedbatelné vzdálenosti od doménového rozhraní a nejsou tedy z hlediska aplikačního zajímavá.

6 Aplikace modelu při analýze poměrů v piezoelektrickém měniči při jeho polarizaci

Piezoelektrické měniče jsou důležitými součástkami moderních elektrických a elektronických zařízení. Vyrábějí se z piezoelektrických keramik. Přesto, že je materiál měniče piezoelektrický, každé zrno materiálu je po vyrobení měniče polarizováno jiným směrem. Proto na měniči nelze pozorovat makroskopické piezoelektrické vlastnosti. Piezoelektrické vlastnosti získají měniče polarizací, při které dojde k jednotné orientaci zrn keramiky a tím i ke vzniku makroskopicky pozorovatelných piezoelektrických vlastností měniče.

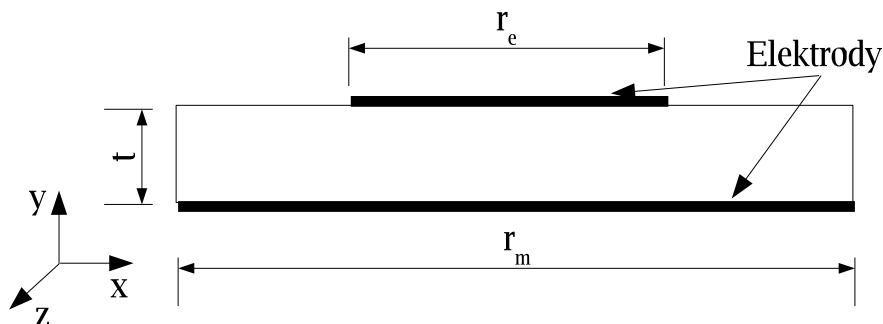
V důsledku nehomogenního rozložení elektrického pole v piezoelektrických měničích dochází při jejich polarizaci vlivem změny strukturní mřížky materiálu ke vzniku elastických deformací a napětí. Tato elastická napětí jsou vedou k mechanickým defektům v měniči.

Eliminace nejvýraznějších nehomogenit v rozložení elektrického pole povede k rovnoměrnější polarizaci a tím i k rovnoměrnějšímu rozložení elastických napětí, k menšímu riziku vzniku strukturních defektů. Jedná se především o potlačení složek elektrického pole v nežádoucích směrech polarizace měniče.

Analýza rozložení elektrického pole v měničích při jeho polarizaci je prvním nutným krokem k modelu, který bude poskytovat údaje o elastických poměrech v měničích.

6.1 Zadání úlohy

Úkolem je analyzovat rozložení elektrického pole v piezoelektrickém měničích, jehož dolní elektroda pokrývá celou jeho podstavu, průměr horní elektrody je však menší než průměr měniče. Řez měničím je na obr. 8.



Obrázek 8: Řez analyzovaným měničím. Znázorněny jsou nejdůležitější rozměry a umístění elektrod.

Horní elektroda je umístěna symetricky k ose souměrnosti měniče. Významné rozměry parametry měniče a procesu jeho polarizace jsou uvedeny v práci v tab. 7.1.

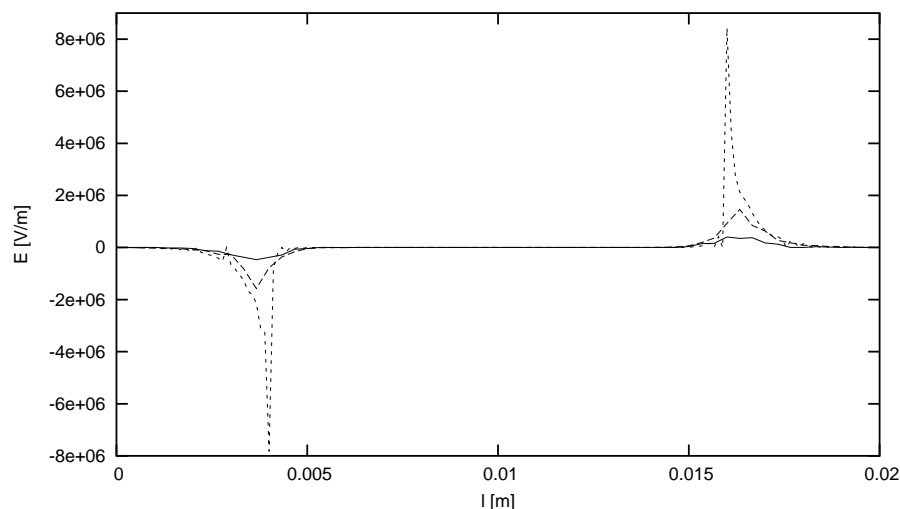
Před započítáním polarizace má vzhledem k náhodné polarizaci jednotlivých zrn materiálu měnič téměř izotropní vlastnosti. Ty se polarizací změny na vlastnosti anizotropní. My budeme v našem modelu pro zjednodušení uvažovat vlastnosti izotropní i v průběhu polarizace. Proto má tenzor permitivity všechny diagonální složky shodné.

6.2 Výsledky a jejich diskuse

V grafu na obr. 9 je znázorněna složka E_x pole v řezech vedených podél dolní elektrody, v polovině tloušťky měniče a podél horního okraje měniče.

Vzhledem k tomu, že elektrické pole je na každém konečném prvku počítáno v těžišti, nelze (vzhledem k tomu, že prvky jsou čtyřstěny), zobrazit pole přímo na elektrodách či okrajích měniče. Zobrazené elektrické pole v okolí dolní elektrody je zobrazeno ve vzdálenosti $0,1t$ od dolní elektrody, u horního okraje ve vzdálenosti $0,03t$ od horního okraje. Uvedené platí i pro graf na obrázku 10, kde je zobrazena E_y složka pole.

Z grafů je patrné, že u horního okraje v okolí hrany horní elektrody bude pravděpodobně docházet k polarizaci ve vodorovném směru, protože složka E_x má vyšší amplitudu než složka E_y . Zároveň je dodržena podmínka velikosti pole vyššího než E_c . K polarizaci ve směru působení aplikovaného pole, ve směru svislém dojde v celé oblasti pod horní elektrodou a v úzkém, cca 1mm okolí.



Obrázek 9: Rozložení složky E_x elektrického pole. Plná čára podél dolní elektrody, tečkovaná v polovině tloušťky, dvojitě tečkovaná podél horního okraje měniče.

Pro lepší názornost jsou oblasti polarizace v jednotlivých směrech znázorněny na obrázcích 11 a 12, kde jsou zobrazeny složky elektrického pole pouze v oblastech, kde překračují $E_c > 1 \cdot 10^6 \text{ V/m}$.

Z prezentovaných výsledků lze vyvodit závěr, že k největším mechanickým napětím a deformacím bude docházet v prstenci, který bude mít průměr cca 12-15 mm v celé tloušťce měniče. Napětí jsou způsobena jak polarizací ve vodorovném směru, tak nízkou polarizací ve svislém směru mimo oblast ležící pod horní elektrodou.

Tato napětí lze dle mého názoru přiblížit k působení tlaku tekutiny na stěnu tlakové nádoby ve tvaru válce. I důsledky tohoto působení budou ekvivalentní. Dojde pravděpodobně k roztržení měniče, které je schématicky znázorněno na obr. 13.

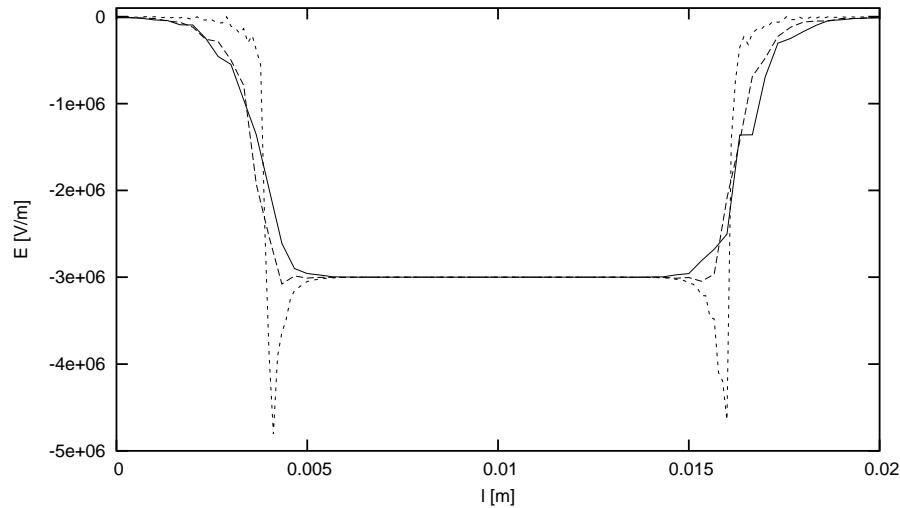
Jde však o pouhý odhad důsledků nehomogenity elektrického pole. K podrobnější a přesnější analýze je nutné model doplnit o část, která bude popisovat mechanické vlastnosti uvažované struktury v důsledku působení elektrického pole.

6.3 Analýza elastických polí

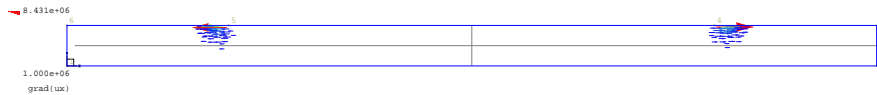
Jak již bylo uvedeno v předchozí části, při polarizaci piezoelektrického měniče dochází vlivem změny polarizace ke vzniku elastických napětí. Tato elastická napětí vznikají jako důsledek změny směru spontánní deformace, která přímo souvisí se změnou směru spontánní polarizace, viz např. [25].

Změna polarizace, resp. spontánní deformace, je přímo ovlivněna elektrickým polem, které na materiál působí. Čím vyšším elektrickým polem na materiál působíme, tím více jeho zrn se přepolarizuje do směru působícího elektrického pole. V tím větším počtu zrn dojde ke změně směru spontánní polarizace a bude indukováno větší elastické napětí.

Tento jev svými důsledky připomíná jev piezoelektrický, tedy že na základě změny elektrické polarizace dojde ke změně elastického napětí. Vliv tohoto jevu na



Obrázek 10: Rozložení složky E_y elektrického pole. Plná čára podél dolní elektrody, tečkovaná v polovině tloušťky, dvojitě tečkovaná podél horního okraje měniče.



Obrázek 11: E_x složka pole v oblastech kde překračuje hodnotu E_c .

elastická napětí v materiálu je však o několik řádů vyšší, než u jevu piezoelektrického, jak je ukázáno např. v [26].

Uvedených faktů, tedy ekvivalence s jevem piezoelektrickým a kvantitativní převahy nad jevem piezoelektrickým, využijeme při konstrukci modelu, který bude popisovat rozložení elastických napětí v závislosti na polarizačním elektrickém poli.

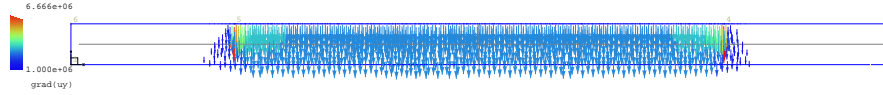
6.4 Zadání úlohy

Úkolem je vyšetřit rozložení mechanických napětí a deformací v piezoelektrickém měniči vyrobeném z PZT keramiky. Měnič má před započítím samotné polarizace téměř izotropní vlastnosti. My se tohoto konstatování přidržíme a budeme uvažovat materiál měniče za izotropní a nebudeme uvažovat změny jeho vlastností v průběhu polarizace.

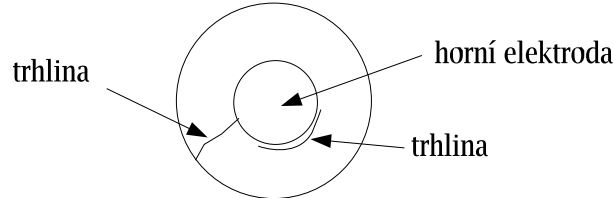
Při procesu polarizace nedochází k jednorázové změně spontánní polarizace v celém objemu materiálu. Procento zpolarizovaného materiálu je úměrné velikosti polarizačního pole, jak je uvedeno v [24].

6.5 Výsledky a jejich diskuse

Prvním výsledkem, který budeme diskutovat je rozložení posunutí v měniči, viz obr. 14.



Obrázek 12: E_y složka pole v oblastech kde překračuje hodnotu E_c .



Obrázek 13: Schématické naznačení míst, ve kterých může dojít k mechanickým defektům v měničích.

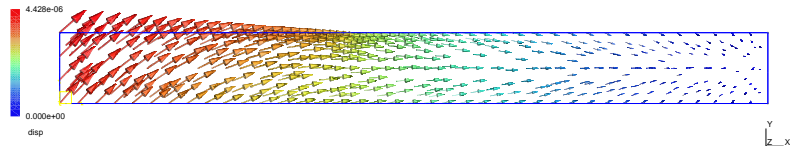
V okolí uchycení měniče jsou posunutí zcela zřejmě nulová. V oblasti, která je mezi oběma elektrodami, tedy v oblasti, kde je vytvořeno homogenní elektrické pole, jsou posunutí rovnoměrná. V této oblasti dochází k rovnoměrné polarizaci materiálu ve svislém směru, proto nelze výrazné nehomogenity v poli posunutí očekávat. Je zřejmé, že v okolí hrany horní elektrody dojde v důsledku významné složky E_x elektrického pole k ohybu měniče. V krajní části, kde je elektrické pole prakticky nulové k výrazným změnám posunutí nedochází.

Dalšími výsledky jsou prostorová rozložení složek T_{11}, T_{12}, T_{22} tenzoru napětí, viz obr. 15.

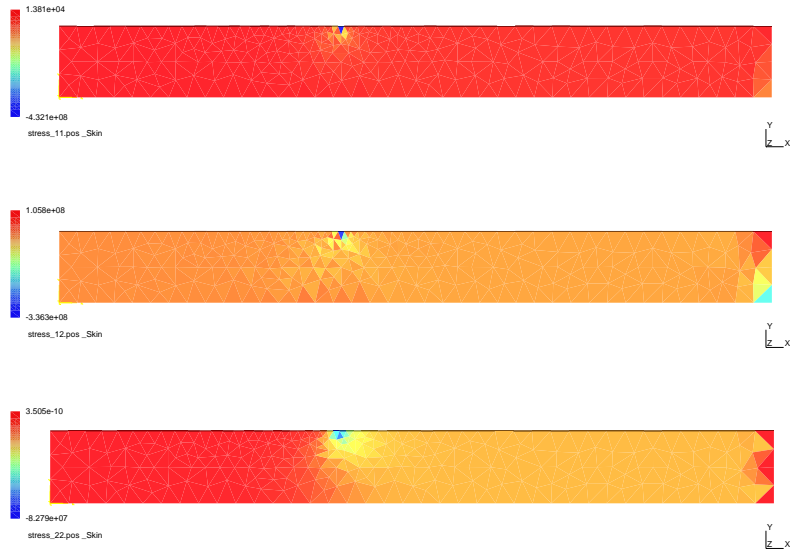
Jako první si povšimněme skutečnosti, že složka T_{12} je řádově menší než složky T_{11}, T_{22} . To je logickým důsledkem zavedení předpokladu, že elektrické pole nebude indukovat smyková napětí. Existence smykových napětí a deformací je pouze důsledkem vazby hlavních směrů napětí a deformací se smykovými dané tenzorem elastických modulů.

Již díky znalosti rozložení vektoru posunutí jsme mohli odhadnout, že k největším deformacím a napětím dojde v okolí hrany horní elektrody. Toto místo je kritické a ke strukturálním defektům bude docházet pravděpodobně právě v okolí hrany horní elektrody.

Na základě získaných výsledků můžeme provést návrh optimalizace umístění elektrod za účelem eliminace napětí, která způsobují praskání měničů při jejich výrobě. Kritériem by tedy byla minimalizace sumy napětí přes celou oblast měniče. Tento úkol ale již přesahuje rámec této práce a proto ho nebudeme v tuto chvíli diskutovat. Přesto však již prezentované výsledky jsou jistým vodítkem k návrhu nového konstrukčního uspořádání měniče.



Obrázek 14: Rozložení posunutí v měniči.



Obrázek 15: Prostorové rozložení složek T_{11} , T_{12} , T_{22} tenzoru napětí.

7 Závěr

Disertační práce představuje výsledky výzkumu, jehož hlavními přínosy jsou především implementace kódu primární formulace úlohy metody konečných prvků a jeho testování na základních úlohách a aplikace na vybrané problémy piezoelektrických a feroelektrických struktur.

Přínosem disertační práce je vytvoření funkčního prostředí pro analýzu elektrických a elastických polí v piezoelektrických a feroelektrických strukturách. Tento je založen na primární formulaci metody konečných prvků a implementován v jazyce C. Dalším přínosem je použití tohoto nástroje ve dvou reálných konkrétních aplikacích.

Tyto aplikace ukazují široké možnosti použití modelu, které jsou demonstrovány výpočtem elektrických a elastických polí na doménovém rozhraní feroelektrika a analýzou poměrů v piezoelektrickém měniči při jeho polarizaci.

První aplikace je z oblasti teoretického materiálového výzkumu tenkých vrstev feroelektrik. Výsledky mají i praktické dopady, např. v oblasti konstrukce nových typů paměťových médií. V disertační práci je poukázáno na významnou nehomogenitu elastických a elektrických polí v okolí devadesátistupňové doménové stěny.

Tento jev ovlivňuje makroskopické vlastnosti takových struktur. Lze tedy vyslovit domněnku, že je velmi diskutabilní homogenizace vlastností podle průměrných

hodnot polí, která se v uvedených strukturách vyskytují pouze v nezanedbatelné vzdálenosti od doménového rozhraní a nejsou tedy z hlediska aplikačního zajímavá. Výsledky uvedené v disertační práci byly publikovány např. v [28], [29].

V budoucnu by model mohl být rozšířen pro řešení multidoménových struktur a měl by vhodně doplňovat experimentální výzkum.

Druhá aplikace modelu je zaměřena do oblasti průmyslové výroby piezoelektrických měničů. Dotýká se problému mechanických defektů v měniči, které vznikají v průběhu polarizace. Tyto jsou způsobeny nehomogenním rozložením polarizačního elektrického pole a tím nerovnoměrné polarizace materiálu.

Na konkrétním piezoelektrickém měniči jsou analyzována elektrická a elastická pole a vymezeny oblasti, ve kterých může docházet k mechanickým defektům při polarizaci měniče. Uvedené výsledky se shodují s praktickými zkušenostmi při výrobě piezoelektrických měničů tohoto typu.

Práce též otevřela řadu možných směrů dalšího výzkumu a vývoje modelovacího nástroje. Jedná se především o možnosti upřesnění modelu doplněním jednak nelineárních závislostí mezi veličinami vystupujícími v modelu a tím rozšířit možnosti nasazení tohoto prostředku a dále i napojením na modely, které budou sledovat další přidružené stavy jako je například teplotní pole. To jsou však úkoly, které je třeba řešit vzhledem k jejich rozsahu ve větším kolektivu a tedy přesahují rámec disertační práce. Autorovy publikace [30], [31] ukazují řešení tematiky příbuzné disertační práci.

Pro tyto modely zahrnující nelinearity, respektive neustálené procesy, bude nutné propojit řešení stavových soustav v iteračním procesu. V těchto případech volání externího řešiče může vést k časovému zhroucení výpočtů. Nejinak tomu je i v případě tvarových optimalizací, které matematicky charakterizují geometrické nelinearity a vedou tedy na obdobné numerické potíže, jako nelinearity fyzikální.

Model může být dále rozšířen o nadstavbové moduly, které budou optimalizovat návrh piezoelektrického měniče tak, aby nedocházelo ke strukturním defektům a přitom aby zůstaly zachovány jeho provozní parametry. Jedná se především o optimalizaci tvaru a umístění elektrod.

Dalšími pracemi, které budou na předkládanou disertační práci bezprostředně navazovat, bude srovnání modelu prezentovaného v této práci s modelem na bázi smíšené hybridní formulace metody konečných prvků uvedeným v disertační práci Ing. Jiřiny Královcové.

Každý z modelů má své výhody a nevýhody a jejich vhodnou kombinací lze dosáhnout na řešení úloh, které nejsou samy o sobě dosažitelné pouze jedním typem modelu.

Reference

- [1] G.L. LINK, *Motion of c Domain Centers in BaTiO₃*, J. Appl. Phys. 32 (1961) 2566.a

- [2] M. OMURA, H. ADACHI, Y. ISHIBASHI, *Simulation of Polarization Reversals by a Two-Dimensional Lattice Model*, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 31, pp. 3238-3240, September 1992.
- [3] V.N. NESTEROV, A.V. SHILNIKOV, *The Computer Analyses of Dynamics of Domain Boundaries in Ferroelectrics - Ferroelastics*, Ferroelectrics, Vol. 265, pp. 153-159, 2002.
- [4] D.B.A. REP, M.W.J. PRINS, *Equivalent-circuit modelling of ferroelectric switching devices*, J. Appl. Phys., Vol. 85, pp. 7923-7930, 1999.
- [5] RICINSCHI D., ISHIBASHI Y., OKUYAMA M., *Electrostatic Model for the Dielectric Permittivity of Ferroelectric Films with 90° Domain Structures*, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42, pp. 6183 - 6187 (2003).
- [6] TH. STEINKOPFF, *Micromechanical Modeling of Ferroelasticity and Ferroelectricity and Finite-Element Results for Nonlinear Piezoelectric Applications*, Ferroelectrics, Vol. 222, pp. 126-129, 1999.
- [7] S. KOVALEV, M. SAKAI, *Numerical Modeling of Electro-Elastic Field in Ferroelectric Crystal Containing 90° Twin Boundary*, Acta mater., Vol. 46, pp. 3015-3026, 1998.
- [8] J. ZELENKA, *Piezoelektrické rezonátory a jejich použití*, Academia, Praha 1983.
- [9] J. F. NYE, *Physical Properties of Crystals*, Oxford University Press 2003, ISBN 0 19 851165 5.
- [10] Z. HORÁK, F. KRUPKA, *Fyzika*, SNTL, Praha 1976.
- [11] I. HLAVÁČEK, J. NEČAS, *Úvod do matematické teorie pružných a pružně plastických těles*, Praha, SNTL 1983.
- [12] S. MÍKA, A. KUFNER, *Parciální diferenciální rovnice I*, SNTL Praha 1983.
- [13] K. REKTORYS *Variační metody v inženýrských problémech a v problémech matematické fyziky*, Academia, Praha 1999.
- [14] J. NEČAS, *Les methodes directes en theorie des equations elliptiques*, Masson et Cie, Editeurs, Paris, 1967.
- [15] H. ALLIK, T. J. R. HUGHES, *Finite Element Method for Piezoelectric Vibrations*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol 2, pp. 151-157, 1970.
- [16] O.C. ZIENKIEWICZ, R.L. TAYLOR, *The Finite Element Method - 4th ed.*, McGraw-Hill Book Company (UK) Limited 1989
- [17] D.S. WATKINS, *Fundamentals of Matrix Computations*, John Wiley & Sons 1991

- [18] M. ZGONIK, P. BERNASCONI, M. DUELLI, R. SCHLESSER, P. GUNTER, *Dielectric, elastic, piezoelectric, electro-optic and elasto-optic tensors of BaTiO₃ crystals*, Physical Review B, Vol. 50, No. 9, September 1994.
- [19] *GMSH - mesh generator home page*, <http://www.geuz.org/gmsh>.
- [20] *LAPACK - Linear Algebra Package*, <http://www.netlib.org/lapack>.
- [21] *GSL - The GNU Scientific Library, Development Page*, <http://sources.redhat.com/gsl>.
- [22] *Gnuplot Homepage*, <http://www.gnuplot.info>
- [23] K. UCHINO, *Ferroelectric Devices*, Marcel Dekker Inc., New York 2000, ISBN 0-8247-8133-3.
- [24] K. UCHINO, *Piezoelectric Actuators and Ultrasonic motors*, Kluwer Academic Publishers, 1996, ISBN 0792398114.
- [25] J. FOUSEK, *Základy fyziky dielektrik a ferroelektrik*, ČSAV, Praha 1961.
- [26] F. KROUPA, K. NEJEZCHLEB, I. SAXL, *Anisotropy of Internal Stresses in Poled PZT Ceramics*, Ferroelectrics, 1988, Vol. 88, pp. 123-137.
- [27] OKROUHLÍK M, *Technická mechanika II.*, ČVUT Praha 1984
- [28] J. NOVÁK, J. MARYŠKA, J. FOUSEK, *Modelling of Electric Field in Ferroelectrics*, Proceedings of ECMS 2003, Liberec, Czech Republic, June 2-4, 2003, pp. 427 - 431. ISBN 80-7083-708-X.
- [29] J. NOVÁK, J. FOUSEK, J. MARYŠKA, M. MARVAN, *Distributions of Electric and Elastic Fields at Domain Boundaries*, Material Science & Engineering - B, přijato k publikaci, vyjde v roce 2005.
- [30] J. MARYŠKA, J. NOVÁK, P. RÁLEK, *Modelling of the Resonance Characteristics of the Piezoelectric Resonators*, Proceedings of EFTF 02, St. Petersburg Russia 2002, ISBN 5-8088-0082-X.
- [31] J. MARYŠKA, J. NOVÁK, P. RÁLEK, J. ŠEMBERA, *Finite Element Model of Piezoelectric Resonator*, Current Trends in Scientific Computing, Contemporary Mathematics, Vol. 329, pp. 263-270, 2003.