

05.1; 05.2; 05.3

© 1992

## АНИЗОТРОПИЯ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИТОВ И МЕХАНИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ СЕГНЕТОКЕРАМИКИ

Е.И. Бондаренко, В.Ю. Тополов

Интерес к проблеме механической прочности сегнетокерамических (СК), пьезоэлектрических и родственных им материалов вызван требованиями практики. Кроме того, исследование механизмов разрушения СК в связи с фазовыми переходами, доменной структурой и анизотропией физических свойств является актуальным для физики разрушения. Анализ литературных данных показывает [1], что СК типа  $BaTiO_3$  в процессе разрушения ведет себя как хрупкое тело с характеристиками, зависящими от фазового состояния материала. Экспериментальные данные свидетельствуют как о снижении предела прочности СК при растяжении  $\sigma_{пр}$  в случае перехода из параэлектрической (ПЭ) в сегнетоэлектрическую (СЭ) фазу [2], так и о повышении [3, 4]. Согласно [2], механическая прочность СК  $BaTiO_3$  при температуре  $T=298$  К на 62.8 МПа меньше, чем при  $T=423$  К. Эту разность авторы [2] связывают с возникновением в СЭ фазе внутренних напряжений.

Расхождения между результатами [2] и [3, 4], по-видимому, указывают на существование дополнительного механизма влияния фазовых переходов на  $\sigma_{пр}$ . Как будет показано в настоящей работе, такой механизм может быть обусловлен изменением анизотропии электромеханических свойств СК. Для этого нами исследовалось распределение механических напряжений  $\sigma_{fg}^*$  по кристаллитам при приложении к образцу внешнего однородного растягивающего напряжения  $\sigma_{fg}^0$ . В предлагаемой модели сферический кристаллит с вектором спонтанной поляризации  $\vec{P}_s \parallel OX_3$  окружен однородной средой — СК матрицей, поляризованной вдоль оси  $OX_3^*$ . Оси прямоугольной системы координат матрицы  $(X_1^*, X_2^*, X_3^*)$  и кристаллита  $(X_1, X_2, X_3)$  связаны направляющими косинусами  $\alpha_{kr}(\varphi, \psi, \theta)$ , где  $\varphi, \psi, \theta$  — углы Эйлера.

Основываясь на результатах теории [5], уравнение упругого равновесия кристаллита с механически напряженной матрицей в системе координат  $(X_1, X_2, X_3)$  имеет вид

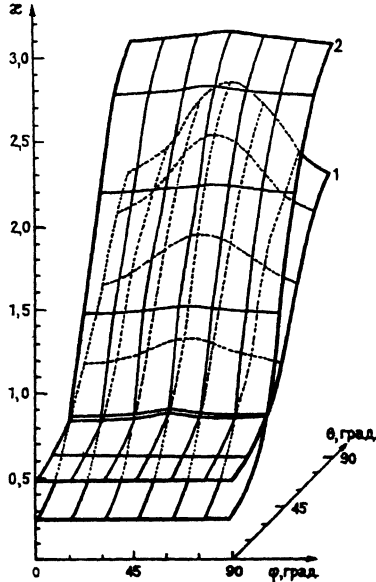
$$c_{ijkl}(\xi_{kl}^0 + S_{klmn} \xi_{mn}^* - \xi_{kl}^*) = c_{ijkl}^*(\xi_{kl}^0 + S_{klmn} \xi_{mn}^* - \xi_{kl}^*). \quad (1)$$

В (1)  $c_{ijkl}$  и  $c_{ijkl}^*$  — модули упругости кристаллита и СК матрицы соответственно;  $\xi_{kl}^0 = \alpha_{kr} \alpha_{lt} S_{rtfg}^* \sigma_{fg}^0$  — деформации матрицы,

зависящие от ее упругих податливостей  $s_{rtfg}^*$ ;  $s_{klmn}$  - факторы формы, зависящие от  $c_{ijkl}^*$  матрицы и геометрии кристаллита;  $\xi_{mn}^{\Sigma} = \xi_{mn}' + \xi_{mn}^s$ ;  $\xi_{mn}'$  - деформации кристаллита, связанные с  $c_{ijkl} \neq c_{ijkl}^*$  и влиянием  $\epsilon_{fg}^0$ ;  $\xi_{mn}^s = d_{amn} E_a$  - его пьезодеформации, возбуждаемые электрическим полем СК матрицы  $E_a = -d_{aef} g_{efh}^* \epsilon_{fh}^0$  (в простейшем случае мы не учитываем деполяризационных эффектов); коэффициенты  $d_{amn}$  и  $g_{efh}^*$  характеризуют пьезоэлектрические свойства кристаллита и матрицы соответственно. После определения  $\xi_{mn}'$  внутренние механические напряжения  $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(\epsilon_{fg}^0)$  рассчитываются с использованием любой из частей (1). В системе координат  $(X_1^* X_2^* X_3^*)$  эти напряжения принимают вид  $\epsilon_{fg}^* = d_{fi} d_{gj} \epsilon_{ij}$ . Отношение  $\alpha_{fg} = \epsilon_{fg}^* / \epsilon_{fg}^0$  характеризует усиление ( $\alpha_{fg} > 1$ ) или ослабление ( $\alpha_{fg} < 1$ ) внутри кристаллита, приложенного к образцу внешнего напряжения  $\epsilon_{fg}^0$ .

Нами определены ориентационные зависимости  $\alpha_{33}(\varphi, \psi, \theta)$  для СК  $BaTiO_3$  и  $PbTiO_3$  в СЭ ( $T=298$  К) и ПЭ ( $T=423$  К и  $803$  К для  $BaTiO_3$  и  $PbTiO_3$  соответственно) фазах с использованием экспериментальных данных [6]. В СЭ фазе мы выделяли вклады в  $\alpha_{33}^{\Sigma} = \alpha + \alpha_n$ , обусловленные только упругим взаимодействием кристаллита и матрицы  $\alpha$  (в (1), полагали  $\xi_{mn}^{\Sigma} = \xi_{mn}'$ ;  $\xi_{kl}^s = 0$ ) и связанные с их пьезоэлектрической активностью  $\alpha_n$  (в (1) подставляли  $\xi_{mn}^{\Sigma} = \xi_{mn}^s$ ). Результаты расчетов  $\alpha$  представлены на рисунке, а  $\alpha_n$  задаются формулой  $\alpha_n = (A \cos^2 \theta + B) \cos \theta$ , где  $A = -0.738$ ;  $B = 0.784$  ( $BaTiO_3$ ) и  $A = -0.324$ ;  $B = 0.517$ , ( $PbTiO_3$ ). В ПЭ фазе вследствие кубической анизотропии кристаллита для обоих соединений  $\alpha^{n3} \approx 1$ . Практическое отсутствие зависимости  $\alpha_{33}^{\Sigma}$  от  $\psi$  связано с симметрией модели и близостью  $c_{ijkl}^*$  к модулям упругости изотропной среды. Более резкие максимумы  $\alpha(\varphi)_{\theta \rightarrow 90^\circ}$  у  $BaTiO_3$ , чем у  $PbTiO_3$ , в значительной мере обусловлены различием  $(c_{12}^E - c_{13}^E) |_{BaTiO_3} \approx 2(c_{12}^E - c_{13}^E) |_{PbTiO_3}$ . В ПЭ фазе, где  $c_{12} = c_{13}$ , зависимость  $\alpha^{n3}(\varphi)$  для обеих СК выражена слабо.

Как показывают расчеты, в кристаллитах с ориентацией  $75^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$   $\alpha_{33}^{\Sigma} \approx 2$ . Если пренебречь  $90^\circ$ -ми переориентациями и масштабным эффектом, величина  $\epsilon_{np}$  СК должна уменьшиться примерно в 2 раза. Например, для крупнозернистой СК  $BaTiO_3$  при комнатной температуре следует ожидать понижения  $\epsilon_{np}$  от 152 до 76 МПа (экспериментальные значения 152 и 96 МПа соответственно [2]).  $90^\circ$ -е переориентации, весьма заметные в сегнетомягких СК (например, в  $BaTiO_3$  до 75 % кристаллитов переориентируется под действием двухосного сжимающего напряжения  $\sim 200$  МПа [7]), приводят к уменьшению  $\alpha_{33}^{\Sigma}$  и увеличению  $\epsilon_{np}$  в СЭ фазе (до 117 МПа для крупнозернистой СК  $BaTiO_3$ ). Однако



Зависимость  $z(\varphi, \theta)$  для СК  $BaTiO_3$  (1) и  $PbTiO_3$  (2).

в сегнетожестких (ЦТС-23) и средних по жесткости (ТБК-3) СК число таких переориентаций меньше [7]. В СК  $PbTiO_3$  неоднородность распределения  $\epsilon_{33}^*$  возрастает (см. рисунок), а  $90^\circ$ -е переориентации отсутствуют вплоть до напряжений  $\sim 300$  МПа [8]. Следовательно, влияние анизотропии электромеханических свойств на  $\epsilon_{пр}$  СК  $PbTiO_3$  более значительно.

Роль масштабного эффекта зависит от характера распределения размеров дефектов (трещин Гриффитса). Значительная концентрация  $\epsilon_{33}^*$  (среднее значение  $\bar{z} \approx 2$  в  $BaTiO_3$ ) имеет место в кристаллитах при  $\theta \approx 75^\circ$  (см. рисунок), суммарный объем которых  $v^* \approx v/4$ , где  $v$  - объем образца. Учитывая масштабный эффект [1], оценки в СЭ фазе необходимо умножить на  $(v/v^*)^{1-m}$ , где  $m$  - параметр Вейбулла. Для узкого распределения дефектов ( $m \approx 10$ ) поправочный коэффициент незначителен (1.15), тогда как для  $m \approx 3$  (характерно для ЦТС-19 [1]) влияния масштабного эффекта (увеличение  $\epsilon_{пр}$  в 1.6 раз) и анизотропии на  $\epsilon_{пр}$  практически компенсируют друг друга. При выборе же  $\bar{z} \approx 1.6$  ( $v^* \approx v/2$ ) роль масштабного эффекта незначительна.

Таким образом, изменение анизотропии электромеханических свойств, вызванное фазовыми переходами, может существенным образом повлиять на  $\epsilon_{пр}$  СК, и его необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных данных.

- [1] Зацаринный В.П. Прочность пьезокерамики. Ростов н/Д: РГУ, 1978. 208 с.
- [2] Rohanek R.C., Rice R.W., Walker B.E., Smith P.L. // *Ferroelectrics*. 1976. V. 10. N 1-4. P. 231-235.
- [3] Греков А.А., Крамаров С.О. // *Ferroelectrics*. 1978. V. 18. N 4. P. 249-255.
- [4] Катрич М.Д., Шильников А.В. Физика диэлектриков и полупроводников. Волгоград, 1986. С. 187-195.
- [5] Муга Т. *Micromechanics of defects in solids*. Dordrecht: Martins Nijhoff Publ., 1987. XIV, 587 p.
- [6] Физика сегнетоэлектрических явлений / Под ред. Г.А. Смоленского. Л.: Наука, 1985. 396 с.
- [7] Дудкевич В.П., Кулешов В.В., Турик А.В., Фесенко Е.Г. // *ЖТФ*. 1977. Т. 47. № 10. С. 2168-2172.
- [8] Феровов А.Д., Кулешов В.В., Дудкевич В.П., Фесенко Е.Г. // *ЖТФ*. 1980. Т. 50. № 3. С. 621-623.

Научно-исследовательский  
институт физики  
Ростовского  
государственного  
университета

Поступило в Редакцию  
11 ноября 1991 г.