УДК 539.3

# ОБ ОДНОЙ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПОЛЯРИЗАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

# Герасименко Т.Е.

## ABOUT ONE TWO-DIMENSIONAL MODEL OF POLARIZATION OF POLYCRYSTALLINE FERROELECTRIC MATERIALS

### Gerasimenko T.E.

Southern federal university, Rostov-on-Don, 344006, Russia e-mail: tegerasimenko@sfedu.ru

Abstract. Development of mathematical models, which describe nonlinear processes, is a relevant problem of practical importance. The present article concentrates on the approach to modeling polarization of polycrystalline ferroelectric materials subjected to high electric field in the case of plane strain. The model employed here is based on the Jiles–Atherton model. It is important to emphasize that this Jiles–Atherton model, designed for one-dimensional case, is generalized here on a two-dimensional case, taking into account the influence of the neighborhood electrical domains on the process of their switching.

In the first step, polarization of the representative volume element is defined without including mutual interaction between the neighbor domains. There's introduced a new notion of ideal polarization, which takes place in the ideal case, when the influence of neighboring domains on the dipoles' switching is ignored. In the second step, the correction of the model is carried out through the consideration of domain wall dynamics and the influence of neighboring domains on it. The convergence method is suggested to solve this system.

The article presents a broad range of computational experiments for the determination of the model parameters.

The practical application of this model lies in the introduction of the elaborated algorithm into the finite element package ACELAN.

*Keywords:* piezoelectric ceramics, polycrystalline ferroelectrics, ferroelectric hysteresis, nonlinear problems, heterogeneous polarization.

#### Введение

В последнее время возрос интерес к математическим моделям, описывающим необратимые процессы поляризации и деполяризации в поликристаллических сегнетоэлектриках в сильных электрических полях. При моделировании таких процессов зачастую используют численные методы, например, метод конечных элементов. Но в этом случае возникает необходимость построения определяющих соотношений, которые для необратимых процессов выражаются в виде нелинейных гистерезисных зависимостей. Аналогичные задачи возникают в моделях пластичности, где также подобным образом необходимо формулировать определяющие соотношения. В связи с этим задача построения определяю-

щих соотношений для поликристаллических сегнетоэлектрических сред, в которых протекают необратимые процессы, является первостепенной и требует своего досконального исследования. Именно этим исследованиям и посвящена эта работа.

Многие модели в той или иной форме описывают переключение доменов поликристаллического материала с использованием различных критериев их переключения. Одной из первых таких моделей была модель ориентационных переключений [1], в которой приводятся условия переключений 180и 90-градусных доменов в виде простых тригонометрических неравенств. Однако гистерезисных петель построено не было.

Герасименко Татьяна Евгеньевна, ассистент кафедры математического моделирования Института математики, механики и компьютерных наук им. И. И. Воровича Южного федерального университета; e-mail: tegerasimenko@sfedu.ru.



Рис. 1. Геометрия пьезокерамического образца и расположение электродов

Другим направлением является моделирование с помощью метода Прейзаха [2,3], в котором вводится понятие гистерона и соответствующие условия его переключения. Но эта модель описывает только переключения 180-градусных доменов. В ней вводится в рассмотрение плотность вероятности распределения гистеронов по коэрцитивным и эффективным полям.

Для получения более реалистичной картины поляризации были введены модели, которые учитывают распределение доменов в представительном объеме под действием электрического поля. Поляризация представительного объема определяется совокупностью доменов, входящих в этот объем, и находится в два этапа. Вначале определяется поляризация представительного объема без учета влияния соседних доменов на процесс их переключений, а затем такое влияние учитывается энергетическим способом. Фактически в этой модели взята за основу теория запертой стенки. А сама модель получила название модели Джила–Атертона [4,5]. Модель Джила-Атертона изначально была создана для ферромагнитных сред, а затем перенесена на случай поликристаллических сегнетоэлектриков.

В настоящем исследовании, в отличие от вышеупомянутой работы, была построена двумерная модель, которая полностью опирается на модель Джила–Атертона, но является более информативной и более приближенной к реальным средам, а в ее основе лежат те же физические подходы. Однако в математическом плане задача становится сложнее, она описывается системой уравнений в дифференциалах, для решения которой в работе предложен численный алгоритм ее решения методом последовательных приближений. Модель включает в себя шесть параметров, которые необходимо подбирать из экспериментальных данных. Эти параметры имеют вполне определенный физический смысл и влияют на поведение петель диэлектрического гистерезиса. В статье приводится комплекс вычислительных экспериментов для выбора параметров модели. Численные эксперименты показали эффективность предложенной модели и возможность использования ее в качестве определяющих соотношений в двумерном случае. Описанная модель может быть внедрена в конечно-элементный комплекс ACELAN, которая позволит рассчитывать неоднородные поля поляризации поликристаллических сегнетоэлектрических тел, при воздействии сильных электрических полей.

# 1. Постановка задачи. Вывод предельной зависимости

Рассматривается задача о поляризации прямоугольного керамического тела электрическим полем, создаваемым системой электродов, например, как показано на рис. 1. Так как электроды имеют такую геометрию, что они не изменяются вдоль одного направления, то и электрическое поле не будет изменяться вдоль этого направления. В этом случае применимы условия модели плоской деформации: переключения доменов будут происходить в одной плоскости.

Пусть на электродах потенциал изменяется во времени таким образом, что возникающее внутри электрическое поле будет вызывать эффект поляризации керамики. Тогда после снятия электрического напряжения поляризация внутри объема не исчезает. Характер распределения векторного поля этой поляризации также не зависит от длины образца.



Рис. 2. а) Ориентация векторов спонтанной поляризации неполяризованной керамики, б) Ориентация векторов спонтанной поляризации в электрическом поле

ти к рассмотрению двумерной задачи для сечения образца.

Под представительным объемом будем понимать бесконечно малый двумерный объем по сравнению с основным сечением тела, содержащий в себе достаточно большое количество кристаллитов, и как следствие этого — доменов. Вследствие структурного фазового перехода все домены представительного объема получают спонтанную поляризацию **P**<sub>s</sub>. Результирующая поляризация в представительном объеме определяется простым осреднением векторов спонтанной поляризации входящих в него доменов. Для геометрической интерпретации процесса переключения вводится в рассмотрение единичная окружность, отнесенная к некоторой фиксированной декартовой системе координат с единичными ортами **i**, **j**.

Вначале влиянием соседних доменов на процесс переключения пренебрегаем. Рассмотрим представительный объем и поставим в соответствие каждому домену единичный вектор, коллинеарный направлению его оси спонтанной поляризации с началом в единичной окружности, как это показано на рис. 2а.

Прикладывая электрическое поле, замечаем, что домены меняют ориентацию спонтанной поляризации и располагаются в некотором круговом секторе, угол раствора которого зависит от величины электрического поля и от типа сегнетоэлектрика, как это изображено на рис. 26. Положение вектора спонтанной поляризации можно охарактеризовать углом в глобальной системе и его можно представить в виде

$$\mathbf{P}_s = P_s(\mathbf{i}\cos\psi + \mathbf{j}\sin\psi),$$

Все вышесказанное позволяет нам перей- где  $P_s$  — величина спонтанной поляризации сегнетоэлектрика.

> В данной модели на первом этапе определяется функция распределения доменов и строится вспомогательная предельная зависимость между вектором поляризации и вектором электрического поля, для случая, когда влиянием соседних доменов друг на друга пренебрегается. Это так называемый идеальный случай, для которого механизмы запирания движения доменных стенок отсутствуют.

> Эта предельная зависимость выводится аналитически на основании теории Вейсса, согласно которой на процесс переключения доменов в частице оказывает влияние «эффективное» поле, определяемое в следующем виде:  $\mathbf{E}_{ef} = \mathbf{E} + \alpha \mathbf{P}_0$ , где  $\mathbf{E}$  — электрическое поле,  $\mathbf{P}_0$  — остаточная поляризация частицы,  $\alpha$  — постоянная, которую необходимо определить в дальнейшем.

> Второе положение, на котором строится модель это статистика Больцмана, согласно которой в момент, когда происходит процесс переключения доменов, распределение осей доменов в эффективном поле отличается от их распределения без поля на величину  $e^{-\frac{U}{kT}}$ , где *U* — потенциальная энергия домена в поле  $\mathbf{E}_{\mathrm{ef}}, k$  — постоянная Больцмана, T — температура.

> Следуя рассуждениям работы [4], автором получена формула для определения поляризации после переключения всех доменов в представительном объеме в идеальном случае, т.е. когда между доменами в частице нет никаких электрических и механических взаимодействий. Иными словами, выведенная формула определяет наиболее выгодный

случай переключения доменов в поле  $\mathbf{E}_{\mathrm{ef}}$ 

$$\mathbf{P}_{\infty} = \frac{\int\limits_{0}^{2\pi} \Psi P_{\mathbf{s}}(\mathbf{i}\cos\psi + \mathbf{j}\sin\psi)d\psi}{\int\limits_{0}^{2\pi} \Psi d\psi},$$
$$\Psi = e^{\frac{(E_{1}^{ef}\cos\psi + E_{2}^{ef}\sin\psi)}{a}}.$$

Здесь были введены постоянные  $P_s$  и  $a = kT/P_s$ , которые подлежат в дальнейшем определению.

#### 2. Вывод энергетического соотношения

Реальная поляризация будет отличаться от этой, так как имеющиеся механизмы запирания движения стенок оказывают существенное влияние на процесс поляризации.

В процессе моделирования поляризации важным шагом является оценка энергии, необходимой для преодоления механизмов закрепления доменных стенок, когда электрическое поле получает некоторое приращение. Далее будем рассматривать произвольный объем сегнетоэлектрика  $\Omega$ . Следуя основным положениям работ [4, 6], энергию слома механизмов, запирающих стенки доменов, для произвольного объема  $\Omega$  можно выразить в виде

$$\Delta U = \int_{\Omega} n \left\langle \Delta U_{pin} \right\rangle d\Omega =$$
$$= \int_{\Omega} n \frac{\left\langle U_{\pi} \right\rangle}{2 \left| \mathbf{P}_{s} \right| \left| d\mathbf{E}_{ef} \right|} d\mathbf{P}_{0} d\mathbf{E}_{ef} d\Omega,$$

где  $\langle \Delta U_{pin} \rangle$  — энергия, затрачиваемая на слом механизмов запирания, усредненная для представительного объема. Эту энергию можно выразить через  $\langle U_{\pi} \rangle$  — энергию переключения домена на максимальный угол, т.е. на 180°. Механизмы запирания в разных точках керамики схожи, но их количество может меняться от домена к домену. Учитывая огромное число доменов, естественно считать, что «интенсивность» таких механизмов подчиняется статистическим законам. Поэтому предыдущие соотношения дополнены некоторой плотностью распределения этих механизмов в представительном объеме. Через *п* обозначена средняя плотность запертых стенок доменов в представительном объеме, для которых энергия слома выражается через  $\langle \Delta U_{pin} \rangle$ .

Далее необходимо оценить работу поля в поляризационном процессе, т. е. ту работу, которая затрачивается на создание поляризации. Аналогично [4,6], получили

$$\begin{split} \Delta A &= d \left( \int_{\Omega} \mathbf{E} \mathbf{P} d\Omega \right) - d \left( \int_{\Omega} \frac{\mathbf{E} \boldsymbol{\eta}(\mathbf{P}_0) \mathbf{E}}{2} d\Omega \right) + \\ &+ \alpha d \left( \int_{\Omega} \frac{\mathbf{P}_0^2}{2} d\Omega \right) + \\ &+ \int_{\Omega} \frac{\mathbf{E} d \boldsymbol{\eta}(\mathbf{P}_0) \mathbf{E}}{2} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{P}_0 d\mathbf{E}_{ef} d\Omega. \end{split}$$

Полная поляризация рассматривается как совокупность индуцированной и остаточной частей, т. е.  $\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_0$ . Симметричный тензор второго ранга  $\boldsymbol{\eta}$  не зависит от величины электрического поля, а зависит только от остаточной поляризации  $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}(\mathbf{P}_0)$ . Как показано в [6], за потери в циклическом процессе отвечает только пятый интеграл

$$\Delta A = -\int_{\Omega} \mathbf{P}_0 d\mathbf{E}_{ef} d\Omega.$$

После этого составляется энергетическое соотношение, учитывающее потери в реальном процессе поляризации, потери в идеальном случае и энергию, необходимую для слома механизмов запирания доменных стенок

$$-\int_{\Omega} \mathbf{P}_{0} d\mathbf{E}_{\text{ef}} d\Omega = -\int_{\Omega} \mathbf{P}_{\infty} d\mathbf{E}_{\text{ef}} d\Omega + \int_{\Omega} n \frac{\langle U_{\pi} \rangle}{2 |\mathbf{P}_{s}| |d\mathbf{E}_{\text{ef}}|} d\mathbf{P}_{0} d\mathbf{E}_{\text{ef}} d\Omega$$

Введем  $k = n \frac{\langle U \rangle}{2P_s}$  — новую неизвестную величину, которую необходимо в дальнейшем определить. В силу произвольности объема интегрирования и эффективного электрического поля, получаем соотношение

$$\mathbf{P}_{\infty} - \mathbf{P}_0 = k \frac{d\mathbf{P}_0}{|d\mathbf{E}_{\rm ef}|},$$

которое можно переписать в виде

$$d\mathbf{P}_{0} = \frac{1}{k} |d\mathbf{E}_{ef}| (\mathbf{P}_{\infty} - \mathbf{P}_{0}),$$
  
$$d\mathbf{E}_{ef} = d\mathbf{E} + \alpha d\mathbf{P}_{0}.$$
 (2.1)

Полученное уравнение в дифференциалах является искомым уравнением для определения остаточной поляризации  $d\mathbf{P}_0$ .

# 3. Численное решение полученного уравнения

Для решения полученного уравнения предлагается использовать метод последовательных приближений. Для этого будем рассматривать уравнение (2.1) как уравнения в конечных разностях

$$\Delta \mathbf{P}_0 = \frac{1}{k} \left| \Delta \mathbf{E} + \alpha \Delta \mathbf{P}_0 \right| (\mathbf{P}_\infty(\mathbf{P}_0) - \mathbf{P}_0).$$
(3.1)

Представим процесс поляризации в виде последовательности равновесных состояний  $C^{(i)}$ . Переход от состояния  $C^{(i)}$  к состоянию  $C^{(i+1)}$  связан с определением приращений функций, т.е.  $\mathbf{P}_{0}^{(i+1)} = \mathbf{P}_{0}^{(i)} + \Delta \mathbf{P}_{0}^{(i)}$  и т.д. Если электрическое поле получает при-

Если электрическое поле получает приращение  $\Delta \mathbf{E}^{(i)}$ , то наша задача из (3.1) получить приращение  $\Delta \mathbf{P}_0^{(i)}$ . Очевидно, что  $\mathbf{E}^{(i)} + \Delta \mathbf{E}^{(i)}$  и  $\mathbf{P}_0^{(i)} + \Delta \mathbf{P}_0^{(i)}$  будут функциями следующего  $C^{(i+1)}$  состояния. Для определения приращения вектора остаточной поляризации  $\Delta \mathbf{P}_0^{(i)}$  при переходе от одного равновесного состояния  $C^{(i)}$  к  $C^{(i+1)}$  состоянию воспользуемся итерационным процессом

$$\Delta \mathbf{P}_{0m}^{(i)} = \frac{1}{k} \left| \Delta \mathbf{E}^{(i)} + \alpha \Delta \mathbf{P}_{0m-1}^{(i)} \right| \times \\ \times \left( \mathbf{P}_{\infty}(\mathbf{P}_{0m}^{(i)}) - \mathbf{P}_{0m}^{(i)} \right), \quad (3.2)$$
$$\mathbf{P}^{(i)} = -\mathbf{P}^{(i)} + \Delta \mathbf{P}^{(i)} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{P}_{0m+1}^{(i)} = \mathbf{P}_{0m}^{(i)} + \Delta \mathbf{P}_{0m}^{(i)}.$$
 (3.3)

Индуцированную составляющую поляризации будем представлять в виде

$$\mathbf{P}_e = c(\mathbf{P}_{\infty} - \mathbf{P}_0) + \beta \mathbf{E}, \qquad (3.4)$$

где  $c, \beta$  — постоянные, также подлежащие определению в дальнейшем. В (3.4), в отличие от работы [4], было введено добавочное слагаемое  $\beta \mathbf{E}$ , которое отвечает за индуцированную составляющую поляризации даже в случае диэлектрика, не являющегося сегнетоэлектриком. Отметим, что добавление этого слагаемого позволило получить более реалистичные гистерезисные петли.

Далее определяем полную поляризацию  $\mathbf{P}^{(i)}$  при переходе от одного равновесного состояния  $C^{(i)}$  к  $C^{(i+1)}$ 

$$\mathbf{P}^{(i)} = \mathbf{P}_e^{(i)} + \Delta \mathbf{P}_0^{(i)}.$$

# 4. Результаты численных экспериментов

Как отмечалось в предыдущем разделе, будем решать полученное уравнение методом последовательных приближений. Параметры  $\alpha$ , a, k, c,  $P_s$ ,  $\beta$  подбираются из условия совпадения расчетных и экспериментальных зависимостей, например, больших петель диэлектрического гистерезиса. Для сходимости метода необходимо убедиться, что существуют такие диапазоны параметров  $\alpha$ , a, k, c,  $P_s$ ,  $\beta$ , при которых в (3.2)–(3.3) метод последовательных приближений работает, т.е. оператор будет сжимающим.

Задавшись значениями этих параметров, организуем итерационный процесс (3.2) с нулевым начальным приближением приращения поляризации для определения приращения вектора остаточной поляризации  $\Delta \mathbf{P}_0^{(i)}$ при переходе от одного равновесного состояния  $C^{(i)}$  к  $C^{(i+1)}$  состоянию. Условием выхода из итерационного процесса будем считать условие

$$\left|\Delta \mathbf{P}_{0\ m+1}^{(i)} - \Delta \mathbf{P}_{0\ m}^{(i)}\right| < \varepsilon.$$

Отметим, что это условие для значения  $\varepsilon = 10^{-5}$  выполнялось при значениях m, не превышающих 30 итераций.

Рассмотрим влияние параметров модели на форму большой петли гистерезиса. На рис. 3 представлены петли гистерезиса при значениях параметра  $\alpha$ : {9,6 · 10<sup>6</sup>, 6,6 · 10<sup>6</sup>, 3,6 · 10<sup>6</sup>}( $\frac{B_{M}}{K_{\pi}}$ ), при этом остальные параметры оставались неизменными:  $a = 2 \cdot 10^{6} (\frac{B}{M})$ ,  $c = 0,18, k = 1,5 \cdot 10^{6} (\frac{M}{B}), P_{s} = 0,45 (\frac{K\pi}{M^{2}}),$  $\beta = 1 \cdot 10^{-8} (\frac{K\pi}{MB}).$ 

Анализируя приведенные результаты, можно сделать вывод, что петля гистерезиса тем круче, чем больше значение параметра. Это объясняется тем, что параметр  $\alpha$  связан с остаточной поляризацией в выражении эффективного электрического поля. Чем больше значение параметра  $\alpha$ , тем больше влияние соседних доменов.

На рис. 4 показано влияние параметра *a*, который принимал значения из следующего множества *a*: {1,4 · 10<sup>6</sup>, 6,4 · 10<sup>5</sup>, 4,4 · 10<sup>5</sup>} ( $\frac{B}{M}$ ), при неизменных значениях остальных параметров:  $\alpha = 6,3 \cdot 10^6 (\frac{BM}{K\pi})$ ,  $c = 0,28, k = 5,5 \cdot 10^6 (\frac{M}{B}), P_s = 0,45 (\frac{K\pi}{M^2})$ ,  $\beta = 1,4 \cdot 10^{-8} (\frac{K\pi}{MB})$ .



Рис. 3. Большая петля гистерезиса при а)  $\alpha = 9.6 \cdot 10^6$ ; б)  $\alpha = 6.6 \cdot 10^6$ ; в)  $\alpha = 3.6 \cdot 10^6 \left(\frac{B_M}{K_{\pi}}\right)$ 



Рис. 4. Большая петля гистерезиса при а)  $a = 1, 4 \cdot 10^6$ , б)  $a = 6, 4 \cdot 10^5$ , в)  $a = 4, 4 \cdot 10^5 \left(\frac{B}{M}\right)$ 

Можно сделать вывод, что параметр aвлияет как на пологость петли, так и на ее форму. Это связано с тем, что чем выше температура, тем меньше переключения доменов, следовательно, петля становится уже.

На рис. 5 демонстрируется как с ростом параметра  $k: \{1 \cdot 10^6, 2 \cdot 10^6, 3 \cdot 10^6\} \left(\frac{M}{B}\right)$  меняетпараметра к. (1710, 2710, 3710,  $f(\frac{1}{B})$  меняет-ся петля гистерезиса. Остальные параметры остаются неизменными:  $\alpha = 9,6 \cdot 10^6 \left(\frac{B_M}{K\pi}\right)$ ,  $a = 2,1 \cdot 10^6 \left(\frac{B}{M}\right)$ , c = 0,28,  $P_s = 0,45 \left(\frac{K\pi}{M^2}\right)$ ,  $\beta = 1 \cdot 10^{-8} \left(\frac{K\pi}{MB}\right)$ . Параметр k связан с потенциальной энер-

гией  $\hat{U}$  поворота домена на  $180^{\circ}$  в поле  $\mathbf{E}_{\rm ef}$ . Чем больше потенциальная энергия U, тем большее поле надо приложить и, следовательно, петля расширяется. Чем меньше энергия

уменьшается поперечная зона внутри об- на рис. 7. Видно, что экспериментальная и

ласти петли. Остальные параметры остаются неизменными:  $\alpha = 9.6 \cdot 10^{6} \left(\frac{\text{Bm}}{\text{Kn}}\right),$  $a = 2.1 \cdot 10^{6} \left(\frac{\text{B}}{\text{M}}\right), P_{s} = 0.45 \left(\frac{\text{Kn}}{\text{M}^{2}}\right), k = 2 \cdot 10^{6} \left(\frac{\text{M}}{\text{B}}\right),$  $\beta = 1 \cdot 10^{-9} \left(\frac{\text{Kn}}{\text{M}^{8}}\right).$ 

Рассмотренные примеры показывают, что варьируя параметры модели, можно с большой вероятностью подобрать их так, что расчетная гистерезисная петля будет совпадать с экспериментальной. Например, мы взяли в качестве экспериментальных данных результаты работ как зарубежных, так и российских авторов [7–9]. Эти петли показаны на рис. 7–9 сплошной линией и соответствуют керамике PLZT.

но, петля расширяется. Чем меньше энергия домена в поле, тем при меньшем его значении происходят переключения доменов. Наконец, из рис. 6 видно, что с ростом параметра *c*: {0,1, 0,38, 0,58}, *к* и с с *P\_s* = 0,3  $\left(\frac{K\pi}{M^2}\right)$ ,  $\beta = 1 \cdot 10^{-8} \left(\frac{K\pi}{MB}\right)$ , мы получаем



Рис. 5. Большая петля гистерезиса при а)  $k = 1 \cdot 10^6$ , б)  $k = 2 \cdot 10^6$ , в)  $k = 3 \cdot 10^6 \left(\frac{M}{R}\right)$ 



Рис. 6. Большая петля гистерезиса при а) c = 0,1, 6) c = 0,38, в) c = 0,58

расчетная кривые достаточно хорошо совпали.

В качестве второго примера приведем гистерезисную зависимость остаточной поляризации от приложенного электрического поля для керамики РZT, полученной методом изостатического холодного прессования. На рис. 8 сплошной линией показана экспериментальная кривая. На этом же рисунке пунктирной линией показана расчетная кривая, наложенная на экспериментальную.

Для данного случая выбраны следующие параметры модели:  $a = 6.1 \cdot 10^5 \left(\frac{\text{B}}{\text{M}}\right)$ ,  $\alpha = 4.9 \cdot 10^6 \left(\frac{\text{B} \cdot \text{M}}{\text{K} \pi}\right)$ , c = 0.2,  $k = 1.1 \cdot 10^6 \left(\frac{\text{M}}{\text{B}}\right)$ ,  $P_s = 0.5 \left(\frac{\text{K} \pi}{\text{M}^2}\right)$ ,  $\beta = 1 \cdot 10^{-9} \left(\frac{\text{K} \pi}{\text{M} \text{B}}\right)$ .

В работе [9] исследованы процессы переключения сегнетомягких керамических материалов на основе цирконата-титаната свинца и приведены экспериментальные петли диэлектрического гистерезиса. На рис. 9 показа-

но сравнение экспериментальной петли и петли, рассчитанной с помощью модели с параметрами:  $a = 1.57 \cdot 10^6 \left(\frac{\text{B}}{\text{M}}\right), \alpha = 6.79 \cdot 10^6 \left(\frac{\text{B} \text{M}}{\text{K} \pi}\right),$  $c = 0.3, k = 6.5 \cdot 10^5 \left(\frac{\text{M}}{\text{B}}\right), P_s = 0.5 \left(\frac{\text{K} \pi}{\text{M}^2}\right),$  $\beta = 1 \cdot 10^{-8} \left(\frac{\text{K} \pi}{\text{M} \text{B}}\right).$ 

#### Заключение

Рассмотрена задача об определении остаточной поляризации представительного объема сегнетоэлектрического материала, помещенного во внешнее электрическое поле в рамках модели плоской деформации. Полученные уравнения и проведенные вычисления показали возможность обобщения модели Джила–Атертона на двумерный случай для поликристаллических сегнетоэлектрических сред. Практическое применение данной модели заключается в построении определяющих соотношений между полной поляризацией и электрическим полем, а также в возможно-





Рис. 7. Экспериментальная петля гистерезиса для керамики PLZT (сплошная линия) и ее аппроксимация (пунктирная линия)

Рис. 8. Экспериментальная петля гистерезиса остаточной поляризации для керамики РZT (сплошная линия) и ее аппроксимация (пунктирная линия)



Рис. 9. Сравнение расчетной (пунктирная линия) и экспериментальной петли гистерезиса поляризации для твердого раствора на основе ЦТС (сплошная линия)

сти использования разработанной модели и численного алгоритма в конечно-элементном комплексе ACELAN.

#### Литература

- Фесенко Е.Г., Данцигер А.Я., Крамаров О.П. и др. Поляризация керамики. Ростов-на-Дону: Из-во РГУ, 1968. 136 с.
- Preisach F. Über die magnetische Nachwirkung // Zs. f. Phys. 1935. No. 94. P. 277–302.
- Robert G., Damjanovic D., Setter N. Preisach distribution function approach to piezoelectric nonlinearity and hysteresis // J. of Appl. Phys. 2001. Vol. 90. No. 5. P. 2459–2464.
- 4. Smith R.C., Hom C.L. A domain wall theory for ferroelectric hysteresis // Center for Research in

Scientific Computation (CRSC) technical report CRSC-TR99-01, Journal of Intelligent Material Systems and Structures. 1999. Vol. 10.  $\mathbb{N}$  3. P. 195–213.

- Smith R.C., Ounaies Z. A domain wall model for hysteresis in piezoelectric materials // Journal of Intelligent Material Systems and Structures. 2000. Vol. 11. No. 1. P. 62–79.
- 6. Белоконь А.В., Скалиух А.С. Математическое моделирование необратимых процессов поляризации. М.: Физматлит, 2010. 328 с.
- Lynch C.S. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT // Acta mater. 1996. Vol. 44. No. 10, P. 4137–4148.
- 8. Selten M., Schneider G.A., Knoblauch V., McMeeking R.M. On the evolution of the linear material properties of PZT during loading

history—an experimental study // Int. Journal of Solids and Structures. 2005. No. 42. P. 3953–3966.

 Акбаева Г.М., Бородин В.З. Особенности процессов переключения сегнетомягкой керамики на основе цирконата-титаната свинца // Физика твердого тела. 2015. Т. 57. Вып. 3. С. 501– 505.

#### References

- Fesenko E.G., Danciger A.Ya., Kramarov O.P. *Polarizaciya keramiki* [Polarization of the ceramics]. Rostov-on-Don, RGU Publ., 1968, 136 p. (In Russian)
- Preisach F. Uber die magnetische Nachwirkung. Zs. f. Phys., 1935, no. 94, pp. 277–302.
- Robert G., Damjanovic D., Setter N. Preisach distribution function approach to piezoelectric nonlinearity and hysteresis J. of Appl. Phys., 2001, vol. 90, no. 5, pp. 2459–2464.
- Smith R.C., Hom C.L. A domain wall theory for ferroelectric hysteresis Center for Research in Scientific Computation (CRSC) technical report CRSC-TR99-01, Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 1999, vol. 10, no. 3, pp. 195–213.

- Smith R.C., Ounaies Z. A domain wall model for hysteresis in piezoelectric materials *Journal* of *Intelligent Material Systems and Structures*, 2000, vol. 11, no. 1, pp. 62–79.
- Belokon A.V., Skaliukh A.S. Matematicheskoe modelirovanie neobratimykh processov poliarizatsii [Mathematical modeling of irreversible processes of polarization]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010, 328 p. (In Russian)
- Lynch C.S. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT Acta mater., 1996, vol. 44, no. 10, pp. 4137–4148.
- Selten M., Schneider G.A., Knoblauch V., McMeeking R.M. On the evolution of the linear material properties of PZT during loading history—an experimental study *Int. Journal of Solids and Structures*, 2005, no. 42, pp. 3953– 3966.
- Akbaeva G.M., Borodin V.Z. Osobennosti processov pereklucheniya segnetomyagkoi keramiki na osnove cirkonata-titanata svinca [Specifics of polarization switching in soft CTS-based ferroelectric ceramic]. *Fizika tverdogo tela* [Physics of the Solid State]. 2015, vol. 57, iss. 3, pp. 501–505. (In Russian)

Статья поступила 18 декабря 2015 г.

<sup>ⓒ</sup> Герасименко Т. Е., 2016