Прикладная математика и механика. Том 35, 1971

ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИНОК С КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ [1]

Р. Д. Миндлин

(Нью-Йорк)

Показано, что, по крайней мере в принципе, можно возбудить толщинные колебания в центрально-симметричной кристаллической пластинке с кубической структурой путем приложения переменной разности потенциалов между электродами на кристаллографических гранях (100) пластинки. Для случая хлорида натрия приближенно рассчитаны формы и частоты колебаний и найдено, что коэффициент электромеханической связности может достигать значения порядка $^1/_{400}$ от значения для пластинки из монокристалла кварца.

Согласно классической теории пьезоэлектричества, в центрально-симметричных кристаллах не может возникать пьезоэлектрический эффект. Отсюда следует, что в центрально-симметричной кристаллической пластинке нельзя возбудить колебания, скажем, путем приложения переменной разности потенциалов между электродами, расположенными на противоположных гранях пластинки. Этот вывод непосредственно вытекает из содержащегося в теории предположения, что накопленная энергия деформации и поляризации является функцией только деформации и поляризации [1]. Значит, единственно возможная энергия электромеханического взаимодействия получается путем умножения тензора деформации второго ранга и тензора поляризации первого ранга на тензор пьезоэлектрических констант третьего ранга. Центрально-симметричных тензоров третьего ранга не существует, поэтому в центрально-симметричных материалах не должен возникать пьезоэлектрический эффект.

Однако есть основания предполагать, что накопленная энергия деформация и поляризации зависит не только от деформации и поляризации, но и от градиента поляризации. Основанная на этом предположении обобщенная теория [2] может быть оправдана тем, что: 1) она дает математическое выражение для поверхностной энергии деформации и поляризации [2], которая по классической теории отсутствует, но обнаруживается прямыми лабораторными измерениями и рассчитывается на атомарном уровне; 2) она дает возможность учесть [3] явную аномалию, наблюдающуюся при измерениях электрической емкости тонких диэлектрических пленок; 3) уравнения современной динамической теории кристаллических решеток с электронной поляризацией атомов в пределе при низких частотах в точности совпадают с уравнениями обобщенной (а не классической) теории.

Если принять, что функция накопленной энергии зависит от градиента поляризации, то появляется возможность дополнительной энергии взаимодействия между двумя тензорами второго ранга — деформации и градиента поляризации. При этом соответствующие константы материала образуют тензор четвертого ранга, что показывает возможность возникновения электромеханического эффекта в центрально-симметричных материалах.

---

[1] Статья представлена в связи с 60-летием со дня рождения А. А. Ильюшина; по техническим причинам не могла быть подготовлена к вып. 1 этого года.

1. Поле колебаний и граничные условия. Линейные уравнения упругого диэлектрического континуума с учетом вклада градиента поляризации в накопленную энергию были выведены [2] при помощи простого обобщения вариационного принципа Тупина [4], относящегося к классическим уравнениям пьезоэлектричества. Рассмотрим пластинку [1] кубического монокристалла класса $m3m$ (O_n), на гранях (100) которой $x = \pm h$ наклеены пленки электродов, к которым подводится напряжение $\pm Ve^{i\omega t}$ соответственно. Если пренебречь краевыми эффектами, то механическое и электрическое поля одномерны и описываются уравнениями [2]

$$c_{11}\partial^2 u + d_{11}\partial^2 P = -\rho\omega^2 u, \qquad d_{11}\partial^2 u + b_{11}\partial^2 P - a_{11}P - \partial\varphi = 0$$

$$\varepsilon_0\partial^2\varphi - \partial P = 0 \qquad (\partial = d\,(\cdot)/dx) \tag{1.1}$$

Здесь u и P — X-компоненты механического перемещения и электронной поляризации соответственно; φ — потенциал Максуэлла самонаведенного электрического поля, ρ — массовая плотность, c_{11} — упругая жесткость, ε_0 — диэлектрическая постоянная вакуума, $\varepsilon_0 a_{11}$ —взаимная диэлектрическая восприимчивость. Постоянные b_{11} и d_{11} связаны с членами в плотности энергии, содержащими градиент поляризации, а именно $^1/_2 b_{11}$ — коэффициент квадратичного члена, d_{11} — коэффициент при произведении поляризации и деформации $\partial P \partial u$. Таким образом, d_{11} — дополнительная электромеханическая константа, без которой,как видно из (2.1), механическое и электрическое поля не были бы связаны.

Допустим, что масса и жесткость электродов пренебрежимо малы. Тогда усилия на поверхностях $x = \pm h$ равны нулю. Граничные условия, как показано в [2], имеют вид

$$(c_{11}\partial u + d_{11}\partial P)_{x=\pm h} = 0 \tag{1.2}$$

Можно положить также [3], что

$$(P)_{x=\pm h} = -kV/a_{11}h \qquad (0 \leqslant k \leqslant 1) \tag{1.3}$$

причем наиболее приемлемо значение $k = 0$, что соответствует непрерывности поляризации на границах кристалл — электрод. Наконец, при заданном изменении разности потенциалов

$$(\varphi)_{x=\pm h} = \pm V \tag{1.4}$$

Надо заметить, что независимое задание граничных значений поляризации и потенциала допустимо в обобщенной теории и неприемлемо в классической.

2. Решение. С учетом симметрии решение уравнения (1.1) при граничных условиях (1.2) — (1.4) имеют вид

$$u = A\cos\xi x, \qquad P = B_0 + B\cos\xi x, \qquad \varphi = C_0 x + C\sin\xi x \tag{2.1}$$

Подставляя выражения (2.1) в (1.1), находим

$$B_0 = -a_{11}^{-1}C_0, \qquad B = \varepsilon_0 \xi C \tag{2.2}$$

$$\frac{A}{C} = -\frac{\varepsilon_0 d_{11}\xi^2}{c_{11}\xi^2 - \rho\omega^2} = -\frac{1 + \varepsilon_0 a_{11} + \varepsilon_0 b_{11}\xi^2}{d_{11}\xi} \tag{2.3}$$

Последнее равенство (2.3) приводит к уравнению

$$(b_{11}c_{11} - d_{11}^2)\varepsilon_0\xi^4 - [\varepsilon_0 b_{11}\rho\omega^2 - (1 + \varepsilon_0 a_{11})c_{11}]\xi^2 - (1 + \varepsilon_0 a_{11})\rho\omega^2 = 0 \tag{2.4}$$

Из положительной определенности плотности энергии вытекают требования

$$b_{11}c_{11} - d_{11}^2 > 0, \qquad a_{11} > 0 \tag{2.5}$$

Следовательно, один корень уравнения (2.4) для ξ^2 действителен и положителен, другой отрицателен. Значит, одно значение ξ действительно, другое мнимое. Учитывая (2.2) — (2.5), решение (2.1) можно записать в форме

$$u = \alpha_1 C_1 \cos \xi_1 x + \alpha_2 C_2 \,\mathrm{ch}\, \xi_2 x$$

$$P = -a_{11}^{-1}C_0 + \varepsilon_0\xi_1 C_1 \cos \xi_1 x + \varepsilon_0 \xi_2 C_2 \,\mathrm{ch}\,\xi_2 x \tag{2.6}$$

$$\varphi = C_0 x + C_1 \sin \xi_1 x + C_2 \,\mathrm{sh}\, \xi_2 x$$

$$\alpha_i = -\frac{\varepsilon_0 d_{11}\xi_i^3}{c_{11}\xi_i^2 + (-1)^i \rho\omega^2} = \frac{1 + \varepsilon_0 a_{11} - (-1)^i \varepsilon_0 \xi_i^2}{(-1)^i d_{11}\xi_i} \tag{2.7}$$

Подставляя (2.6) в граничные условия (1.2) — (1.4), находим

$$(c_{11}\alpha_1 + \varepsilon_0 d_{11}\xi_1)\xi_1 C_1 \sin \xi_1 h - (c_{11}\alpha_2 + \varepsilon_0 d_{11}\xi_2)\xi_2 C_2 \,\mathrm{sh}\, \xi_2 h = 0 \tag{2.8}$$

$$-C_0 + \varepsilon_0 a_{11}\xi_1 C_1 \cos \xi_1 h + \varepsilon_0 a_{11}\xi_2 C_2 \,\mathrm{ch}\, \xi_2 h = kV / h$$

$$C_0 h + C_1 \sin \xi_1 h + C_2 \,\mathrm{sh}\, \xi_2 h = V$$

Из (2.8) видно, что приложение напряжения V вынуждает совместно механическое и электрическое поля.

Резонанс наступает, когда детерминант из коэффициентов при C_0, C_1 и C_2 в (2.8) обращается в нуль, т. е. когда

$$\frac{1 + \varepsilon_0 a_{11}\xi_1 h \,\mathrm{ctg}\, \xi_1 h}{1 + \varepsilon_0 a_{11}\xi_2 h \,\mathrm{ctg}\, \xi_2 h} = \frac{1 + \rho\omega^2/c_{11}\xi_2^2}{1 - \rho\omega^2/c_{11}\xi_1^2} \tag{2.9}$$

3. Приложение к хлориду натрия. В случае хлорида натрия константы материала, входящие в решение, имеют следующие значения:

$\varepsilon_0^{-1} = 36\pi\cdot 10^7$ *дин см*$^2/k^2$, $\quad \varepsilon_0^{-1}a_{11}^{-1} = 4.6 \quad$ ([4], стр. 68, 69)

$b_{11} = 6.88\cdot 10^3$ *дин см*$^4/k^2$, $\quad d_{11} = 4.67\cdot 10^7$ *дин см/к* $\quad$ [5]

$c_{11} = 4.83\cdot 10^{11}$*дин/см*^{2}, $\quad \rho = 2.214$ *г/см*^{3} $\quad$ ([6], стр. 39, 88).

При этих значениях можно найти простые приближенные выражения для резонансных частот и форм колебаний.

При низких частотах из (2.4)

$$\lim_{\omega\to 0} \xi_2^{-1} = \left[\frac{b_{11} - d_{11}^2 / c_{11}}{\varepsilon_0^{-1}(1 + \varepsilon_0 a_{11})}\right]^{1/2} \approx 1.3\cdot 10^{-8} \text{ см} \tag{3.1}$$

Если пластинка имеет толщину порядка миллиметров, то, как видно из (3.1), экспоненциальные части полей быстро затухают с расстоянием от граней пластинки, и решение в большей части пластинки принимает (приближенно) вид

$$u \approx \alpha_1 C_1 \cos \xi_1 x, \qquad P \approx -a_{11}^{-1} C_0 + \varepsilon_0 \xi_1 C_1 \cos \xi_1 x$$
$$\varphi \approx C_0 x + C_1 \sin \xi_1 x \tag{3.2}$$

Действительно, для хлорида натрия коэффициент затухания (3.1) составляет менее половины наименьшего межатомного расстояния $a = 2.83 \cdot 10^{-8}$ *см*. При значении (3.1) корни уравнения (2.9) очень близки к корням уравнения

$$\sin \xi_1 h = 0, \qquad \xi_1 h \neq 0; \quad \text{или} \quad \xi_1 h = n\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{3.3}$$

Запишем (2.4) в форме

$$\left(1 - \frac{\rho\omega^2}{c_{11}\xi^2}\right) \frac{1 + \varepsilon_0 a_{11} + \varepsilon_0 b_{11} \xi^2}{\xi^2} - \frac{\varepsilon_0 d_{11}^2}{c_{11}} = 0 \tag{3.4}$$

Замечая, что

$$\frac{\varepsilon_0 d_{11}^2}{c_{11}} \approx 4 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2 \tag{3.5}$$

можно видеть, что частоты, определяемые из (3.4), приближенно равны

$$\omega = \xi_1 (c_{11} / \rho)^{1/2} \tag{3.6}$$

Следовательно, учитывая (3.4), имеем

$$\omega = \frac{n\pi}{h} \left(\frac{c_{11}}{\rho}\right)^{1/2}, \quad \text{или} \quad f = \frac{\omega}{2\pi} \approx \frac{4.7\, n}{2h} \times 10^6 \text{ гц} \tag{3.7}$$

Здесь $2h$ — толщина пластинки в миллиметрах. Так, для пластинки миллиметровой толщины наименьшая резонансная частота (при $n = 1$) составляет около 4.7 мегациклов в секунду. Заметим, что при этом имеется два узла колебаний: центральная половина толщи пластинки и внешние ее четверти движутся в противоположных направлениях. Эту форму, по-видимому, легче всего обнаружить. При этом, как можно выяснить из подсчета коэффициента электромеханической связности, частотная характеристика значительно более резкая, чем в случае пьезоэлектрического кристалла типа кварца.

Коэффициент электромеханической связности равен квадратному корню из отношения энергии деформации к полной энергии при нулевой частоте.

При $\omega = 0$ решение (2.6) сводится [1] к следующему:

$$u_0 = B_1 \operatorname{ch} \xi_2 x, \qquad P_0 = A_2 + B_2 \operatorname{ch} \xi_2 x, \qquad \varphi_0 = A_3 x + B_3 \operatorname{sh} \xi_2 x \tag{3.8}$$

Здесь ξ_2 определяется из (3.1), причем

$$A_2 = A_3 / a_{11}, \qquad B_2 = \varepsilon_0 \xi_2 B_3 = -c_{11} B_1 / d_{11}, \qquad A_3 = B_3 \varepsilon_0 a_{11} \xi_2 \operatorname{ch} \xi_2 h$$
$$B_3 = (1 - k)\, V (\operatorname{sh} \xi_2 h + \varepsilon_0 a_{11} \xi_2 h \operatorname{ch} \xi_2 h)^{-1} \tag{3.9}$$

Энергия деформации, отнесенная к единице площади, равна

$$W_s = \frac{c_{11}}{2} \int_{-h}^{h} (\partial u_0)^2 dx = \frac{\varepsilon_0^2 \xi_2^2 d_{11}^2 (1 - k)^2 V^2 (\operatorname{sh} 2\xi_2 h - 2\xi_2 h)}{4 c_{11} (\operatorname{sh} \xi_2 h + \varepsilon_0 a_{11} \xi_2 h \operatorname{ch} \xi_2 h)^2} \tag{3.10}$$

Полная энергия на единицу площади равна произведению V на поверхностный заряд

$$W = V (\varepsilon_0 \partial \varphi_0 - P_0)_{x=h} = \frac{\varepsilon_0 \xi_2 (1 + \varepsilon_0 a_{11}) (1 - k) V^2 \operatorname{ch} \xi_2 h}{\operatorname{sh} \xi_2 h + \varepsilon_0 a_{11} \xi_2 h \operatorname{ch} \xi_2 h} + \frac{kV^2}{h a_{11}} \tag{3.11}$$

Учитывая, что значение $\xi_2 h$ очень велико, для коэффициента электромеханической связности в случае $k = 0$ находим

$$\left(\frac{W_s}{W}\right)^{1/2} \approx \left(\frac{\xi_2 d_{11}^2}{2\varepsilon_0 a_{11}^2 c_{11} (1 + \varepsilon_0^{-1} a_{11}^{-1}) h}\right)^{1/2} \approx 2.4 \cdot 10^{-4} \tag{3.12}$$

(при $h = 1$ *мм*)

Это значение сравнимо с значением $9{,}5 \cdot 10^{-2}$ для X-среза пластинки из кварца [7]. Значит, при $k = 0$ коэффициент для пластинки из хлорида натрия составляет $^1/_{400}$ от коэффициента для пластинки из кварца. Это объясняется тем, что полоса резонансных частот в этом случае значительно ýже [7]. Интересно отметить, что коэффициент связности (3.12) обратно пропорционален квадратному корню из толщины пластинки, тогда как в случае пьезоэлектрика этот коэффициент не зависит от толщины.

Поступила 15 V 1970 Колумбийский университет

ЛИТЕРАТУРА

1. Nye J. F. Phisical properties of crystals. Oxford, Clarendon Press, 1957.
2. Mindlin R. D., Polarization in elastic dielectrics. Internat J. Solids and Structures, 1968, vol. 4, No. 6, p. 637—642.
3. Mindlin R. D. Continuum and lattice theories of influence of electromechanical coupling on capacitance of thin dielectric films, Internat. J. Solids and Structures, 1969, vol. 5, No. 12, p. 1197—1208.
4. Toupin R. A. The elastic dielectric. J. Rational Mech. and Analysis, 1956, vol. 5, No. 6, p. 849—916.
5. Askar A., Lee P. C. Y. and Cakmak A. S. A lattice-dynamics approach to the theory of elastic dielectrics with polarization gradient. Phys. Rev., Ser. B, 1970, vol. 1, No. 8.
6. Hearmon R. F. S. An introduction to applied anisotropic elasticity, London, Oxford University Press, 1961.
7. Mason W. P. Piezoelectric crystals and their application to ultrasonics, Toronto. Van Nostrand Co, 1950, p. 96.