

简支边界铁电晶片的第三热释电效应的理论计算*

王旭昇 张显焱

(西安电子科技大学技术物理系, 陕西, 西安, 710071)

摘要——由晶体的状态方程和板壳应力理论讨论了单轴铁电晶体薄片在温度沿厚度方向非均匀变化时, 处于简支边界条件下的第三热释电效应; 推导了温度梯度垂直于极化轴情况下 LiTaO_3 和 $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 铁电晶片第三热释电系数的表达式; 对它们的分布进行了计算和讨论, 结果表明: 在温度梯度较大时, 第三热释电效应的贡献是不可忽略的。

关键词——热释电效应, 铁电晶体, 热应力。

1. 引 言

热释电效应可分为三类^[1]: 当晶体均匀受热时, 按力学边界条件的不同将产生第一和第二热释电效应; 当晶体非均匀受热时, 晶体中将产生附加应力, 进而产生附加应变使自发极化发生变化, 这种由于温度不均匀变化引起的附加热释电效应称为第三热释电效应。前两类效应已经讨论得很清楚; 而第三类效应则讨论得很少。

实际应用中, 晶体的温度变化一般都是非均匀的, 特别是利用温度不均匀变化做成的 II 型热释电探测器^[2], 它的工作原理可能与第三热释电效应有关, 故对第三热释电效应的研究将有助于揭示 II 型热释电探测器的工作机理及加深对晶体热电特性的了解。我们曾讨论过沿晶体薄片厚度方向温度变化不均匀时, 其梯度平行于极化轴和垂直于极化轴两种情况下的第三热释电效应^[3], 但对后者的推导不够准确。本文将结合 II 型热释电探测器的结构, 利用晶体的状态方程和板壳应力理论来讨论简支边界条件下单轴铁电晶片在温度梯度垂直于极化轴时的第三热释电效应。

2. 第三热释电系数的推导

设晶体薄片的长、宽和厚分别为 a 、 b 和 t , 极化轴的方向沿 z 轴, 其坐标如图 1 所示。为了便于推导, 只考虑在垂直于极化轴方向上的 X 轴和 Y 轴性能对称的那些晶体, 如热释

本文 1990 年 5 月 7 日收到, 修改稿 1990 年 7 月 7 日收到。

* 国家自然科学基金资助项目。

电探测器常用的材料、3m 点群的 LiTaO_3 和 4mm 点群的 $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 等晶体。

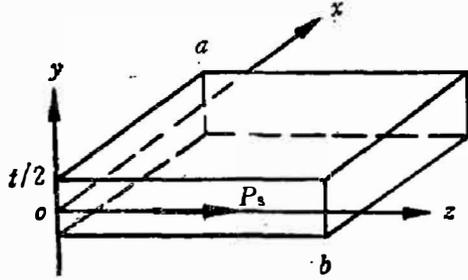


图1 晶体薄片坐标示意图

Fig. 1 Coordinates of the crystal wafer.

2.1 晶体的状态方程

在晶体的三组状态变量(应力 T , 应变 S)、(电场强度 E , 电位移 D)和(温度 θ , 熵 σ)中, 任取每组中一个量组成三个变量为自变量, 其余三个为因变量, 就可列出晶体的状态方程. 为了方便取 (S, E, θ) 为自变量, 当自变量有一微小变化 $(\Delta S, \Delta E, \Delta \theta)$ 时, 晶体的状态方程可写为^[4]

$$\Delta T_i = c_{ij}^{E, \theta} \Delta S_j - e_{mi}^{\theta} \Delta E_m - \lambda_i^E \Delta \theta, \quad (1a)$$

$$\Delta D_n = e_{ni}^{\theta} \Delta S_j + \epsilon_{mn}^{S, \theta} \Delta E_m + p_n^S \Delta \theta; \quad (1b)$$

式中 $c_{ij}^{E, \theta}$ 为弹性刚度常数, e_{mi}^{θ} 为压电应力常数, λ_i^E 为热应力常数, $\epsilon_{mn}^{S, \theta}$ 为介电常数, p_n^S 为热释电常数(恒应变), $i, j=1\sim 6, m, n=1\sim 3$, 由于推导中不用到熵的表达式, 故未列出. 为了与后面的推导一致, 对 $\Delta T, \Delta D, \Delta S$ 和 ΔE 的具体表达式, 将用 x, y, z 标注脚标.

考虑晶体薄片有一温度变化且沿厚度方向有一梯度. 温度分布的不均匀将使晶体薄片产生附加应变, 设晶片中某一微元沿 x, y, z 三个方向的位移分别为 u, v, w , 则应变为^[5]

$$\begin{cases} \Delta S_x = \frac{\partial u}{\partial x} - y \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \stackrel{\text{记}}{=} \Delta S_x^0 + \Delta S'_x, \\ \Delta S_y = \frac{\partial v}{\partial y}, \\ \Delta S_z = \frac{\partial w}{\partial z} - y \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \stackrel{\text{记}}{=} \Delta S_z^0 + \Delta S'_z, \\ \Delta S_{xz} = \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) - 2y \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial z} \stackrel{\text{记}}{=} \Delta S_{xz}^0 + \Delta S'_{xz}; \end{cases} \quad (2)$$

式中右端第一项为晶体温度均匀变化时的应变; 第二项是由于温度不均匀变化使晶片沿 y 轴挠曲而产生的附加应变, v 称为挠度. 附加应变产生的附加自发极化为

$$\Delta D'_n = e_{ni}^{\theta} \Delta S'_i. \quad (3a)$$

对 3m 点群和 4mm 点群的晶体^[2], 沿 z 轴的附加自发极化为

$$\Delta D'_z = e_{31}^{\theta} \Delta S'_x + e_{33}^{\theta} \Delta S'_z. \quad (3b)$$

给出温度分布, 若能求出挠度 v , 就可得到温度不均匀对自发极化的贡献.

2.2 挠度方程

这里涉及的是小挠度问题, 可以用相应的板壳应力理论进行处理, 在求解挠度时只考虑 $\Delta S_x, \Delta S_z, \Delta S_{xz}$ 和温度分布的影响, 则应力分量方程为

$$\begin{cases} \Delta T_x = c_{11}^E \Delta S_x + c_{31}^E \Delta S_z - \lambda_1^E \Delta \theta, \\ \Delta T_z = c_{13}^E \Delta S_x + c_{33}^E \Delta S_z - \lambda_3^E \Delta \theta, \\ \Delta T_{xz} = c_{44}^E \Delta S_{xz}. \end{cases} \quad (4)$$

当晶体薄片厚度方向温度变化不均匀时, 薄片将产生挠曲, 其单位长度上的弯矩为^[5]

$$\begin{bmatrix} M_x \\ M_z \\ M_{xz} \end{bmatrix} = \int_{-t/2}^{t/2} \begin{bmatrix} \Delta T_x \\ \Delta T_z \\ \Delta T_{xz} \end{bmatrix} y dy, \quad (5a)$$

由方程(2)、(4)及(5a)可得

$$\begin{cases} M_x = -\frac{t^3}{12} \left[c_{11}^E \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + c_{13}^E \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right] - \lambda_1^E M^*, \\ M_z = -\frac{t^3}{12} \left[c_{13}^E \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + c_{33}^E \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right] - \lambda_3^E M^*, \\ M_{xz} = -\frac{t^3}{6} c_{44}^E \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial z}; \end{cases} \quad (5b)$$

其中 $M^* = \int_{-t/2}^{t/2} (\Delta\theta) y dy$. 将上述方程代入无荷载薄板的弯曲平衡方程^[5]

$$\frac{\partial^2 M_x}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 M_{xz}}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 M_z}{\partial z^2} = 0, \quad (6)$$

可得到挠度方程

$$D_x \frac{\partial^4 v}{\partial x^4} + 2H \frac{\partial^4 v}{\partial x^2 \partial z^2} + D_z \frac{\partial^4 v}{\partial z^4} = -\lambda_1^E \frac{\partial^2 M^*}{\partial x^2} - \lambda_3^E \frac{\partial^2 M^*}{\partial z^2}, \quad (7)$$

其中 $D_x = \frac{t^3}{12} c_{11}^E$, $D_z = \frac{t^3}{12} c_{33}^E$, $H = \frac{t^2}{12} (c_{13}^E + 2c_{44}^E)$. 简单支撑薄板的边界条件为^[5]

$$\begin{cases} v=0, & \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}=0; (x=0, a) \\ v=0, & \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}=0; (z=0, b) \end{cases} \quad (8)$$

由方程(7)和边界条件(8)所确定的挠度 v 有多种解法, 我们采用纳维埃(Navier)级数解^[5]. 其基本思想是假设解的形式为正弦级数, 即

$$v = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{b}\right), \quad (9)$$

将 M^* 也按此形式展开, 代入方程(7)和(8)可解得

$$a_{mn} = \frac{16M^*}{\pi^4} \cdot \frac{\left[\lambda_1^E \left(\frac{m}{a}\right)^2 + \lambda_3^E \left(\frac{n}{b}\right)^2 \right]}{mn \left[\left(\frac{m}{a}\right)^4 D_x + 2H \left(\frac{m}{a}\right)^2 \left(\frac{n}{b}\right)^2 + \left(\frac{n}{b}\right)^4 D_z \right]}, \quad (10)$$

其中 $m, n=1, 3, 5, \dots$.

2.3 第三热释电系数

我们用平均温度变化来定义第三热释电系数, 即

$$p^3 = \frac{\Delta D'_z}{\Delta\theta}, \quad (11)$$

其中 $\overline{\Delta\theta} = \frac{1}{t} \int_{-t/2}^{t/2} (\Delta\theta) dy$ 为平均温度变化. 将式(2)、(3a)和式(9)代入式(11)即得第三热释电系数

$$\begin{aligned} p^3 &= -\frac{y}{\Delta\theta} \left(e_{31}^e \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + e_{33}^e \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ &= Ay \cdot \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left[\lambda_1^E \left(\frac{m}{a}\right)^2 + \lambda_3^E \left(\frac{n}{b}\right)^2 \right] \cdot \left[e_{31}^e \left(\frac{m}{a}\right)^2 + e_{33}^e \left(\frac{n}{b}\right)^2 \right]}{mn \left[c_{11}^E \left(\frac{m}{a}\right)^4 + 2(c_{13}^E + 2c_{44}^E) \left(\frac{m}{a}\right)^2 \left(\frac{n}{b}\right)^2 + c_{33}^E \left(\frac{n}{b}\right)^4 \right]} \\ &\quad \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{n\pi z}{b}\right); \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $m, n=1, 3, 5, \dots$, $A = \frac{192}{\pi^2 t^2} \int_{-t/2}^{t/2} (\Delta\theta) y dy / \int_{-t/2}^{t/2} (\Delta\theta) dy$.

3. 计算与讨论

3.1 系数的确定

由式(12)可知,第三热释电系数与温升分布有关.一般情况下温升 $\Delta\theta$ 的分布是多种多样的,但对热释电探测器晶片,吸收入射辐射后的温升则是指数的形式.我们可设某一瞬时的温度分布为

$$\Delta\theta = (\Delta\theta)_0 e^{(y-t/2)/\delta}, \quad (13)$$

其中 $(\Delta\theta)_0$ 是晶片上表面的温升, y 为厚度方向的坐标(见图1), $\delta = \left(\frac{2K}{\omega\rho c_p}\right)^{1/2}$ 为热扩散长度, K, ρ, c_p 分别为晶体的热导率、密度和比热, ω 为调制频率.

由式(12)还可看出,第三热释电系数与晶体的许多物理常数有关.表1给出了 LiTaO_3 和 $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 的物理常数,为了便于比较,同时还列出了它们的第一和第二热释电系数 p^1 和 p^2 .

表1 LiTaO_3 和 $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 的物理常数

Table 1 Physical constants of LiTaO_3 and $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$.

晶体材料	弹性刚度常数 (10^{11}N/m^2)				压电应力常数 (C/m^2)		热应力常数 ($10^6\text{N/m}^2\cdot^\circ\text{C}$)		热释电常数 ($10^{-6}\text{C/m}^2\cdot^\circ\text{C}$)	
	c_{11}^E	c_{13}^E	c_{33}^E	c_{44}^E	e_{31}^E	e_{33}^E	λ_1^E *	λ_3^E *	$p^{1[4]}$	p^{2*}
$\text{LiTaO}_3^{[6]}$	2.30	0.81	2.80	0.97	-0.38	1.09	4.74	3.76	-175	-7.8
$\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6^{[7]}$	2.10	0.36	1.17	0.66	-1.89	9.81	3.10	0.76	-500	-47.1

* 这里 $\lambda_1^E = c_{13}^E \alpha_3$; $p^2 = e_{33}^E \alpha_3$ 由文献[6, 7]计算得到.

3.2 第三热释电系数

为了简单起见,取矩形薄片的长和宽相等,即 $a=b$;由式(12)可知,第三热释电系数 p^3 关于 $y=0$ 反对称,这里只对上表面($y=\frac{t}{2}$)进行计算.因此,对式(13)的温升分布, p^3 的表达式为:

$$p^3 = B \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\lambda_1^E m^2 + \lambda_3^E n^2] \cdot [e_{31}^E m^2 + e_{33}^E n^2]}{m \cdot n \cdot [c_{11}^E m^4 + 2(c_{13}^E + 2c_{44}^E) m^2 n^2 + c_{33}^E n^4]} \cdot \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{n\pi z}{a}\right); \quad (14)$$

$(m, n=1, 3, 5, \dots)$

其中 $B = \frac{48}{\pi^2} \cdot \frac{(e^{t/2\delta} + e^{-t/2\delta}) - \frac{2\delta}{t}(e^{t/2\delta} - e^{-t/2\delta})}{(e^{t/2\delta} - e^{-t/2\delta})}$; 这就是实际计算用的表达式.由于 p^3 是

正弦型函数,对 x 或 z 关于 $\frac{a}{2}$ 处对称,我们沿如下两条路径进行计算:(1) $x=0 \sim a/2, y=t/2, z=a/2$; (2) $x=a/2, y=t/2, z=0 \sim a/2$.式(14)收敛是显然的;对误差估算作如下选择:以 $m \cdot n \leq 1089$ 的项求和确定 p^3 值,以 $1089 < mn \leq 1101$ 的各项和作为误差项,其最后结果误差 $< 1\%$ ($p^3=0$ 附近除处).

我们计算了第三热释电系数 p^3 沿两条路径的分布及不同晶片厚度 t 和不同热扩散长度 δ 对 p^3 的影响. 图 2 给出了 $t=10\mu\text{m}$ 和 $\delta=13.2\mu\text{m}$ 时 p^3 沿两条路径的分布情况 (这里我们以 δ 作为比较标准, 若以调制频率表示, $\delta=13.2\mu\text{m}$ 所对应的调制频率对 LiTaO_3 和 $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 分别为 2kHz 和 780Hz). 沿路径(1)的 p^3 值在边缘附近为负, 随着 x 的增加, p^3 由负值变到正值, 并在中心 ($x=a/2$) 处取得最大值; 沿路径(2) p^3 值为正, 在整个范围内变化不大, 边缘处的 p^3 值稍大于中心处的值. p^3 值的大小和符号与晶体的物理常数有关, 特别是 $\lambda_1^E, \lambda_3^E, e_{31}^e$ 和 e_{33}^e 将影响 p^3 的符号. 为了比较这些参数对 p^3 的影响, 我们还用 A. W. Warner^[8] 测量的 LiTaO_3 晶体物理常数对 p^3 进行了计算 (沿路径(1)), 结果表明: p^3 不仅都为正, 而且还比 R. T. Smith (表 1) 参数计算的结果大 (在中心处由 A. W. Warner 参数计算的 $p^3=6.19 \times 10^{-6}\text{C}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$, 而由 R. T. Smith 参数计算的 $p^3=2.48 \times 10^{-6}\text{C}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$. A. W. Warner 测得 $e_{31}^e=0.00\text{C}/\text{m}^2$; $e_{33}^e=1.90\text{C}/\text{m}^2$; 其它参数与 R. T. Smith 参数基本相同).

为了比较晶片厚度和热扩散长度 (亦表征了入射辐射的调制频率) 对 p^3 的影响, 我们还计算了在晶片中心 ($a/2, t/2, a/2$) 处不同的晶片厚度和不同的热扩散长度下 p^3 的值, 如表 2 所示. 由表 (2) 可见: 晶片厚度 t 越大, p^3 亦越大, 这说明可以利用增加 t 来增大 p^3 , 但 t 不能太大, 因为推导时利用的是小挠度理论, 要求晶片很薄才能成立; 热扩散长度 δ 越小 (亦即调制频率越高), p^3 越大, 这是因为 δ 越小, 温度梯度越大, 晶片所受的热应力也就越大, 从而使 p^3 增大.

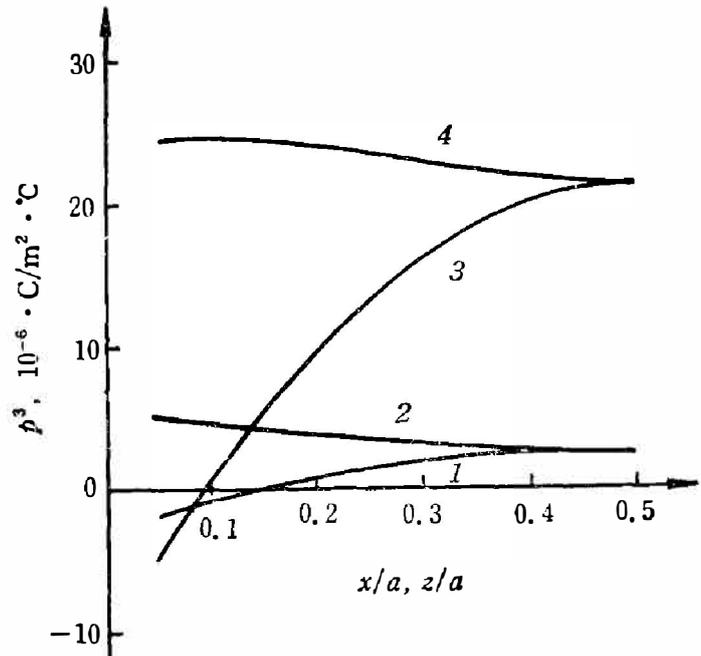


图 2 p^3 沿 x 或 z 轴的分布 ($t=10\mu\text{m}$, $\delta=13.2\mu\text{m}$)

- 1— LiTaO_3 沿 $(0 \sim a/2, t/2, a/2)$;
2— LiTaO_3 沿 $(a/2, t/2, 0 \sim a/2)$;
3— $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 沿 $(0 \sim a/2, t/2, a/2)$;
4— $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 沿 $(a/2, t/2, 0 \sim a/2)$

Fig. 2 Distribution of p^3 along x or z axis.

表 2 p^3 在 $(a/2, t/2, a/2)$ 处随 t 和 δ 的变化

Table 2 The values of p^3 at $(a/2, t/2, a/2)$ vs t and δ .

$\delta (\mu\text{m})$		LiTaO_3			$\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$		
		13.2	4.17	0.417	13.2	4.17	0.417
$p^3 (10^{-6}\text{C}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$	$t=10\mu\text{m}$	2.48	7.25	18.2	21.4	62.5	156.6
	$t=20\mu\text{m}$	4.83	11.9	19.0	41.6	102.4	163.7

计算表明: p^3 在晶片的上表面为正, 对第一和第二效应起减弱作用, p^3 在晶片的下表面为负, 对第一和第二效应起增强作用; p^3 值在一定的 t 和 δ 下比第二释热电常数都大.

4. 结 论

(1) LiTaO_3 和 $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ 两种铁电晶片的第三热释电效应在瞬时温度梯度较大时不可忽略, 相应的热释电系数可与第一、第二效应的值比拟. 在晶片上表面中心处的值 ($t=20\ \mu\text{m}$, $\delta=0.417\ \mu\text{m}$) 可分别达到 $19.0 \times 10^{-6}\ \text{C}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$ 和 $163.7 \times 10^{-6}\ \text{C}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$.

(2) 两种晶片的第三热释电系数沿 $(a/2, t/2, 0 \sim a/2)$ 的分布较为平稳, 边缘处的值稍大于中心处的值; 沿 $(0 \sim a/2, t/2, a/2)$ 的分布变化较大, 边缘处为负, 向里逐渐增加为正, 在中心处取得最大值. 第三热释电系数的值随晶片厚度的增加而增加; 随热扩散长度的减小 (亦即随调制频率增高) 而增加.

参 考 文 献

- [1] 孙慷、张福学主编, 压电学(上), 北京: 国防工业出版社, (1984), p116, p329.
- [2] Hadni A., *Infrared Physics*, **27**(1987), 1: 17.
- [3] Wang X., *Ferroelect. Lett.*, (待发表).
- [4] Liu S. T. and Donald Long, *Proc. IEEE.*, **66**(1978), 1: 14.
- [5] Ugral A. C., *Stresses in Plates and Shells*, McGraw-Hill, New York, 1981, p12, p59, p187. 板壳应力, 范钦珊译, 北京: 中国建筑工业出版社, (1986), p9, p46, p151.
- [6] Smith R. T. and Welsh F. S., *J. Appl. Phys.*, **42**(1971), 6: 2219.
- [7] Shorrocks N. M., Whatmore R. W. and Liu S. T., *J. Phys. D*, **15**(1982), 2469.
- [8] Warner A. W., Onoe M. and Coquin G. A., *J. Acoust. Soc. Amer.*, **42**(1967), 6: 1223.

THEORETICAL CALCULATION OF TERTIARY PYROELECTRIC EFFECT OF FERROELECTRIC CRYSTAL WAFERS IN SIMPLY SUPPORTED EDGES*

WANG XUSHENG ZHANG XIANZHI

(Technical Physics Department, Xi'an University of Electronic Science and Technology, Xi'an, Shaanxi 710071, China)

ABSTRACT

Based on the state equation and theory of stresses in plates and shells, the tertiary pyroelectric effect due to nonuniform temperature distribution is discussed for the single axial ferroelectric crystal wafers in simply supported edges boundary condition. The tertiary pyroelectric coefficients of LiTaO_3 and $\text{Sr}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_6$ are derived and calculated with a temperature gradient perpendicular to polar axis. The results show that the tertiary pyroelectric effect can not be neglected for the case of large temperature gradient.

* Project supported by the Chinese National Natural Sciences Fund.