

УДК 539.3

ОПИСАНИЕ ПЬЕЗОЭФФЕКТА В ПОЛЯРНЫХ МАТЕРИАЛАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОМЕНТНОЙ ТЕОРИИ

Е. А. Иванова, Я. Э. Колпаков

Институт проблем машиноведения РАН, 199178 Санкт-Петербург

E-mails: elenaivanova239@post.ru, jacey@inbox.ru

Предложен метод описания пьезоэффекта в полярной среде, основанный на использовании модели сложной частицы с семью степенями свободы, обладающей ненулевым дипольным моментом. На основе микрополярной теории получена система уравнений, отличающаяся от классической теории пьезоэлектричества наличием дополнительных слагаемых. Показано, что при определенных допущениях предложенная система уравнений переходит в классическую, однако пьезоэлектрические модули существенно зависят от вектора спонтанной поляризации. Показано, что для анизотропных сред с различной симметрией структура пьезоэлектрических тензоров третьего ранга, полученных в рамках предлагаемой микрополярной теории, совпадает со структурой тензоров, получаемых в рамках классической теории. Для рассматриваемых сред приведены дисперсионные соотношения и показано, что в предлагаемой теории, в отличие от классической теории, пьезоэлектрические модули пропорциональны спонтанной поляризации.

Ключевые слова: микрополярная теория, пьезоэлектричество, пьезоэффект, полярные материалы, спонтанная поляризация.

Введение. Современную технику невозможно представить без приборов, работающих на основе пьезоэффекта. Являясь непосредственными преобразователями энергии из электрической в механическую и наоборот, такие приборы имеют очень широкую область применения. Наиболее известным является применение пластин, вырезанных из пьезоэлектрического материала под определенным углом, для стабилизации частоты. Кроме того, пьезоэлектрические резонаторы используются для фильтрации частот в определенном диапазоне. Для проведения исследований в области высоких частот (от 60 МГц до 2 ГГц) применяются резонаторы на поверхностных акустических волнах, а при еще более высоких частотах — резонаторы на тонких пьезоэлектрических пленках. Современный пьезоэлектрический резонатор представляет собой пластину из материала, обладающего пьезоэлектрическими свойствами и покрытого проводящим слоем металла. Другая область применения пьезоэлектричества — различные датчики (давления, температуры, ускорения). С помощью пьезоэлектрических датчиков можно измерить, например, давление внутри ствола орудия или двигателя внутреннего сгорания, ускорение космического корабля, температуру в нефтяной скважине или оперативно определить наличие и концентрацию определенных бактерий в окружающей среде. Характеристики пьезодатчиков (постоянное положение нулевой точки, минимальные потери на трение, хорошая воспроизводимость показаний, высокая чувствительность) превосходят характеристики их меха-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 09-01-00623.а).

© Иванова Е. А., Колпаков Я. Э., 2013

нических аналогов. На основе пьезоэлементов создается медицинская аппаратура, а также другие приборы — источники и приемники звуковых и ультразвуковых колебаний.

Первая попытка построить теорию пьезоэлектричества была предпринята В. Фойгтом в 1910 г. В настоящее время существует несколько разновидностей линейной теории пьезоэлектричества (см., например, [1, 2]). Инженерные методы расчета характеристик пьезоэлектрических резонаторов, разработанные на основе этой теории, изложены, например, в [3–5]. Считается, что качественные различия между теорией и экспериментом отсутствуют. Вместе с тем существует проблема, для решения которой требуется расширить и обобщить теорию пьезоэлектричества. Как известно, некоторые пьезоэлектрические материалы представляют собой полярные кристаллы. При создании теорий пьезоэлектричества, описывающих поведение подобных материалов, необходимо учитывать вращательные степени свободы. Данная работа является продолжением работы [6], в которой предложена теория пьезоэлектричества, основанная на уравнениях моментной теории упругости, использованной ранее для описания различных электромеханических явлений (см., например, [7, 8]).

1. Примеры полярных материалов. Полярные материалы, в отличие от неполярных, имеют ненулевой дипольный момент единицы объема, т. е. обладают спонтанной поляризацией. Как правило, у полярных материалов величина пьезоэффекта, которую можно приближенно оценить как среднеквадратичное значение пьезоэлектрических модулей, оказывается приближенно пропорциональной плотности спонтанной поляризации. Кроме того, для полярных материалов пьезоэлектрические модули значительно больше, чем для неполярных. Полярными пьезоэлектриками являются, например, LiGaO_2 , Li_2GeO_3 , CdTe , BaTiO_3 , PZT , $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_3$. В качестве примера рассмотрим материал PZT , элементарная ячейка которого показана на рис. 1. Базис ячейки и заряды составляющих ее ионов определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \text{Pb: } \quad \mathbf{B}_1 &= z_1 c \mathbf{e}_3, & q_1 &= +2q_e, \\ \mathbf{B}_2 &= \frac{1}{2} a \mathbf{e}_1 + \frac{1}{2} a \mathbf{e}_2 + z_2 c \mathbf{e}_3, & q_2 &= +4q_e (\text{Zr, Ti}), \\ \mathbf{B}_3 &= \frac{1}{2} a \mathbf{e}_1 + \frac{1}{2} a \mathbf{e}_2 + z_3 c \mathbf{e}_3, & q_3 &= -2q_e (\text{O}), \\ \mathbf{B}_4 &= \frac{1}{2} a \mathbf{e}_1 + z_4 c \mathbf{e}_3, & q_4 &= -2q_e (\text{O}), \\ \mathbf{B}_5 &= \frac{1}{2} a \mathbf{e}_2 + z_4 c \mathbf{e}_3, & q_5 &= -2q_e (\text{O}). \end{aligned}$$

Здесь $q_e = 1,602 \cdot 10^{-19}$; $a = 4,046 \cdot 10^{-10}$; $c = 4,139 \cdot 10^{-10}$; $z_1 = 0$; $z_2 = 0,4517$; $z_3 = -0,1027$; $z_4 = 0,3785$. Значения всех величин выражены в единицах системы СИ.

Дипольный момент элементарной ячейки вычисляется по формуле

$$\mathbf{d}_0 = \sum_i q_i \mathbf{B}_i = 2q_e c [z_1 - z_3 + 2(z_2 - z_4)] \mathbf{e}_3.$$

Значение дипольного момента равно $d_0 = 3,303 \cdot 10^{-29}$ Кл·м.

2. Модель дипольной частицы. Спонтанная поляризация среды. Рассмотрим среду, каждая частица которой является нейтральным диполем с зарядом q_+ , равным q , и зарядом q_- , равным $-q$. Диполь способен перемещаться в пространстве и поворачиваться, а также растягиваться или сжиматься. Пусть отсчетное положение диполя (рис. 2) определяют следующие величины: \mathbf{R}_0^+ , \mathbf{R}_0^- — радиус-векторы зарядов q^+ и q^- соответственно, \mathbf{l}_0 — вектор, определяющий положение зарядов в диполе относительно друг друга; \mathbf{r}_0 — радиус-вектор центра диполя. При переходе в актуальное положение заряды q^+ и q^- перемещаются в точки пространства, определяемые соответственно радиус-векторами \mathbf{R}^+

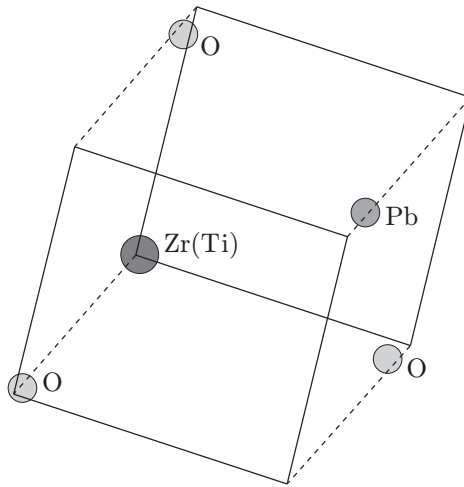


Рис. 1

Рис. 1. Элементарная ячейка материала PZT

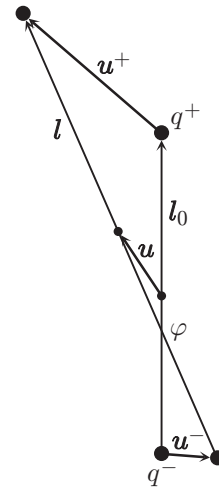


Рис. 2

Рис. 2. Тело-точка как пара зарядов

и \mathbf{R}^- , центр частицы-диполя — в точку, определяемую радиус-вектором \mathbf{r} . Вектор \mathbf{l} , определяющий положение зарядов в диполе в актуальной конфигурации, равен $\mathbf{R}^+ - \mathbf{R}^-$. Величины, характеризующие перемещения центра диполя и составляющих его зарядов, определяются следующим образом:

$$\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{u}^+ = \mathbf{R}^+ - \mathbf{R}_0^+, \quad \mathbf{u}^- = \mathbf{R}^- - \mathbf{R}_0^-.$$

Введем дипольные моменты частицы в отсчетном и актуальном положениях, обозначив их соответственно \mathbf{d}_0 и \mathbf{d} :

$$\mathbf{d}_0 = ql_0 = q(\mathbf{R}_0^+ - \mathbf{R}_0^-), \quad \mathbf{d} = ql = q(\mathbf{R}^+ - \mathbf{R}^-).$$

Пусть \mathbf{p} — поляризация, равная изменению дипольного момента, ξ — относительное изменение абсолютной величины диполя:

$$\mathbf{p} = \mathbf{d} - \mathbf{d}_0, \quad |\mathbf{d}| = |\mathbf{d}_0|(1 + \xi).$$

После ряда преобразований получаем следующее представление для \mathbf{p} :

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p}_1 = \xi \mathbf{d}_0, \quad \mathbf{p}_2 = \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{d}_0 \quad (1)$$

($\boldsymbol{\varphi}$ — вектор поворота диполя). Формулы (1) получены в предположении малости угла поворота и растяжения диполя. Такое предположение оправдано, поскольку ниже рассматривается линейная теория.

Запишем выражение для скорости подвода энергии, передаваемой диполю через электрическое поле в веществе:

$$\dot{e} = \mathbf{F}^+ \cdot \mathbf{v}^+ + \mathbf{F}^- \cdot \mathbf{v}^-.$$

Здесь \mathbf{F}^+ , \mathbf{F}^- — силы, действующие на положительно и отрицательно заряженные частицы соответственно; \mathbf{v}^+ , \mathbf{v}^- — скорости этих частиц.

Используя формулу Лоренца для силы \mathbf{F} , действующей на заряженную частицу, в пренебрежении воздействием магнитного поля $q\mathbf{E}$ (\mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля) выполним следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \dot{e} &= q^+ \mathbf{E}(\mathbf{R}^+) \cdot \dot{\mathbf{u}}^+ + q^- \mathbf{E}(\mathbf{R}^-) \cdot \dot{\mathbf{u}}^- = \\ &= q(\mathbf{E}(\mathbf{R}^+) - \mathbf{E}(\mathbf{R}^-)) \cdot \dot{\mathbf{u}} + q \mathbf{E}(\mathbf{R}^+) \cdot \frac{1}{2q} \dot{\mathbf{p}} + q \mathbf{E}(\mathbf{R}^-) \cdot \frac{1}{2q} \dot{\mathbf{p}} = \\ &= \mathbf{d}_0 \cdot (\nabla \mathbf{E}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

С помощью уравнений (1) вычислим производную от вектора поляризации:

$$\dot{\mathbf{p}} = \dot{\xi} \mathbf{d}_0 + \dot{\varphi} \times \mathbf{d}_0.$$

Таким образом, выражение для скорости подвода энергии имеет вид

$$\dot{e} = \mathbf{d}_0 \cdot (\nabla \mathbf{E}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\mathbf{d}_0 \times \mathbf{E}) \cdot \dot{\varphi} + (\mathbf{d}_0 \cdot \mathbf{E}) \dot{\xi}. \quad (2)$$

Введем в рассмотрение плотность спонтанной поляризации сплошной среды:

$$\mathbf{P}^s = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \sum_{k \in \Delta V} \mathbf{d}_{0k}.$$

Определим плотность пьезоэлектрической поляризации сплошной среды \mathbf{P}^p как предел отношения

$$\mathbf{P}^p = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \sum_{k \in \Delta V} \mathbf{p}_k = \mathbf{P}_1^p + \mathbf{P}_2^p, \quad (3)$$

где

$$\mathbf{P}_1^p = \xi \mathbf{P}^s, \quad \mathbf{P}_2^p = \varphi \times \mathbf{P}^s. \quad (4)$$

Вектор \mathbf{P}^p представляется в виде суммы поляризаций, имеющих разный характер: одна составляющая поляризации обусловлена поворотом дипольного момента среды, другая — изменением его абсолютной величины. Векторы двух составляющих поляризации взаимно ортогональны, что позволяет однозначно разложить произвольный вектор \mathbf{P}^p по двум указанным выше векторам поляризации.

Используя формулы (3), (4), запишем аналог формулы (2) для сплошной среды:

$$\dot{E} = \mathbf{P}^s \cdot (\nabla \mathbf{E}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\mathbf{P}^s \times \mathbf{E}) \cdot \dot{\varphi} + (\mathbf{P}^s \cdot \mathbf{E}) \dot{\xi}. \quad (5)$$

Предположим, что влияние электрического поля представляет собой внешнее воздействие. Тогда мощность этого воздействия можно вычислить двумя способами. С одной стороны, мощность внешних воздействий, приходящихся на единицу объема сплошной среды, равна $\rho \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{L} \cdot \dot{\varphi}$, где $\rho \mathbf{F}$ — объемная сила; $\rho \mathbf{L}$ — объемный момент. С другой стороны, мощность внешних воздействий равна той составляющей скорости подвода энергии \dot{E} , которая зависит от скоростей $\dot{\mathbf{u}}$ и $\dot{\varphi}$. Таким образом, получаем

$$\rho \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{L} \cdot \dot{\varphi} = \mathbf{P}^s \cdot (\nabla \mathbf{E}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\mathbf{P}^s \times \mathbf{E}) \cdot \dot{\varphi}. \quad (6)$$

Результаты сравнения левой и правой частей уравнения (6) позволяют сделать вывод, что в правой части уравнения коэффициент при $\dot{\mathbf{u}}$ можно отождествить с объемной силой, а коэффициент при $\dot{\varphi}$ — с объемным моментом:

$$\rho \mathbf{F} = \mathbf{P}^s \cdot \nabla \mathbf{E}, \quad \rho \mathbf{L} = \mathbf{P}^s \times \mathbf{E}. \quad (7)$$

Итак, смысл первых двух слагаемых в правой части выражения (5) определен. Последнее слагаемое можно отождествить с величиной Q , характеризующей подвод энергии от внешнего источника:

$$Q = (\mathbf{P}^s \cdot \mathbf{E}) \dot{\xi}. \quad (8)$$

3. Уравнения баланса для континуума Коссера. Рассмотрим упругий континуум, состоящий из тел-точек, — континуум Коссера. Пусть x_s — материальные (лагранжевы) координаты, $\mathbf{r}(x_s)$, $\mathbf{R}(x_s)$ — радиус-векторы, определяющие положения точек среды в отсчетной и актуальной конфигурациях соответственно. Плотность кинетической энергии среды, состоящей из тел-точек, представляется в виде квадратичной формы скоростей [9]

$$K = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}^2 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot P(t) \cdot J \cdot P^T(t) \cdot \boldsymbol{\omega}.$$

Здесь $\mathbf{u} = \mathbf{R} - \mathbf{r}$ — вектор перемещений; J — тензор инерции в отсчетной конфигурации; $P(t)$ — тензор поворота (собственно ортогональный тензор); $\boldsymbol{\omega}$ — вектор угловой скорости. Предполагается, что вектор перемещений \mathbf{u} мал, т. е. рассматривается линейная теория. В линейном приближении для тензора поворота P можно использовать следующую аппроксимацию:

$$P \approx I + \boldsymbol{\varphi} \times I, \quad \boldsymbol{\varphi} = \varphi \mathbf{e}_\varphi. \quad (9)$$

Здесь $\boldsymbol{\varphi}$ — вектор малого поворота; I — единичный тензор; \mathbf{e}_φ — единичный вектор, направленный по оси поворота; φ — угол поворота. Используя уравнение Пуассона

$$\dot{P} = \boldsymbol{\omega} \times P$$

и приближенное выражение для тензора поворота (9), получаем следующее выражение для вектора угловой скорости:

$$\boldsymbol{\omega} = \dot{\boldsymbol{\varphi}}.$$

Плотность количества движения определяется как частная производная от плотности кинетической энергии по трансляционной скорости [9]:

$$\mathbf{K}_1 = \frac{\partial K}{\partial \dot{\mathbf{u}}} = \dot{\mathbf{u}}.$$

Уравнение баланса количества движения имеет вид

$$\frac{d}{dt} \int_{(V)} \rho \mathbf{K}_1 dV = \int_{(V)} \rho \mathbf{F} dV + \int_{(S)} \mathbf{T}_{(n)} dS, \quad (10)$$

где $\rho = V^{-1} \sum_V m_i$ — объемная плотность; V — материальный объем; \mathbf{F} — массовая плотность внешних сил; $\mathbf{T}_{(n)}$ — вектор напряжений. Справедлива формула

$$\mathbf{T}_{(n)} = \mathbf{n} \cdot T, \quad (11)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор нормали к поверхности контрольного объема в данной точке; T — тензор напряжений Коши. Используя теорему о дивергенции с учетом (11), приведем уравнение (10) к виду

$$\int_{(V)} (\rho \ddot{\mathbf{u}} - \rho \mathbf{F} - \nabla \cdot T) dV = \mathbf{0}.$$

Из (11) следует уравнение баланса количества движения в дифференциальной форме

$$\nabla \cdot T + \rho \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (12)$$

Тензор напряжений можно разложить на симметричную и антисимметричную составляющие:

$$T = \tau - \frac{1}{2} \mathbf{q} \times I, \quad \tau = \tau^T, \quad \mathbf{q} = T_{\times} \quad (13)$$

(\mathbf{q} — векторный инвариант тензора напряжений). Используя представление (13), запишем уравнение (12) в форме

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{q} + \rho \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (14)$$

Плотность кинетического момента определяется как сумма плотности момента количества движения и плотности собственного кинетического момента, который в свою очередь определяется как частная производная от плотности кинетической энергии по угловой скорости [9]:

$$\mathbf{K}_2 = \mathbf{R} \times \mathbf{K}_1 + \frac{\partial K}{\partial \boldsymbol{\omega}}.$$

При малых \mathbf{u} и $\boldsymbol{\omega}$ выражение для \mathbf{K}_2 принимает вид

$$\mathbf{K}_2 = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{u}} + J \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}}.$$

Уравнение баланса кинетического момента записывается следующим образом:

$$\frac{d}{dt} \int_{(V)} \rho \mathbf{K}_2 dV = \int_{(V)} \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{F} + \mathbf{L}) dV + \int_{(S)} (\mathbf{r} \times \mathbf{T}_{(n)} + \boldsymbol{\mu}_{(n)}) dS. \quad (15)$$

Здесь \mathbf{L} — массовая плотность внешних моментов; $\boldsymbol{\mu}_{(n)}$ — вектор моментных напряжений. Формула Коши, с помощью которой вводится тензор моментных напряжений $\boldsymbol{\mu}$, имеет вид

$$\boldsymbol{\mu}_{(n)} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}. \quad (16)$$

С использованием формулы (16), теоремы о дивергенции и уравнения баланса количества движения (14) из (15) получаем уравнение баланса кинетического момента в дифференциальной форме

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\mu} + \mathbf{q} + \rho \mathbf{L} = \rho J \cdot \ddot{\boldsymbol{\varphi}}. \quad (17)$$

Уравнения (14), (17) — известные соотношения в теории микрополярных сред.

Ниже рассматривается антисимметричный тензор моментных напряжений, задаваемый с помощью сопутствующего вектора \mathbf{m} :

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{m} \times I. \quad (18)$$

Подставляя (18) в уравнение (17), получаем

$$\nabla \times \mathbf{m} + \mathbf{q} + \rho \mathbf{L} = \rho J \cdot \ddot{\boldsymbol{\varphi}}. \quad (19)$$

Перейдем к обсуждению уравнения баланса энергии. Запишем это уравнение в интегральной форме

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{(V)} \left(\frac{1}{2} \rho \dot{\mathbf{u}}^2 + \frac{1}{2} \rho \dot{\boldsymbol{\varphi}} \cdot J \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + \rho U \right) dV = \\ = \int_{(V)} (\rho \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{L} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + Q) dV + \int_{(S)} (\mathbf{T}_{(n)} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\mu}_{(n)} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + h_{(n)}) dS. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь U — массовая плотность внутренней энергии; $h_{(n)}$ — скорость подвода энергии через границу объема; Q — скорость подвода энергии в единицу объема. Используя теорему о дивергенции и соотношение $h_{(n)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{h}$, где \mathbf{h} — вектор потока энергии, запишем уравнение (20) в виде

$$\begin{aligned} \int_{(V)} [\rho \dot{U} + (\rho \ddot{\mathbf{u}} - \rho \mathbf{F} - \nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\rho J \cdot \ddot{\boldsymbol{\varphi}} - \rho \mathbf{L} - \nabla \cdot \boldsymbol{\mu}) \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} - \\ - \mathbf{T}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}} - \boldsymbol{\mu}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\varphi}} - \nabla \cdot \mathbf{h} - Q] dV = 0. \end{aligned}$$

Из законов динамики (14), (17) получаем уравнение баланса энергии в дифференциальной форме

$$\rho\dot{U} = T^T \cdot \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + \mu^T \cdot \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\varphi}} + \nabla \cdot \mathbf{h} + Q. \quad (21)$$

Не вызывает затруднений доказательство тождества

$$T^T \cdot \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}},$$

где

$$\mathbf{g} \equiv \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad \boldsymbol{\theta} \equiv \boldsymbol{\varphi} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}. \quad (22)$$

Симметричный тензор \mathbf{g} называется тензором линейной деформации, вектор $\boldsymbol{\theta}$ — вектором сдвига. С учетом приведенного тождества уравнение (21) принимает вид

$$\rho\dot{U} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \mu^T \cdot \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\varphi}} + \nabla \cdot \mathbf{h} + Q. \quad (23)$$

Используя представление (18) для тензора моментных напряжений, запишем уравнение баланса энергии (23) в форме

$$\rho\dot{U} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \nabla \cdot \mathbf{h} + Q, \quad (24)$$

где

$$\boldsymbol{\gamma} = \nabla \times \boldsymbol{\varphi}. \quad (25)$$

4. Уравнения дипольной пьезоэлектрической среды. Уравнения движения (14), (19) с учетом выражений для объемных сил и моментов (7) принимают вид

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{q} + \mathbf{P}^s \cdot \nabla \mathbf{E} = \rho \ddot{\mathbf{u}}; \quad (26)$$

$$\nabla \times \mathbf{m} + \mathbf{q} + \mathbf{P}^s \times \mathbf{E} = \rho J \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}}. \quad (27)$$

Введем вектор электрической индукции \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}^p. \quad (28)$$

Здесь \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля в веществе; ε_0 — электрическая постоянная.

Используя формулы (3), (4), запишем выражение (28) в форме

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \xi \mathbf{P}^s + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{P}^s. \quad (29)$$

Уравнение электростатики

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (30)$$

с учетом выражения (29) принимает вид

$$\nabla \cdot [\varepsilon_0 \mathbf{E} + \xi \mathbf{P}^s + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{P}^s] = 0. \quad (31)$$

Согласно уравнению (31) принятое в классической теории пьезоэлектричества соотношение Коши — Грина, связывающее величины \mathbf{D} и \mathbf{E} , в рассматриваемой теории следует заменить соотношением Коши — Грина, связывающим величину ξ и проекцию вектора \mathbf{E} на вектор \mathbf{P}^s . В этом заключается одно из существенных отличий микрополярной теории дипольной пьезоэлектрической среды от классической теории пьезоэлектричества.

Для того чтобы получить соотношения Коши — Грина, используем метод, разработанный в [10]. Выполним следующие преобразования уравнения баланса энергии (24). Выражения для величин $\boldsymbol{\tau}$, \mathbf{q} , \mathbf{m} представим в виде

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_e + \boldsymbol{\tau}_f, \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_e + \mathbf{q}_f, \quad \mathbf{m} = \mathbf{m}_e + \mathbf{m}_f, \quad (32)$$

где τ_e , \mathbf{q}_e , \mathbf{m}_e — упругие (не зависящие от скоростей деформаций) составляющие силовых и моментных напряжений; τ_f , \mathbf{q}_f , \mathbf{m}_f — диссипативные составляющие этих напряжений. Учитывая (32) и выражение для скорости подвода энергии (8), запишем уравнение баланса энергии (24) в форме

$$\rho \dot{U} = \tau_e \cdot \dot{g} - \mathbf{q}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + (\mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^s) \dot{\xi} + \nabla \cdot \mathbf{h} + \tau_f \cdot \dot{g} - \mathbf{q}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}.$$

Введем в рассмотрение две скалярные величины: температуру ϑ и энтропию H , удовлетворяющие уравнению

$$\vartheta \dot{H} = \nabla \cdot \mathbf{h} + \tau_f \cdot \dot{g} - \mathbf{q}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (33)$$

Для вектора теплового потока \mathbf{h} можно использовать определяющее уравнение

$$\mathbf{h} = \kappa \nabla \vartheta, \quad (34)$$

где κ — теплопроводность среды. Подставляя (34) в (33), получаем уравнение теплопроводности

$$\kappa \Delta \vartheta - \vartheta \dot{H} = -\tau_f \cdot \dot{g} + \mathbf{q}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \mathbf{m}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (35)$$

Слагаемые в правой части уравнения (35) характеризуют производство тепла, обусловленное диссипативными процессами в кристалле.

Используя соотношение (33), запишем уравнение баланса энергии (24) в форме

$$\rho \dot{U} = \tau_e \cdot \dot{g} - \mathbf{q}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + (\mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^s) \dot{\xi} + \vartheta \dot{H}.$$

Тогда соотношения Коши — Грина можно записать в виде

$$\begin{aligned} \tau_e &= \frac{\partial \rho U}{\partial g}, & \mathbf{q}_e &= -\frac{\partial \rho U}{\partial \boldsymbol{\theta}}, & \mathbf{m}_e &= -\frac{\partial \rho U}{\partial \boldsymbol{\gamma}}, \\ \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^s &= \frac{\partial \rho U}{\partial \xi}, & \vartheta &= \frac{\partial \rho U}{\partial H}. \end{aligned} \quad (36)$$

Примем гипотезу натурального состояния и представим выражение для внутренней энергии в виде положительно определенной квадратичной формы

$$\begin{aligned} \rho U &= \rho U_0 + \frac{1}{2} g \cdot C^{(g)} \cdot g + \frac{1}{2} \boldsymbol{\theta} \cdot C^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma} \cdot C^{(\gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \\ &+ \frac{1}{2} C^{(\xi)} \xi^2 + \frac{1}{2} C^{(H)} H^2 + \boldsymbol{\theta} \cdot C^{(\theta g)} \cdot g + \boldsymbol{\gamma} \cdot C^{(\gamma g)} \cdot g + \xi C^{(\xi g)} \cdot g + \\ &+ H C^{(Hg)} \cdot g + \boldsymbol{\gamma} \cdot C^{(\gamma \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \xi C^{(\xi \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + H C^{(H \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \\ &+ \xi C^{(\xi \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + H C^{(H \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + C^{(\xi H)} \xi H. \end{aligned} \quad (37)$$

Подставляя выражение для внутренней энергии (37) в соотношения Коши — Грина (36), получаем определяющие уравнения

$$\begin{aligned} \tau_e &= C^{(g)} \cdot g + \boldsymbol{\theta} \cdot C^{(\theta g)} + \boldsymbol{\gamma} \cdot C^{(\gamma g)} + C^{(\xi g)} \xi + C^{(Hg)} H, \\ -\mathbf{q}_e &= C^{(\theta g)} \cdot g + C^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\gamma} \cdot C^{(\gamma \theta)} + C^{(\xi \theta)} \xi + C^{(H \theta)} H, \\ -\mathbf{m}_e &= C^{(\gamma g)} \cdot g + C^{(\gamma \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + C^{(\gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + C^{(\xi \gamma)} \xi + C^{(H \gamma)} H, \\ \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^s &= C^{(\xi g)} \cdot g + C^{(\xi \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + C^{(\xi \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + C^{(\xi)} \xi + C^{(\xi H)} H, \\ \vartheta &= C^{(Hg)} \cdot g + C^{(H \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + C^{(H \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + C^{(\xi H)} \xi + C^{(H)} H. \end{aligned} \quad (38)$$

Для замыкания системы (22), (25)–(27), (31), (32), (35), (38) необходимо сформулировать определяющие уравнения для диссипативных составляющих силовых и моментных напряжений τ_f , \mathbf{q}_f , \mathbf{m}_f .

5. Простейшая теория дипольной пьезоэлектрической среды. Будем пренебрегать инерцией вращения и моментными взаимодействиями, полагая $J = 0$, $\mathbf{m} = 0$. Тогда уравнение баланса кинетического момента (27) принимает вид

$$\mathbf{q} = -\mathbf{P}^s \times \mathbf{E}. \quad (39)$$

Подставляя (39) в уравнение баланса количества движения (26), получаем

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \frac{1}{2} \nabla \times (\mathbf{P}^s \times \mathbf{E}) + \mathbf{P}^s \cdot \nabla \mathbf{E} = \rho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (40)$$

В пренебрежении диссипативными и температурными эффектами с учетом принятого выше предположения об отсутствии моментных напряжений и соотношения (39) определяющие уравнения (38) записываются в виде

$$\begin{aligned} \tau &= C^{(g)} \cdot \cdot g + \boldsymbol{\theta} \cdot C^{(\theta g)} + C^{(\xi g)} \xi, \\ \mathbf{P}^s \times \mathbf{E} &= C^{(\theta g)} \cdot \cdot g + C^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + C^{(\xi \theta)} \xi, \\ \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}^s &= C^{(\xi g)} \cdot \cdot g + C^{(\xi \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + C^{(\xi)} \xi, \end{aligned} \quad (41)$$

где индекс e у тензора τ опущен, поскольку диссипативная составляющая отсутствует.

Уравнение электростатики (31) с учетом соотношения между углами φ и θ принимает вид

$$\nabla \cdot \left[\varepsilon_0 \mathbf{E} + \xi \mathbf{P}^s + \boldsymbol{\theta} \times \mathbf{P}^s + \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{P}^s \right] = 0. \quad (42)$$

Таким образом, система уравнений (40)–(42) представляет собой формулировку простейшей теории дипольной пьезоэлектрической среды. Основными неизвестными являются вектор перемещений \mathbf{u} , вектор сдвига $\boldsymbol{\theta}$ и величина ξ , характеризующая деформацию диполя.

6. Сравнение предлагаемой теории с классической теорией. Для того чтобы сравнить систему уравнений (40)–(42) с уравнениями классической теории пьезоэлектричества, следует получить соотношения, связывающие величины τ и \mathbf{D} с величинами g и \mathbf{E} . Для получения этих соотношений выполним следующие преобразования. Решим второе и третье уравнения системы (41) для величин $\boldsymbol{\theta}$ и ξ . Затем подставим найденные выражения в формулу (41) для τ и в формулу для \mathbf{D} (выражение в квадратных скобках в формуле (42)). В результате получаем

$$\tau = C \cdot \cdot g - \mathbf{E} \cdot M, \quad \mathbf{D} = M \cdot \cdot g + \epsilon \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{2} \mathbf{P}^s \times (\nabla \times \mathbf{u}), \quad (43)$$

где C — тензор упругости; M — тензор пьезоэлектрических модулей; ϵ — тензор диэлектрической проницаемости. В данном случае тензоры C , M , ϵ вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} C &= C^{(g)} - \frac{C^{(\xi g)} \otimes C^{(\xi g)}}{C^{(\xi)}} + \left(C^{(\theta g)*} - \frac{C^{(\xi g)} \otimes C^{(\xi \theta)}}{C^{(\xi)}} \right) \cdot \Lambda \cdot \left(C^{(\theta g)} - \frac{C^{(\xi \theta)} \otimes C^{(\xi g)}}{C^{(\xi)}} \right), \\ M &= -\frac{\mathbf{P}^s \otimes C^{(\xi g)}}{C^{(\xi)}} + \left(\mathbf{P}^s \times I + \frac{\mathbf{P}^s \otimes C^{(\xi \theta)}}{C^{(\xi)}} \right) \cdot \Lambda \cdot \left(C^{(\theta g)} - \frac{C^{(\xi \theta)} \otimes C^{(\xi g)}}{C^{(\xi)}} \right), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\epsilon = \epsilon_0 I + \frac{\mathbf{P}^s \otimes \mathbf{P}^s}{C(\xi)} \left(1 + \frac{C^{(\xi\theta)} \cdot \Lambda \cdot C^{(\xi\theta)}}{C(\xi)} \right) - \mathbf{P}^s \times \Lambda \times \mathbf{P}^s + \\ + \frac{1}{C(\xi)} (\mathbf{P}^s \otimes \mathbf{P}^s \times \Lambda \cdot C^{(\xi\theta)} + \mathbf{P}^s \times \Lambda \cdot C^{(\xi\theta)} \otimes \mathbf{P}^s),$$

где

$$\Lambda = \left(C^{(\theta)} - \frac{C^{(\xi\theta)} \otimes C^{(\xi\theta)}}{C(\xi)} \right)^{-1},$$

знак “*” означает циклическую перестановку базисных векторов в триаде.

Сравнительный анализ определяющих уравнений (43) и соответствующих уравнений классической теории

$$\tau = C \cdot \cdot g - \mathbf{E} \cdot M, \quad \mathbf{D} = M \cdot \cdot g + \epsilon \cdot \mathbf{E}$$

показал, что определяющие уравнения для τ совпадают, а определяющие уравнения для \mathbf{D} различаются: в мультиполярной теории выражение для \mathbf{D} содержит дополнительное слагаемое, зависящее от ротора вектора перемещений.

Уравнение движения (40) в микрополярной теории отличается от классического уравнения

$$\nabla \cdot \tau + \rho \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad \tau = \tau^T$$

наличием двух слагаемых, моделирующих воздействие электрического поля. Уравнение электростатики в обеих теориях имеет один и тот же вид (30).

7. Определение структуры материальных тензоров. При использовании теории симметрии необходимо учитывать, что существуют тензорные величины двух типов: полярные и аксиальные. Полярные тензоры не зависят от их ориентации в трехмерном пространстве, аксиальные тензоры меняют знак при изменении ориентации в трехмерном пространстве. В рассматриваемой теории пьезоэлектричества свойства материала характеризуются тензорами различного типа. Приведем следующие определения [11].

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Ортогональным преобразованием тензора S ранга k называется тензор S' :

$$S = S^{i_1, \dots, i_k} \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{e}_{i_k} \Rightarrow \\ \Rightarrow S' \equiv (\det Q)^\alpha \otimes_1^k Q \cdot S \equiv (\det Q)^\alpha S^{i_1, \dots, i_k} Q \cdot \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes Q \cdot \mathbf{e}_{i_k},$$

где $\alpha = 0$, если тензор S полярный, и $\alpha = 1$, если тензор S аксиальный. Тензор Q является ортогональным тензором.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Группой симметрии тензора S называется набор ортогональных тензоров Q_s , являющихся решениями уравнения

$$(\det Q)^\alpha \otimes_1^k Q \cdot S = S, \tag{45}$$

где S — заданный тензор.

Если известен тензор S , то группа симметрии этого тензора находится из решения уравнения (45). Обратная задача возникает в случае, когда группа симметрии тензора S известна и требуется найти общий вид этого тензора. Именно обратная задача представляет интерес для практических приложений. Как правило, известна группа симметрии реального физического объекта. Для того чтобы определить группу симметрии некоторого тензора, характеризующего свойства этого объекта, необходимо использовать принцип Кюри — Неймана: группа симметрии причины есть подгруппа группы симметрии следствия. Применение данного принципа позволяет определить структуру материальных тензоров любого ранга.

Рассмотрим примеры кристаллических сред с различными симметриями. Наибольший интерес представляют кристаллы, в которых симметрия допускает существование каких-либо ненулевых векторных характеристик, например плотности спонтанной поляризации \mathbf{P}^s .

Прежде чем определять структуру материальных тензоров, векторов и скаляров, определим их тип. В построенной теории полярными являются тензоры четвертого ранга C и $C^{(g)}$, тензоры третьего ранга M и $C^{(\gamma g)}$, тензоры второго ранга ϵ , $C^{(\theta)}$, $C^{(\gamma)}$, $C^{(\xi g)}$, $C^{(Hg)}$, векторы \mathbf{P}^s , $\mathbf{C}^{(\xi\gamma)}$, $\mathbf{C}^{(H\gamma)}$ и скаляры $C^{(\xi)}$, $C^{(H)}$, $C^{(\xi H)}$. Аксиальными являются тензор третьего ранга $C^{(\theta g)}$, тензор второго ранга $C^{(\gamma\theta)}$, векторы $\mathbf{C}^{(\xi\theta)}$ и $\mathbf{C}^{(H\theta)}$.

Используя данные, приведенные в [12, 13], рассмотрим материалы с различными структурами кристаллических решеток. Рассмотрим класс симметрии mm2 ромбической системы. Симметрией данного типа обладают, в частности, такие материалы, как LiGaO_2 , Li_2GeO_3 , CdTe . К группе симметрии указанного класса материалов принадлежат ортогональные тензоры

$$Q_1 = I - 2\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1, \quad Q_2 = 2\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 - I.$$

Рассмотрим структуру тензоров различного ранга для данного класса симметрии. Для упрощения записи используем следующие обозначения для пар индексов: $11 \rightarrow 1$, $22 \rightarrow 2$, $33 \rightarrow 3$, $23 \rightarrow 4$, $32 \rightarrow 4$, $31 \rightarrow 5$, $13 \rightarrow 5$, $12 \rightarrow 6$, $21 \rightarrow 6$. При этом для тензора четвертого ранга преобразуются обе пары индексов, для тензора третьего ранга — второй и третий индексы.

Приведем выражения для полярных и аксиальных векторов и тензоров:

$$\mathbf{P}^s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P^s \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}^{(\xi\theta)} = \mathbf{0} —$$

полярный и аксиальный векторы,

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad C^{(\gamma\theta)} = \begin{pmatrix} 0 & C_{12}^{(\gamma\theta)} & 0 \\ C_{21}^{(\gamma\theta)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} —$$

полярный и аксиальный тензоры второго ранга,

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & M_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{24} & 0 & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} —$$

полярный тензор третьего ранга,

$$C^{(\theta g)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & C_{14}^{(\theta g)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{25}^{(\theta g)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{36}^{(\theta g)} \end{pmatrix} —$$

аксиальный тензор третьего ранга,

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} —$$

полярный тензор четвертого ранга.

Выражения для пьезоэлектрических модулей, полученные с помощью соотношений (44), записываются в виде

$$M_{15} = -\frac{C_{25}^{(\theta g)} P^s}{C_{22}^{(\theta)}}, \quad M_{24} = \frac{C_{14}^{(\theta g)} P^s}{C_{11}^{(\theta)}},$$

$$M_{31} = -\frac{C_{11}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)}, \quad M_{32} = -\frac{C_{22}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)}, \quad M_{33} = -\frac{C_{33}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)}.$$

Материалы, обладающие структурой класса симметрии 4mm тетрагональной системы (например, BaTiO₃, PZT), и материалы, обладающие структурой класса симметрии 6mm гексагональной системы (например, α-ZnS, CdS, CdSe), имеют материальные тензоры с одинаковой структурой, поэтому их можно рассматривать совместно. К группе симметрии класса 4mm принадлежат ортогональные тензоры

$$Q_1 = I - 2\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1, \quad Q_2 = \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3,$$

а элементами симметрии класса 6mm являются преобразования

$$Q_1 = I - 2\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1,$$

$$Q_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) + \frac{\sqrt{3}}{2}(\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3.$$

Для обоих классов симметрии материальные тензоры имеют одну и ту же структуру. Приведем выражения для полярных и аксиальных векторов и тензоров:

$$\mathbf{P}^s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P^s \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}^{(\xi\theta)} = \mathbf{0} —$$

полярный и аксиальный векторы,

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad C^{(\gamma\theta)} = \begin{pmatrix} 0 & C_{12}^{(\gamma\theta)} & 0 \\ -C_{12}^{(\gamma\theta)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} —$$

полярный и аксиальный тензоры второго ранга,

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & M_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{15} & 0 & 0 \\ M_{31} & M_{31} & M_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} —$$

полярный тензор третьего ранга,

$$C^{(\theta g)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & C_{14}^{(\theta g)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -C_{14}^{(\theta g)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} —$$

аксиальный тензор третьего ранга,

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} —$$

полярный тензор четвертого ранга.

Различие структур материальных тензоров для классов симметрии 4mm и 6mm заключается только в том, что для класса 6mm компонента тензора упругости C_{66} не является независимой: $C_{66} = 2(C_{11} - C_{12})$.

Выражения для пьезоэлектрических модулей, полученные с помощью соотношений (44), имеют вид

$$M_{15} = \frac{C_{14}^{(\theta g)} P^s}{C_{11}^{(\theta)}}, \quad M_{31} = -\frac{C_{11}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)}, \quad M_{33} = -\frac{C_{33}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)}.$$

Рассмотрим материалы, относящиеся к классу симметрии 6 гексагональной системы (например, $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_3$). Единственным элементом симметрии этого класса является преобразование

$$Q = \frac{1}{2} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) + \frac{\sqrt{3}}{2} (\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3.$$

Приведем выражения для полярных и аксиальных векторов и тензоров:

$$\mathbf{P}^s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P^s \end{pmatrix}, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & 0 \\ -\epsilon_{12} & \epsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix} -$$

вектор и тензор второго ранга,

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & M_{14} & M_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{15} & -M_{14} & 0 \\ M_{31} & M_{31} & M_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} -$$

тензор третьего ранга,

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix} -$$

тензор четвертого ранга.

Соотношения для пьезоэлектрических модулей, полученные с помощью (44), имеют вид

$$M_{15} = \frac{(C_{11}^{(\theta)} C_{14}^{(\theta g)} - C_{12}^{(\theta)} C_{15}^{(\theta g)}) P^s}{(C_{11}^{(\theta)})^2 + (C_{12}^{(\theta)})^2}, \quad M_{14} = -\frac{(C_{12}^{(\theta)} C_{14}^{(\theta g)} + C_{11}^{(\theta)} C_{15}^{(\theta g)}) P^s}{(C_{11}^{(\theta)})^2 + (C_{12}^{(\theta)})^2},$$

$$M_{31} = \frac{C_3^{(\xi \theta)} (C(\xi) C_{31}^{(\theta g)} - C_3^{(\xi \theta)} C_{11}^{(\xi g)}) P^s}{(C(\xi))^2 (C_{33}^{(\theta)} - (C_3^{(\xi \theta)})^2)} - \frac{C_{11}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)},$$

$$M_{33} = \frac{C_3^{(\xi \theta)} (C(\xi) C_{33}^{(\theta g)} - C_3^{(\xi \theta)} C_{33}^{(\xi g)}) P^s}{(C(\xi))^2 (C_{33}^{(\theta)} - (C_3^{(\xi \theta)})^2)} - \frac{C_{33}^{(\xi g)} P^s}{C(\xi)}.$$

8. Дисперсионные соотношения. Получим дисперсионные соотношения для материалов, принадлежащих рассмотренным выше классам симметрии. Будем рассматривать плоские волны, распространяющиеся в различных направлениях.

Для вектора напряженности электрического поля введем электрический потенциал ϕ :

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

Выражения для вектора перемещений и электрического потенциала представим в виде

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3 - \omega t)}, \quad \phi = \phi_0 e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3 - \omega t)}, \quad (46)$$

где \mathbf{u}_0 , ϕ_0 — постоянные величины; i — мнимая единица; ω — частота колебаний; k_j — координаты волнового вектора.

Подставляя выражения (46) в уравнения (40)–(42) и выполняя необходимые преобразования, получаем дисперсионное соотношение, которое представляет собой уравнение третьей степени относительно ω^2 . Для произвольного волнового вектора решение является достаточно громоздким, поэтому ниже приводятся решения для каждого из трех направлений. Нижний индекс в обозначении величины ω указывает, в каком направлении происходит смещение частиц среды в процессе распространения волны. Например, если рассматривается распространение волны в направлении x_1 , то продольной волне соответствует ветвь ω_1 , поперечной волне в плоскости (x_1, x_2) — ветвь ω_2 , а поперечной волне в плоскости (x_1, x_3) — ветвь ω_3 :

— для класса симметрии $mm2$

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{C_{11}k_1^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{66}k_1^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{55}}{\rho} + \frac{(P^s - 2M_{15})^2}{4\rho\epsilon_1} \right) k_1^2, \\ \omega_1^2 &= \frac{C_{66}k_2^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{22}k_2^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{44}}{\rho} + \frac{(P^s - 2M_{24})^2}{4\rho\epsilon_1} \right) k_2^2, \\ \omega_1^2 &= \frac{C_{55}k_3^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{44}k_3^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{33}}{\rho} + \frac{M_{33}(M_{33} - P^s)}{\rho\epsilon_1} \right) k_3^2; \end{aligned} \quad (47)$$

— для классов симметрии $4mm$ и $6mm$

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{C_{11}k_1^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{66}k_1^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{55}}{\rho} + \frac{(P^s - 2M_{15})^2}{4\rho\epsilon_1} \right) k_1^2, \\ \omega_1^2 &= \frac{C_{66}k_2^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{11}k_2^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{55}}{\rho} + \frac{(P^s - 2M_{15})^2}{4\rho\epsilon_1} \right) k_2^2, \\ \omega_1^2 &= \frac{C_{55}k_3^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{55}k_3^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{33}}{\rho} + \frac{M_{33}(M_{33} - P^s)}{\rho\epsilon_1} \right) k_3^2; \end{aligned} \quad (48)$$

— для класса симметрии 6

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{C_{11}k_1^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{(C_{11} - C_{12})k_1^2}{2\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{55}}{\rho} + \frac{(P^s - 2M_{15})^2}{4\rho\epsilon_1} \right) k_1^2, \\ \omega_1^2 &= \frac{(C_{11} - C_{12})k_2^2}{2\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{11}k_2^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{55}}{\rho} + \frac{(P^s - 2M_{15})^2}{4\rho\epsilon_1} \right) k_2^2, \\ \omega_1^2 &= \frac{C_{55}k_3^2}{\rho}, & \omega_2^2 &= \frac{C_{55}k_3^2}{\rho}, & \omega_3^2 &= \left(\frac{C_{33}}{\rho} + \frac{M_{33}(M_{33} - P^s)}{\rho\epsilon_1} \right) k_3^2. \end{aligned} \quad (49)$$

Из приведенных соотношений следует, что спонтанная поляризация влияет на спектр в тех случаях, когда имеется компонента смещения в направлении \mathbf{P}^s (в данном случае x_3).

Анализ дисперсионных соотношений, полученных для различных классов симметрии, показывает, что учет пьезоэлектрических свойств материала оказывает влияние на углы наклона некоторых дисперсионных ветвей (эффект пьезоэлектрического упрочнения материала). Классические дисперсионные соотношения получаются из (47)–(49), если в последних положить $\mathbf{P}^s = 0$. Сравнение дисперсионных соотношений (47)–(49) с классическими показывает, что в предлагаемой теории пьезоэлектрическое упрочнение количественно

отличается от пьезоэлектрического упрочнения, предсказываемого классической теорией. При этом оно может быть как больше, так и меньше в зависимости от соотношения между значением P^s и величиной соответствующего пьезоэлектрического модуля. Кроме того, предлагаемая теория допускает пьезоэлектрическое разупрочнение материала.

Заключение. В работе предложена микрополярная теория пьезоэлектричества, в основе которой лежит упругий континуум с семью степенями свободы: тремя трансляционными, тремя вращательными и одной степенью свободы, обусловленной деформацией электрического диполя. Показано, что при определенных упрощениях построенная теория допускает переход к квазиклассическому случаю. Отличие квазиклассического случая от классической теории пьезоэлектричества заключается в наличии слагаемых, обусловленных пьезоэлектрическим эффектом, в уравнении динамики и слагаемого, зависящего от ротора вектора перемещений, в выражении для вектора электрической индукции. Именно указанными выше различиями обусловлено наличие в дисперсионных соотношениях слагаемых, содержащих спонтанную поляризацию в явном виде. Заметим, что в построенной теории тензоры пьезоэлектрических модулей обладают такой же структурой, как и в классической теории. Пьезоэлектрические модули, полученные для квазиклассического случая, пропорциональны спонтанной поляризации, что объясняет наблюдающуюся в экспериментах корреляцию между величинами пьезомодулей и величиной спонтанной поляризации материала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кэди У. Пьезоэлектричество и его практические применения. М.: Изд-во иностр. лит., 1949.
2. Tiersten H. F. Linear piezoelectric plate vibrations. N. Y.: Plenum Press, 1969.
3. Gerber E. Precision frequency control / E. Gerber, A. Balato. N. Y.: Acad. Press Inc., 1985. V. 1, 2.
4. Мезон У. Методы и приборы ультразвуковых исследований. М.: Мир, 1966.
5. Смагин А. Г. Пьезоэлектрические резонаторы и их применение. М.: Изд-во стандартов, 1967.
6. Колпаков Я. Е., Zhilin P. A. Generalized continuum and linear theory of piezoelectric materials // Proc. of the 29th Summer school — conf. “Advanced problems in mechanics”. St. Petersburg: Inst. of Problems Mech. Engng, 2002. P. 364–375.
7. Dixon R. C., Eringen A. C. A dynamical theory of polar elastic dielectrics. 1, 2 // Intern. J. Engng Sci. 1965. V. 3. P. 359–397.
8. Треуголов И. Г. Моментная теория электромагнитных эффектов в анизотропных твердых телах // Прикл. математика и механика. 1989. Т. 53, вып. 6. С. 992–997.
9. Жилин П. А. Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики: Учеб. пособие. СПб.: Изд-во С.-Петербур. гос. ун-та, 2003.
10. Жилин П. А. Математическая теория неупругости // Успехи механики. 2003. Т. 2, № 4. С. 3–36.
11. Жилин П. А. Векторы и тензоры второго ранга в трехмерном пространстве. СПб.: Нестор, 2001.
12. Акустические кристаллы: Справ. под ред. М. П. Шаскольской. М.: Наука, 1982.
13. Сироткин Ю. И. Основы кристаллофизики / Ю. И. Сироткин, М. П. Шаскольская. М.: Наука, 1975.

Поступила в редакцию 29/IX 2011 г.,
в окончательном варианте — 28/III 2013 г.