

# 圧電セラミックスのドメインスイッチングモデル

## Modeling of Domain Switching for Piezoelectric Ceramics

○正 永井 学志 (岐大)  
正 渡邊 勝彦 (東大)

月足 繁 (東大)

Gakuji NAGAI, Gifu University, 1-1, Yanagido, Gifu-city, Gifu 501-1193

Shigeru TSUKIASHI and Katsuhiko WATANABE, University of Tokyo, 4-6-1, Komaba, Meguro, Tokyo 153-8505

**Key Words:** Polycrystalline Ceramics, Finite Element Method, Energy-Based Criterion

### 1. 緒言

電圧を印加すると変形し、力を加えると電位差を生じる圧電セラミックス材料は、装置のアクチュエータや各種電子デバイスの部品として用いられている。この材料は、一般のセラミックスと同じく粉体を固化・焼結して得られる多結晶かつ脆性な材料である。圧電セラミックスの各結晶は強誘電体であり、電気的あるいは力学的に高い負荷を加えると自発分極方向を変化させるドメインスイッチングと呼ばれる非線形現象を起こすことが知られている。この微視的現象が、圧電セラミックスの巨視的な電気-力学的非線形挙動の本質的要因であると考えられている<sup>[1]</sup>。

一方、圧電セラミックス部品の合理的な設計や高出力化のために、この電気-力学的非線形挙動の理解と予測が望まれる。しかしながら、圧電セラミックスの電気-力学的連成性から実験の実施が難しいこともあり、明らかにされていない部分が多く残されている。このような問題から、巨視的に観察される非線形挙動を、微視的現象であるドメインスイッチング現象からモデル化して数値シミュレーションを行うことにより、求めようという試みが行われている。現在のところ、ドメインスイッチング発生条件は検討中の課題であり、確立された条件は未だ定まっていない様子である<sup>[2]</sup>。

そこで本研究では、圧電セラミックスの巨視的な非線形挙動シミュレーション手法の確立を目標として、ドメインスイッチングの発生条件について提案・考察を行う。また、2次元問題において多結晶圧電セラミックスの非線形挙動シミュレーションを行い、その有効性を検証する。

### 2. モデル化と有限要素定式化

まずは簡便のために、結晶粒を一つの分域として一要素で表し、要素内を双一次関数で補間する。結晶粒の大きさはどれもほぼ同じと考えて要素分割を直交に限定する。各単結晶粒を強誘電体として、電位と変位を未知数として有限要素定式化を行うと、次の剛性方程式を得る。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^{uu} & \mathbf{K}^{u\phi} \\ \mathbf{K}^{u\phi T} & -\mathbf{K}^{\phi\phi} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \phi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^u \\ \mathbf{f}^\phi \end{Bmatrix} \quad (1)$$

$$\mathbf{K}^{uu} = \sum_{e=1}^{nelm} \int_V \mathbf{B}_e^{uT} \mathbf{c}_e^E \mathbf{B}_e^u dV$$

$$\mathbf{K}^{u\phi} = \sum_{e=1}^{nelm} \int_V \mathbf{B}_e^{uT} \mathbf{e}_e \mathbf{B}_e^\phi dV$$

$$\mathbf{K}^{\phi\phi} = \sum_{e=1}^{nelm} \int_V \mathbf{B}_e^{\phi T} \boldsymbol{\kappa}_e^s \mathbf{B}_e^\phi dV$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^u &= \sum_{e=1}^n \int_V \mathbf{B}_e^{uT} \mathbf{c}_e^E \boldsymbol{\varepsilon}_e^s dV + \sum_{e=1}^n \int_V \mathbf{N}_e^{uT} \mathbf{b}_e dV + \sum_{e=1}^n \int_{S_e} \mathbf{N}_e^{uT} \mathbf{t}_e dS \\ \mathbf{f}^\phi &= - \sum_{e=1}^n \int_V \mathbf{B}_e^{\phi T} (-\mathbf{e}_e^T \boldsymbol{\varepsilon}_e^s + \mathbf{P}_e^s) dV - \sum_{e=1}^n \int_V \mathbf{N}_e^{\phi T} \mathbf{q}_e^v dV - \sum_{e=1}^n \int_{S_e} \mathbf{N}_e^{\phi T} \mathbf{q}_e^s dS \end{aligned}$$

ここに、 $\mathbf{u}$  は節点変位、 $\phi$  は節点電位、 $\mathbf{N}_e^u$  と  $\mathbf{N}_e^\phi$  は各要素の形状関数行列、 $\mathbf{B}_e^u$  は各要素のひずみ-節点変位変換行列、 $\mathbf{B}_e^\phi$  は電界-節点電位行列、 $\mathbf{b}_e$  は物体力、 $\mathbf{t}_e$  は表面力、 $\mathbf{q}_e^s$  は表面電荷密度、 $\mathbf{q}_e^v$  は体積電荷密度、 $\mathbf{c}_e^E$  は弾性定数、 $\mathbf{e}_e$  は圧電応力定数、 $\boldsymbol{\kappa}_e^s$  は誘電率、 $\boldsymbol{\varepsilon}_e^s$  は自発ひずみ、 $\mathbf{P}_e^s$  は自発分極である。

### 3. ドメインスイッチング条件

観察されている実現象にある程度対応するシミュレーション結果を出した条件として、系のポテンシャルエネルギーに注目したもの<sup>[3]</sup>

$$\Delta U + V_c \Delta \psi_c \leq 0 \quad (2)$$

がある。ここで  $\Delta U$  は、圧電セラミックス内のある領域  $V_c$  がドメインスイッチングした前後における系のポテンシャルエネルギー差であり、 $\Delta \psi_c$  は単位体積あたりのエネルギー障壁である。この条件を用いると、ある程度実現象に対応する結果を得るものの、a)局所の現象が系全体の状態に依存するものとなっている、b)系のポテンシャルエネルギーに注目したものであるために負荷がポテンシャル負荷の場合に対してしか物理的意味がない、c)現象が起ころうとする条件が起こった後の状態にも依存する形になっている、といった問題が存在する。

そこで本研究では、このような問題が生じない条件として、材料に蓄えられるエネルギーに注目した次のようなドメインスイッチング発生条件を新たに提案する。

$$f(W_e^M, W_e^E) \geq c \quad (3)$$

$$W_e^M = \frac{1}{2} \int_{V_e} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^s) dV \quad W_e^E = \frac{1}{2} \int_{V_e} \mathbf{E}(\mathbf{D} - \mathbf{P}^s) dV$$

関数  $f$  の具体的な形は色々考えられるが、ここでは最も簡単な形である次のような式を採用することにする。

$$f(W_e^M, W_e^E) = aW_e^M + bW_e^E$$

ここに、係数  $a, b$  は、材料に単純力学負荷と単純電気負荷をかけた数値実験から求まる値である。

式(3)を満たした後、各結晶粒のとりうる自発分極方向は、

強誘電体のペロブスカイト結晶構造から、3次元の場合には6方向存在する。それらの方向のうち、 $f$ が最も小さくなる方向にスイッチすると仮定する。この方向判定を行うため、数値計算では、一度に一要素のみのスイッチングを許容することとなる。

## 4. 2次元問題の計算例

### 4.1. 解析モデル

Fig.1(a)に解析モデルを示す。1mm角の正方形断面を20×20要素に分割する。Fig.1(b)(c)のように単純電気負荷を印加した場合と単純力学負荷を加えた場合を計算する。図中の矢印は各粒の分極方向を表す。構成則は、面内で各単結晶粒の分極方向を軸3、その直交軸を軸2として、ペロブスカイト結晶構造の原子配置から直交異方性を仮定して、

$$\begin{Bmatrix} \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{23} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{c}}^E & \bar{\mathbf{e}} \\ \bar{\mathbf{e}}^T & \bar{\mathbf{\kappa}}^s \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\epsilon}_{22} - \bar{\epsilon}_{22}^s \\ \bar{\epsilon}_{33} - \bar{\epsilon}_{33}^s \\ \bar{\epsilon}_{23} - \bar{\epsilon}_{23}^s \end{Bmatrix} \quad (4)$$

$$\bar{\mathbf{c}}^E = \begin{bmatrix} 7.30 & 4.68 & 0 \\ 4.68 & 5.30 & 0 \\ 0 & 0 & 4.20 \end{bmatrix} \times 10^{10} \text{ [N/m}^2\text{]}$$

$$\bar{\mathbf{e}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 15.22 \\ -11.53 & 19.45 & 0 \end{bmatrix}^T \text{ [C/m}^2\text{]}$$

$$\bar{\mathbf{\kappa}}^s = \begin{bmatrix} 1.744 & 0 \\ 0 & 1.292 \end{bmatrix} \times 10^{-8} \text{ [F/m]}$$

$$\bar{\mathbf{P}}^s = \begin{Bmatrix} P_2^s \\ P_3^s \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0.34 \end{Bmatrix} \text{ [C/m}^2\text{]} \quad \bar{\mathbf{\epsilon}}^s = \begin{Bmatrix} \epsilon_{22}^s \\ \epsilon_{33}^s \\ \epsilon_{23}^s \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -0.00277/2 \\ 0.00277 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

とする。ここで変数の上付き棒は局所座標系であることを示す。また、体積電荷、体積力は無視する。

### 4.2. 計算結果

Fig.2とFig.3に、単純電気負荷を印加したときの巨視的なひずみ - 電場曲線と、巨視的な電束密度 - 電場曲線を示す。Fig.4に、単純力学負荷をかけたときの巨視的な応力 - ひずみ曲線を示す。いずれにおいても、実現象と似た結果が得られている。

## 5. 結言

ドメインスイッチング発生条件を提案し、それを用いて非線形有限要素シミュレーションを行った。要素数が比較的少なかったものの実現象でみられる非線形挙動を表現することができた。ドメインスイッチング発生条件の改良や結晶粒の幾何学的モデル化は、今後の課題である。

### 参考文献

- [1] 白木原, 田中, 秋庭, 水野: J. Soc. Mat. Sci., Japan, Vol.51, No.7, pp.736-742, 2002
- [2] M. Kamlah: Continuum Mech. Thermodyn., Vol.13, pp.219-268, 2001
- [3] Hwang SC, McMeeking RM: Proceedings of SPIE, Vol.3992, pp.736-742, 2000

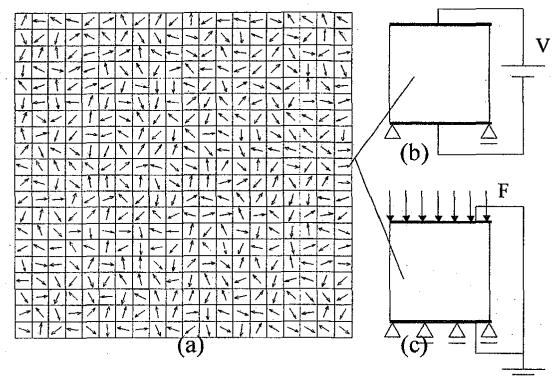


Fig. 1 Configurations and FE Model

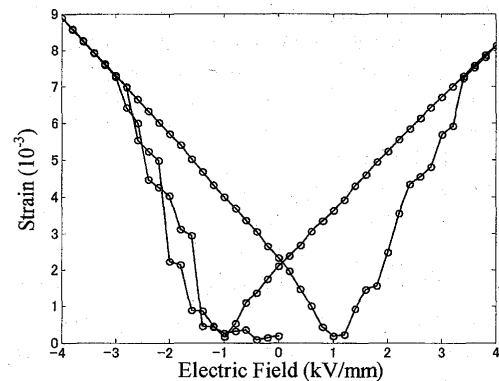


Fig. 2 Macroscopic relation of strain and electric field

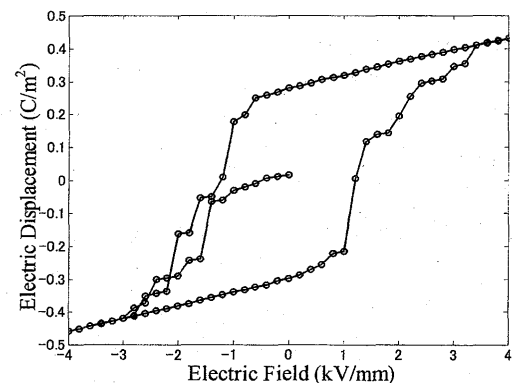


Fig. 3 Macroscopic relation of electric Disp. and electric field

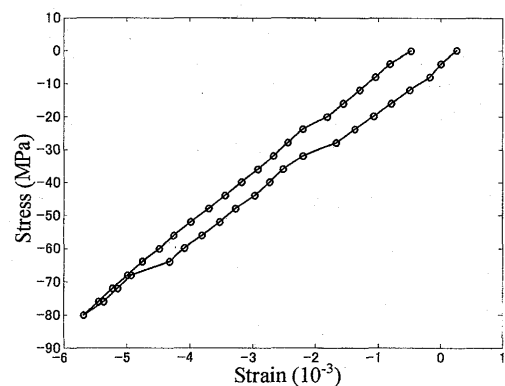


Fig. 4 Macroscopic relation of strain and stress