

Нестеров Владимир Николаевич, Нестеров Иван Владимирович, Савицкий Владислав Зенонович
**АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ О МОДЕЛИРОВАНИИ СВОЙСТВ
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ**

Адрес статьи: www.gramota.net/materials/1/2011/1/24.html

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.

Источник

Альманах современной науки и образования

Тамбов: Грамота, 2011. № 1 (44). С. 73-75. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: www.gramota.net/editions/1.html

Содержание данного номера журнала: www.gramota.net/materials/1/2011/1/

© Издательство "Грамота"

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: www.gramota.net

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: almanac@gramota.net

Список литературы

1. **Карташов Э. М.** Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. М.: Высш. шк., 2001. 550 с.
2. **Макаров Е. Г.** Инженерные расчеты в *MathCAD 14*. СПб.: Питер, 2007. 592 с.
3. **Трофимова Т. И.** Курс физики: учебник для студ. вузов. М.: Высш. шк., 1985. 432 с.

УДК 537.226.4

Владимир Николаевич Нестеров, Иван Владимирович Нестеров, Владислав Зенонович Савицкий
Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ
О МОДЕЛИРОВАНИИ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ[©]

Сегнетоэлектрики являются важнейшим классом твердых тел. Изучению свойств сегнетоэлектриков посвящено много научных работ. Наиболее эффективным методом изучения свойств сегнетоэлектриков является компьютерное моделирование.

Настоящая работа посвящена анализу современных представлений о моделировании свойств сегнетоэлектриков.

Усталостные характеристики тонких пленок $\text{Pb}_{0.6}\text{Zr}_{0.4}\text{O}_3$ с ориентацией изучены как функция частоты сигнала напряжений.

Полученные результаты анализируются в рамках модели, основанной на захвате и высвобождении носителей состояниями в запрещенной зоне, расположенными на поверхностях между электродами сегнетоэлектрической пленкой («модель поверхностного состояния»). Постоянные времени захвата и высвобождения носителей, которые управляют изменением остаточной поляризации, определяются в согласии с классическими результатами, полученными при изучении МОП-структур. Несмотря на широкое разнообразие форм кривых зависимости остаточной поляризации от числа циклов, экспериментальные данные хорошо аппроксимируются данной моделью. Полученные результаты подтверждают пригодность модели поверхностного состояния для описания усталости в сегнетоэлектрических тонких пленках.

С помощью молекулярного моделирования на основе метода минимизации энергии исследована природа пьезоэлектричества в β -фазе PVDF. Как показывают результаты моделирования, под действием постоянного напряжения кристалл PVDF может сжиматься или растягиваться в зависимости от ориентации диполей и полярности приложенного напряжения. Моделирование подтверждает, что пьезоэлектричество в полимерах в основном определяется размерным эффектом. Рассчитанный в рамках модели пьезоэлектрических коэффициент хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Рассматриваются два подхода к моделированию размерного эффекта в плоскопараллельном конденсаторе: пространственная корреляция под влиянием граничных условий на электродах конденсатора и модель «мертвого слоя».

Для описания пространственной корреляции используется модель Гинзбурга-Девоншира с параметром корреляции ξ . Феноменологическими характеристиками модели «мертвого слоя» являются толщина и диэлектрическая постоянная слоя. Модель «мертвого слоя» может использоваться для практических целей моделирования. Эта модель должна учитывать, что размерные эффекты и определение параметров мертвого слоя основаны на корреляции динамической сегнетоэлектрической поляризации и соответствующих граничных условий.

Экспериментально и теоретически исследована зависимость ϵ пористых керамик на основе $\text{Ba}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{TiO}_3$ от E .

Обсуждается влияние размера пор и их концентрации на ϵ , а также на скорость уменьшения ϵ при росте E . Отмечено хорошее соответствие экспериментальных данных с расчетами, выполненными в рамках простой модели.

С помощью ПЭМ исследовано диффузное рассеивание в керамике $\text{Pb}(\text{ZrTi})\text{O}$ во всем диапазоне фазовой диаграммы от ромбоэдрической фазы ($x=0.3$) к тетраг. фазе ($x=0.7$). Хотя во всем диапазоне составов наблюдаются полосы одного и того же типа, наиболее сильные и заметные из них располагаются в ромбоэдрической фазе, постепенно ослабляясь и исчезая при приближении к морфотропной фазовой границе. Эти полосы соответствуют диффузным плоскостям рассеивания в трех направлениях (111).

Моделирование методом Монте-Карло позволяет воспроизвести наблюдаемую дифракционную картину в ромбоэдрической фазе. В этой модели смещения ионов Pb в цепочках направлены вдоль цепочек и обладают сильной межцепочечной корреляцией. Отсутствие латеральной корреляции свидетельствует о существенной независимости соседних цепочек.

Исследованы нелинейные пьезоэлектрические явления в системе $\text{PbTiO}_3\text{-Pb}(\text{Sc}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$, которая является сегнетоэлектрическим релаксором с большой постоянной d . Значения скачков и изменения резонансной частоты, рассчитанные при использовании ϵ в качестве нелинейного пьезоэлектрического коэффициента слагаемого третьего порядка для электрического поля, согласуются с измеренными значениями в области тетраг. фазы.

В ромбоэдрической области рассчитанные значения не согласуются с измеренными, однако это расхождение может быть устранено введением нового нелинейного пьезоэлектрического коэффициента слагаемого третьего порядка для механических напряжений ϵ . Использование комплексного ϵ позволяет точно предсказать точку падения ток, до сих пор было невозможно.

Квантово-химическим методом на основе формализма Хартри-Фока выполнено моделирование легированного железом BaTiO_3 с учетом кубическо- и тетрагонально-кристаллических решеток кристалла. Рассчитанные равновесные структуры легированных Fe кристаллов обнаруживают смещение атомов Ti и O к Fe-дефекту, тогда как атомы Ba удаляются от дефекта Fe. Как плотность, между атомом Fe с шестью соседними атомами O могут иметь место необычные химические связи. Обсуждается роль примеси Fe сегнетоэлектрической поляризации тетрагонального кристалла BaTiO_3 .

При механических и электрических нагрузках интенсивные напряжения и электрические поля в окрестности трещин и полости могут вызвать переключение поляризации в сегнетоэлектрических материалах. В рамках трехмерно нелинейной модели конечных элементов основанной на принципе виртуальной работы исследованы переключение поляризации и нелинейное поведение сегнетоэлектриков. Модель рассматривает три физических поля: поля поляризации, электрическое поле и поле механических напряжений, а так же взаимодействия между ними. Исследовано распределение поляризации вблизи непроницаемо царапины в сегнетоэлектрическом домене, подверженном механической и электрической нагрузкам. Переключение поляризации имеет место вблизи вершины царапины, если механическая нагрузка превышает критическое значение. Электрическое поле, параллельное начально поляризации, увеличивает критическое значение, тогда как поле, антипараллельное e , уменьшает его. Переключение поляризации является результатом минимизации полно энергии в моделированных сегнетоэлектриках.

Рассматривается использование дробно производно для объяснения явлений поляризации в сегнетоэлектрических материалах, а также моделирования их как моделирования и измерений для сильных, слабых и сверхслабых электрических t поле в широкой полосе частот (петли гистерезиса более четырех порядков величины). Во всех случаях дробное слагаемое обеспечивает очень точное моделирование динамического поведения сегнетоэлектриков. Модель точно воспроизводит частотную зависимость коэффициента диэлектрической проницаемости в направлении поляризации ϵ_{33} который является основным параметром в сегнетоэлектриках. Временная зависимость переполаризации хорошо воспроизводится с помощью дробной производной (порядка 0,5), но плохо - при использовании производной первого порядка.

С помощью аналитического и численного моделирования исследованы пьезоэлектрического коэффициента слоистых композитов в условиях короткого замыкания.

Определены индикаторы пар различных пьезоэлектрических / непьезоэлектрических материалов, которые могут быть использованы для определения усиления пьезоэлектрического коэффициента. Исследованы усиление пьезоэлектрического коэффициента и добротность шести пьезоэлектрических материалов, спаренных с шестью непьезоэлектрическими / упругими материалами. Наилучшими характеристиками среди 36 пар обладает пара цирконат-титана свинца (PZT) / термопластичны поливинилхлорид, насыщенны хлором при отношении толщин более R ниже 0,09 и пара PZT - цинк при отношении толщин более 0,09, которые обнаруживают пьезоэлектрический коэффициент - $20 \cdot 10^{-4} \text{ Кл/м}^2 \cdot \text{К}$ при $R=0,09$, что соответствует увеличению этого коэффициента приблизительно на 300%. PZT - поливинилхлорид обнаруживает максимальное увеличение пьезоэлектрического коэффициента на 800% и 12-кратное увеличение добротности по сравнению с чистым PZT.

Вывод: анализ современных представлений о моделировании свойств сегнетоэлектриков показал, что наиболее изучаемыми сегнетоэлектриками являются составы на основе PZT. С ростом мощностей современных компьютеров используемые модели усложняются и учитывают всё больше деталей физических свойств сегнетоэлектриков.

Список литературы

1. **Baba-Kishi K. Z., Welberry T. R., Withers R. L.** An electron diffraction and Monte Carlo simulation study of diffuse scattering in $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ // J. Appl. Crystallogr. 2008. V. 41. № 5. P. 930.
2. **Chang H. H. S., Whatmore R. W., Huang Z.** Pyroelectric effect enhancement in laminate composites under short circuit condition // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. № 11. P. 114110.
3. **Guyomar D., Ducharne B., Sebald G., Audiger D.** Fractional derivative operators for modeling the dynamic polarization behavior as a function of frequency and electric field amplitude // IEEE Trans. Ultrason., Ferroelec. and Freq. Contr. 2009. V. 56. № 3. P. 437.
4. **Ishii Keisuke, Tashiro Shinjiro.** Simulation of current-jumping phenomena in $\text{PbTiO}_3\text{-Pb}(\text{Sc}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ system piezoelectric ceramics // J. Ceram. Soc. Jap. 2008. V. 116. № 1359. P. 1214.
5. **Poullain G., Cibert C., Bouregba R.** Analysis of the influence of stress signal frequency on fatigue of ferroelectric thin films // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. № 12. P. 124105.

6. **Stashans Arvids, Castillo Darwin.** Simulation of iron impurity in BaTiO₃ crystals // *Physica. B.* 2009. V. 404. № 8-11. P. 1575.
7. **Vendic Orest G., Zubko Svetlana P., Medvedeva Natalia Yu.** «Dead layer» characteristic based on a correlation of the ferroelectric polarization under relevant boundary conditions in a parallel plate capacitor // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 105. № 5. P. 053515.
8. **Wang Jie, Kamalah Marc.** Three-dimensional finite element modeling of polarization switching in a ferroelectric single domain with an impermeable notch // *Smart Mater. and Struct.* 2009. V. 18. № 10. P. 104008.
9. **Zhang Y., Wang G., Wang K., Wang Yu, Dong X.** The model of electric field dependent dielectric properties for porous ceramics // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. № 11. P. 114103.
10. **Zhu GuoDong, Zeng Zhigang, Zhang Li, Yan XueJian.** Piezoelectricity in β -phase PVDF crystals: a molecular simulation study // *Comput. Mater. Sci.* 2008. V. 44. № 2. P. 224.

УДК 551.501.79

Александр Иванович Романенко

Московский государственный университет технологий и управления им. К. Г. Разумовского

ОПТИМИЗАЦИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ АВИАЦИОННЫХ ФОРМИРОВАНИЙ[©]

Безопасность и эффективность функционирования авиационных формирований (назовем так авиационные отряды, эскадрильи гражданской, транспортной и военной авиации) находятся в существенной зависимости от неуправляемых метеорологических факторов. Отличительная особенность этих формирований заключается в том, что повышение ресурсной оснащенности и технического уровня, увеличение масштабов и возможностей их функционирования приводят не к снижению, а к увеличению значимости проблемы учета погодных условий в процессе принятия решений при наличии метеорологической неопределенности. Вместе с этим, традиционная методология метеорологического обеспечения авиации неоправданно идеализирует процессы влияния характеристик погоды на безопасность и эффективность функционирования авиационных формирований (далее АФ), «очищая» их от влияния метеорологических факторов путем осреднения значений различных показателей и нормативов по погодным ситуациям. Однозначное их фиксирование при планировании и анализе равносильно предположению о точности предвидения одной из возможных реализаций погодных условий в момент принятия решений. Данный факт совершенно исключает из поля зрения проблему повышения качества метеорологического обеспечения и заметно снижает роль указанной методологии в построении адекватного механизма управления.

Анализ метеорологических прогнозов показывает, что разрабатываются они в настоящее время в основном без учета специфики функционирования АФ и относятся к прогнозам общего назначения. Качество метеорологического обеспечения при этом определяется степенью близости прогнозов погоды к идеальным.

Именно на повышение этой близости традиционно направлены усилия авторов разрабатываемых прогностических методов. Разумеется, разработка идеальных прогнозов погодных условий и знание точного механизма воздействия этих условий на функционирование АФ, обеспечили бы потребности в метеорологической информации лицо, принимающее решение (далее ЛПР), в полном объеме. Однако, как известно, регулярное составление идеальных прогнозов погоды невозможно, а проведение исследований, направленных на увеличение качества разрабатываемых прогнозов, является сложным и дорогостоящим процессом. С другой стороны, авторами ряда работ доказано, что повышение качества метеорологического обеспечения связано не только с увеличением успешности прогнозов погоды общего назначения, но и с улучшением методики использования метеорологической информации ЛПР. По этой причине все больше внимание исследователей уделяется вопросам оптимизации использования метеорологической информации с целью повышения эффективности функционирования метеозависимых АФ.

Существующие алгоритмы оптимального использования метеорологической информации, основанные на исследовании операций, в ряде случаев требуют существенной модификации. Особенно отчетливо это прослеживается при поэтапном принятии решений. Поэтому проблема оптимизации метеорологического обеспечения поэтапного функционирования АФ в настоящее время остается актуальной.

Для ее решения необходимо выполнение следующих задач:

1. Проведение анализа методов оптимизации использования метеорологической информации при управлении АФ для определения возможности повышения качества их применения в процессе принятия решений.
2. Разработка методики оптимизации использования метеорологической информации при управлении метеозависимыми АФ, основанной на синтезе методов математического программирования и статистических данных об адекватности используемой метеорологической информации принимаемым решениям.
3. Построение оптимизационных моделей использования метеорологической информации.