

dr Renata Bujakiewicz-Korońska

Uniwersytet Pedagogiczny w Krakowie

Wydział Matematyczno-Fizyczno-Techniczny, Instytut Fizyki

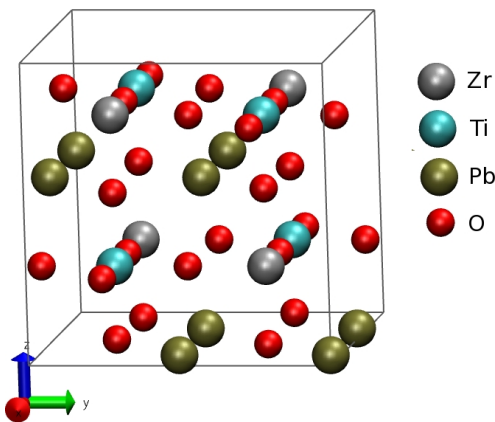
dr Jan Koroński

Politechnika Krakowska, Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Instytut Matematyki

## Obliczenia ab initio dla cienkich włókien $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$

Cienkie włókna  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$  (skrótowo zwane włóknami PZT) należą do grupy materiałów XXI wieku nowej generacji, nazywanych materiałami inteligentnymi o sterowalnych właściwościach i grubości mniejszej od  $200 \mu\text{m}$ . Ich unikatowe własności mechaniczne i fizyczne sprawiają, że mogą one być z sukcesem integrowane z innymi materiałami w celu uzyskania właściwości nieosiągalnych na żadnej innej drodze. Stworzone na ich bazie elementy aktywne, wbudowane w materiał konstrukcyjny i tworzące rozproszoną sieć sensorów i (lub) aktywatorów dają możliwość realizacji zadanych zadań monitorowania, adaptacji i sterowania elementem konstrukcyjnym. Szczególnie ważne są układy włókien piezoelektrycznych PZT.



Rys. 1. Komórka elementarna PZT składająca się z ośmiu cząsteczek [2]

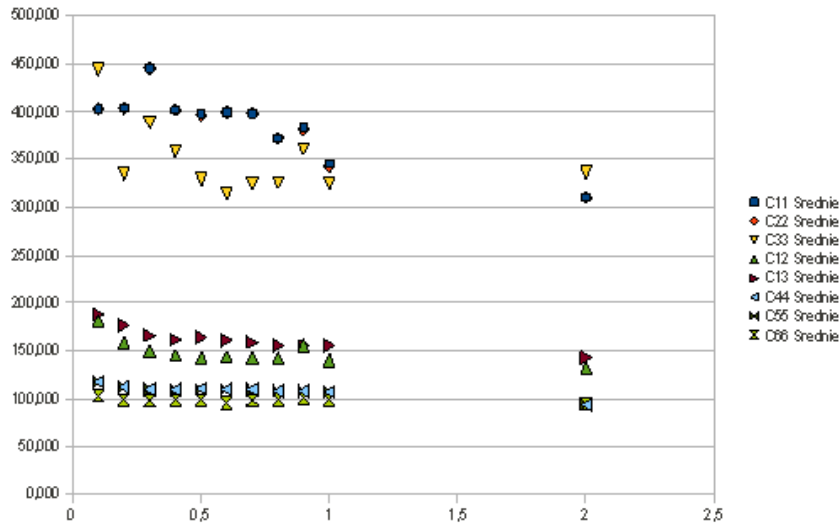
$C_{66} = 98.1 \text{ GPa}$  — rys. 2. Używając tych wielkości oraz korzystając z tensorowej postaci modułu Younga obliczono:  $E(100) = 358.7 \text{ GPa}$ ,  $E(001) = 295.9 \text{ GPa}$ ,  $E(011) = 251.8 \text{ GPa}$ ,  $E(110) = 59.1 \text{ GPa}$ ,  $E(111) = 258.1 \text{ GPa}$ . Porównano je z danymi eksperymentalnymi.

Stałe elastyczne  $C_{11}$  i  $C_{22}$  wykazują liniowe zachowanie wraz ze wzrostem odkształcenia, ale pozostałe  $C_{33}$ ,  $C_{44}$ ,  $C_{55}$  i  $C_{66}$  dla deformacji aż do  $0.5\%$  są dobrze dopasowane przez logarytmiczną linię trendu. Oznacza to, że w obszarze małych naprężeń występują siły krótkozasięgowe, które przeciwstawiają się zewnętrznej sile deformującej. Wartości tych stałych maleją w sposób eksponencjalny ze wzrostem deformacji do około  $0.5\%$  i pozostają stałe aż do  $1\%$ . Odkształcenia większe od  $1\%$  nie są badane, bowiem rzeczywiste materiały ceramiczne powyżej tej wartości ulegają zniszczeniu.

Wartości kierunkowych modułów Younga są w przybliżeniu stałe — rys. 3, ale w kierunku (001) pojawia się zachowanie eksponencjalne w zależności  $E(001)$  od odkształcenia,

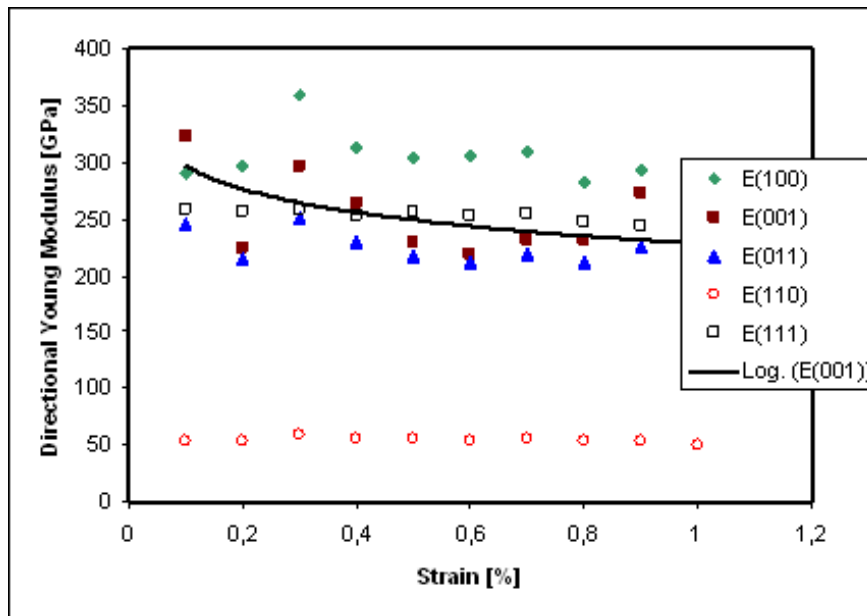
Przy wykorzystaniu formalizmu teoretycznego z pierwszych zasad, zwanego także *ab initio*, przeprowadzono programem SIESTA [1] obliczenia teoretyczne własności strukturalnych, elastycznych, a także struktury elektronowej dla cienkich włókien wykonanych z  $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$  (PZT) o strukturze tetragonalnej. Posłużono się metodą DFT i uogólnionego gradientu potencjału GGA [1], [2]. Uzyskano parametry komórki elementarnej dla struktury równowagowej zgodne z eksperymentalnymi — rys. 1. Wartości średnie stałych elastycznych otrzymane dla odkształceń w zakresie  $0.1\%$ – $1.0\%$  wynoszą:  $C_{11} = 445.8 \text{ GPa}$ ,  $C_{33} = 388.6 \text{ GPa}$ ,  $C_{12} = 149.3 \text{ GPa}$ ,  $C_{13} = 166.1 \text{ GPa}$ ,  $C_{44} = 109.1 \text{ GPa}$ ,

podobne do tego dla stałej elastycznej  $C_{33}$  w tym kierunku. Eksperymentalne wartości modułu Younga zostały zmierzone dla cienkich włókien PZT jedynie w kierunku wzdłuż promienia i mieszczą się w zakresie 108–120 GPa w temperaturze pokojowej.



Rys. 2. Teoretyczne zależności stałych elastycznych od odkształcenia [2]

Wyniki teoretyczne obliczeń stałych elastycznych (rys. 2) przewyższają eksperymentalne o ponad 50%, ale efekt ten wynika z faktu realizowania obliczeń dla idealnej sieci krystalicznej (która w rzeczywistości nigdy nie występuje), znajdującej się w temperaturze zera bezwzględnego. Wprowadzenie pojedynczych defektów punktowych skutkuje uzyskaniem zadowalającej zgodności teorii z doświadczeniem.



Rys. 3. Teoretyczne zależności kierunkowych modułów Younga od odkształcenia [2]

#### Literatura

- [1] R. Bujakiewicz-Korońska, J. Koroński, *O obliczeniach ab initio stałych elastycznych materiałów ferroelektrycznych na przykładzie tytanianu sodowo-bismutowego*, XXXVIII Ogólnopolska Konferencja Zastosowań Matematyki, IM PAN, Warszawa 2009, 10–11.
- [2] R. Bujakiewicz-Korońska, J. Koroński i inni, *First principles studies of structural, elastic, electronic properties of the PbZr<sub>0.5</sub>Ti<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> fibres*, w przygotowaniu do druku.