



**TECHNICKÁ UNIVERZITA
V LIBERCI**

Hálkova 6, 461 17 Liberec 1

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských
studií

Diplomová práce

Reakce 90° doménové stěny na vnější elektrické pole

Tomáš Sluka

2002/2003

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových
inženýrských studií

Obor: Přírodovědné inženýrství

Reakce 90° doménové stěny na
vnější elektrické pole

Reaction of the 90° domain wall
to an external electric field

TOMÁŠ SLUKA

UNIVERZITNÍ KNIHOVNA
TECHNICKÉ UNIVERZITY V LIBERCI



3146069737

Vedoucí diplomové práce: Doc.RNDr. Antonín Kopal, CSc. (Katedra fyziky FP)

Rozsah práce

Počet stran: 72

Počet obrázků: 26

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Katedra fyziky

Akademický rok: 2002/2003

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

pro: **Tomáš SLUKA**

studijní program: 2612 M – Elektrotechnika a informatika

obor: 2612 T - Přírodovědné inženýrství

Vedoucí katedry Vám ve smyslu zákona o vysokých školách č.111/1998 Sb. určuje tuto diplomovou práci:

Název tématu: **Reakce 90⁰ doménové stěny na vnější elektrické pole**

Zásady pro vypracování:

1. Studium základní literatury o titanátu barya, viz. seznam na str. 2.
2. Rešerše časopisecké literatury.
3. Práce s programy Matlab , Mathematica, Ansys, fenomenologické výpočty efektu elektrického pole na doménovou stěnu.
4. Zhodnocení výsledků, porovnání s experimentem.
- 5.
- 6.

Rozsah grafických prací: dle potřeby dokumentace

Rozsah průvodní zprávy: cca 40 až 50 stran

Seznam odborné literatury:

- [1] Jona F., Shirane, G.: Ferroelectric Crystals. Dover Pub., 1993
- [2] Zgonik M. et al.: Phys. Rev. B, **50**, 5 941 (1994)
- [3] Devonshire A.F., Wills H.H.: Phil. Mag. Ser. 7, **40**, 1040 (1949)
- [4] Devonshire A.F., Wills H.H.: Phil. Mag. Ser. 7, **42**, 1065 (1951)
- [5] Fousek, J., Březina E.: Czech. J. Phys. B, **10**, 511, (1960)

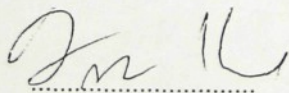
Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Antonín Kopal, CSc.

Konzultant: Doc. Mgr. Jiří Erhart, Ph.D.

Zadání diplomové práce: 23.10.2002

Termín odevzdání diplomové práce: 23. 5. 2003





Vedoucí katedry



Děkan

V Liberci dne 23. 10. 2002

Diplomová práce byla podpořena projektem GAČR 200/03/0569 a GAČR 202/02/1006
a výzkumným záměrem MSM 242 200 002.

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č.121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé DP a prohlašuji, že souhlasím s případným užitím mé diplomové práce (prodej, zapůjčení a pod.).

Jsem si vědom toho, že užít své diplomové práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do její skutečné výše).

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum 22.5.2003

Podpis



Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu mé diplomové práce Doc. RNDr. Antonínu Kopalovi, CSc. za odborné vedení, trpělivost a příjemnou spolupráci.

Annotation

It is well known that many common ferroelectric materials are also ferroelastic. A subject of the thesis is the influence of a combined mechanical and electrical activity on 90-degree domain wall motions. Variations in the domain structure are the basis of extrinsic contributions to permittivity, elastic and piezoelectric coefficients of ferroic materials.

Extrinsic contributions play an essential role in effective properties of ferroic samples. Extremely slight domain wall motions can strongly influence their macroscopic behaviour measured in applied fields of very low intensity.

In the thesis a simple model of a ferroic capacitor is studied. It consists of a ferroic layer among two insulating layers. There are some simplifications considered. The first line simplification is the assumption of the approximation to homogenous electric field and stress in the single layers. It could be considered in the thick sample with the serial periodic domain structure. Next simplification is the assumption of the small asymmetry of the periodic domain structure.

Common ferroic materials such as barium titanate exhibit intrinsic piezoelectric effect. When insulating layers are piezoelectric too, the model should possess untypical effective properties.

The results support a possibility of unstable behaviour of the model. In the vicinity of the border of the stability region the effective properties have an infinity value.

Anotace

Tato práce se zabývá vlivem elektrického a mechanického působení na změny v 90° doménové struktuře feroik. Tyto změny jsou příčinou tzv. vnějších příspěvků k dielektrickým, mechanickým a elektromechanickým vlastnostem feroických materiálů.

Nevlastní příspěvky mají značný vliv na efektivní chování feroických vzorků. Velice malé pohyby doménových stěn způsobují velké makroskopické změny elektrických a mechanických veličin.

Je zde studován konkrétní model feroického kondenzátoru složený ze tří vrstev, dvou izolačních nanesených na povrchu feroické. Model zahrnuje některá zjednodušení. Nejvýznamnějším je předpoklad homogenního elektrického pole a mechanického napětí v jednotlivých vrstvách. Může být uvažován v případě relativně tlustého vzorku a husté pravidelné doménové struktury. Dalším předpokladem jsou pouze malé hodnoty asymetrie doménové struktury.

Běžné feroické materiály jako je například baryum titanát mají vlastní příspěvek k piezoelektrickému koeficientu. Pokud jsou piezoelektrické také izolační vrstvy vzorku, projevuje model neobvyklé chování.

Výsledky umožňují nestabilní chování modelu. V blízkosti hranic oblasti stability mohou efektivní materiálové koeficienty dosahovat teoreticky nekonečných hodnot.

Obsah

1	Úvod	13
1.1	Dielektrika	13
1.2	Feroelektrika	13
1.2.1	Feroelasticita	14
1.2.2	Curieova teplota a fázové přechody	14
1.2.3	Symetrie feroelektrik	14
1.2.4	Doménová struktura	15
1.2.5	Pohyb doménových stěn	15
1.2.6	Nevlastní příspěvky k dielektrickým koeficientům	16
1.3	Baryum titanát	16
1.3.1	Materiálové vlastnosti	18
1.4	Využití feroelektrik	20
1.4.1	Feroelektrické kondenzátory	20
1.4.2	Elektromechanické prvky	21
1.4.3	Konstrukce paměťových obvodů	21
1.5	Cíle diplomové práce	21
2	Výpočet rovnovážné 90° doménové struktury	23
2.1	Energie, rovnováha a stabilita termodynamického systému	23
2.2	Popis modelu feroelektrického vzorku	23
2.2.1	Geometrické schéma modelu	23
2.2.2	Zjednodušení modelu	24
2.3	Stavové rovnice	25
2.3.1	Transformace souřadnic	26
2.3.2	Homogenizace materiálových vlastností vrstvy (2)	27
2.4	Mechanické namáhání vzorku	30
2.5	Volba okrajových podmínek	31
3	Okrajové podmínky A	33
3.1	Elektrické pole a tenzor mechanického napětí v jednotlivých vrstvách	35
3.2	Vnitřní energie	36
3.3	Rovnovážná asymetrie	37
3.4	Stabilita	38
3.5	Efektivní materiálové vlastnosti	40
3.5.1	Efektivní permitivita $\epsilon_{33}^{eff,\tau}$	40
3.5.2	Efektivní poddajnost $s_{1313}^{eff,E}$	41
3.5.3	Efektivní přímý piezoelektrický koeficient d_{313}^{eff}	42
3.5.4	Efektivní inverzní piezoelektrický koeficient d_{313}^{eff}	43

4	Okrajové podmínky B	45
4.1	Elektrické pole a tenzor mechanického napětí v jednotlivých vrstvách	47
4.2	Vnitřní energie	48
4.3	Rovnovážná asymetrie	49
4.4	Stabilita	50
4.5	Efektivní materiálové vlastnosti	51
4.5.1	Efektivní impermitivita $\beta_{33}^{eff,e}$	51
4.5.2	Efektivní pružnost $c_{1313}^{eff,D}$	52
4.5.3	Efektivní přímý piezoelektrický modul h_{313}^{eff}	52
4.5.4	Efektivní inverzní piezoelektrický modul h_{313}^{eff}	54
5	Okrajové podmínky C	55
5.1	Elektrické pole a tenzor mechanického napětí v jednotlivých vrstvách	56
5.2	Vnitřní energie	57
5.3	Rovnovážná asymetrie	57
5.4	Stabilita	58
5.5	Efektivní materiálové vlastnosti	58
5.5.1	Efektivní permitivita $\epsilon_{33}^{eff,e}$	59
5.5.2	Efektivní pružnost $c_{1313}^{eff,E}$	60
5.5.3	Efektivní přímý piezoelektrický modul e_{313}^{eff}	61
5.5.4	Efektivní inverzní piezoelektrický modul e_{313}^{eff}	61
6	Okrajové podmínky D	63
6.1	Vnitřní energie	64
6.2	Rovnovážná asymetrie	64
6.3	Stabilita	65
6.4	Efektivní materiálové vlastnosti	66
6.4.1	Efektivní impermitivita $\beta_{33}^{eff,\tau}$	66
6.4.2	Efektivní poddajnost $s_{1313}^{eff,D}$	67
6.4.3	Efektivní přímý piezoelektrický koeficient g_{313}^{eff}	68
6.4.4	Efektivní inverzní piezoelektrický koeficient g_{313}^{eff}	68
7	Závěr	71
	Použité zdroje	72

Seznam obrázků

1.1	Perovskitová kubická struktura baryum titanátu	17
1.2	Základní krystalové buňky čtyř fázových stavů BaTiO_3	17
1.3	Dvě domény BaTiO_3 v tetragonální fázi oddělené doménovou stěnou.	18
1.4	Snímek doménové struktury pozorované polarizačním mikroskopem.	19
2.1	Geometrie modelu v rovině $x - z$	24
2.2	Mechanické namáhání ploch kolmých na osu z	30
2.3	Mechanické namáhání ploch kolmých na osu x	31
3.1	Okrajové podmínky A.	33
3.2	Oblast stability vzorku s okrajovými podmínkami A.	39
3.3	Závislost efektivní permitivity na poměru $\frac{a}{b}$	41
3.4	Závislost efektivní poddajnosti na poměru $\frac{a}{b}$	42
3.5	Závislost efektivního piezoelektrického koeficientu na poměru $\frac{a}{b}$	43
4.1	Okrajové podmínky B.	45
4.2	Závislost efektivní impermitivity na poměru $\frac{a}{b}$	52
4.3	Závislost efektivní pružnosti na poměru $\frac{a}{b}$	53
4.4	Závislost efektivního piezoelektrického modulu na poměru $\frac{a}{b}$	53
5.1	Okrajové podmínky C.	55
5.2	Oblast stability vzorku s okrajovými podmínkami C.	59
5.3	Závislost efektivní permitivity na poměru $\frac{a}{b}$	60
5.4	Závislost Průběh efektivní pružnosti na poměru $\frac{a}{b}$	61
5.5	Závislost efektivního piezoelektrického modulu na poměru $\frac{a}{b}$	62
6.1	Okrajové podmínky D.	63
6.2	Oblast stability vzorku s okrajovými podmínkami D.	66
6.3	Závislost efektivní impermitivity na poměru $\frac{a}{b}$	67
6.4	Závislost efektivní poddajnosti na poměru $\frac{a}{b}$	68
6.5	Závislost piezoelektrického modulu na poměru $\frac{a}{b}$	69

Seznam symbolů

Materiálové parametry

$P_{0,i}^{(*)}$	vektor spontánní polarizace v oblasti (*)	Cm^{-2}
P_0	spontánní polarizace ve směru osy z v oblasti (2+)	Cm^{-2}
	$P_0 = P_{0,3}^{(2+)}$	
$e_{0,ij}^{(*)}$	tenzor spontánní deformace v oblasti (*)	1
e_0	složka tenzoru spontánní deformace v oblasti (2+)	1
	$e_0 = e_{0,13}^{(2+)}$	
$\varepsilon_{ij}^{(*),\circ}$	tenzor relativní permitivity oblasti (*) při konstantním $\circ$	1
ε_*	relativní permitivita oblasti (*) při konstantním τ	1
	$\varepsilon_* = \varepsilon_{33}^{(*),\tau}$	
$\beta_{ij}^{(*),\circ}$	tenzor impermitivity oblasti (*) při konstantním $\circ$	mF^{-1}
$d_{ijk}^{(*)}$	tenzor piezoelektrických koeficientů v oblasti (*)	CN^{-1}
d_*	piezoelektrický koeficient v oblasti (*)	CN^{-1}
	$d_* = d_{313}^{(*)}$	
d_{ij}	tenzor piezoelektrických koeficientů zapsaný v maticové formě.	CN^{-1}
$g_{ijk}^{(*)}$	tenzor piezoelektrických koeficientů v oblasti (*)	m^2C^{-1}
$h_{ijk}^{(*)}$	tenzor piezoelektrických modulů v oblasti (*)	NC^{-1}
$e_{ijk}^{(*)}$	tenzor piezoelektrických modulů v oblasti (*)	Cm^{-2}
$s_{ijkl}^{(*),\circ}$	tenzor poddajnosti v oblasti (*) při konstantním $\circ$	Nm^{-2}
s_*	koeficient poddajnosti v oblasti (*) při konstantním E	m^2N^{-1}
	$s_* = s_{1313}^{(*),E}$	
s_{ij}°	tenzor koeficientů poddajnosti zapsaný v maticové formě při konstantním $\circ$	m^2N^{-1}
$c_{ijkl}^{(*),\circ}$	tenzor koeficientů pružnosti v oblasti (*) při konstantním $\circ$	Nm^{-2}
U_{el}	plošná hustota elektrické energie vzorku	Jm^{-2}
U_{def}	plošná hustota deformační energie vzorku	Jm^{-2}
U_w	plošná hustota energie doménových stěn	Jm^{-2}
σ_w	energie doménových stěn vztahená na jednotku plochy doménové stěny	Jm^{-2}
G	hustota gibsovy volné energie	Jm^{-2}

Geometrické parametry

a	tloušťka izolujících (pasivních) dielektrických vrstev	m
b	tloušťka feroelektrické vrstvy	m
w_+	tloušťka domény (2+)	m
w_-	tloušťka domény (2-)	m
$2w$	perioda doménové struktury	m
A	koefficient asymetrie	$A = \frac{w_+ - w_-}{2w} \quad 1$

Ostatní parametry

$E_i^{(*)}$	vektor elektrického pole v oblasti (*)	Vm^{-1}
$\tau_{ij}^{(*)}$	tenzor mechanického napětí v oblasti (*)	Nm^{-2}
V_*	rozdíl potenciálů na povrchu oblasti (*)	V
W_{el}	plošná hustota elektrické práce vnějších zdrojů	Jm^{-2}
W_{def}	plošná hustota mechanické práce vnějších zdrojů	Jm^{-2}

Kapitola 1

Úvod

Více než 80 let uplynulo od objevení dielektrického fenoménu dnes známého jako feroelektrina. Velká pozornost, která je jí stále věnována je motivována bohatými možnostmi praktického využití a stále ještě otevřenými otázkami podněcujícími jejich výzkum.

1.1 Dielektrika

Hlavní problémy které přináší zkoumání dielektrických krystalů se týkají polarizace. Polarizace může být vytvořena v nevodivých materiálech působením vnějšího elektrického pole. Je důsledkem vzájemného vychýlení kladného a záporného náboje v látce, které tak vytváří elektrický dipól. Každá dielektrická látka může být polarizována tzv. elektronovou polarizací způsobenou vychýlením elektronového obalu a jádra atomu. Látky s iontovými vazbami mohou být polarizovány iontovou polarizací, kde při působení elektrického pole dochází k vychýlení iontů.

Dosažitelná velikost polarizace je u většiny dielektrik relativně malá a vliv, který má polarizace na celou řadu fyzikálních vlastností krystalu, jako jsou elastické, optické a tepelné vlastnosti, je také nepatrný.

Malá skupina krystalů vykazuje mnohonásobně větší schopnost polarizace než jaká je pozorována u většiny dielektrik. Podrobné studium takových materiálů dále přineslo objevení množství neobvyklých vlastností, které nejsou předmětem zájmu jen fyziky dielektrik, ale také mnoha dalších oblastí vědy a zejména elektrotechnického inženýrství.

1.2 Feroelektrika

V důsledku velkého rozvoje elektrotechniky v první polovině 20. století se ve větší míře začali zkoumat možnosti využití dielektrických materiálů.

V roce 1921 na univerzitě v Mineapolis čechoameričan prof. Joseph Valasek poprvé pozoroval hysterezní smyčku při elektrické polarizaci Seignettovy soli a jako její příčinu správně označil spontánní polarizaci. Tento jev byl kvůli formální podobnosti s feromagnetismem nazván feroelektrina a materiály, na kterých je pozorován, feroelektrika. Tyto dva jevy jsou podobné především z fenomenologického hlediska. Feromagnetické materiály mají spontánní magnetizaci a hysterezní závislost magnetizace na magnetickém poli. Feroelektrické materiály vykazují výše zmíněnou spontánní polarizaci a hysterezní závislost elektrické indukce na elektrickém poli. Výrazným projevem feroelektrik jsou také změny vlastností s měnící se teplotou.

1.2.1 Feroelasticita

Je známo, že mnohé feroelektrické materiály jsou také feroelastické. To znamená, že vedle spontánní polarizace je v látce přítomna také spontánní deformace. Látka je deformována aniž by na ní působilo mechanické napětí a je možné pozorovat hysterezní závislost deformace na mechanickém napětí. Přítomnost obou fenoménů feroelektriny a feroelasticity způsobuje vzájemnou analogii elektrického a mechanického chování takového materiálu. Dále již předpokládáme, že feroelektrické materiály jsou obecně i feroelastické.

1.2.2 Curieova teplota a fázové přechody

Většina krystalických materiálů může existovat ve více krystalických fázích. Každá fáze zůstává stabilní v určitém rozmezí teplot a tlaků. Přechod mezi jednotlivými fázemi je doprovázen nespojitostí změn objemu a entropie a změnou symetrie krystalové struktury.

Feroelektrické vlastnosti látek se projevují jen v určitých krystalických fázích. Teplota, při které látka přechází z feroelektrické fáze do tzv. paraelektrické, kdy se začíná chovat jako běžné dielektrikum, se nazývá Curieova teplota. Fázový přechod přes Curieovu teplotu je doprovázen nespojitostí změn spontánní polarizace. Při fázovém přechodu prvního druhu do paraelektrické fáze zaniká spontánní polarizace nespojitě. V případě fázového přechodu druhého druhu zaniká polarizace spojitě s nespojitou první derivací.

Závislost permitivity feroelektrik v paraelektrické fázi na teplotě může být popsána tzv. Curie-Weisovým zákonem. Teplotní závislost chování feroelektrik není předmětem této práce a nebude zde dále rozváděna. Rozsáhle je diskutována například v [1].

1.2.3 Symetrie feroelektrik

Struktura jakéhokoli krystalického materiálu odpovídá jedné ze třiceti dvou typů makroskopické symetrie, které odpovídají 32 bodovým grupám symetrie. Bodové grupy obsahují osm operátorů symetrie:

1-bez rotace, 2-vlastnosti invariantní při otočení o 180° , 3-otočení o 120° , 4-otočení o 90° , 6-otočení o 60° , $\bar{4}$ -otočení o 90° a středová inverze, i -středová inverze, m -zrcadlení.

Pokud zahrneme i translační symetrii, získáme 230 prostorových grup symetrie.

Strukturální symetrie má vliv na dielektrické, elastické, piezoelektrické, feroelektrické a nelineární optické vlastnosti krystalu. Stejně jako struktura krystalů jsou i makroskopické fyzikální vlastnosti invariantní při aplikování operátorů symetrie dané bodové grupy.

Třicet dva bodových grup může být klasifikováno následovně: centrosymetrické typy se středovou symetrií, kterou obsahuje jedenáct bodových grup ($\bar{1}$, $2/m$, mmm , $4/m$, $4/mmm$, $\bar{3}$, $\bar{3}/m$, $6/m$, $6/mmm$, $m\bar{3}$ a $m3m$) a necentrosymetrické. Krystaly se středovou souměrností nemohou mít žádnou polární osu. Ostatních 21 bodových grup neobsahuje středovou inverzi. Krystaly s těmito symetriemi mají jeden nebo více krystalograficky význačných směrů. Všechny necentrosymetrické bodové grupy s výjimkou grupy 432 umožňují piezoelektrický efekt. Grupa 432 také neobsahuje operátor středové inverze, ale piezoelektrický efekt zde vylučuje jiná kombinace operací symetrie.

Mezi zmíněnými 20 bodovými grupami symetrie, které umožňují piezoelektrický efekt, má 10 bodových grup jen jeden význačný směr (1, 2, m , $mm2$, 4, $4mm$, 3, $3m$, 6, $6mm$). Bodové grupy symetrie, které tyto krystaly mají, obsahují jen jednu rotační osu a žádný operátor zrcadlení na ní kolmý. Podél polární osy je uspořádání atomů na jednom konci jiné než na opačném. Takové krystaly se nazývají polární.

Feroelektrický efekt umožňují jen polární krystaly. Při přechodu látky do paraelektrické fáze se mění její grupa symetrie. Struktura látky v paraelektrické fázi neumožňuje přítomnost spontánní polarizace. Poměr řádů bodové grupy symetrie paraelektrické a feroelektrické fáze určuje počet možných krystalograficky ekvivalentních kombinací spontánní polarizace a spontánní deformace. Feroelektrická fáze má vždy menší symetrii. Žádná z těchto kombinací není bez vnějších vlivů nijak preferována, umožňuje to vznik domén s různými kombinacemi spontánní polarizace a spontánní deformace.

1.2.4 Doménová struktura

Feroelektrické krystaly se skládají obecně z více domén. Jednotlivé domény oddělují tzv. doménové stěny. V navzájem sousedních doménách je jiná kombinace spontánní polarizace a spontánní deformace.

Bez působení vnějšího elektrického pole a mechanického namáhání jsou domény zpravidla rovnoměrně uspořádány a celková makroskopická spontánní polarizace a deformace je nulová. Takového stavu je možné dosáhnout například pozvolným přechodem z paraelektrické fáze do feroelektrické bez mechanického namáhání či přítomnosti elektrického pole.

1.2.5 Pohyb doménových stěn

Doménové stěny jsou úzké oblasti mezi doménami. Jejich tloušťka je obvykle jen několika násobek rozměru základní krystalové buňky [2]. V této malé oblasti se plynule mění velikost spontánní polarizace a její směr a podoba spontánní deformace. Konkrétní případ je uveden v 1.3.

Významnou vlastností feroelektrik je možnost změny velikosti domén díky pohybu doménových stěn. Doménové stěny v rovnováze zaujímají takovou polohu, aby celková energie krystalu byla minimální. Pokud dojde ke změnám vnějších podmínek, je systém obecně vyveden z rovnováhy a dochází ke změnám vnitřních parametrů v takovém smyslu, že minimalizují následky vnějšího působení. U feroelektrických materiálů to znamená změny elektrických a mechanických veličin a zejména změny v doménové struktuře. Doménové stěny změni svoji polohu a tím ovlivňují chování celého systému. Změní se velikosti jednotlivých domén a výrazně i celkové vlastnosti krystalu.

Doménová stěna je na hranici domén umístěna tak, aby i ona samotná měla nejnížší energii. To znamená, že vzhledem ke směřům spontánní polarizace v doménách které odděluje má takový úhel, aby na ní nebyl polarizační náboj. Složka spontánní polarizace kolmá na doménovou stěnu je spojitá. Analogicky je zde taková změna spontánní deformace, aby vznikalo minimální vnitřní pnutí. Spontánní polarizace a spontánní deformace se navzájem doprovázejí. Ve svém důsledku má doménová stěna téměř přesně podobu roviny a je to také důvod proč se doménová stěna pohybuje téměř jako celek a neláme se. Za určitých okolností je stěna v rovnováze mírně zakřivená [3] na úkor vzniku polarizačního náboje a vnitřního pnutí, ale vzhledem k celkové konfiguraci systému a jeho energii je takové většinou zanedbatelné zakřivení výhodnější.

Další možností změn v doménové struktuře je vznik tzv. nukleačních zárodků. Uvnitř domény může dojít ke vzniku oblastí, které mají jinou kombinaci spontánní polarizace a spontánní deformace než okolí. Tyto zárodky se dále rozšiřují již zmíněným pohybem doménových stěn a jsou příčinou změn makroskopické deformace a polarizace krystalu.

U reálného krystalu stěny většinou nedosáhnou ihned až do polohy, kde systém má nejnížší energii, jak by tomu bylo v ideálním případě, ale zastaví se v blízkosti této polohy díky krys-

talovým poruchám. Toto zachycení na poruchách je příčinou hysteretzní závislosti elektrické indukce vícedoménového krystalu na malém elektrickém poli.

Výraznější hysteretzi můžeme pozorovat u jednodoménového krystalu, který je možné vytvořit například působením silného elektrického pole nebo mechanického napětí. Takový krystal nemá žádnou doménovou stěnu, která by se mohla pohybovat a ovlivňovat tak makroskopické vlastnosti. K výraznějším změnám dochází díky již zmíněné tvorbě nukleačních zárodků. Ty vznikají pod vlivem působení relativně velkého elektrického pole nebo mechanického napětí v opačném smyslu než jaký má přítomná kombinace spontánní polarizace a spontánní deformace. Zárodek se díky silným vnějším vlivům krátce po svém vzniku rozroste opět na celou oblast krystalu a tím způsobí relativně velkou skokovou změnu makroskopických vlastností.

V této práci se budeme zabývat pouze chováním vícedoménových krystalů vystavených působení relativně malých vnějších vlivů, které nezpůsobují vznik nukleačních zárodků.

1.2.6 Nevlastní příspěvky k dielektrickým koeficientům

Makroskopické vlastnosti feroelektrik jsou popsány tenzory permitivity, poddajnosti a piezokoefficientu. Jsou ovlivňovány jednak vlastními materiálovými příspěvky, které jsou důsledkem jevů na atomární úrovni, společnými s neferoelektrickými látkami, a jednak nevlastními příspěvky způsobenými pohyby doménových stěn. Nevlastní příspěvky mohou mít mnohonásobně větší vliv na chování feroelektrika než vlastní. Efektivní permitivita, poddajnost a piezokoefficient jsou ovlivněny doménovou strukturou.

1.3 Baryum titanát

Baryum titanát¹ (BaTiO_3) je v současnosti nejkomplexněji prozkoumaný feroelektrický materiál. Je zajímavý z pohledu fyziky pevných látek, protože jeho mikroskopická struktura je jednodušší než struktura většiny ostatních feroelektrik, což umožňuje snažší pochopení jeho chování. Je hojně používán v praktických aplikacích, protože je chemicky a mechanicky stabilní, je feroelektrický i za běžných pokojových teplot a může z něj být snadno vyroben keramický polykrystalický vzorek.

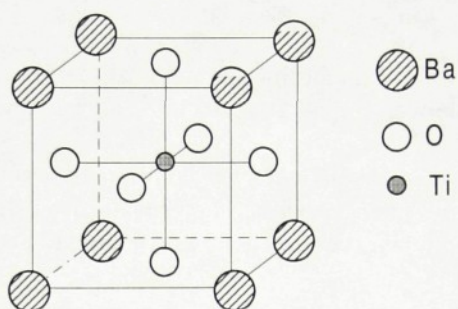
Anomální dielektrické vlastnosti baryum titanátu byly objeveny nezávisle v několika laboratořích v roce 1943 na keramickém vzorku a publikovány v roce 1946.

V padesátých letech bylo možné, díky nové metodě pěstování krystalů, vyrobit také relativně velké monokrystaly.

Na obr.1.1 je náčrt krystalové perovskitové² struktury baryum titanátu v kubické paraelektrické fázi v jaké se nachází při teplotách nad Curieovým bodem $T_c = 120^\circ\text{C}$. V paraelektrické fázi má bodovou grupu symetrie $m\bar{3}m$. Při přechodu přes Curieovu teplotu směrem od vyšších teplot k nižším dochází k fázové přeměně a mění se struktura baryum titanátu na feroelektrickou. Feroelektrická struktura v teplotním rozsahu mezi 5°C a 120°C je tetragonální s bodovou grupou symetrie $4mm$. Znamená to, že při přechodu došlo k deformaci kubické mřížky a tedy vzniku spontánní deformace. Stejně tak, díky vychýlení iontu titanu ze své centrální polohy, dojde ke vzniku elektrického dipólu a vzniku spontánní polarizace. Směr spontánní polarizace je vždy podél jedné z hran krystalové buňky. Stav látky s přítomností

¹Český ekvivalent tohoto názvu je titaničitan barnatý, ale častěji se používá termín baryum titanát převzatý z angličtiny.

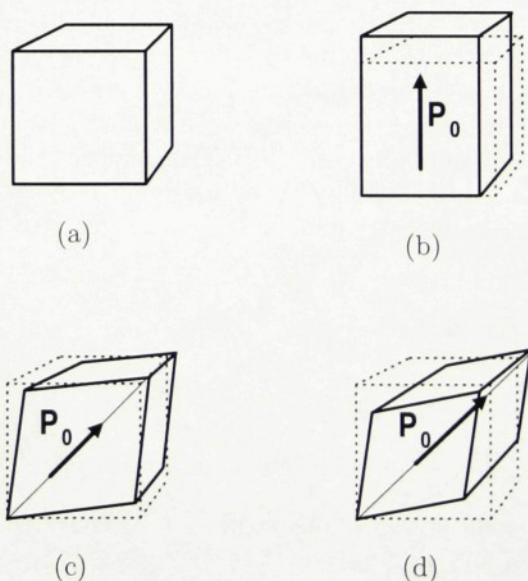
²Perovskitová struktura se vyskytuje u celé řady dalších materiálů, společně se řadí do jedné skupiny. Dalším představitelem této skupiny materiálů je například sodium niobát NaNbO_3 .



Obrázek 1.1: Perovskitová kubická struktura baryum titanátu

spontánní polarizace a spontánní deformace je oproti intuitivnímu očekávání energeticky výhodnější. Takové chování látky je fenomenologicky popsáno a částečně vysvětleno termodynamickou teorií fázových přechodů [4]. Studium fázových přechodů baryum titanátu není cílem této práce, a proto zde budou v tomto směru uvedeny jen základní rysy jeho chování.

V teplotním rozsahu od 5°C do -90°C má barum titánat ortorombickou krystalovou strukturu s bodovou grupou symetrie $mm2$ se spontánní polarizací ve směru stěnové úhlopříčky. Pod -90°C má romboedrickou strukturu s grupou symetrie $3m$ se směrem spontánní polarizace podél tělesové úhlopříčky. Jednotlivé fázové stavy jsou schematicky zobrazeny na obr.1.2.



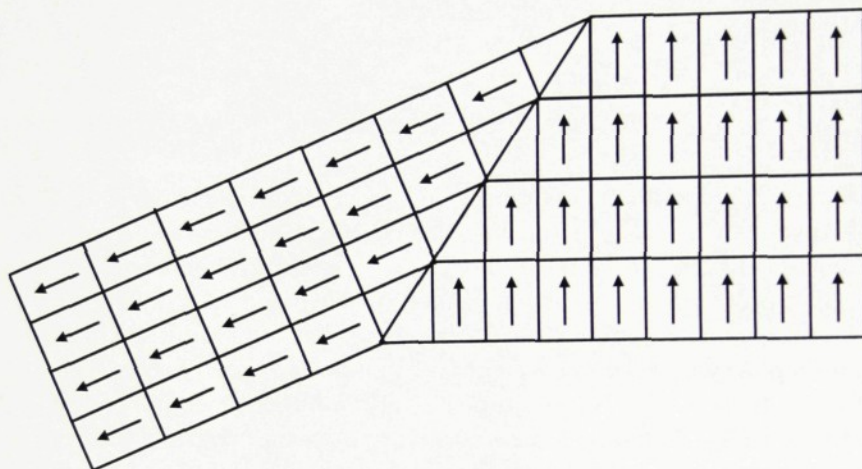
Obrázek 1.2: Základní krystalové buňky čtyř fázových stavů BaTiO_3 .

- (a) Kubická, nad 120°C .
- (b) Tetragonální, 120°C až 5°C .
- (c) Ortorombická, 5°C až -90°C .

(d) Romboedrická, pod -90°C .

Baryum titanát byl podrobně experimentálně zkoumán zejména v tetragonální fázi, protože v té se nachází za běžných pokojových teplot, a také v této práci se dále budeme zabývat právě touto fází.

Tetragonální fáze umožňuje vznik šesti různých kombinací spontánní polarizace a spontánní deformace. To znamená, že může vytvářet poměrně složitou doménovou strukturu. Na obr.1.3 jsou znázorněny dvě domény s tzv. 90° doménovou stěnou.



Obrázek 1.3: Dvě domény BaTiO_3 v tetragonální fázi oddělené doménovou stěnou.

Zobrazení je pouze schematické, aby dostatečně vystihovalo podstatu problému. V reálném případě je přechod mezi doménami plynulejší a velikost spontánní deformace jednotlivých krystalových buněk je přibližně jednocentní. V BaTiO_3 může vzniknout i 180° doménová stěna, kdy v sousedních doménách jsou směry spontánní polarizace opačné. 90° a 180° doménové stěny se mohou v materiálu vyskytovat zároveň. Doménovou strukturu lze pozorovat několika různými způsoby.

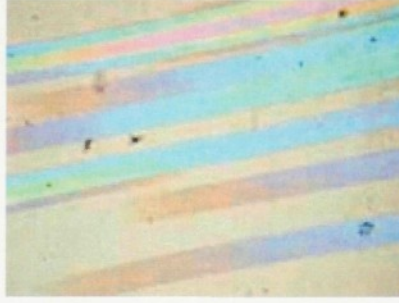
- Polarizačním mikroskopem.
- Sledováním povrchu krystalu po naleptání kyselinou. Různé domény mají na povrchu různé chemické vlastnosti.
- Sledováním povrchu krystalu po posypání elektrostaticky nabitým práškem.

Na obr.1.4 je fotografie 90° doménové struktury BaTiO_3 . Za poskytnutí tohoto snímku děkuji RNDr. Miroslavu Šulcovi, Ph.D..

Pohyb doménových stěn BaTiO_3 a proces nukleace je studován například v článku [3]. Přes možnost vzniku rozmanitých složitějších doménových struktur, vznikají také jednoduché relativně pravidelné doménové struktury. Chování takových struktur je možné snadněji popsat.

1.3.1 Materiálové vlastnosti

Konkrétní materiálové vlastnosti BaTiO_3 v tetragonální fázi, které budou uvedeny v této části platí pro soustavu souřadnic s osou z shodnou s polární osou. Většina konkrétních hodnot



Obrázek 1.4: Snímek doménové struktury pozorované polarizačním mikroskopem.

je získána z [1]. Uvedené vlastnosti jsou uvedeny pro jednodoménový krystal a nezahrnují nevlastní příspěvky způsobené změnami v doménové struktuře.

Většina materiálových vlastností BaTiO₃ je výrazně závislá na teplotě. Uvedené hodnoty platí pro teplotu 25°C.

Jak již bylo uvedeno, symetrie krystalu je 4mm. Ze symetrie vyplývá struktura tenzorových vlastností materiálu.

Permitivita a piezoelektrické koeficienty

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

kde permitivita při konstantním mechanickém napětí je:

$$\varepsilon_{11}^T = 4400, \varepsilon_{33}^T = 130,$$

a permitivita při konstantní deformaci je:

$$\varepsilon_{11}^e = 2200, \varepsilon_{33}^e = 56.$$

Tenzor piezoelektrických koeficientů je zapsán v maticové formě:

$$d_{15} = 392[10^{-12}CN^{-1}], d_{31} = -34.5, d_{33} = 85.6.$$

Pro tenzorovou formu platí:

$$d_{131} = d_{113} = \frac{1}{2}d_{15}, d_{311} = d_{31}, d_{333} = d_{33}.$$

Koeficienty poddajnosti:

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix},$$

kde v maticové formě je při konstantním elektrickém poli:

$$s_{11}^E = 8.05[10^{-12}m^2N^{-1}], s_{33}^E = 15.7, s_{12}^E = -2.35, s_{13}^E = -5.24, s_{44}^E = 18.4, s_{66}^E = 8.84$$

a při konstantní elektrické indukci:

$$s_{11}^D = 7.25[10^{-12}m^2N^{-1}], s_{33}^D = 10.8, s_{12}^D = -3.15, s_{13}^D = -3.26, s_{44}^D = 12.4, s_{66}^D = 8.84.$$

Pro tenzorovou formu platí:

$$s_{1111} = s_{11}, s_{1122} = s_{12}, s_{1133} = s_{13}, s_{3333} = s_{33}, s_{2323} = s_{2332} = s_{3232} = s_{3223} = \frac{1}{4}s_{44}, s_{1212} = s_{1221} = s_{2121} = \frac{1}{4}s_{66}.$$

Spontánní polarizace a spontánní deformace:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm P_{0,3} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} e_{0,11} & 0 & 0 \\ 0 & e_{0,11} & 0 \\ 0 & 0 & e_{0,33} \end{pmatrix},$$

kde spontánní polarizace má hodnotu:

$$P_{0,3} = 0.26Cm^{-2}.$$

Hodnota spontánní deformace vychází ze změny rozměrů kubické fáze na tetragonální:

$$e_{0,11} = -0.011, e_{0,33} = 0.011.$$

1.4 Využití feroelektrik

Feroelektrické materiály jako baryum titanát si našly široké uplatnění díky svým specifickým dielektrickým, mechanickým a elektromechanickým vlastnostem. Je zřejmé, že hlavní pole jejich působnosti je v elektrotechnice. V největším měřítku se feroelektrik využívá jako dielektrik kondenzátorů s velkou kapacitou vzhledem k rozměrům a jako elektromechanických prvků. Používají se jako senzory a aktuátory v ultrazvukových aplikacích. Zkoumá se také možnost využití feroelektrik jako paměťových prvků.

1.4.1 Feroelektrické kondenzátory

Díky nevlastním příspěvkům mají některá feroelektrika velkou permitivitu a jak je známo, kapacita kondenzátoru je přímo úměrná velikosti permitivity. Díky feroelektrikům mohla výrazně pokročit miniaturizace kondenzátorů.

Hysteresní závislost polarizace na elektrickém poli způsobuje, že kapacita feroelektrického kondenzátoru může mít nelineární závislost na velikosti elektrického napětí. Tato jinde nevýhodná vlastnost si našla významné uplatnění například při konstrukci jednoduchých a levných násobičů frekvence, které využívají vzniku vyšších harmonických složek při přivedení harmonického signálu na nelineární prvek, nebo při výrobě amplitudových a frekvenčních modulátorů.

1.4.2 Elektromechanické prvky

Některá feroelektrika mají relativně velký koeficient elektromechanické vazby a jsou schopna měnit elektrickou energii na mechanickou s velkou účinností. Proto se využívají jako účinné elektromechanické měniče. Obvykle se nepoužívají v aplikacích, kde je kladen velký důraz na přesnost a stabilitu frekvence kmitání elektromechanického prvku. Zde nemohou konkurovat například křemenu, který se využívá při konstrukci mimořádně přesných a stabilních rezonátorů a vysoce selektivních filtrů. Feroelektrik se proto využívá při konstrukci ultrazvukových zdrojů, ultrazvukových vrtaček, mikrofónů, gramofonových přenosů atd.. S výhodou, hlavně díky relativně nízké ceně, lze použít feroelektrické keramické materiály, například PZT. Keramické feroelektrické materiály jsou bez vnějších vlivů makroskopicky izotropní a mají nulovou střední spontánní polarizaci. Makroskopická spontánní polarizace se v nich vytvoří při polarizování silným elektrickým polem. Takto vzniknou cenově přijatelné a technicky významné elektromechanické měniče.

1.4.3 Konstrukce paměťových obvodů

Do popředí zájmu výrobců počítačů se v posledních letech dostává možnost využití feroelektrik jako paměťových prvků. Díky hysterezní závislosti polarizace na elektrickém poli je možné uchovávat informaci v podobě směru spontánní polarizace. Paměťovou buňku lze v podstatě sestavit jako feroelektrický kondenzátor. Informaci lze vkládat nebo měnit přivedením napětí, které vytváří elektrické pole větší než je jeho koercitivní hodnota.

Z paměťových buněk se sestavují matrice. Na feroelektrickou desku s kolmými směry spontánní polarizace se nanese rovnoběžné proužky elektrod, vzájemně kolmé na jedné a na druhé straně. Pak lze přepolarizovávat jen paměťovou buňku, na kterou jsou z obou stran přivedeny elektrické pulsy opačné polarity. Na ostatních buňkách není napětí dostatečné na přepolarizování. Takové paměťové obvody jsou zatím ve fázi vývoje.

1.5 Cíle diplomové práce

Základní motivací této diplomové práce je teoretické vysvětlení chování feroelektrického vzorku s 90° doménovou strukturou a jeho vliv na vznik vnějších příspěvků k elastickým, dielektrickým a piezoelektrickým vlastnostem vzorků. Cílem je zejména popis rovnovážné 90° doménové struktury a efektivních vlastností odpovídajícího vzorku. Rovnovážná doménová struktura a nevlastní příspěvky k materiálovým vlastnostem byly studovány na 180° doménové struktuře jaká může vzniknout například v krystalech skupiny KDP. Výsledky této práce na katedře fyziky jsou uvedeny např. v článcích [5], [6] a diplomové práci [7].

Kapitola 2

Výpočet rovnovážné 90° doménové struktury

2.1 Energie, rovnováha a stabilita termodynamického systému

Pro popis rovnovážného stavu systému se využívá vlivu jeho vnitřního uspořádání na celkovou energii. První postulát termodynamiky říká, že každý makroskopický systém, který je od určitého časového okamžiku v neměnných vnějších podmínkách, nevyhnutelně dospěje do stavu termodynamické rovnováhy, v němž všechny makroskopické parametry mají časově konstantní hodnoty. Po dosažení rovnováhy je jakákoliv změna parametrů uspořádání možná pouze změnou vnějších podmínek. V rovnovážném a stabilním stavu má systém lokálně nejnížší hodnotu gibsovy energie. Při výpočtu rovnovážného uspořádání feroelektrického krystalu s 90° doménovou strukturou hledáme jeho vnitřní uspořádání, které má nejnížší energii.

Systém označujeme jako termodynamický a získáváme termodynamický popis, dále bude předpokládáno, že je adiabaticky izolovaný a tepelná energie je konstantní.

K výpočtu je vhodné využít variačního principu. Systém vzorek plus vnější mechanický a elektrický zdroj se nachází ve stabilním rovnovážném stavu, je-li variace Gibsova potenciálu nulová a variace druhého řádu kladná.

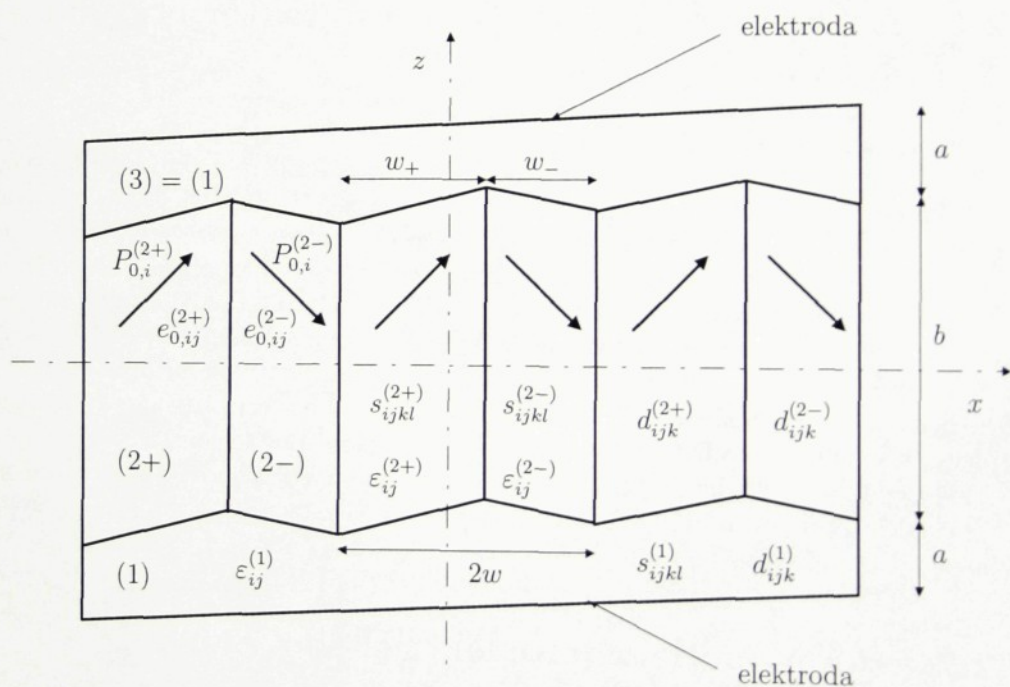
2.2 Popis modelu feroelektrického vzorku

Měření feroelektrik se provádí na feroelektrických kondenzátorech. Chování 90° doménové struktury budeme popisovat na modelu kondenzátoru. Vzhledem ke složitosti reálného případu, jehož chování závisí na celé řadě faktorů, je získání úplného matematického popisu prakticky nerealizovatelné. Bylo nutné vytvořit fyzikálně a matematicky přijatelný model, který by dostatečně vyhovoval požadavkům na přesnost a jednoduchost. Uvažujeme tenký nekonečně rozlehlý výbrus feroelektrického krystalu. Experimentální pozorování ukázalo, že je možné získat vzorek s pravidelnou 90° doménovou strukturou.

2.2.1 Geometrické schéma modelu

Na obr.2.1 je schematicky znázorněn řez modelem feroelektrického vzorku. Předpokládáme, že ve směru osy y se struktura nemění. Uvažujeme nekonečně rozlehlou desku položenou v ro-

vině $x - y$, složenou ze tří vrstev. Vrstva (2) s doménami (2+) a (2-), ve které se podél osy x domény periodicky opakují, je výřez BaTiO_3 s 90° doménovou strukturou, její tlouška je označena b . Materiálové parametry: permitivita $\varepsilon_{ij}^{(2+)}$, $\varepsilon_{ij}^{(2-)}$; poddajnost $s_{ijkl}^{(2+)}$, $s_{ijkl}^{(2-)}$; piezoelektrický koeficient $d_{ijk}^{(2+)}$, $d_{ijk}^{(2-)}$; spontánní polarizace $P_{0,i}^{(2+)}$, $P_{0,i}^{(2-)}$; spontánní deformace $e_{0,ij}^{(2+)}$, $e_{0,ij}^{(2-)}$ v oblastech (2+) a (2-) se vzájemně transformují otočením přibližně o 90° . Tento úhel je v reálném případě menší o $36'$. Polární osy krystalu svírají s osami x a z úhel přibližně 45° . Naznačená spontánní deformace je u BaTiO_3 zhruba jednaprocentní. Dále jsou zde označeny šířky domén w_+ , w_- . Pasivní mezivrstvy (1) a (3) jsou z téhož obecně piezoelektrického materiálu, jehož materiálové koeficienty jsou označeny $\varepsilon_{ij}^{(1)}$, $s_{ijkl}^{(1)}$, $d_{ijk}^{(1)}$ a jejichž tloušťka je označena a . Na obou vnějších plochách jsou naneseny tenké elektrody.



Obrázek 2.1: Geometrie modelu v rovině $x - z$.

2.2.2 Zjednodušení modelu

Aby bylo možné matematicky řešit model, zavedli jsme některé zjednodušující předpoklady.

- Model je nekonečně rozlehlý deskový kondenzátor. Tento předpoklad nás zbavuje výrazné nehomogenní deformace a elektrické indukce, které vznikají na okrajích konečně rozměrného kondenzátoru. Z tohoto důvodu bude počítáno s plošnou hustotou energie vzorku namísto celkové.

- Neuvažujeme závislost chování vzorku na teplotě, systém je tepelně izolován a tepelná energie je konstantní.
- Uvažujeme ideálně pohyblivé doménové stěny a ideální krystalovou strukturu bez poruch.
- Materiálové vlastnosti jsou v oblastech (2+) a (2−) vzájemně transformovány otočením o $89^\circ 64'$. Odchylku od 90° považujeme za zanedbatelnou.
- Doménové stěny mají nenulovou tloušťku, avšak vzhledem k ostatním rozměrům vzorku a domén je zanedbatelná, obvykle činí $5 \sim 10nm$.
- Uvažujeme pouze lineární stavové rovnice, tím se omezujeme na teploty daleko od teplot fázových přechodů.
- Všechny dielektrické vrstvy jsou ideálně nevodivé.
- Doménová struktura je periodická ve směru osy x .
- Elektrody jsou zanedbatelně tenké a nemají vliv na mechanické chování vzorku.
- Nejdůležitějším zjednodušujícím předpokladem je uvažování homogenního elektrického pole a mechanického napětí v jednotlivých vrstvách. Z výsledků uvedených v pracích [5], [6], [7] vyplývá, že tento předpoklad můžeme zavést u relativně tlustého vzorku¹ s hustou doménovou strukturou. Elektrické pole ve vzorku je vytvářeno elektrickým napětím na elektrodách a polarizačním nábojem na povrchu feroické vrstvy. Mechanické napětí ve vzorku je vytvářeno vnějším mechanickým namáháním a v důsledku přítomnosti spontánní deformace feroické vrstvy.

Pokud je perioda doménové struktury vzhledem k ostatním rozměrům vzorku malá, jsou elektrické pole a mechanické napětí nehomogenní pouze v zanedbatelně malé oblasti na rozhraních feroické vrstvy a pasivních mezivrstev.

Na vzniku homogenního elektrického pole a mechanického napětí se podílí jen střední hodnoty spontánní polarizace a spontánní deformace feroické vrstvy (2).

2.3 Stavové rovnice

Lineární stavové rovnice (2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7, 2.8,) určují vztah mezi deformací, mechanickým napětím, elektrickou indukcí a elektrickým polem.

$$D_i = P_{0,i} + \varepsilon_0 \varepsilon_{ij}^T E_j + d_{ijk} \tau_{jk}, \quad (2.1)$$

$$e_{ij} = e_{0,ij} + s_{ijkl}^E \tau_{kl} + d_{kij} E_k, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3. \quad (2.2)$$

$$E_i = \beta_{ji}^T (D_j - P_{0,j}) - g_{ijk} \tau_{jk}, \quad (2.3)$$

$$e_{ij} = e_{0,ij} + s_{ijkl}^D \tau_{jk} + g_{kij} (D_k - P_{0,k}), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3. \quad (2.4)$$

¹Rozměry vzorku musí být mnohonásobně větší než jsou šířky domén $a \gg w$, $b \gg w$.

$$D_i = P_{0,i} + \varepsilon_{ij}^e E_j + e_{ijk}(e_{jk} - e_{0,jk}), \quad (2.5)$$

$$\tau_{ij} = c_{klij}^E (e_{kl} - e_{0,kl}) - e_{kij} E_k, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3. \quad (2.6)$$

$$E_i = \beta_{ji}^e (D_j - P_{0,j}) - h_{ijk}(e_{jk} - e_{0,jk}), \quad (2.7)$$

$$\tau_{ij} = c_{klij}^D (e_{kl} - e_{0,kl}) - h_{kij} (D_k - P_{0,k}), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3. \quad (2.8)$$

Materiálové konstanty vyhovují rovnicím:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,ik}^* \beta_{jk}^* &= \delta_{ij}, & s_{ik}^+ c_{jk}^+ &= \delta_{ij}, \\ d_{ij} &= \varepsilon_{ik}^\tau g_{kj} = e_{il} s_{jl}^E, & e_{ij} &= \varepsilon_{ik}^e h_{kj} = d_{il} c_{jl}^E, \\ g_{ij} &= \beta_{ik}^\tau d_{kj} = h_{il} s_{jl}^D, & h_{ij} &= \beta_{ik}^e e_{kj} = g_{il} c_{jl}^D, \\ \varepsilon_0 (\varepsilon_{ij}^\tau - \varepsilon_{ij}^e) &= d_{ik} e_{jk}, & \beta_{ij}^\tau - \beta_{ij}^e &= -g_{ik} h_{jk}, \\ s_{ij}^E - s_{ij}^D &= d_{ki} g_{kj}, & c_{ij}^E - c_{ij}^D &= -e_{ki} h_{kj}, \end{aligned}$$

kde $*$ = τ nebo e a $+$ = E nebo D . Rovnice jsou zapsány v maticové formě.

2.3.1 Transformace souřadnic

Složky tenzorů materiálových vlastností uvedené v 1.3 platí pro soustavu souřadnic s osou z rovnoběžnou s polární osou BaTiO_3 . Tyto vlastnosti je nutné transformovat otočením do zvolené soustavy souřadnic. Vlastnosti v doméně (2+) o 45° a v doméně (2-) o 135° kolem osy y .

Operátor otočení o úhel ψ kolem osy y je:

$$o = \begin{pmatrix} \cos \psi & 0 & \sin \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \psi & 0 & \cos \psi \end{pmatrix}.$$

Tenzorové vlastnosti v oblasti (2) se transformují do požadované soustavy souřadnic následovně: Tenzory dielektrických vlastností:

$$\varepsilon'_{ij} = o_{ik} o_{jl} \varepsilon_{kl}, \quad \beta'_{ij} = o_{ik} o_{jl} \beta_{kl},$$

Tenzory elektromechanických vlastností:

$$\begin{aligned} d'_{ijk} &= o_{il} o_{jm} o_{kn} d_{lmn}, & g'_{ijk} &= o_{il} o_{jm} o_{kn} g_{lmn}, \\ h'_{ijk} &= o_{il} o_{jm} o_{kn} h_{lmn}, & e'_{ijk} &= o_{il} o_{jm} o_{kn} e_{lmn}, \end{aligned}$$

Tenzory mechanických vlastností:

$$s'_{ijkl} = o_{im} o_{jn} o_{ko} o_{lp} s_{mnop}, \quad c'_{ijkl} = o_{im} o_{jn} o_{ko} o_{lp} c_{mnop},$$

Vektor spontánní polarizace a tenzor spontánní deformace.

$$P'_{0,i} = o_{ij} P_{0,j}, \quad e'_{0,ij} = o_{ik} o_{jl} e_{0,kl}.$$

Vlastnosti transformované do zvolené soustavy souřadnic jsou v doménách (2+) a (2-) obecně jiné. Nicméně složky tenzorů, které se budou uplatňovat v následujícím výpočtu jsou v obou doménách stejné nebo opačné.

2.3.2 Homogenizace materiálových vlastností vrstvy (2)

V relativně tlustém vzorku můžeme předpokládat přibližně homogenní elektrické pole a mechanické napětí v jednotlivých vrstvách. Domény jsou mnohonásobně užší než jsou rozměry a a b .

Po vrstvách homogenní elektrické pole ve vzorku vytváří polarizaci a díky piezoelektrickým vlastnostem také deformaci, které se přičtou ke spontánní polarizaci a spontánní deformaci ve feroiku. Také po vrstvách homogenní mechanické napětí vytvoří obdobně příspěvek k polarizaci a deformaci ve vzorku.

Kvůli určení rovnovážného stavu takového systému nás bude dále zajímat jeho energie. Objemová hustota deformační energie se vypočítá $\frac{1}{2}\tau_{ij}(\mathbf{e}_{ij} - \mathbf{e}_{0,ij})$ a objemová hustota elektrické energie je analogicky $\frac{1}{2}\mathbf{E}_i(\mathbf{D}_i - \mathbf{P}_{0,i})$.

Deformace e_{ij} a $e_{0,ij}$, elektrická indukce D_i a spontánní polarizace $P_{0,i}$ se podél osy x ve feroické vrstvě periodicky mění. V uvažovaném případě bude celková energie vzorku závislá pouze na jejich střední hodnotě.

Z uvedených důvodů vyplývá, že feroickou vrstvu (2) můžeme považovat za přibližně homogenní prostředí v němž se materiálové vlastnosti projevují jen jako střední hodnota vlastností v jednotlivých doménách. Jsou-li všechny domény stejně široké, výsledná střední spontánní polarizace a deformace vrstvy (2) jsou nulové. Nenulové jsou, pokud doménová struktura je nesymetrická.

Zavedení asymetrie:

Na vzorku BaTiO_3 s rovnoměrnou 90° doménovou strukturou jaká je popsána na obr.2.1 bylo pozorováno, že pokud dochází k pohybům doménových stěn, mění se velikost jednotlivých domén, ale perioda $2w$ takové struktury zůstává přibližně konstantní. Asymetrii doménové struktury popisujeme faktorem:

$$A = \frac{w_+ - w_-}{2w}.$$

Asymetrie A má hodnotu z intervalu $\langle -1, 1 \rangle$. Hodnoty -1 a 1 znamenají, že celou oblast (2) zaplňuje doména $(2-)$ eventuelně doména $(2+)$. Pokud $A = 0$, jsou domény rozloženy symetricky.

Materiálové vlastnosti BaTiO_3 ve zvolené soustavě souřadnic v doméně $(2+)$

Vektor spontánní polarizace a tenzor spontánní deformace:

$$\begin{pmatrix} P'_{0,1} \\ 0 \\ P'_{0,1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} e'_{0,11} & 0 & e'_{0,13} \\ 0 & e'_{0,22} & 0 \\ e'_{0,13} & 0 & e'_{0,11} \end{pmatrix}.$$

Tenzor permitivity:

$$\begin{pmatrix} \epsilon'_{11} & 0 & \epsilon'_{13} \\ 0 & \epsilon'_{22} & 0 \\ \epsilon'_{13} & 0 & \epsilon'_{11} \end{pmatrix}.$$

Tenzor piezoelektrických koeficientů:

$$\begin{pmatrix} d'_{11} & d'_{12} & d'_{13} & 0 & d'_{15} & d'_{26} \\ 0 & 0 & 0 & d'_{24} & 0 & d'_{26} \\ d'_{13} & d'_{12} & d'_{11} & 0 & d'_{15} & 0 \end{pmatrix}$$

a tenzor poddajnosti:

$$\begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & s'_{15} & 0 \\ s'_{12} & s'_{22} & s'_{12} & 0 & s'_{25} & 0 \\ s'_{13} & s'_{12} & s'_{11} & 0 & s'_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & s'_{46} \\ s'_{15} & s'_{25} & s'_{15} & 0 & s'_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{46} & 0 & s'_{44} \end{pmatrix}.$$

Materiálové vlastnosti v doméně (2-)

Vektor spontánní polarizace a tenzor spontánní deformace:

$$\begin{pmatrix} P'_{0,1} \\ 0 \\ -P'_{0,1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} e'_{0,11} & 0 & -e'_{0,13} \\ 0 & e'_{0,22} & 0 \\ -e'_{0,13} & 0 & e'_{0,11} \end{pmatrix}.$$

Tenzor relativní permitivity:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon'_{11} & 0 & -\varepsilon'_{13} \\ 0 & \varepsilon'_{22} & 0 \\ -\varepsilon'_{13} & 0 & \varepsilon'_{11} \end{pmatrix}.$$

Tenzor piezoelektrických koeficientů:

$$\begin{pmatrix} d'_{11} & d'_{12} & d'_{13} & 0 & -d'_{15} & -d'_{26} \\ 0 & 0 & 0 & -d'_{24} & 0 & d'_{26} \\ -d'_{13} & -d'_{12} & -d'_{11} & 0 & d'_{15} & 0 \end{pmatrix}$$

a tenzor poddajnosti:

$$\begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & -s'_{15} & 0 \\ s'_{12} & s'_{22} & s'_{12} & 0 & -s'_{25} & 0 \\ s'_{13} & s'_{12} & s'_{11} & 0 & -s'_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & -s'_{46} \\ -s'_{15} & -s'_{25} & -s'_{15} & 0 & s'_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -s'_{46} & 0 & s'_{44} \end{pmatrix}.$$

Tenzory jsou uvedeny v maticové formě. V homogenním případě se materiálové vlastnosti ve vrstvě (2) budou projevovat jen jako průměrná hodnota závislá na asymetrii doménové struktury A.

Střední hodnoty materiálových vlastností ve vrstvě (2).

Vektor střední spontánní polarizace a tenzor střední spontánní deformace:

$$\begin{pmatrix} P'_{0,1} \\ 0 \\ AP'_{0,1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} e'_{0,11} & 0 & Ae'_{0,13} \\ 0 & e'_{0,22} & 0 \\ Ae'_{0,13} & 0 & e'_{0,11} \end{pmatrix}.$$

Pokud jsou pasivní vrstvy (1), (3) naneseny na vrstvu (2) v její feroelektrické fázi, musíme spontánní deformace ve směrech os x a y označit za nulové a ve směru osy z můžeme považovat spontánní deformaci za nulovou, proto položíme $e'_{0,11} = 0$ a $e'_{0,22} = 0$. Tenzor střední spontánní deformace bude mít tvar:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & Ae'_{0,13} \\ 0 & 0 & 0 \\ Ae'_{0,13} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tenzor střední permittivity:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon'_{11} & 0 & A\varepsilon'_{13} \\ 0 & \varepsilon'_{22} & 0 \\ A\varepsilon'_{13} & 0 & \varepsilon'_{11} \end{pmatrix}.$$

Tenzor středních piezoelektrických koeficientů:

$$\begin{pmatrix} d'_{11} & d'_{12} & d'_{13} & 0 & Ad'_{15} & Ad'_{26} \\ 0 & 0 & 0 & Ad'_{24} & 0 & d'_{26} \\ Ad'_{13} & Ad'_{12} & Ad'_{11} & 0 & d'_{15} & 0 \end{pmatrix}$$

a tenzor střední poddajnosti:

$$\begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} & s'_{13} & 0 & As'_{15} & 0 \\ s'_{12} & s'_{22} & s'_{12} & 0 & As'_{25} & 0 \\ s'_{13} & s'_{12} & s'_{11} & 0 & As'_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s'_{44} & 0 & As'_{46} \\ As'_{15} & As'_{25} & As'_{15} & 0 & s'_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & As'_{46} & 0 & s'_{44} \end{pmatrix}.$$

Na vznik nevlastních příspěvků mají významný vliv spontánní polarizace a spontánní deformace. Složky

$$\begin{aligned} \varepsilon_{13} &= A\varepsilon'_{13}, d_{333}^{(2)} = Ad'_{11}, d_{311}^{(2)} = Ad'_{13}, d_{322}^{(2)} = Ad'_{12}, d_{113}^{(2)} = d_{131}^{(2)} = \frac{1}{2}Ad'_{15}, \\ s_{1113}^{(2)} &= s_{1131}^{(2)} = s_{1311}^{(2)} = s_{3111}^{(2)} = s_{3313}^{(2)} = s_{3331}^{(2)} = s_{1333}^{(2)} = s_{3133}^{(2)} = \frac{1}{2}As'_{15}, \\ s_{2213}^{(2)} &= s_{2231}^{(2)} = s_{1322}^{(2)} = s_{3122}^{(2)} = \frac{1}{2}As'_{25} \end{aligned}$$

mají malý vliv na vznik nevlastních příspěvků k elektromechanickým vlastnostem pokud asymetrie A je malá. Další výsledky budou aktuální pro malé hodnoty asymetrie A .

Elektromechanické vlastnosti vrstev (1), (3)

Vlastnosti izolačních vrstev zvolíme tak, aby jejich tenzory měly pouze následující nenulové složky.

Tenzor permitivity:

$$\begin{pmatrix} \bullet & \cdot & \cdot \\ \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

Tenzor piezoelektrických koeficientů:

$$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \end{pmatrix}$$

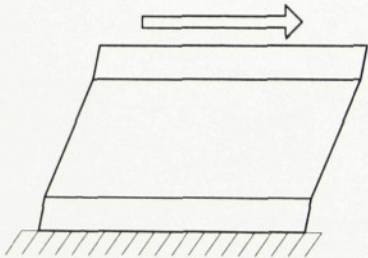
Tenzor poddajnosti:

$$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

Předpokládáme, že pasivní vrstvy jsou neferoelektrické a není v nich přítomna spontánní polarizace ani spontánní deformace.

2.4 Mechanické namáhání vzorku

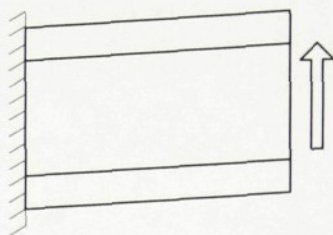
Střížné namáhání materiálu se obvykle provádí působením na dvě protilehlé okrajové plochy vzorku. V případě vzorku na obr.2.1 můžeme působit na roviny kolmé na osu z (viz. obr.2.2). Za uvedených předpokladů je v celém objemu konstantní tenzor mechanického napětí a tenzor deformace ve vrstvě (2) je obecně jiný než v izolačních vrstvách (1), (3).



Obrázek 2.2: Mechanické namáhání ploch kolmých na osu z .

Druhou možností je působení na okrajové plochy kolmé na osu x , obr.2.3. V tomto případě je konstantní deformace v celém objemu vzorku a obecně jiný tenzor mechanického napětí ve vrstvě (2) a vrstvách (1), (3). Tento případ mechanického chování vzorku formálně lépe odpovídá působení elektrického pole vytvořeného napětím na elektrodách.

Jeden ze zvolených předpokladů je nekonečná rozlehlost kondenzátorové desky. Vzorky na nákresech budou zobrazeny s konečnou velikostí, aby bylo možné popsat jejich okrajové podmínky.



Obrázek 2.3: Mechanické namáhání ploch kolmých na osu x .

2.5 Volba okrajových podmínek

Měření feroelektrických vzorků se provádí na deskových kondenzátorech při různých podmínkách. Na elektrody může být přivedeno konstantní napětí nebo konstantní náboj, vzorek může být namáhán konstantní silou nebo konstantně deformován. Každá konfigurace určuje obecně jiné okrajové podmínky. Máme čtyři možnosti.

- A Na elektrodách vzorku je zadán potenciál a na stěnách působící síla.
- B Je zadána celková deformace vzorku a volný náboj na elektrodách.
- C Je zadán potenciál na elektrodách a celková deformace.
- D Na stěnách je zadána síla a na elektrodách volný náboj.

Za nezávislou proměnnou bude zatím považována i asymetrie doménové struktury A . Závislost asymetrie na okrajových podmínkách bude získána z jejího vlivu na energii systému.

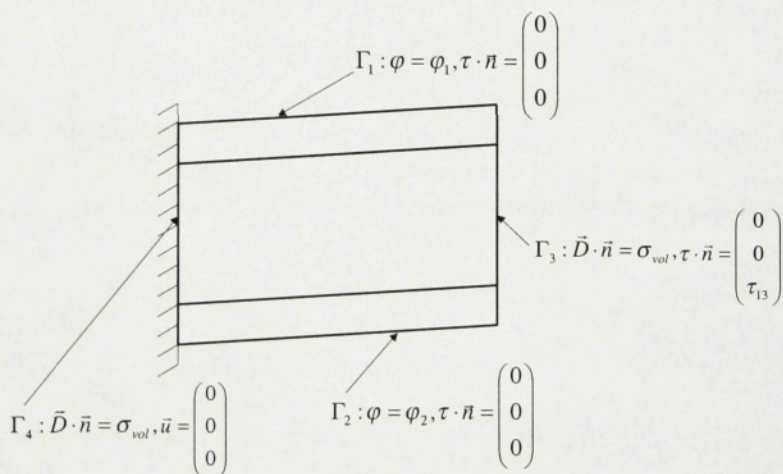


Kapitola 3

Okrajové podmínky A

Vzorek má na elektrodách Γ_1, Γ_2 viz. obr.3.1 zadaný konstantní elektrický potenciál. Na ostatních stěnách vzorku Γ_3, Γ_4 předpokládáme úplné kompenzování polarizačního náboje volným nábojem z okolního prostředí.

Uvažovaný vzorek má na stěně Γ_4 nulové mechanické posunutí u . Na stěnu Γ_3 působí síla. Stěny Γ_1, Γ_2 jsou volné.



Obrázek 3.1: Okrajové podmínky A.

Na obr.3.1 je u mechanické posunutí, φ elektrický potenciál a $\vec{n}$ jednotkový normálový vektor příslušných ploch směrem ven ze vzorku.

Elektrické pole:

Pokud na elektrodách je po celé ploše konstantní potenciál, musí elektrické pole ve vzorku mít směr rovnoběžný s osou z .

$$E_1^{(1)}(x, y, z) = 0, \quad E_2^{(1)}(x, y, z) = 0,$$

$$E_1^{(2)}(x, y, z) = 0, \quad E_2^{(2)}(x, y, z) = 0.$$

Toto chování vyplývá z Maxwellovy rovnice v elektrostatickém případě:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0,$$

a rovnice:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi.$$

Elektrická energie je závislá na skalárním součinu elektrického pole a elektrické indukce, pro její výpočet bude mít význam jen složka vektoru elektrické indukce D_3 .

Tenzor mechanického napětí:

Mechanické namáhání popsané na obr.3.1 je střížné v rovině $x - z$. V celém objemu vzorku vytváří za daných podmínek pouze střížné mechanické napětí:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \tau_{13} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Jeho hodnota je v každé vrstvě obecně jiná.

Elektrická indukce

Složka střední elektrické indukce D_3 je v celém objemu vzorku konstantní. Pokud všechny tři vrstvy mají ideální izolační vlastnosti, nevyskytuje se ve vzorku volný náboj $\sigma_{\text{vol}} = 0$ a v elektrostatickém případě platí Maxwellova rovnice 3.1.

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \sigma_{\text{vol}} \Rightarrow \frac{\partial D_3}{\partial z} = 0. \quad (3.1)$$

Tenzor deformace

Ve vzorku bude za daných podmínek vznikat pouze deformace:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ e_{13} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

která bude ve všech vrstvách stejná. V takovém případě budou dále figurovat jen některé materiálové koeficienty, konkrétně $\varepsilon_{33}^\tau, d_{313}, s_{1313}^E, P_{0,3}, e_{0,13}$.

Stavové rovnice (2.1, 2.2) vrstvy (1) mají konkrétní tvar:

$$D_3 = \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(1),\tau} E_3^{(1)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(1)}, \quad (3.2)$$

$$e_{13} = 2s_{1313}^{(1),E} \tau_{13}^{(1)} + d_{313}^{(1)} E_3^{(1)}, \quad (3.3)$$

a vrstvy (2):

$$D_3 = AP_{0,3} + \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(2),\tau} E_3^{(2)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(2)}, \quad (3.4)$$

$$e_{13} = Ae_{0,13} + s_{1313}^{(2),E} \tau_{13}^{(2)} + 2d_{313}^{(2)} E_3^{(2)}. \quad (3.5)$$

3.1 Elektrické pole a tenzor mechanického napětí v jednotlivých vrstvách

Vektor elektrického pole má v celém vzorku směr osy z . Jeho velikost je však v každé vrstvě obecně jiná.

Celkové napětí na vzorku je součtem elektrického napětí na jednotlivých vrstvách.

$$V_1 + V_2 = V, \quad (3.6)$$

a elektrické pole je:

$$\begin{aligned} E_3^{(1)} &= \frac{V_1}{2a}, \\ E_3^{(2)} &= \frac{V_2}{b}, \\ E_3 &= \frac{V}{2a + b}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

kde E_3 budeme nazývat vnějším elektrickým polem. Vztah mezi elektrickým polem v jednotlivých vrstvách a vnějším polem vyplývá z rovnic (3.7, 3.6).

$$2aE_3^{(1)} + bE_3^{(2)} = (2a + b)E_3. \quad (3.8)$$

Obdobný vztah získáme i pro mechanické napětí. Celková síla která působí na stěnu vzorku Γ_3 se musí rozdělit na jednotlivé vrstvy tak, aby v nich způsobila stejnou mechanickou deformaci.

$$F_1 + F_2 = F. \quad (3.9)$$

Dále bude počítáno s hustotou energie, proto síly působí na stěnu Γ_3 vzorku s jednotkovou plochou v rovině $x - y$. Platí:

$$\begin{aligned} \tau_{13}^{(1)} &= \frac{F_1}{2a}, \\ \tau_{13}^{(2)} &= \frac{F_2}{b}, \\ \tau_{13} &= \frac{F}{2a + b}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

τ_{13} budeme nazývat vnějším mechanickým napětím. Z rovnic (3.9, 3.10) vyplývá:

$$2a\tau_{13}^{(1)} + b\tau_{13}^{(2)} = (2a + b)\tau_{13}. \quad (3.11)$$

Nyní máme zavedeny vztahy mezi extenzivními a intenzivními veličinami v jednotlivých vrstvách.

Díky uvedené volbě okrajových podmínek a všem předpokladům, můžeme vnější elektrické pole E_3 a mechanické napětí τ_{13} považovat za nezávislé veličiny. Nezávislou veličinou je také asymetrie doménové struktury A . Z rovnic (3.8, 3.11) a stavových rovnic pro vrstvu (2) (3.4, 3.5) a vrstvu (1) (3.2, 3.3) můžeme obecně vyjádřit extenzivní veličiny.

$$\begin{aligned} D_3 &= D_3(E_3, \tau_{13}, A), & e_{13} &= e_{13}(E_3, \tau_{13}, A), \\ E_3^{(1)} &= E_3^{(1)}(E_3, \tau_{13}, A), & E_3^{(2)} &= E_3^{(2)}(E_3, \tau_{13}, A), \\ \tau_{13}^{(1)} &= \tau_{13}^{(1)}(E_3, \tau_{13}, A), & \tau_{13}^{(2)} &= \tau_{13}^{(2)}(E_3, \tau_{13}, A). \end{aligned}$$

3.2 Vnitřní energie

Celková vnitřní energie vzorku (obr.2.1) se skládá z elektrické energie, deformační energie a energie doménových stěn. Objemová hustota deformační energie je $\frac{1}{2}\tau_{ij}(\mathbf{e}_{ij} - \mathbf{e}_{0,ij})$ a objemová hustota elektrické energie je analogicky $\frac{1}{2}\mathbf{E}_i(\mathbf{D}_i - \mathbf{P}_{0,i})$ viz.[11]. Hustotu energie doménových stěn označme σ_w . Hustota energie doménových stěn je vztahována na jednotku plochy doménové stěny. Velikost doménových stěn se u uvažovaného vzorku nemění, proto hodnota jejich energie je konstantní a neovlivňuje podobu rovnovážného stavu.

Zajímá nás plošná hustota energie na jednotku plochy výbrusu, dále bude nazývána jen hustotou energie. Získáme ji integrací objemové hustoty energie přes objem odpovídající jednotce plochy výbrusu.

Hustota elektrická energie

$$U_{el} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} E_i(D_i - P_{0,i}) dx dy dz. \quad (3.12)$$

Hustota elektrická energie vzorku (obr.2.1) za uvedených předpokladů se získá:

$$U_{el}(E_3, \tau_{13}, A) = \frac{1}{2} \int_{(1),(3)} E_3^{(1)} D_3 dx dy dz + \frac{1}{2} \int_{(2)} E_3^{(2)} (D_3 - AP_{0,3}) dx dy dz. \quad (3.13)$$

Hustota deformační energie

$$U_{def} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tau_{ij}(e_{ij} - e_{0,ij}) dx dy dz. \quad (3.14)$$

Hustota deformační energie vzorku se za daných předpokladů získá:

$$U_{def}(E_3, \tau_{13}, A) = \int_{(1),(3)} \tau_{13}^{(1)} e_{13} dx dy dz + \int_{(2)} \tau_{13}^{(2)} (e_{13} - A e_{0,13}) dx dy dz. \quad (3.15)$$

Hustota energie doménových stěn

Doménové stěny mají hustotu energie σ_w vztaženou na plochu doménové stěny. Z rozměru doménových stěn a jejich periody získáme energii vztaženou na jednotkovou plochu výbrusu:

$$U_w = \frac{\sigma_w b}{w}. \quad (3.16)$$

Celková hustota energie

Celková plošná hustota vnitřní energie je součtem dílčích hustot energie:

$$U(E_3, \tau_{13}, A) = U_{el}(E_3, \tau_{13}, A) + U_{def}(E_3, \tau_{13}, A) + U_w. \quad (3.17)$$

3.3 Rovnovážná asymetrie

Systém se bude chovat tak, aby jeho Gibbsův termodynamický potenciál byl minimální. Gibbsův potenciál se získá jako rozdíl vnitřní energie a práce vnějšího elektrického a mechanického zdroje.

$$G(E_3, \tau_{13}, A) = U(E_3, \tau_{13}, A) - W_{el} - W_{def},$$

kde práce vnějších zdrojů na jednotku plochy vzorku je:

$$W_{el} = (2a + b)E_3 D_3,$$

$$W_{def} = (2a + b)\tau_{13}e_{13}.$$

Systém je v rovnováze, je-li variace Gibsova potenciálu nulová.

$$\delta G(E_3, \tau_{13}, A) = 0. \quad (3.18)$$

Ke změně elektrické práce může dojít jen se změnou elektrické indukce a také deformační práce se může měnit pouze se změnou deformace. Variace elektrické a mechanické práce je:

$$\delta W_{el} = (2a + b)E_3 \delta D_3,$$

$$\delta W_{def} = (2a + b)\tau_{13} \delta e_{13}.$$

Jak bylo uvedeno elektrická indukce a deformace jsou v tomto případě závislé na asymetrii doménové struktury A . Asymetrie také zůstává posledním nezávislým vnitřním parametrem, který může ovlivnit velikost Gibsova potenciálu. Vnější elektrické pole a mechanické napětí

považujeme za jednoznačně dané, jejich hodnoty jsou proto zároveň rovnovážnými hodnotami. Můžeme psát:

$$\delta D_3(E_3, \tau_{13}, A) = \frac{\partial D_3(E_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A,$$

$$\delta e_{13}(E_3, \tau_{13}, A) = \frac{\partial e_{13}(E_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A.$$

Podmínka rovnováhy (3.18) má tvar:

$$\frac{\partial U(E_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A - (2a + b) E_3 \frac{\partial D_3(E_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A - (2a + b) \tau_{13} \frac{\partial e_{13}(E_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A = 0 \quad (3.19)$$

Řešením tohoto problému získáme rovnovážnou asymetrii doménové struktury v závislosti na vnějším elektrickém poli a mechanickém napětí.

$$A = A(E_3, \tau_{13})$$

Získáním vztahu pro rovnovážnou asymetrii domén máme úplně určeno řešení problému. Nyní při zadaných okrajových podmínkách můžeme kompletně popsat rovnovážný stav. Známe závislost všech vnitřních parametrů v rovnovážném stavu na vnějších parametrech E_3 a τ_{13} .

$$D_3 = D_3(E_3, \tau_{13}), \quad e_{13} = e_{13}(E_3, \tau_{13}),$$

$$E_3^{(1)} = E_3^{(1)}(E_3, \tau_{13}), \quad E_3^{(2)} = E_3^{(2)}(E_3, \tau_{13}),$$

$$\tau_{13}^{(1)} = \tau_{13}^{(1)}(E_3, \tau_{13}), \quad \tau_{13}^{(2)} = \tau_{13}^{(2)}(E_3, \tau_{13}).$$

3.4 Stabilita

Systém zůstane v rovnovážném stavu pouze pokud je stabilní. Podmínka (3.19) udává jen extrém Gibsova potenciálu. Je nutné vyšetřit, zda se jedná o minimum a rovnovážná konfigurace je také stabilní. Variace druhého řádu Gibsova potenciálu musí být kladná. Podmínka stability:

$$\delta^2 G(E_3, \tau_{13}, A) = \delta^2 U(E_3, \tau_{13}, A) > 0. \quad (3.20)$$

Zajímá nás Gibsův potenciál v závislosti na asymetrii A . Proto podmínka stability (3.20) feroelektrického vzorku může být napsána:

$$\frac{\partial^2 U(E_3, \tau_{13}, A)}{\partial A^2} \delta^2 A > 0.$$

Konkrétní výsledky budou dále uváděny se zjednodušeným značením.

Zjednodušené značení

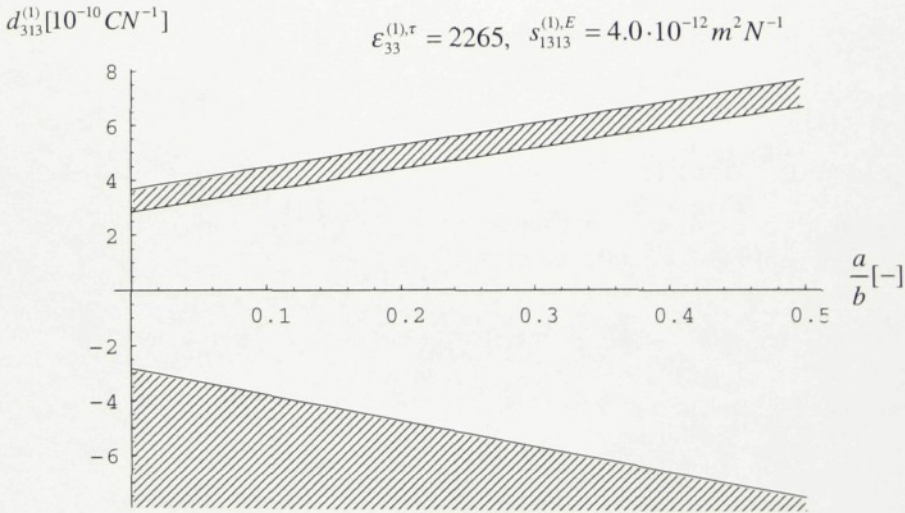
$$\begin{aligned}
 \varepsilon_1 &= \varepsilon_{33}^{(1),\tau}, & \varepsilon_2 &= \varepsilon_{33}^{(2),\tau}, \\
 s_1 &= s_{1313}^{(1),E}, & s_2 &= s_{1313}^{(2),E}, \\
 d_1 &= d_{313}^{(1)}, & d_2 &= d_{313}^{(2)}, \\
 P_0 &= P_{0,3}, & e_0 &= e_{0,13}.
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Konkrétní podmínka stability volného zkratovaného vzorku je:

$$\frac{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_0^2 - 2d_1 e_0 P_0 + s_1 P_0^2) + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}{b^2(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) + 2ab(\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_1 + \varepsilon_0 \varepsilon_1 s_2 - 2d_1 d_2) + 4a^2(\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2)} > 0. \tag{3.22}$$

Explicitně vyjádřené výsledky byly získány s pomocí programu *Mathematica*.

Výraz v podmínce stability je závislý pouze na materiálových konstantách a rozměrech vzorku. Materiálové konstanty BaTiO₃ jsou jednoznačně dané. Stabilitu feroelektrického vzorku můžeme ovlivnit volbou materiálu pasivních vrstev (1), (3) nebo volbou poměru tloušťek jednotlivých vrstev $\frac{a}{b}$. Nestabilita v tomto případě by znamenala, že doménové stěny mají tendenci vytvářet asymetrickou doménovou strukturu. Došlo by samovolně k celkové deformaci a polarizaci vzorku i bez vnějšího působení elektrického pole nebo mechanického namáhání.



Obrázek 3.2: Oblast stability vzorku s okrajovými podmínkami A.

Oblast stability je znázorněna na obr.3.2. Nestabilní oblast je vyznačena šrafováním. Oblast stability nejvíce ovlivňuje přítomnost vlastního piezoelektrického koeficientu. Velikost vlastní permitivity a poddajnosti vrstev (1) a (3) posouvají polohu hranice oblast stability. Materiálové vlastnosti vrstvy (1) uvedené v grafu vpravo nahoře byly voleny libovolně.

Výraz v (3.22) je málo předhledný. Dále je uveden výsledek pro vzorek složený z vrstev, které mají kromě spontánní polarizace a spontánní deformace stejné vlastní materiálové koeficienty:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_{33}^{(2),\tau},$$

$$s_1 = s_2 = s_{1313}^{(2),E},$$

$$d_1 = d_2 = d_{313}^{(2)}.$$

Speciální případ vztahu (3.22) pro stejné materiálové vlastnosti ve všech vrstvách vypadá následovně:

$$\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} > 0.$$

3.5 Efektivní materiálové vlastnosti

Nyní máme vyjádřeny vztahy mezi extenzivními a intenzivními veličinami a je proto možné určit efektivní vlastnosti vzorku s okrajovými podmínkami A. Vlastnosti vyjádříme efektivními materiálovými koeficienty. Efektivní chování vzorku je popsáno lineárními stavovými rovnicemi (3.23, 3.24). Vnější elektrické pole E_3 a vnější mechanické napětí τ_{13} jsou definovány ve vztazích (3.7) a (3.10).

$$D_3 = \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{eff,\tau} E_3 + 2d_{313}^{eff} \tau_{13}, \quad (3.23)$$

$$e_{13} = d_{313}^{eff} E_3 + 2s_{1313}^{eff,E} \tau_{13}. \quad (3.24)$$

Z rovnic (3.23, 3.24) můžeme získat efektivní materiálové koeficienty $\varepsilon_{33}^{eff,\tau}$, $s_{1313}^{eff,E}$ a d_{313}^{eff} .

3.5.1 Efektivní permitivita $\varepsilon_{33}^{eff,\tau}$

Efektivní relativní permitivitu vyjádříme u vzorku s okrajovými podmínkami A ze vztahu (3.23). Mechanické napětí položíme rovno nule, $\tau_{13} = 0$.

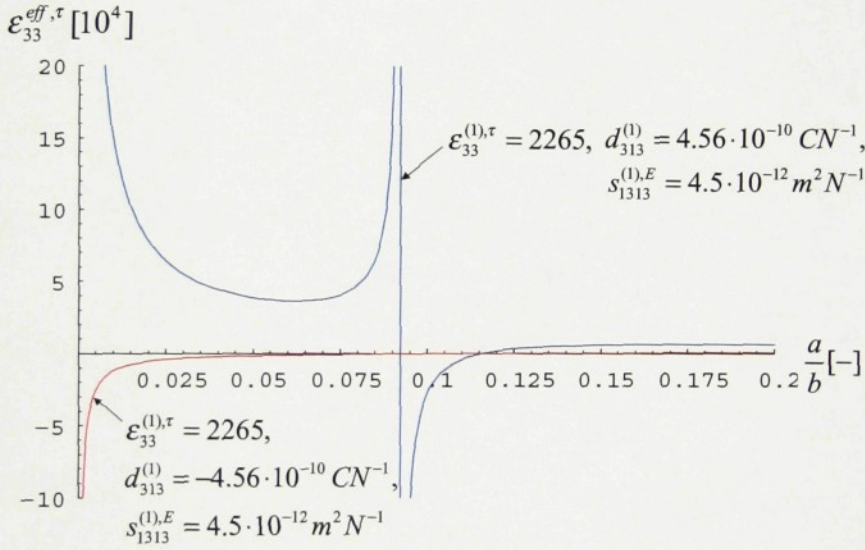
$$\varepsilon_{33}^{eff,\tau} = \frac{D_3(E_3, \tau_{13} = 0)}{\varepsilon_0 E_3}.$$

Výsledná relativní efektivní permitivita má následující tvar:

$$\varepsilon_{33}^{eff,\tau} = \frac{2a + b}{\varepsilon_0 2a} \cdot \frac{bP_0^2(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) + 2a\varepsilon_0 \varepsilon_1 (\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_0^2 - 2d_1 e_0 P_0 + s_1 P_0^2) + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}. \quad (3.25)$$

Výraz je zapsán v již uvedeném zjednodušeném značení (3.21).

V grafu na obr.3.3 jsou vyneseny průběhy závislosti efektivní permitivity na poměru tlouštěk jednotlivých vrstev $\frac{a}{b}$ a různých materiálových vlastnostech vrstev (1), (3). Vlastnosti pasivních vrstev jsou voleny libovolně. Červená křivka znázorňuje průběh rovnovážné efektivní permitivity přecházející z oblasti nestability do oblasti stability. Modrá křivka platí pro rovnovážnou efektivní permitivitu přecházející přes nestabilní oblast. Ve stabilní oblasti mohou být pouze části grafu, kde je hodnota efektivní permitivity kladná. Zajímavé jsou hodnoty permitivity blížící se nekonečnu i pro stabilní vzorek.



Obrázek 3.3: Závislost efektivní permitivity na poměru $\frac{a}{b}$.

Vztah (3.26) platí pro vzorek složený z vrstev, které mají kromě spontánní polarizace a spontánní deformace stejné vlastní materiálové koeficienty.

$$\varepsilon_{33}^{eff,\tau} = \varepsilon_2 + \frac{b}{\varepsilon_0 2a} \frac{P_0^2}{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \varepsilon_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} - \frac{2d_2 \varepsilon_0 P_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} + \frac{s_2 P_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2}}. \quad (3.26)$$

3.5.2 Efektivní poddajnost $s_{1313}^{eff,E}$

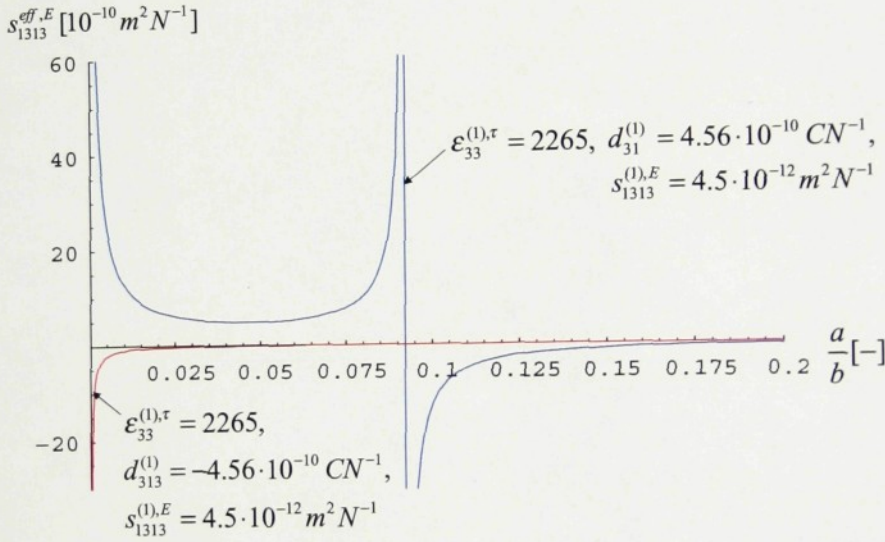
Obdobným způsobem jako efektivní permitivitu získáme ze vztahu (3.24) efektivní poddajnost. Při nulovém elektrickém poli $E_3 = 0$ platí:

$$s_{1313}^{eff,E} = \frac{e_{13}(E_3 = 0, \tau_{13})}{2\tau_{13}}.$$

Výsledná efektivní poddajnost má tvar:

$$s_{1313}^{eff,E} = \frac{2a+b}{2a} \cdot \frac{be_0^2(\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2) + 2as_1(\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2)}{b(\varepsilon_0\varepsilon_1e_0^2 - 2d_1e_0P_0 + s_1P_0^2) + 2a(\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2)}. \quad (3.27)$$

Efektivní poddajnost při konstantním elektrickém poli má podobnou závislost (obr.3.4) na



Obrázek 3.4: Závislost efektivní poddajnosti na poměru $\frac{a}{b}$.

rozměrech jako efektivní permitivita při konstantním mechanickém napětí.

Podobnost získaných vztahů pro efektivní permitivitu a poddajnost potvrzuje výraznou analogii mezi elektrickým a mechanickým chováním vzorku.

Pro případ shodných vlastností v obou vrstvách má výraz (3.27) tvar:

$$s_{1313}^{eff,E} = s_2 + \frac{b}{2a} \frac{e_0^2}{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2} - \frac{2d_2e_0P_0}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2} + \frac{s_2P_0^2}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2}}.$$

3.5.3 Efektivní přímý piezoelektrický koeficient d_{313}^{eff}

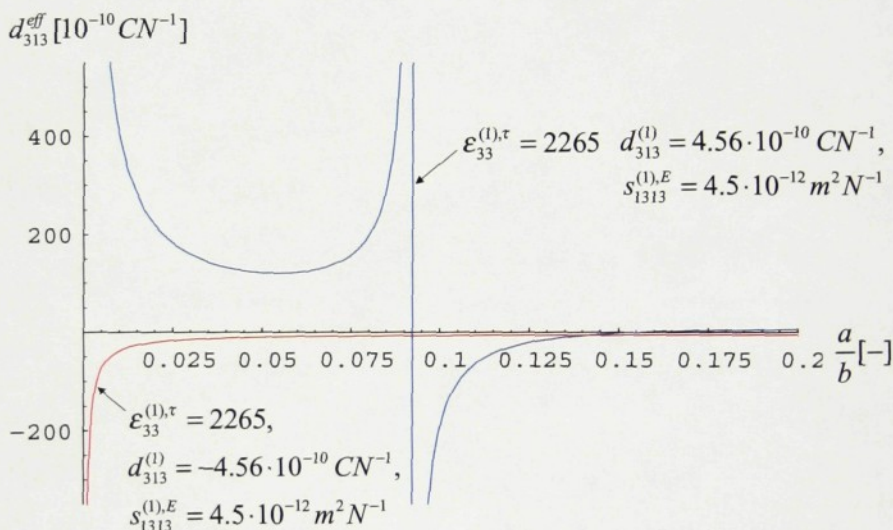
Efektivní přímý piezoelektrický koeficient vyjádříme pro vzorek s okrajovými podmínkami A ze vztahu (3.23) při nulovém elektrickém poli $E_3 = 0$.

$$d_{313}^{eff} = \frac{D_3(E_3 = 0, \tau_{13})}{2\tau_{13}}.$$

Výsledný efektivní přímý piezoelektrický koeficient má tvar:

$$d_{313}^{eff} = \frac{2a+b}{2a} \cdot \frac{be_0P_0(\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2) + 2ad_1(\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2)}{b(\varepsilon_0\varepsilon_1e_0^2 - 2d_1e_0P_0 + s_1P_0^2) + 2a(\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2)}. \quad (3.28)$$

Závislost efektivního piezoelektrického koeficientu (obr.3.5) na rozměrech je obdobná jako



Obrázek 3.5: Závislost efektivního piezoelektrického koeficientu na poměru $\frac{a}{b}$.

závislosti efektivní permitivity a poddajnosti.

V případě stejných materiálových vlastností ve všech vrstvách má efektivní přímý piezoelektrický koeficient tvar:

$$d_{313}^{eff} = d_2 + \frac{b}{2a} \frac{e_0P_0}{\frac{\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2} - \frac{2d_2e_0P_0}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2} + \frac{s_2P_0^2}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2}}. \quad (3.29)$$

3.5.4 Efektivní inverzní piezoelektrický koeficient d_{313}^{eff}

Efektivní inverzní piezoelektrický koeficient získáme ze vztahu (3.24) při konstantním mechanickém napětí $\tau_{13} = 0$.

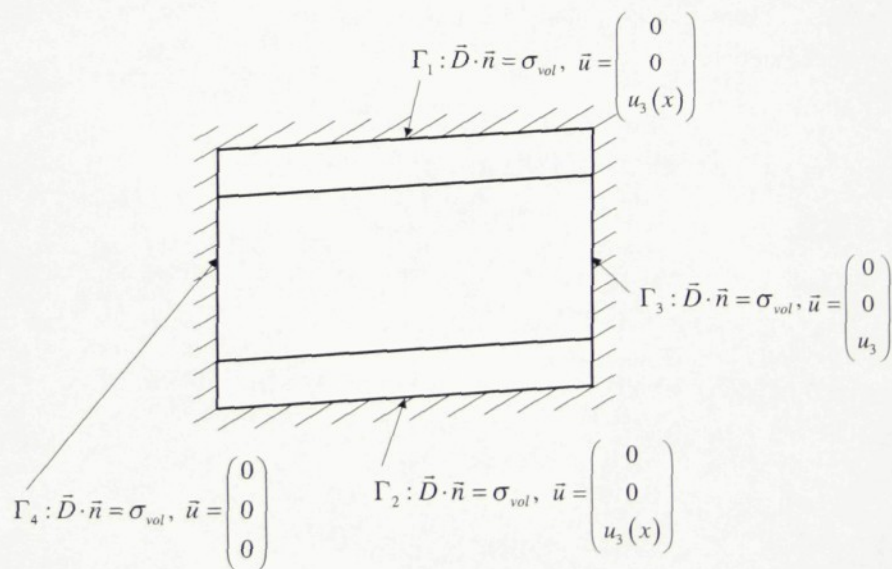
$$d_{313}^{eff} = \frac{e_{13}(E_3, \tau_{13} = 0)}{E_3}.$$

Přímý a inverzní piezoelektrický koeficient by měly mít vždy stejnou hodnotu, proto jsou také stejně značeny, získané vztahy tento předpoklad splňují. Proto vztahy (3.29) a (3.28) zde nejsou znova uvedeny.

Kapitola 4

Okrajové podmínky B

Předpokládejme, že vzorek má na elektrodách Γ_1, Γ_2 viz. obr.4.1 zadaný náboj σ_{vol} . Na stěnách Γ_3, Γ_4 je polarizační náboj kompenzován volným nábojem. Vzorek je na všech plochách mechanicky upnutý, a je střížně deformovaný v rovině $x - z$.



Obrázek 4.1: Okrajové podmínky B.

Elektrická indukce

Složka elektrické indukce D_3 je v případě ideálně nevodivého materiálu v celém objemu vzorku konstantní. Platí Maxwellova rovnice (4.1).

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \sigma_{vol} \implies \frac{\partial D_3}{\partial z} = 0. \quad (4.1)$$

Elektrická indukce ve směru osy x $D_1^{(1)}$ ve vrstvách (1) a (3) je za uvedených podmínek nulová, protože vrstvy (1) a (3) nemají spontánní polarizaci. Složka elektrické indukce $D_1^{(2)}$ ve vrstvě (2) je vytvářena volným nábojem, který kompenzuje polarizační náboj na stěně Γ_3 a Γ_4 proto $D_1^{(2)} = P_{0,1}$.

Tenzor deformace

Vzorek je v celém objemu stejně střížně deformován.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ e_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nevzniká ani deformace $e_{33}^{(1,3)}, e_{33}^{(2)}$ v jednotlivých vrstvách, protože materiály jsou nestlačitelné.

Elektrické pole:

Měkká¹ elektrická indukce je pouze ve směru osy z . Pro výpočet energie bude významná jen složka elektrické pole E_3 . Ostatní složky jsou v tomto konkrétním případě také nulové.

Tenzor mechanického napětí:

Vzorek je pouze střížně deformován. Za daných okolností bude ve vzorku vznikat pouze střížné mechanické napětí.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \tau_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

V takovém případě budou dále figurovat jen materiálové koeficienty $\varepsilon_{33}^\tau, d_{313}, s_{1313}^E, P_{0,3}, e_{0,13}$.

Stavové rovnice (2.7, 2.8) vrstvy (1) mají konkrétní podobu :

$$\begin{aligned} E_3^{(1)} &= \beta_{33}^{(1),e} D_3 - h_{313}^{(1)} e_{13}, \\ \tau_{13}^{(1)} &= c_{1313}^{(1),D} e_{13} - h_{313}^{(1)} D_3, \end{aligned}$$

a vrstvy (2):

$$\begin{aligned} E_3^{(2)} &= \beta_{33}^{(2),e} (D_3 - AP_{0,3}) - h_{313}^{(2)} (e_{13} - Ae_{0,13}), \\ \tau_{13} &= c_{1313}^{(2),D} (e_{13} - Ae_{0,13}) - h_{313}^{(2)} (D_3 - AP_{0,3}). \end{aligned}$$

Rovnice jsou uvedeny ve tvaru s nezávislými veličinami na pravé straně. Pokud uvážíme všechny uvedené předpoklady platí v tomto případě také stavové rovnice (2.1, 2.2) pro vrstvy (1) a (3):

$$D_3 = \varepsilon_{033}^{(1),\tau} E_3^{(1)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(1)}, \quad (4.2)$$

$$e_{13} = 2s_{1313}^{(1),E} \tau_{13}^{(1)} + d_{313}^{(1)} E_3^{(1)}, \quad (4.3)$$

¹Měkká elektrická indukce není vytvářena v důsledku přítomnosti spontánní polarizace.

a pro vrstvu (2):

$$D_3 = AP_{0,3} + \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(2),\tau} E_3^{(2)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(2)}, \quad (4.4)$$

$$e_{13} = Ae_{0,13} + s_{1313}^{(2),E} \tau_{13}^{(2)} + 2d_{313}^{(2)} E_3^{(2)}. \quad (4.5)$$

4.1 Elektrické pole a tenzor mechanického napětí v jednotlivých vrstvách

Také ve vzorku s okrajovými podmínkami B platí pro elektrické pole rovnice:

$$2aE_3^{(1)} + bE_3^{(2)} = (2a + b)E_3, \quad (4.6)$$

a pro mechanické napětí:

$$2a\tau_{13}^{(1)} + b\tau_{13}^{(2)} = (2a + b)\tau_{13}. \quad (4.7)$$

Za nezávislé proměnné vzorku můžeme považovat elektrickou indukci D_3 , která je dána volným nábojem na elektrodách, a deformaci vzorku e_{13} , která je dána upnutím. Asymetrie doménové struktury A je opět volným parametrem, který ovlivňuje velikost vnitřní energie. Z rovnic (4.6, 4.7) a stavových rovnic pro vrstvu (2) (4.2, 4.5) a vrstvu (1) (4.4, 4.5) vyjádříme závislé veličiny.

$$E_3 = E_3(D_3, e_{13}, A), \quad \tau_{13} = \tau_{13}(D_3, e_{13}, A),$$

$$E_3^{(1)} = E_3^{(1)}(D_3, e_{13}), \quad E_3^{(2)} = E_3^{(2)}(D_3, e_{13}),$$

$$\tau_{13}^{(1)} = \tau_{13}^{(1)}(D_3, e_{13}, A), \quad \tau_{13}^{(2)} = \tau_{13}^{(2)}(D_3, e_{13}, A).$$

$E_3^{(1)}$ a $\tau_{13}^{(1)}$ by podle všech předpokladů neměly být závislé na asymetrii domén, jsou jednoznačně určeny deformací a elektrickou indukcí.

Ve zjednodušeném značení (3.21) jsou konkrétní výsledky.

$$E_3(D_3, e_{13}, A) = \frac{2a(s_1 D_3 - d_1 e_{13})}{(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2)} - \frac{b(d_2(e_{13} - Ae_0) - s_2(D_3 - AP_0))}{(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2)}, \quad (4.8)$$

$$\tau_{13}(D_3, e_{13}, A) = \frac{a(\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_{13} - d_1 D_3)}{(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2)} - \frac{b(d_2(D_3 - AP_0) - s_2(e_{13} - Ae_0))}{2(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2)}, \quad (4.9)$$

$$E_3^{(1)}(D_3, e_{13}) = \frac{s_1 D_3 - d_1 e_{13}}{\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2}, \quad (4.10)$$

$$\tau_{13}^{(1)}(D_3, e_{13}) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_{13} - d_1 D_3}{2(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2)}, \quad (4.11)$$

$$E_3^{(2)}(D_3, e_{13}, A) = -\frac{d_2(e_{13} - Ae_0) - s_2(D_3 - AP_0)}{\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2}, \quad (4.12)$$

$$\tau_{13}^{(2)}(D_3, e_{13}, A) = -\frac{d_2(D_3 - AP_0) - s_2(e_{13} - Ae_0)}{2(\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2)}. \quad (4.13)$$

4.2 Vnitřní energie

Hustotu vnitřní energie získáme v závislosti na elektrické indukci D_3 , deformaci e_{13} a asymetrii doménové struktury A .

Hustota elektrické energie

Hustotu elektrické energie vypočítáme:

$$U_{el}(D_3, e_{13}, A) = \frac{1}{2} \int_{(1),(3)} E_3^{(1)} D_3 dx dy dz + \frac{1}{2} \int_{(2)} E_3^{(2)} (D_3 - AP_{0,3}) dx dy dz.$$

Dosažením (4.8, 4.9, 4.10, 4.11, 4.12, 4.13) získáme výslednou hustotu elektrické energie. Výsledná hustota elektrická energie ve zjednodušeném značení (3.21) má tvar:

$$U_{el}(D_3, e_{13}, A) = \frac{aD_3(s_1D_3 - d_1e_{13})}{\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2} - \frac{b(D_3 - AP_0)(d_2(e_{13} - Ae_0) - s_2(D_3 - AP_0))}{2(\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2)}.$$

Hustota deformační energie

Hustotu deformační energie vypočítáme:

$$U_{def}(D_3, e_{13}, A) = \int_{(1),(3)} \tau_{13}^{(1)} e_{13} dx dy dz + \int_{(2)} \tau_{13}^{(2)} (e_{13} - Ae_{0,13}) dx dy dz.$$

Výsledná hustota deformační energie má tvar:

$$U_{def}(D_3, e_{13}, A) = \frac{ae_{13}(\varepsilon_0\varepsilon_1e_{13} - d_1D_3)}{\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2} - \frac{b(e_{13} - Ae_0)(d_2(D_3 - AP_0) - s_2(e_{13} - Ae_0))}{2(\varepsilon_0\varepsilon_2s_2 - d_2^2)}.$$

Hustota energie doménových stěn

Hustota energie doménových stěn je konstantní a zůstává stejná jako v případě vzorku s okrajovými podmínkami A.

$$U_w = \frac{\sigma_w b}{w}.$$

Celková hustota energie

Celková hustota energie je opět součtem dílčích hustot energií.

$$U(D_3, e_{13}, A) = U_{el}(D_3, e_{13}, A) + U_{def}(D_3, e_{13}, A) + U_w.$$

4.3 Rovnovážná asymetrie

Gibbsův potenciál:

$$G(D_3, e_{13}, A) = U(D_3, e_{13}, A) - W_{el} - W_{def}.$$

Vztah pro práci vnějších zdrojů zůstává stejný jako v případě okrajových podmínek A:

$$W_{el} = (2a + b)E_3 D_3,$$

$$W_{def} = (2a + b)\tau_{13}e_{13}.$$

Variace práce vnějších zdrojů je také stejná protože ke změně elektrické a deformační práce může dojít jen se změnou elektrické indukce a deformace.

$$\delta W_{el} = (2a + b)E_3 \delta D_3,$$

$$\delta W_{def} = (2a + b)\tau_{13} \delta e_{13}.$$

Elektrická indukce a deformace jsou nezávislé proměnné, proto platí:

$$\delta D_3 = \frac{\partial D_3}{\partial A} \delta A = 0,$$

$$\delta e_{13} = \frac{\partial e_{13}}{\partial A} \delta A = 0.$$

Je zřejmé, že pokud upneme a izolujeme vzorek, nekonají na něm vnější zdroje žádnou práci. Rovnice rovnováhy:

$$\delta G(D_3, e_{13}, A) = 0,$$

bude v tomto případě mít tvar:

$$\frac{\partial U(D_3, e_{13}, A)}{\partial A} \delta A = 0.$$

Řešením tohoto standardního problému získáme rovnovážnou asymetrii doménové struktury v závislosti na elektrické indukci a deformaci.

$$A(D_3, e_{13}) = \frac{e_{13}(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0 - d_2 P_0) + D_3(s_2 P_0 - d_2 e_0)}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2}. \quad (4.14)$$

Veškeré závislé veličiny můžeme vyjádřit jako funkce D_3 a e_{13} dosazením asymetrie (4.14) do rovnic (4.8, 4.9, 4.10, 4.11, 4.12, 4.13).

$$E_3(D_3, e_{13}) = \frac{2a(s_1 D_3 - d_1 e_{13})}{(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2)} + \frac{be_0(e_0 D_3 - P_0 e_{13})}{(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)},$$

$$\tau_{13}(D_3, e_{13}) = \frac{a(\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_{13} - d_1 D_3)}{(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2)} + \frac{bP_0(P_0 e_{13} - e_0 D_3)}{2(2a + b)(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)},$$

$$E_3^{(1)}(D_3, e_{13}) = \frac{s_1 D_3 - d_1 e_{13}}{\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2},$$

$$\tau_{13}^{(1)}(D_3, e_{13}) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_{13} - d_1 D_3}{2(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2)},$$

$$E_3^{(2)}(D_3, e_{13}) = \frac{e_0(e_0 D_3 - P_0 e_{13})}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2},$$

$$\tau_{13}^{(2)}(D_3, e_{13}) = \frac{P_0(P_0 e_{13} - e_0 D_3)}{2(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}.$$

Uvedené vztahy platí pouze pro rovnovážný stav.

4.4 Stabilita

Za daných podmínek můžeme určit oblast stability.
Podmínka stability:

$$\delta^2 G(D_3, e_{13}, A) = \delta^2 U(D_3, e_{13}, A) > 0.$$

Analogicky s uvedeným případem A je konkrétní podmínka:

$$\frac{\partial^2 U(D_3, e_{13}, A)}{\partial A^2} \delta^2 A > 0. \quad (4.15)$$

Dosazením do nerovnice (4.15) získáme:

$$\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} > 0. \quad (4.16)$$

Okrajové podmínky B odpovídají případu, kdy jsou elektrody elektricky izolované a vzorek je mechanicky upnutý. Za daných podmínek lze očekávat, že vrstvy (1) a (3) nebudou mít vliv na stabilitu vzorku. Tento předpoklad se potvrdil. V nerovnici (4.16) vystupují pouze materiálové koeficienty feroelektrické vrstvy (2). V případě vzorku s materiálovými vlastnostmi BaTiO₃ ve vrstvě (2) je vzorek stabilní. Uvažujeme-li hypotetický materiál s vlastnostmi nevyhovujícími podmínce stability (4.16), mají doménové stěny tendenci vytvářet asymetrickou doménovou strukturu, přestože je vzorek upnut a izolován. Ve vzorku by bylo přítomno vnitřní pnutí a elektrické pole i pokud by vzorek měl nulovou celkovou deformaci a na elektrodách by nebyl žádný volný náboj. Takové chování je způsobeno přítomností vlastního příspěvku k piezoelektrickému koeficientu ve vrstvě (2).

4.5 Efektivní materiálové vlastnosti

Efektivní materiálové vlastnosti vzorku se získají ze stavových rovnic:

$$E_3 = \beta_{33}^{eff,e} D_3 - 2h_{313}^{eff} e_{13}, \quad (4.17)$$

$$\tau_{13} = -h_{313}^{eff} D_3 + 2c_{1313}^{eff,D} e_{13}. \quad (4.18)$$

4.5.1 Efektivní impermitivita $\beta_{33}^{eff,e}$

Efektivní impermitivitu $\beta_{33}^{eff,e}$ vyjádříme ze vztahu (4.17) při $e_{13} = 0$.

$$\beta_{33}^{eff,e} = \frac{E_3(D_3, e_{13} = 0)}{D_3}.$$

Výsledná efektivní impermitivita ve zjednodušeném značení má tvar:

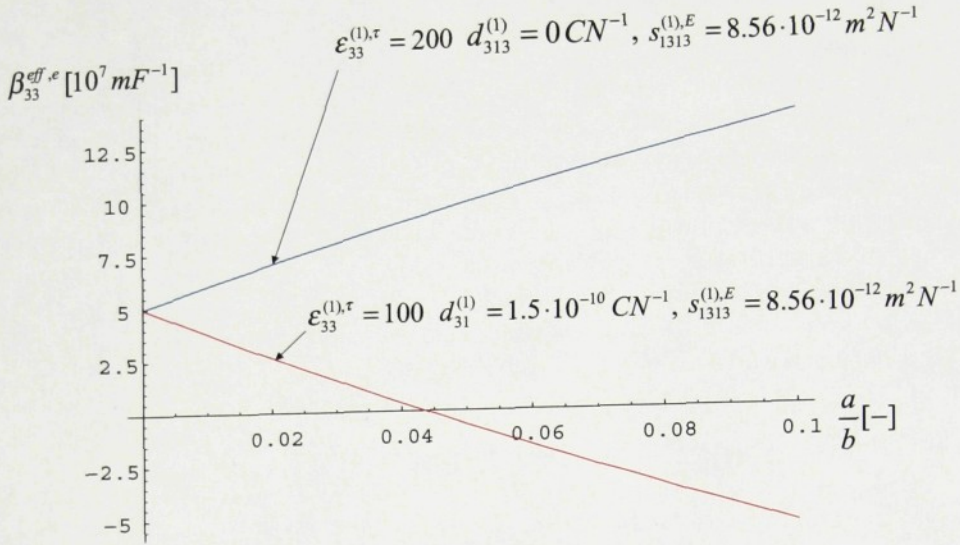
$$\beta_{33}^{eff,e} = \frac{1}{2a + b} \left(\frac{2as_1}{\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2} + \frac{be_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2} \right). \quad (4.19)$$

Ve vztahu jsou odděleny příspěvky od vrstvy (1) a vrstvy (2).

V grafu na obr.4.2 jsou vyneseny dva průběhy efektivní impermitivity vzorku v závislosti na poměru $\frac{a}{b}$. Oba průběhy platí pro stabilní vzorek. V grafu jsou neobvyklé záporné hodnoty impermitivity.

Vztah pro efektivní impermitivitu v případě shodných vlastností s výjimkou spontánní polarizace a spontánní deformace ve všech vrstvách má tvar:

$$\beta_{33}^{eff,e} = \frac{1}{2a + b} \left(\frac{2as_2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} + \frac{be_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2} \right).$$



Obrázek 4.2: Závislost efektivní impermitivity na poměru $\frac{a}{b}$.

4.5.2 Efektivní pružnost $c_{1313}^{eff,D}$

Efektivní pružnost lze vyjádřit ze vztahu (4.18) při $D_3 = 0$.

$$c_{1313}^{eff,D} = \frac{\tau_{13}(D_3 = 0, e_{13})}{2e_{13}}.$$

Výsledná efektivní pružnost má tvar:

$$c_{1313}^{eff,D} = \frac{1}{4(2a + b)} \left(\frac{2a\varepsilon_0\varepsilon_1}{\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2} + \frac{bP_0^2}{\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2} \right). \quad (4.20)$$

V grafu na obr.4.3 jsou vyneseny průběhy efektivní pružnosti vzorku. Závislost je podobná závislosti efektivní impermitivity. Zde je snažší vysvětlit neobvyklou zápornost hodnot. V případě deformování v určitém smyslu vyniká mechanické napětí ve stejném smyslu a má tendenci deformaci podpořit. V případě upnutého vzorku ale další deformace nemůže nastat. Pokud bychom vzorek uvolnili došlo by k nestabilnímu chování a celý vzorek by měl mít tendenci samovolně se deformovat a polarizovat.

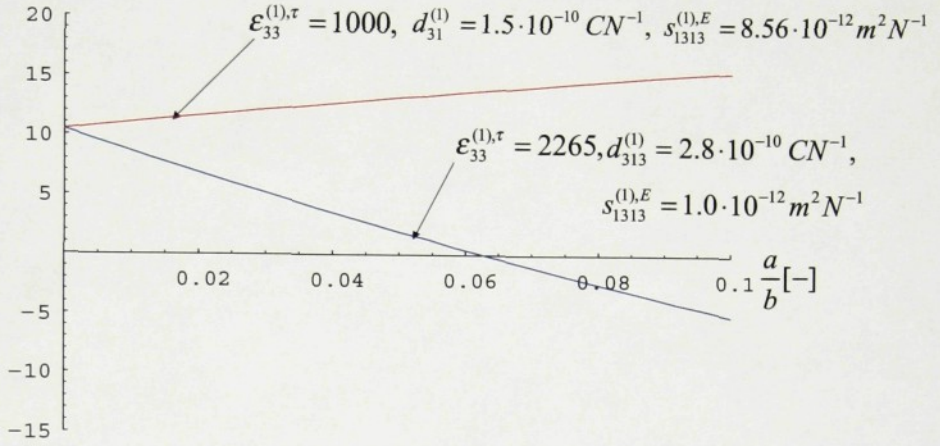
Vztah pro efektivní pružnost v případě shodných vlastností ve všech vrstvách již neuvádíme. Je stejně komplikovaný jako vztah (4.20) a neobsahuje žádnou novou informaci.

4.5.3 Efektivní přímý piezoelektrický modul h_{313}^{eff}

Efektivní přímý piezoelektrický modul získáme ze vztahu (4.17) při $D_3 = 0$.

$$h_{313}^{eff} = -\frac{E_3(D_3 = 0, e_{13})}{2e_{13}}.$$

$c_{1313}^{eff,D} [10^9 m^2 N^{-1}]$

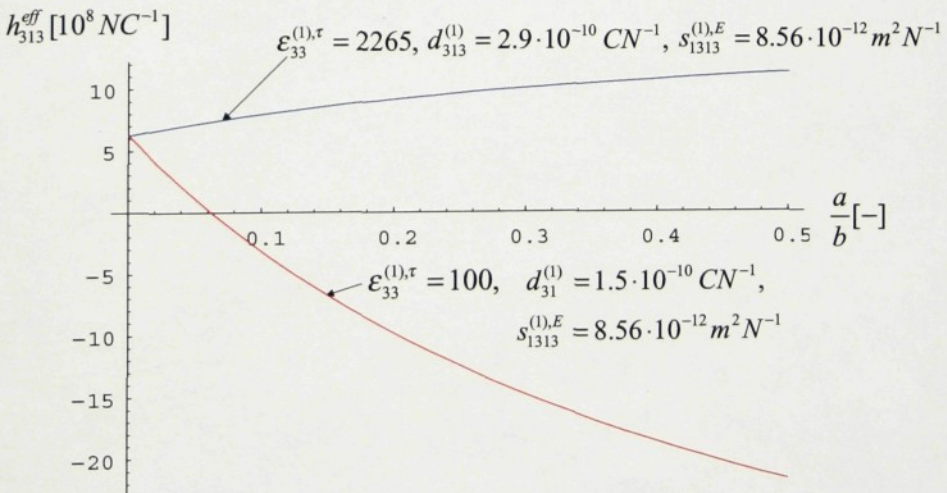


Obrázek 4.3: Závislost efektivní pružnosti na poměru $\frac{a}{b}$.

Výsledný efektivní přímý piezoelektrický modul má tvar:

$$h_{313}^{eff} = \frac{1}{2(2a+b)} \left(\frac{2ad_1}{\epsilon_0 \epsilon_1 s_1 - d_1^2} + \frac{be_0 P_0}{\epsilon_0 \epsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2} \right). \quad (4.21)$$

Průběhy efektivního piezoelektrického modulu jsou v grafu na obr.4.4. Závislost je opět po-



Obrázek 4.4: Závislost efektivního piezoelektrického modulu na poměru $\frac{a}{b}$.

dobná závislosti efektivní impermitivity a pružnosti.

4.5.4 Efektivní inverzní piezoelektrický modul h_{313}^{eff}

Efektivní inverzní piezoelektrický modul při $e_{13} = 0$:

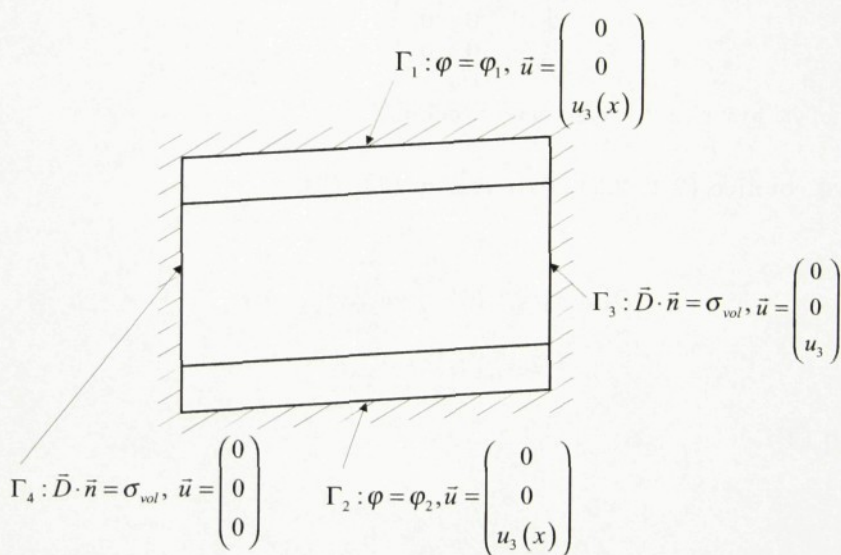
$$h_{313}^{eff} = \frac{\tau_{13}(D_3, e_{13} = 0)}{D_3},$$

je opět shodný s efektivním přímým piezoelektrickým modulem (4.21).

Kapitola 5

Okrajové podmínky C

V tomto případě má vzorek na elektrodách Γ_1, Γ_2 na obr.5.1 zadaný elektrický potenciál φ . Na stěnách Γ_3, Γ_4 je opět volný náboj, který kompenzuje polarizační náboj. Vzorek je na všech stěnách mechanicky upnutý, a je střížně deformovaný v rovině $x - z$.



Obrázek 5.1: Okrajové podmínky C.

Elektrické pole:

Pokud na elektrodách je po celé ploše konstantní potenciál, musí elektrické pole i v tomto případě mít z již uvedených důvodů v celém objemu vzorku směr rovnoběžný s osou z .

$$E_1^{(1)}(x, y, z) = 0, \quad E_2^{(1)}(x, y, z) = 0,$$

$$E_1^{(2)}(x, y, z) = 0, \quad E_2^{(2)}(x, y, z) = 0.$$

Tenzor deformace

Vzorek je v celém objemu stejně střížně deformován:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ e_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Elektrická indukce

Pro výpočet energie má význam pouze složka elektrické indukce D_3 , která je v celém objemu konstantní.

Tenzor mechanického napětí

Ve vzorku bude vznikat pouze střížné mechanické napětí:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \tau_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \tau_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Mechanické napětí je v různých vrstvách obecně jiné.

Platí stavové rovnice (2.1, 2.2). Pro vrstvy (1), (3):

$$D_3 = \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(1),\tau} E_3^{(1)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(1)}, \quad (5.1)$$

$$e_{13} = 2s_{1313}^{(1),E} \tau_{13}^{(1)} + d_{313}^{(1)} E_3^{(1)}, \quad (5.2)$$

a pro vrstvu (2):

$$D_3 = AP_{0,3} + \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(2),\tau} E_3^{(2)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(2)}, \quad (5.3)$$

$$e_{13} = Ae_{0,13} + s_{1313}^{(2),E} \tau_{13}^{(2)} + 2d_{313}^{(2)} E_3^{(2)}. \quad (5.4)$$

5.1 Elektrické pole a tenzor mechanického napětí v jednotlivých vrstvách

Také v tomto případě platí vztahy :

$$2aE_3^{(1)} + bE_3^{(2)} = (2a + b)E_3, \quad (5.5)$$

$$2a\tau_{13}^{(1)} + b\tau_{13}^{(2)} = (2a + b)\tau_{13}. \quad (5.6)$$

Výpočet rovnovážného stavu vzorku s okrajovými podmínkami C je analogický s předchozími dvěma případy. Z rovnic (5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6) můžeme vyjádřit:

$$\begin{aligned} D_3 &= D_3(E_3, e_{13}, A), \quad \tau_{13} = e_{13}(E_3, e_{13}, A), \\ E_3^{(1)} &= E_3^{(1)}(E_3, e_{13}, A), \quad E_3^{(2)} = E_3^{(2)}(E_3, e_{13}, A), \\ \tau_{13}^{(1)} &= \tau_{13}^{(1)}(E_3, e_{13}, A), \quad \tau_{13}^{(2)} = \tau_{13}^{(2)}(E_3, e_{13}, A). \end{aligned}$$

5.2 Vnitřní energie

Pomocí vztahů:

$$U_{el}(E_3, e_{13}, A) = \frac{1}{2} \int_{(1),(3)} E_3^{(1)} D_3 dx dy dz + \frac{1}{2} \int_{(2)} E_3^{(2)} (D_3 - AP_{0,3}) dx dy dz,$$

$$U_{def}(E_3, e_{13}, A) = \int_{(1),(3)} \tau_{13}^{(1)} e_{13} dx dy dz + \int_{(2)} \tau_{13}^{(2)} (e_{13} - Ae_{0,13}) dx dy dz,$$

$$U_w = \frac{\sigma_w b}{w},$$

získáme hustotu vnitřní energie:

$$U(E_3, e_{13}, A) = U_{el}(E_3, e_{13}, A) + U_{def}(E_3, e_{13}, A) + U_w.$$

5.3 Rovnovážná asymetrie

Rovnovážnou asymetrii $A = A(E_3, e_{13})$ získáme z podmínky rovnováhy:

$$\delta G(E_3, e_{13}, A) = 0, \tag{5.7}$$

kde

$$G(E_3, e_{13}, A) = U(E_3, \tau_{13}, A) - W_{el} - W_{def}.$$

Platí rovnice:

$$\delta W_{el} = (2a + b)E_3 \delta D_3,$$

$$\delta W_{def} = (2a + b)\tau_{13} \delta e_{13},$$

kde

$$\delta D_3 = \frac{\partial D_3(E_3, e_{13}, A)}{\partial A} \delta A,$$

$$\delta e_{13} = \frac{\partial e_{13}}{\partial A} \delta A = 0.$$

Podmínka rovnováhy (5.7) má tvar:

$$\frac{\partial U(E_3, e_{13}, A)}{\partial A} \delta A - (2a + b) E_3 \frac{\partial D_3(E_3, e_{13}, A)}{\partial A} \delta A = 0. \quad (5.8)$$

Řešením rovnice (5.8) získáme rovnovážnou asymetrii:

$$A = A(E_3, e_{13}).$$

Dále můžeme vyjádřit:

$$\begin{aligned} D_3 &= D_3(E_3, e_{13}), & \tau_{13} &= e_{13}(E_3, e_{13}), \\ E_3^{(1)} &= E_3^{(1)}(E_3, e_{13}), & E_3^{(2)} &= E_3^{(2)}(E_3, e_{13}), \\ \tau_{13}^{(1)} &= \tau_{13}^{(1)}(E_3, e_{13}), & \tau_{13}^{(2)} &= \tau_{13}^{(2)}(E_3, e_{13}). \end{aligned}$$

5.4 Stabilita

Podmínka stability se získá z nerovnice:

$$\delta^2 G(E_3, e_{13}, A) = \delta^2 U(E_3, e_{13}, A) > 0.$$

V tomto případě platí:

$$\frac{\partial^2 U(E_3, e_{13}, A)}{\partial A^2} \delta^2 A > 0.$$

Podmínka stability pro vzorek s okrajovými podmínkami C má tvar:

$$\frac{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) e_0^2 + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2) s_1}{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) s_2 + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2) s_1} > 0.$$

Oblast stability je znázorněna na obr.5.2. Vzorek je nestabilní pouze v malých oblastech vyznačených šrafováním, všude jinde je oblast stability.

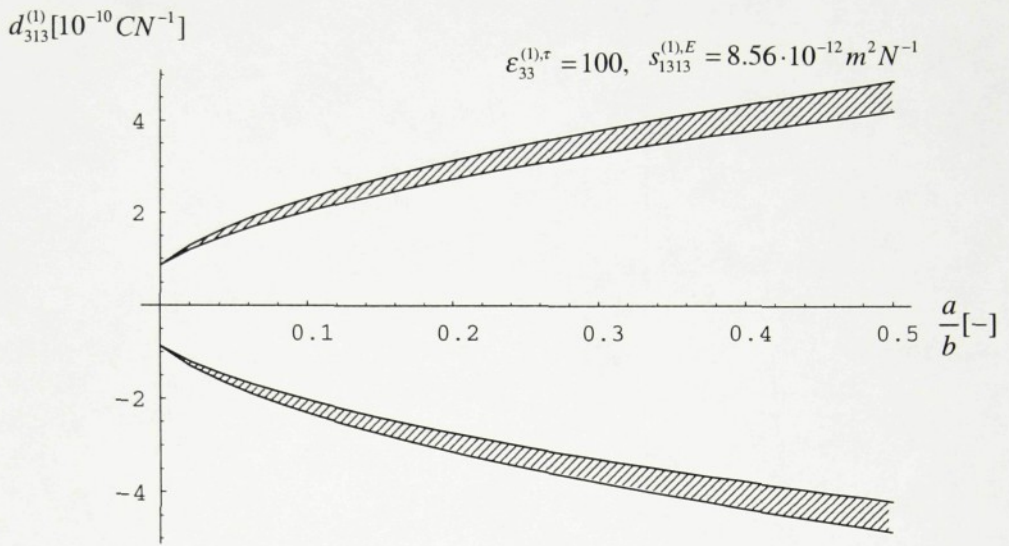
5.5 Efektivní materiálové vlastnosti

Za daných podmínek můžeme ze stavových rovnic:

$$D_3 = \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{eff,e} E_3 + 2e_{313}^{eff} e_{13}, \quad (5.9)$$

$$\tau_{13} = -e_{313}^{eff} E_3 + 2c_{1313}^{eff,E} e_{13}, \quad (5.10)$$

vyjádřit efektivní materiálové koeficienty $\varepsilon_{33}^{eff,e}$, $c_{1313}^{eff,E}$, e_{313}^{eff} .



Obrázek 5.2: Oblast stability vzorku s okrajovými podmínkami C.

5.5.1 Efektivní permitivita $\epsilon_{33}^{eff,e}$

Efektivní relativní permitivitu při konstantní deformaci vyjádříme z rovnice (5.9). Deformace je nulová, $e_{13} = 0$.

$$\epsilon_{33}^{eff,e} = \frac{D_3(E_3, e_{13} = 0)}{\epsilon_0 E_3}.$$

Výsledná relativní efektivní permitivita má tvar.

$$\epsilon_{33}^{eff,e} = \frac{2a + b}{\frac{2a\epsilon_0 s_1}{\epsilon_0 \epsilon_1 s_1 - d_1^2} + \frac{b\epsilon_0 e_0^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 e_0^2 - 2d_2 \epsilon_0 P_0 + s_2 P_0^2}}. \quad (5.11)$$

Na grafu obr.5.3 je vynesena závislost efektivní permitivity při konstantní deformaci. Obě křivky procházejí v okolí singularit oblastí nestability. Všude jinde je systém stabilní. Záporné hodnoty permitivity jsou za daných předpokladů u studovaného modelu ve stabilním stavu možné.

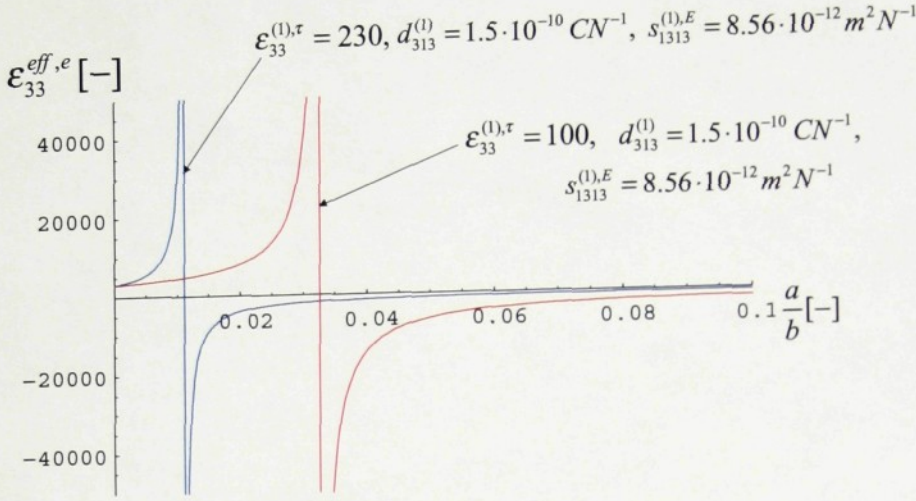
Výsledek vyhovuje vztahu:

$$\epsilon_0 \epsilon_{33}^{eff,e} \beta_{33}^{eff,e} = 1,$$

přičemž obecně platný vztah je:

$$\epsilon_0 \epsilon_{ik}^* \beta_{jk}^* = \delta_{ij},$$

kde $*$ = e nebo τ .



Obrázek 5.3: Závislost efektivní permitivity na poměru $\frac{a}{b}$.

5.5.2 Efektivní pružnost $c_{1313}^{eff,E}$

Efektivní pružnost při konstantním elektrickém poli vyjádříme z rovnice:

$$c_{1313}^{eff,E} = \frac{\tau_{13}(E_3 = 0, e_{13})}{2e_{13}}.$$

Získáme vztah:

$$c_{1313}^{eff,E} = \frac{a}{2(2a+b)} \cdot \frac{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 e_0^2 - 2d_1 e_0 P_0 + s_1 P_0^2) + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}{b e_0^2 (\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) + 2a s_1 (\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}. \quad (5.12)$$

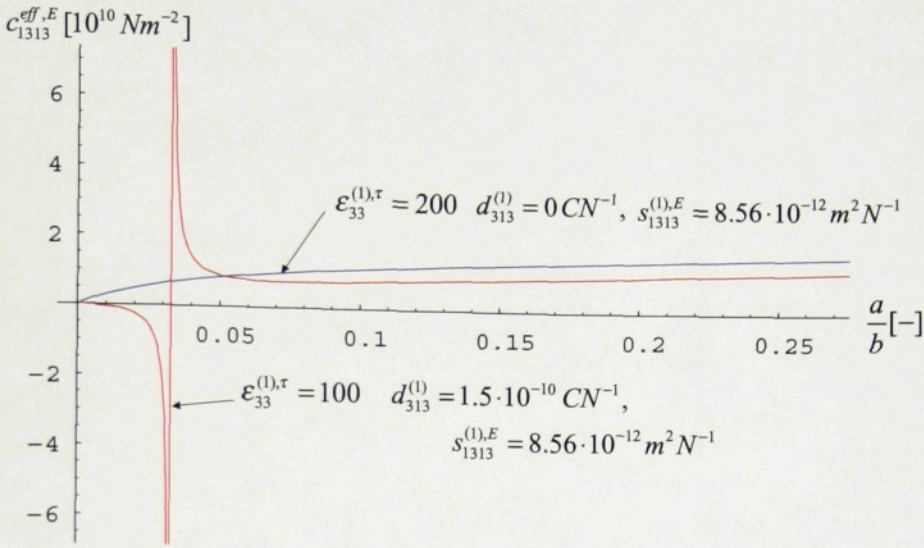
V grafu na obr.5.4 jsou vyneseny dva průběhy efektivní pružnosti v závislosti na poměru $\frac{a}{b}$. Modrá křivka se celá nachází v oblasti stability. Červená křivka prochází oblastí nestability.

Pro případ shodných vlastností v obou vrstvách má výraz (5.12) tvar:

$$c_{1313}^{eff,E} = \frac{1}{4} \left(s_2 + \frac{b}{2a} \frac{e_0^2}{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} - \frac{2d_2 e_0 P_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2} + \frac{s_2 P_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2}} \right)^{-1}.$$

Výsledky vyhovují vztahu:

$$s_{1313}^{eff,E} c_{1313}^{eff,E} = \frac{1}{4}.$$



Obrázek 5.4: Závislost průběh efektivní pružnosti na poměru $\frac{a}{b}$.

Obecně platný vztah je:

$$s_{ik}^* c_{jk}^* = \delta_{ij},$$

kde $*$ = E nebo D . Rovnice je zapsána v maticovém tvaru.

5.5.3 Efektivní přímý piezoelektrický modul e_{313}^{eff}

Přímý piezoelektrický modul získáme z rovnice (5.9).

$$e_{313}^{eff} = \frac{D_3(E_3 = 0, e_{13})}{2e_{13}}.$$

Výsledný efektivní přímý piezoelektrický modul má tvar:

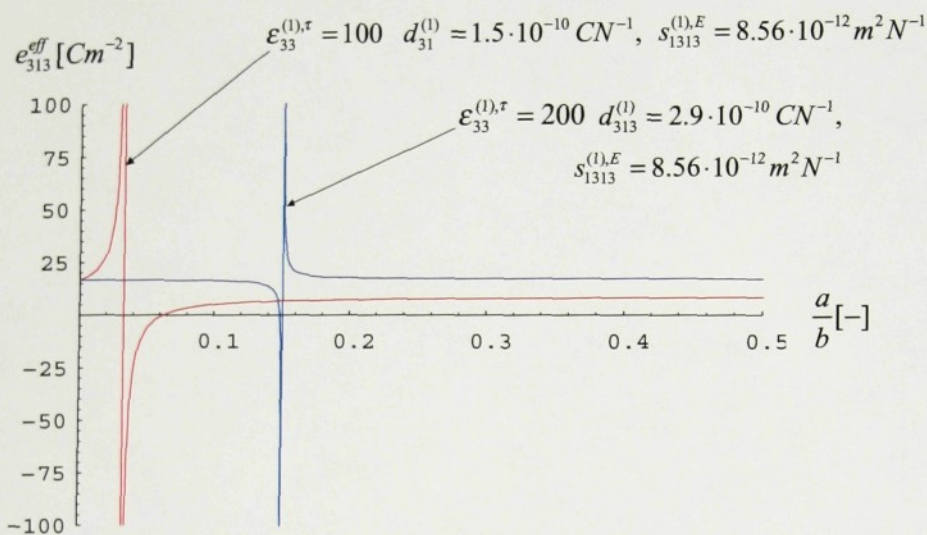
$$e_{313}^{eff} = \frac{1}{2} \cdot \frac{be_0 P_0 (\epsilon_0 \epsilon_1 s_1 - d_1^2) + 2ad_1 (\epsilon_0 \epsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}{be_0^2 (\epsilon_0 \epsilon_1 s_1 - d_1^2) + 2as_1 (\epsilon_0 \epsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}. \quad (5.13)$$

Průběh piezoelektrického modulu je vyneseno v grafu na obr.5.5.

5.5.4 Efektivní inverzní piezoelektrický modul e_{313}^{eff}

Efektivní inverzní piezoelektrický modul získáme ze vztahu (5.10) při konstantní deformaci $e_{13} = 0$.

$$e_{313}^{eff} = -\frac{\tau_{13}(E_3, e_{13} = 0)}{E_3}.$$



Obrázek 5.5: Závislost efektivního piezoelektrického modulu na poměru $\frac{a}{b}$.

Přímý a inverzní piezoelektrický modul je opět stejný.

Výsledky vyhovují vztahu:

$$\varepsilon_0(\varepsilon_{33}^{eff,\tau} - \varepsilon_{33}^{eff,e}) = 2d_{313}^{eff}e_{313}^{eff}.$$

Obecně platný vztah je:

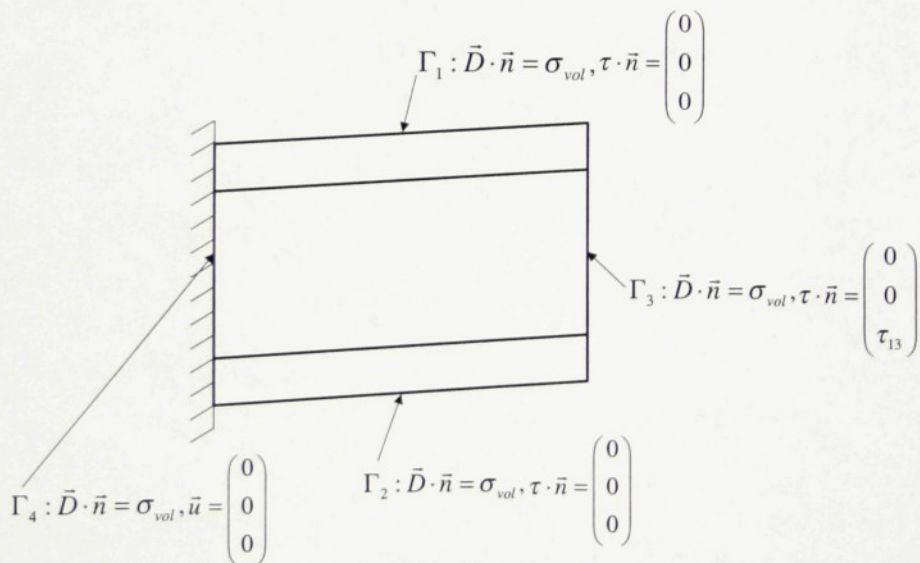
$$\varepsilon_0(\varepsilon_{ik}^{\tau} - \varepsilon_{ik}^e) = d_{ij}e_{kj}.$$

Rovnice je zapsána v maticovém tvaru.

Kapitola 6

Okrajové podmínky D

Vzorek má na elektrodách Γ_1, Γ_2 viz. obr.6.1 zadán volný náboj σ_{vol} . Na stěnách Γ_3, Γ_4 je polarizační náboj kompenzován volným nábojem z okolního prostředí. Vzorek je mechanicky upevněn na stěně Γ_4 a na stěnu Γ_3 působí střížná síla. Na stěnách Γ_1, Γ_2 je vzorek volný.



Obrázek 6.1: Okrajové podmínky D.

Elektrické pole, elektrická indukce, mechanické napětí a deformace se také v tomto případě chovají stejně jako v předchozích částech. Nezávislé veličiny jsou elektrická indukce D_3 a mechanické napětí τ_{13} .

Pro vrstvy (1), (3) platí stavové rovnice (2.1, 2.2):

$$D_3 = \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(1),\tau} E_3^{(1)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(1)}, \quad (6.1)$$

$$e_{13} = 2s_{1313}^{(1),E} \tau_{13}^{(1)} + d_{313}^{(1)} E_3^{(1)}, \quad (6.2)$$

a pro vrstvu (2):

$$D_3 = AP_{0,3} + \varepsilon_0 \varepsilon_{33}^{(2),\tau} E_3^{(2)} + 2d_{313}^{(1)} \tau_{13}^{(2)}, \quad (6.3)$$

$$e_{13} = Ae_{0,13} + s_{1313}^{(2),E} \tau_{13}^{(2)} + 2d_{313}^{(2)} E_3^{(2)}. \quad (6.4)$$

Z rovnic (6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 3.8, 3.11) vyjádříme:

$$\begin{aligned} E_3 &= D_3(D_3, \tau_{13}, A), & e_{13} &= e_{13}(D_3, \tau_{13}, A), \\ E_3^{(1)} &= E_3^{(1)}(D_3, \tau_{13}, A), & E_3^{(2)} &= E_3^{(2)}(D_3, \tau_{13}, A), \\ \tau_{13}^{(1)} &= \tau_{13}^{(1)}(D_3, \tau_{13}, A), & \tau_{13}^{(2)} &= \tau_{13}^{(2)}(D_3, \tau_{13}, A). \end{aligned}$$

6.1 Vnitřní energie

Hustotu vnitřní energie získáme ze vztahů:

$$U_{el}(D_3, \tau_{13}, A) = \frac{1}{2} \int_{(1),(3)} E_3^{(1)} D_3 dx dy dz + \frac{1}{2} \int_{(2)} E_3^{(2)} (D_3 - AP_{0,3}) dx dy dz,$$

$$U_{def}(D_3, \tau_{13}, A) = \int_{(1),(3)} \tau_{13}^{(1)} e_{13} dx dy dz + \int_{(2)} \tau_{13}^{(2)} (e_{13} - Ae_{0,13}) dx dy dz,$$

$$U_w = \frac{\sigma_w b}{w}.$$

Celková hustota vnitřní energie je:

$$U(D_3, \tau_{13}, A) = U_{el}(D_3, \tau_{13}, A) + U_{def}(D_3, \tau_{13}, A) + U_w.$$

6.2 Rovnovážná asymetrie

Rovnovážnou asymetrii $A = A(D_3, \tau_{13})$ získáme z podmínky rovnováhy:

$$\delta G(D_3, \tau_{13}, A) = 0, \quad (6.5)$$

kde

$$G(D_3, \tau_{13}, A) = U(D_3, \tau_{13}, A) - W_{el} - W_{def}.$$

Platí rovnice:

$$\delta W_{el} = (2a + b) E_3 \delta D_3,$$

$$\delta W_{def} = (2a + b) \tau_{13} \delta e_{13},$$

kde

$$\delta D_3 = \frac{\partial D_3}{\partial A} \delta A = 0,$$

$$\delta e_{13} = \frac{\partial e_{13}(D_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A.$$

Podmínka rovnováhy (6.5) má tvar:

$$\frac{\partial U(D_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A - (2a + b) \tau_{13} \frac{\partial e_{13}(D_3, \tau_{13}, A)}{\partial A} \delta A = 0. \quad (6.6)$$

Řešením rovnice (6.6) získáme rovnovážnou asymetrii:

$$A = A(D_3, \tau_{13}),$$

a můžeme vyjádřit:

$$E_3 = D_3(D_3, \tau_{13}), \quad e_{13} = e_{13}(D_3, \tau_{13}),$$

$$E_3^{(1)} = E_3^{(1)}(D_3, \tau_{13}), \quad E_3^{(2)} = E_3^{(2)}(D_3, \tau_{13}),$$

$$\tau_{13}^{(1)} = \tau_{13}^{(1)}(D_3, \tau_{13}), \quad \tau_{13}^{(2)} = \tau_{13}^{(2)}(D_3, \tau_{13}).$$

6.3 Stabilita

Podmínka stability se získá z nerovnice:

$$\delta^2 G(D_3, \tau_{13}, A) = \delta^2 U(D_3, \tau_{13}, A) > 0.$$

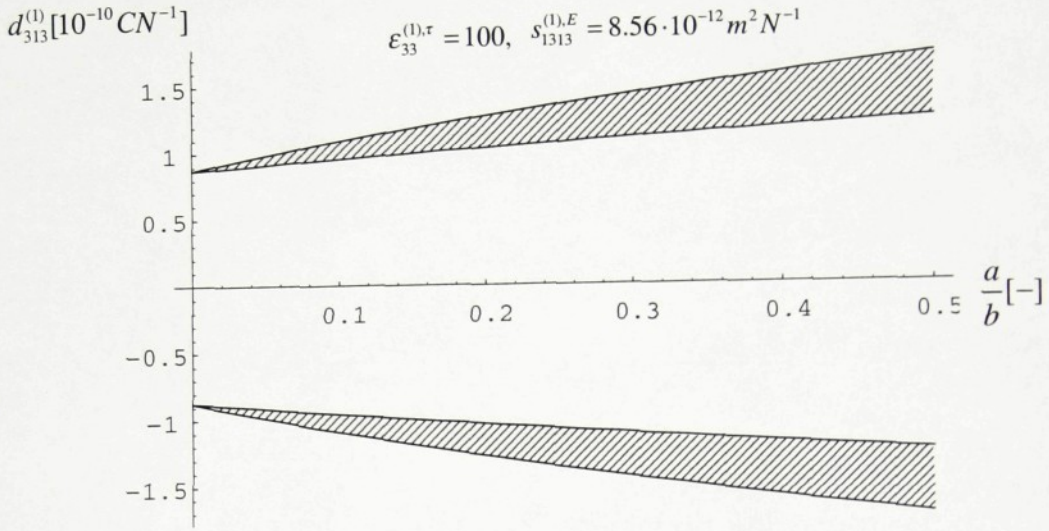
V daném případě platí:

$$\frac{\partial^2 U(D_3, \tau_{13}, A)}{\partial A^2} \delta^2 A > 0.$$

Podmínka stability pro vzorek s okrajovými podmínkami D má tvar:

$$\frac{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) P_0^2 + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2) \varepsilon_0 \varepsilon_1}{b(\varepsilon_0 \varepsilon_1 s_1 - d_1^2) \varepsilon_2 + 2a(\varepsilon_0 \varepsilon_2 s_2 - d_2^2) \varepsilon_1} > 0.$$

Oblast stability je znázorněna na obr.6.2. Opět zde existují pouze malé oblasti nestability vyznačené šrafováním.



Obrázek 6.2: Oblast stability vzorku s okrajovými podmínkami D.

6.4 Efektivní materiálové vlastnosti

Za daných podmínek můžeme ze stavových rovnic:

$$E_3 = \beta_{33}^{eff,\tau} D_3 - 2g_{313}^{eff} \tau_{13}, \quad (6.7)$$

$$e_{13} = g_{313}^{eff} D_3 + 2s_{1313}^{eff,D} \tau_{13}, \quad (6.8)$$

vyjádřit efektivní materiálové koeficienty $\beta_{33}^{eff,\tau}$, $s_{1313}^{eff,D}$, g_{313}^{eff} .

6.4.1 Efektivní impermitivita $\beta_{33}^{eff,\tau}$

Efektivní relativní impermitivitu při konstantním mechanickém napětím vyjádříme z rovnice (6.7) při $\tau_{13} = 0$.

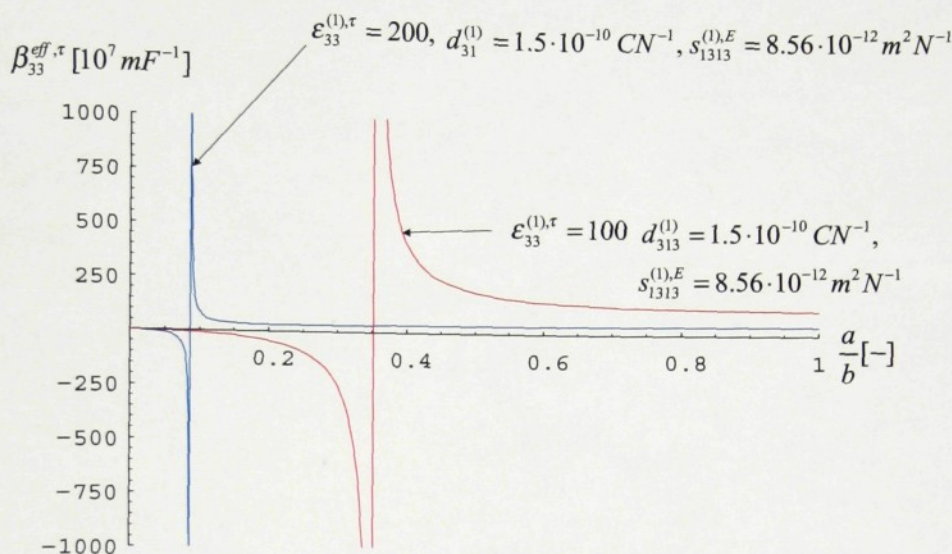
$$\beta_{33}^{eff,e} = \frac{E_3(D_3, \tau_{13} = 0)}{D_3}.$$

Výsledná efektivní impermitivita má tvar.

$$\beta_{33}^{eff,\tau} = \frac{2a}{(2a+b)} \cdot \frac{b(\epsilon_0 \epsilon_1 e_0^2 - 2d_1 e_0 P_0 + s_1 P_0^2) + 2a(\epsilon_0 \epsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}{bP_0^2(\epsilon_0 \epsilon_1 s_1 - d_1^2) + 2a\epsilon_0 \epsilon_1 (\epsilon_0 \epsilon_2 e_0^2 - 2d_2 e_0 P_0 + s_2 P_0^2)}. \quad (6.9)$$

Průběh efektivní impermitivity je vyneseno v grafu na obr.6.3.

Pro případ shodných vlastností v obou vrstvách má výraz (6.9) tvar (6.10).



Obrázek 6.3: Závislost efektivní impermitivity na poměru $\frac{a}{b}$.

$$\beta_{33}^{eff, \tau} = \left(\epsilon_0 \epsilon_2 + \frac{b}{2a} \frac{P_0^2}{\frac{\epsilon_0 \epsilon_2 \epsilon_0^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 s_2 - d_2^2} - \frac{2d_2 \epsilon_0 P_0}{\epsilon_0 \epsilon_2 s_2 - d_2^2} + \frac{s_2 P_0^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 s_2 - d_2^2}} \right)^{-1}. \quad (6.10)$$

Uvedené výsledky vyhovují vztahu:

$$\epsilon_0 \epsilon_{33}^{eff, \tau} \beta_{33}^{eff, \tau} = 1.$$

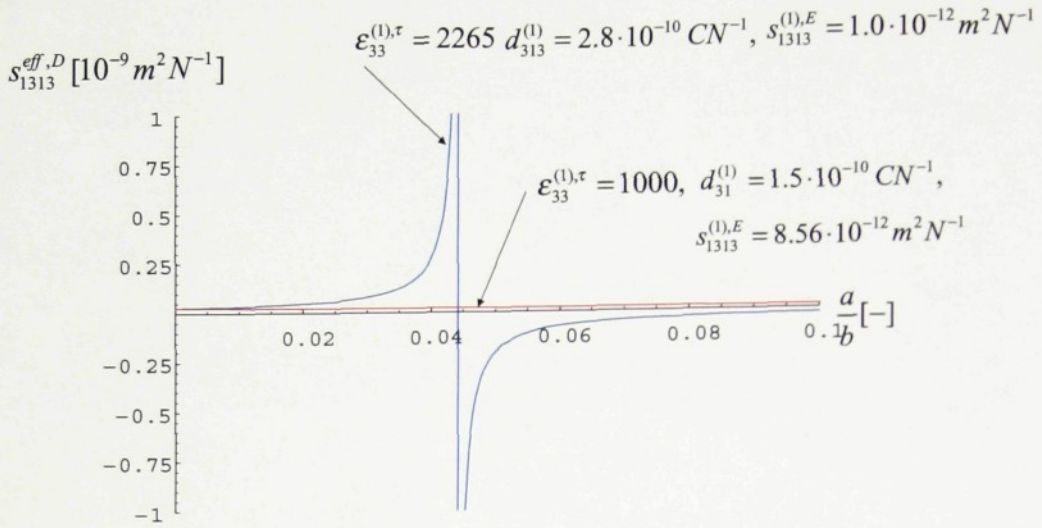
6.4.2 Efektivní poddajnost $s_{1313}^{eff, D}$

Efektivní poddajnost při konstantní elektrické indukci $D_3 = 0$ vyjádříme z rovnice:

$$s_{1313}^{eff, D} = \frac{e_{13}(D_3 = 0, \tau_{13})}{2\tau_{13}}.$$

Získáme vztah:

$$s_{1313}^{eff, D} = \frac{2a + b}{\frac{2a\epsilon_0\epsilon_1}{\epsilon_0\epsilon_1 s_1 - d_1^2} + \frac{bP_0^2}{\epsilon_0\epsilon_2\epsilon_0^2 - 2d_2\epsilon_0 P_0 + s_2 P_0^2}}. \quad (6.11)$$



Obrázek 6.4: Závislost efektivní poddajnosti na poměru $\frac{a}{b}$.

V grafu na obr.6.4 je červená křivka v oblasti stability a modrá prochází oblastí nestability. Výsledky vyhovují vztahu:

$$s_{1313}^{eff,D} c_{1313}^{eff,D} = \frac{1}{4}.$$

6.4.3 Efektivní přímý piezoelektrický koeficient g_{313}^{eff}

Efektivní přímý piezoelektrický koeficient získáme z rovnice (6.7).

$$g_{313}^{eff} = -\frac{E_3(D_3 = 0, \tau_{13})}{2\tau_{13}}.$$

Výsledný efektivní přímý piezoelektrický koeficient má tvar:

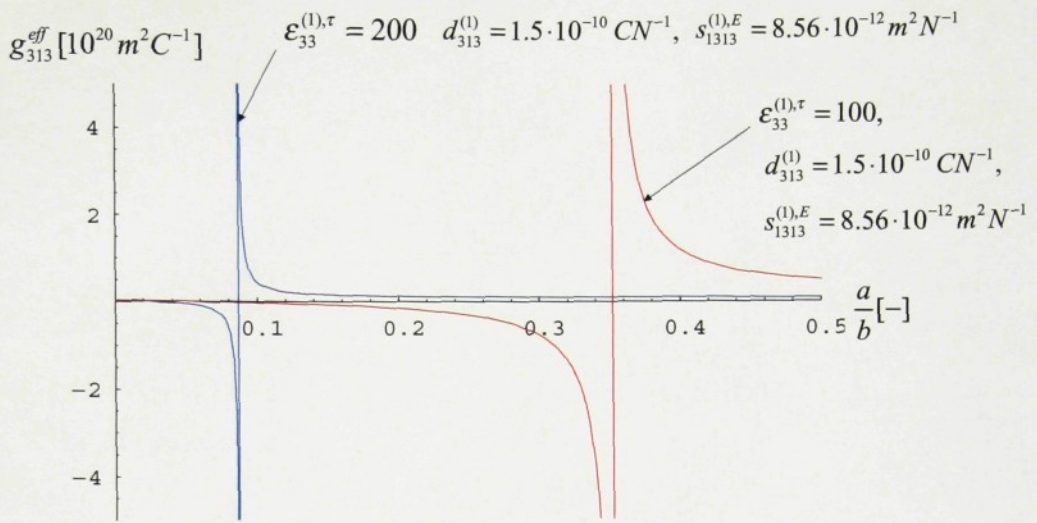
$$g_{313}^{eff} = \frac{be_0P_0(\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2) + 2ad_1(\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2)}{bP_0^2(\varepsilon_0\varepsilon_1s_1 - d_1^2) + 2a\varepsilon_0\varepsilon_1(\varepsilon_0\varepsilon_2e_0^2 - 2d_2e_0P_0 + s_2P_0^2)}. \quad (6.12)$$

V grafu na obr.5.5 je vynesena průběh piezoelektrického koeficientu v závislosti na poměru $\frac{a}{b}$. Obě křivky procházejí oblastí nestability.

6.4.4 Efektivní inverzní piezoelektrický koeficient g_{313}^{eff}

Efektivní inverzní piezoelektrický koeficient získáme ze vztahu (6.8) při konstantním mechanickém napětí $\tau_{13} = 0$.

$$g_{313}^{eff} = \frac{e_{13}(D_3, \tau_{13} = 0)}{D_3}.$$



Obrázek 6.5: Závislost piezoelektrického modulu na poměru $\frac{a}{b}$.

Výsledný vztah je shodný se vztahem (6.12).

Výsledky vyhovují vztahu:

$$\beta_{33}^{eff,\tau} - \beta_{33}^{eff,e} = -2g_{313}^{eff}h_{313}^{eff}.$$



Kapitola 7

Závěr

Cílem této práce bylo popsat chování feroelektrického vzorku s pravidelnou 90° doménovou strukturou a jeho reakci na kombinované elektrické a mechanické působení. Přítomnost spontánní deformace a spontánní polarizace ve feroelektriku způsobuje vznik tzv. vnějších příspěvků k dielektrickým, mechanickým a elektromechanickým vlastnostem. Chování feroelektrického vzorku lze popsat efektivními materiálovými koeficienty.

Například v člancích [5], [6] byly studovány efektivní vlastnosti obdobného vzorku se 180° doménovou strukturou. Nebyly zde zahrnuty veškeré možné vlastní materiálové koeficienty.

V této práci je popsáno chování konkrétního vzorku, modelu feroelektrického kondenzátoru, s geometrickým uspořádáním uvedeném na obr.2.1. Struktura feroelektrické vrstvy odpovídá například struktuře, jaká může vzniknout v baryum titanátu. Všechny tři vrstvy studovaného vzorku mají obecně piezoelektrické vlastnosti. Konkrétní numerické výsledky platí pro hodnoty materiálových konstant baryum titanátu ve feroelektrické vrstvě.

Výpočet bylo možné realizovat pouze s uvážením uvedených předpokladů. Výsledky platí pro přiblížení tlustého vzorku s hustou pravidelnou doménovou strukturou a malé hodnoty asymetrie doménové struktury. Pro větší hodnoty asymetrie se projevují nelineární závislosti efektivních vlastností vzorku. Tyto efekty uvažovaný model nepostihuje.

Výsledky popisují také chování hypotetického vzorku se 180° doménovou strukturou, kde střížná spontánní deformace leží v rovině $x - z$ a spontánní polarizace má v jednotlivých doménách směr osy z nebo opačný.

Rovnovážné efektivní vlastnosti jsou získány pro čtyři různé okrajové podmínky. Popisované případy by mohly být realizovány například následovně:

- volný vzorek se zkratovanými elektrodami
- upnutý vzorek s izolovanými elektrodami
- volný vzorek s izolovanými elektrodami
- upnutý vzorek se zkratovanými elektrodami

Jsou uvedeny výsledné efektivní rovnovážné koeficienty $\epsilon_{33}^{eff,\tau}$ (3.25), $\epsilon_{33}^{eff,e}$ (5.11), $\beta_{33}^{eff,\tau}$ (6.9), $\beta_{33}^{eff,e}$ (4.19), $s_{1313}^{eff,E}$ (3.27), $s_{1313}^{eff,D}$ (6.11), $c_{1313}^{eff,E}$ (5.12), $c_{1313}^{eff,D}$ (4.20), e_{313}^{eff} (5.13), d_{313}^{eff} (3.28), g_{313}^{eff} (6.12), h_{313}^{eff} (4.21). Vztahy platí pro rovnovážný stav. Vlastnosti modelu popisují pouze pokud je jeho konfigurace stabilní.

Stabilita

Nejvýznamějším novým poznatkem je teoretická možnost nestabilního chování vzorku. Nestabilita může za určitých podmínek u uvedeného modelu vzorku vzniknout jako důsledek přítomnosti piezoelektrických vlastností jednotlivých vrstev. Na hranicích oblastí stability je chování modelu neobvyklé. Efektivní koeficienty dosahují teoreticky nekonečných hodnot. Materiálové vlastnosti izolačních vrstev a poměr tloušťek jednotlivých vrstev rozhoduje o stabilitě vzorku. Hranice oblasti stability je v případě uvažovaného modelu feroelektrického vzorku dosažitelné pro reálné hodnoty materiálových konstant a realizovatelné poměry tloušťek jednotlivých vrstev odpovídající také předpokladu tlustého vzorku.

V důsledku zjednodušení modelu nezahrnují výsledky veškeré efekty, které se mohou podílet na efektivním chování reálného vzorku. Jedním z předpokladů je vznik pouze malé asymetrie doménové struktury, která vzniká při relativně malých elektrických polích a malém mechanickém namáhání.

Pokud se nacházíme v blízkosti oblasti nestability, má popisovaný model velké hodnoty efektivních dielektrických, elastických a elektromechanických koeficientů, na kterých se majoritně podílejí nevlastní příspěvky způsobené doménovou strukturou. V tomto případě i při malém vnějším elektrickém nebo mechanickém působení dochází u uvažovaného modelu k nezanedbatelnému vzrůstu hodnot asymetrie. Je pravděpodobné, že nezahrnuté efekty budou mít vliv na efektivní vlastnosti v blízkosti hranic oblastí stability a na polohu samotné oblasti stability. Přesto lze předpokládat, že popis kvalitativně vystihuje možnost nestabilního chování a stává se výchozím bodem pro další zkoumání v tomto směru.

V případě obecnějšího modelu platného i pro větší hodnoty asymetrie se na vzniku nevlastních příspěvků podílejí téměř všechny koeficienty, chování je nelineární a úloha je analyticky neřešitelná. Přesto mají největší podíl na chování vzorku parametry uvažované v modelu studovaném v této práci.

Literatura

- [1] Jona, F. - Shirane, G.: *Ferroelectric Crystals*. Dover, New York, 1993
- [2] Xu, Y.: *Ferroelectric Materials and Their Applications*. North-Holland, 1991
- [3] Fousek, J. - Březina, B.: Pohyb jednoduché doménové stěny BaTiO_3 ve stříťavém elektrickém poli. 1960
- [4] Strukov, B.A. - Levanyuk, A.P.: *Ferroelectric Phenomena in Crystals*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1998
- [5] Mokřý, P. - Kopal, A. - Fousek, J.: Extrinsic Contribution in a Nonuniform Ferroic Sample: Dielectric, Piezoelectric and Elastic: Příspěvek na 5.konferenci ECAPD, Journala, Litva, srpen 2000. Přijato k publikaci ve *Ferroelectrics*
- [6] Mokřý, P. - Kopal, A. - Fousek, J.: Plate-like and thin film Ferroelectric-Feroelastic Samples: Extrinsic Properties. Preprint Submitted to Elsevier Preprints.
- [7] Mokřý, P.: Reakce feroelektrické doménové struktury na vnější elektrické pole. Diplomová práce, TU Liberec, 1999
- [8] Nye, J.F.: *Physical Properties of Crystals. Their Representation by Tensors and Matrices*. Oxford Science Publications, 1985
- [9] Uchino, K.: *Ferroelectric devices*. New York : Marcel Dekker, 2000
- [10] Sedlák, B. - Štoll, I.: *Elektrina a magnetismus*. Academia, Karolinum, 1993
- [11] Landau, L. D. - Lifšic, E. M.: *Elektrodynamika splošnych sred*. Moskva, 1957
- [12] Burcsu, E. - Ravichandran, G. - Bhattacharia, K.: Electro-mechanical Behaviour of 90-degree Domain Motion in Barium Titanate Single Crystals. *Proc. SPIE*, 2001
- [13] Miller, R. C. - Savage, A.: Motion of 180° domain walls in metal electroded barium titanate crystals as a function of electric field and sample thickness, *J. Appl. Phys.*, 1960
- [14] Little, E. A.: Dynamic behaviour of damain walls in barium titanate, *Phys. Review* 98, 1955
- [15] Kittel, Ch: *Úvod do fyziky pevných látek*, Academia, Praha, 1985
- [16] Kvasnica, J: *Teorie elektromagnetického pole*, Academia, Praha, 1985
- [17] Wolfram, S: *The MATHEMATICA book*, Wolfram media, Cambridge university press