

用于振动能收集器的弛豫铁电单晶切型研究

史翔¹, 王伟², 杜慧玲¹, 安群力¹

(1 西安科技大学 材料学院, 陕西 西安 710054; 2 西安电子科技大学 先进材料科学与纳米技术学院, 陕西 西安 710071)

摘要:弛豫铁电单晶具有优越的压电性能和良好的温度适应性,在压电器件领域具有良好的应用前景。但是由于其复杂的工程化畴组态和各向异性,在器件设计过程中必须要考虑切型问题。该文从物联网电源的需求出发,以弛豫铁电单晶应用于振动能收集器为例,构造了以输出电压为考核目标的优化切型判据;利用基于欧拉旋转定理的张量计算方法计算分析了沿其赝立方结构的[001]、[011]和[111]极化的铌镁酸铅-钛酸铅单晶适用于振动能收集器的优化切型;分析了3种切型对切角误差的敏感性;最后给出了优化切型下的相关物理性能张量。

关键词:弛豫铁电单晶;振动能收集器;切型;工程化畴

中图分类号:O732+.1;TN602;TM22 **文献标识码:**A

Study on the Cutting Orientations of Relaxor Ferroelectric Single Crystals for Piezoelectric Vibration Energy Harvester

SHI Xiang¹, WANG Wei², DU Huiling¹, AN Qunli¹

(1. College of Materials and Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, China;

2. School of Advanced Materials and Nanotechnology, XIDIAN University, Xi'an 710071, China)

Abstract: The relaxor ferroelectric single crystals have a good application prospects for the piezoelectric devices because of excellent piezoelectric properties and temperature adaptability. But the cutting orientation has to be considered before design and manufacture of the devices due to the engineered domain configurations and anisotropy. This paper discussed the selection criterion of crystal orientation regarding the output voltage of piezoelectric vibration energy harvester starting from the needs of power supply of the Internet of Things. By computation, the optimized crystal orientations with larger fault-tolerant regions were proposed for lead magnoniobate titanate single crystal poled along the pseudo-cubic [001], [011] and [111] directions respectively. The sensitivity of these cutting orientation to the cutting angle error was analyzed. The relevant physical property tensors were given for the optimized crystal orientations.

Key words: relaxor ferroelectric single crystals; vibration energy harvester; cutting orientation; engineered domain configurations

0 引言

随着物联网技术和可穿戴设备技术的发展,低功耗无线传感网络越来越受到人们的重视,成为目前信息技术的研究热点^[1]。但由于体积限制和电量有限,传统化学电池限制了相应设备的小型化和免维护性能,故而亟需研制开发体积小,寿命长的供电设备以满足物联网发展的需求。压电振动能量收集器因其免维护性和能量密度高^[2]而成为物联网电源的理想方案。

弛豫铁电单晶具有较高的压电系数和机电耦合系数,成为振动能量收集器的理想材料。但该类单晶复杂的工程化畴组态和晶体的各向异性,在应用弛豫铁电单晶进行器件设计时应根据器件性能要求对单晶的切型进行计算研究。LI Shiyang等利用沿[011]_c方向极化的0.24Pb(In_{1/2}Nb_{1/2})O₃-0.46Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-0.30PbTiO₃单晶的Zt±45°切型具有优异的面切变性能(d_{36} 约为2368 pC/N)制作了面切变型超声电机,获得了良好的输出性能,其最

收稿日期:2016-08-08

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51372197);陕西省重点科技创新团队基金资助项目(2014KCT-04);陕西省国际科技合作重点基金资助项目(2012KW-10)

作者简介:史翔(1976-),男,青海西宁人,讲师,硕士,主要从事先进功能材料与器件的研究。E-mail: shixiang2222@163.com。

大空载速度达到 182.5 mm/s, 最大输出力为 1.03 N^[3]。因此, 考察弛豫铁电单晶的优化切型对提升器件性能有直接帮助。铌镁酸铅-钛酸铅 (PMNT) 弛豫铁电单晶因其优良的压电系数 (d_{31} 约为 $-1\ 335\ \text{pC/N}$) 和极高的机电转化效率 (k_{31} 约为 0.87)^[4] 成为应用于振动能量收集器的理想材料。

本文以提高振动能量收集器输出电压为目标, 从 PMNT 单晶的畴工程化组态出发, 利用基于邦德矩阵的晶体物理性能张量计算方法, 计算分析了不同方向极化而形成不同工程化畴组态的 PMNT67/33 单晶应用于振动能量收集器的优化切型, 并给出了该切型相关物理性能张量。

1 优化切型判据及计算方法

根据工作模式的不同, 振动能量收集器的支撑形式主要有悬臂梁式、简支梁式和固支梁式。本文选择适合于低频能量收集的悬臂梁式进行讨论。其结构与工作原理如图 1 所示。利用集中质量块对振动敏感, 使悬臂梁发生弯曲变形而产生电荷^[5]。

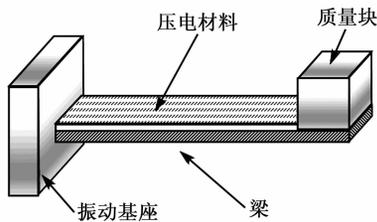


图 1 悬臂梁式振动能量收集器结构

1.1 切型判据的确定

根据牛顿第二定律和压电方程得到该类悬臂梁的输出电压^[6]为

$$V_s = \frac{d_{31}^*}{\epsilon_{33}^{T*}} \cdot \frac{mz_0\omega^2(\omega t - \varphi) \cdot T_p(2L_s - L_p)(T_p - 2b)}{4I_z} \quad (1)$$

式中: d_{31}^* 、 ϵ_{33}^{T*} 分别为某切型压电单晶的横向压电系数和机械自由介电系数; z_0 和 ω 分别为稳态响应振幅与振动频率; φ 为稳态响应与激励的相位差; I_z 为中性轴惯性矩; m 为集中质量; L_s 、 L_p 分别为悬臂梁和压电片的长度; T_p 为压电片的厚度; b 为中性轴高度。

从式(1)可看出, 在相同的器件几何结构和某一振动模式下, 输出电压仅与压电材料的横向压电系数 d_{31}^* 及介电常数 ϵ_{33}^{T*} 有关。本文研究压电单晶用于振动能量收集器的优化切型, 假设收集器几何结构与振动模式相同, 则认为若要输出电压达到最大

值, 则需要 $|d_{31}^*/\epsilon_{33}^{T*}|$ 达到最大值, 故构造比较值 D_{crit} (优化切型的判据) 为

$$D_{\text{crit}} = \left| \frac{d_{31}^*}{\epsilon_{33}^{T*}} \right| \quad (2)$$

当某一切型满足式(2)为最大值, 其输出电压可达到最大值。因此, 本文计算分析的过程实际上就是计算与对比各切型下的 D_{crit} 数值的过程。

1.2 计算方法

由于晶体在结构上存在着各向异性, 晶体的介电性能、压电性能均以张量形式表示。为考察不同方向物理性能张量的具体形式, 通常利用基于欧拉旋转定律的坐标系旋转操作得到新坐标系下的物理性能张量。欧拉转动定理认为空间任何的转动都可以用 3 次连续转动的欧拉角 φ 、 θ 、 ψ 来描述, 3 次转动对应 3 个操作矩阵, 当然, 高阶张量脚标缩减形式时, 需要使用基于上述操作矩阵的邦德矩阵进行计算^[7]。本文出于晶体样品切割工艺的难度考虑, 只研究双旋转切型, 因此, 在计算时仅进行两次欧拉旋转, 即

$$\mathbf{d}^* = \mathbf{a}_2(\theta) \cdot \mathbf{a}_1(\varphi) \cdot \mathbf{d} \cdot \mathbf{N}_1^t(\varphi) \cdot \mathbf{N}_2^t(\theta) \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}^{T*} = \mathbf{a}_2(\theta) \cdot \mathbf{a}_1(\varphi) \cdot \boldsymbol{\epsilon}^T \cdot \mathbf{a}_1^t(\varphi) \cdot \mathbf{a}_2^t(\theta) \quad (4)$$

式中: \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 为绕相应坐标轴旋转的操作矩阵, 其矩阵元是关于 φ 和 θ 的三角函数; \mathbf{N}_1 、 \mathbf{N}_2 为基于 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 的邦德矩阵; 上标 t 为转置矩阵。操作矩阵具体形式参考文献[8-9]。

根据无线电工程委员会 (IRE) 的切型符号表示法^[10] 与上述欧拉旋转计算, 可以得到计算后优化切型的表示符号, IRE 标准规定的切型符号包含一组字母 (X 、 Y 、 Z 、 t 、 l 、 ω), 用 X 、 Y 、 Z 任意两个字母的先后排列表示晶片厚度和长度的初始方向, 用 t (厚度)、 l (长度)、 ω (宽度) 表示旋转轴的位置, 例如 ($ZXtl$) φ/θ 表示晶片初始位置的厚度沿 Z 轴、长度沿 X 轴, 先绕厚度轴 (Z 方向) 旋转 φ 角度, 再绕新的长度轴旋转 θ 角度, 其中 φ 和 θ 为两次旋转的角度。由此可见, 采用遍历的方法, 在一定范围内计算不同旋转坐标系下的 D_{crit} , 确定其最大值所对应的 φ 与 θ , 即可确定压电单晶应用于振动能量收集器的优化切型。

PMNT 单晶沿不同方向极化后, 将形成工程化畴结构, 其宏观对称性也将发生改变, 物理性能张量也存在很大差异。本文对沿立方物理学坐标系 $[001]_c$ 、 $[011]_c$ 、 $[111]_c$ 方向极化的 PMNT67/33 分别进行计算讨论, 得到其适用于振动能量收集器的优化切型。

2 计算与分析

根据工程化畴理论,沿 $[001]_c$ 方向极化的 PMNT 单晶在宏观上具有 $4mm$ 点群的对称性;沿 $[011]_c$ 方向极化的 PMNT 单晶具有 $mm2$ 点群的

对称性;沿 $[111]_c$ 方向极化的 PMNT 单晶具有 $3m$ 点群的对称性^[10]。3 种工程化畴的物理学坐标系各轴对应的晶向和物理性能独立张量元如表 1 所示。

表 1 沿不同方向极化的 PMNT67/33 单晶物理学坐标轴方向及物理性能独立张量元

极化方向	物理学坐标轴 ^[11]			$d/(\text{pC}/\text{N})$						ϵ^T		
	x	y	z	d_{15}	d_{24}	d_{22}	d_{31}	d_{32}	d_{33}	ϵ_{11}^T	ϵ_{22}^T	ϵ_{33}^T
$[001]_c$ ^[3]	$[100]_c$	$[010]_c$	$[001]_c$	146.1	146.1	—	-1 335	-1 335	2 820	1 600	1 600	9 200
$[011]_c$ ^[12]	$[0\bar{1}1]_c$	$[100]_c$	$[011]_c$	2 321.0	1 941.0	—	143	-216	165	5 197	16 816	816
$[111]_c$ ^[3]	$[1\bar{1}0]_c$	$[11\bar{2}]_c$	$[111]_c$	4 100.0	4 100.0	1 340	-90	-90	190	3 950	3 950	640

根据不同极化方向的 PMNT 单晶宏观对称性确定 $-90^\circ\sim 90^\circ$ 作为 φ 与 θ 的变化范围,按照 $\Delta\varphi=\Delta\theta=0.5^\circ$ 的步长,利用遍历算法和相关的物理性能,计算每种切型下的 D_{cr} ,确定最大值所对应的 φ 和 θ ,进而确定其优化切型。

2.1 沿 $[001]_c$ 方向极化的单晶切型分析

图 2(a)为沿 $[001]_c$ 方向极化的 PMNT67/33 单晶双旋转切型的 D_{cr} 变化图,由图可知, D_{cr} 的最大值出现在 $\theta=\pm 60.5^\circ$ 的位置,绕厚度轴(Z 轴)旋转的角度 φ 不影响计算值的大小。因此,认为 D_{cr} 由绕长度轴的旋转角度确定,沿 $[001]_c$ 方向极化 PMNT67/33 单晶适用于振动能量收集器的优化切型可表示为 $(ZXI)\pm 60.5^\circ$,是一种单旋转切型, D_{cr} 随 θ 而变化的单旋转计算结果如图 2(b)所示。

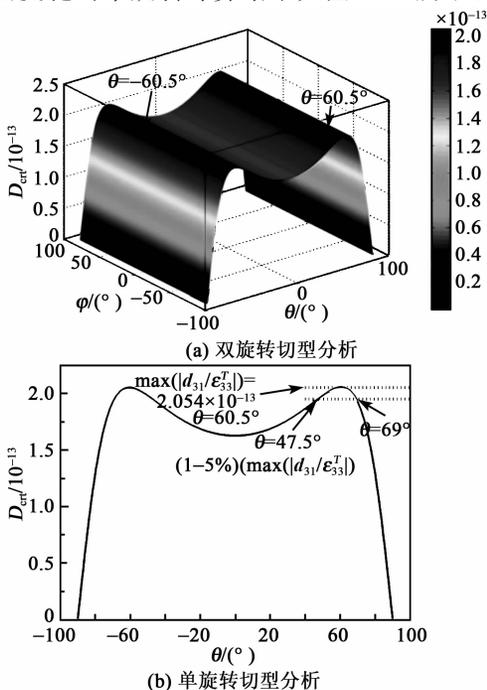


图 2 $[001]_c$ 方向极化 PMNT67/33 单晶切型分析

由图 2(b)所示的绕长度轴的单旋转计算结果可知,与双旋转切型分析结果一致, D_{cr} 的最大值为 2.054×10^{-13} 出现在 $\theta=\pm 60.5^\circ$ 的位置。需要说明的是,根据定义式, D_{cr} 的单位应为 pC/N ,但由于该构造值从物理意义上不能等同于压电应变系数,为避免混淆,本文假设该值为无量纲量。

为了考察切割误差对器件输出性能的影响,本文引入 D_{cr} 最大值的 5%作为性能误差容忍范围,如图 2(b)所示,切割误差的容许范围为 $\theta=47.5^\circ\sim 69^\circ$ 。

综上所述可知,对于沿 $[001]_c$ 方向极化的 PMNT67/33 单晶,应用于振动能量收集器的优化切型为 $(ZXI)60.5^\circ$,该切型对切角误差不敏感。

2.2 沿 $[011]_c$ 方向极化的单晶切型分析

对沿 $[011]_c$ 方向极化的 PMNT67/33 单晶,经计算后可发现沿 Z 轴旋转 $\pm 90^\circ$ 而无需沿新的 X 轴旋转即可获得 D_{cr} 的最大值,如图 3(a)所示,因此优

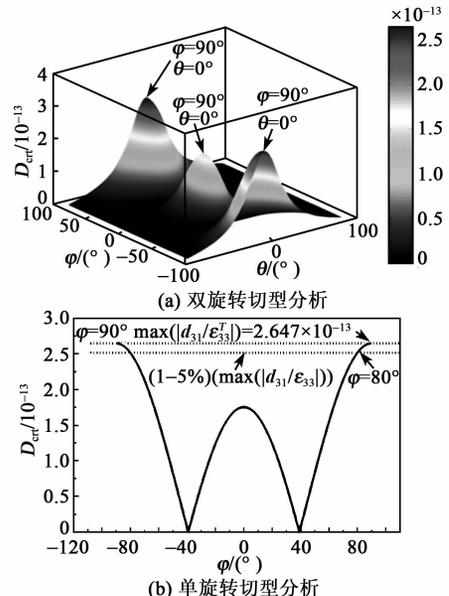


图 3 $[011]_c$ 方向极化 PMNT67/33 单晶切型分析

化切型可表示为 $(ZXl) \pm 90^\circ$ 。由于优化切型的获得不需要绕长度轴旋转,该切型是一种绕厚度轴(Z 轴)的单旋转切型,图3(b)为 D_{crit} 随单旋转切角 φ 的变化图。由图可知,在 $\varphi = \pm 90^\circ$ 时, D_{crit} 获得最大值 2.647×10^{-13} ,该切型的切割误差允许范围为

$\pm 80^\circ \sim \pm 90^\circ$ 。

另外,根据旋转后的样品方位和切型表示法,上述切型可表示为 ZY ,将表2所示的该切型物理性能张量与表1中的物理学坐标系下的相应值对比后证明了这一点。

表2 最佳切型与相应的物理性能参数

极化方向	优化切型	$d/(\text{pC/N})$	ϵ^T
$[001]_c$	$(ZXl)60.5^\circ$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 72 & 127 \\ -1\ 162 & 1\ 608 & -316 & 3\ 063 & 0 & 0 \\ -657 & 838 & -107 & 1\ 819 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1\ 600 & 0 & 0 \\ 0 & 6\ 600 & 2\ 829 \\ 0 & 2\ 829 & 3\ 200 \end{bmatrix}$
$[011]_c$	ZY	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1\ 941 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\ 321 & 0 & 0 \\ -216 & 143 & 165 & 1\ 819 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 16\ 816 & 0 & 0 \\ 0 & 519 & 0 \\ 0 & 0 & 816 \end{bmatrix}$
$[111]_c$	$(ZXl) - 22^\circ$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 4\ 805 & 949 \\ -1\ 209 & -233 & 1\ 438 & 3\ 670 & 0 & 0 \\ -585 & -149 & 744 & 1\ 273 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 3\ 950 & 0 & 0 \\ 0 & 3\ 486 & 1\ 150 \\ 0 & 1\ 150 & 1\ 105 \end{bmatrix}$

2.3 沿 $[111]_c$ 方向极化的单晶切型分析

图4为沿 $[111]_c$ 方向极化的PMNT67/33单晶的双旋转和绕长度轴的单旋转切型下 D_{crit} 变化示意图。由图可知,其优化切型也可表示为一个单旋转切型 $(ZXl) - 22^\circ$,其切角误差允许范围为 $-15.5^\circ \sim -31^\circ$,稍小于上述两种极化方向的单晶,但同样对切割误差不敏感。

的PMNT67/33单晶适用于振动能量收集器的优化切型,并将其简化为单旋转切型。为便于后续设计过程中的计算与数值模拟,本文计算提供优化切型下的相关物理性能张量如表2所示。

3 结束语

为解决弛豫铁电单晶应用于振动能量收集器的问题,基于输出电压最大的目标,构造了优化切型的判据;针对 $[001]_c$ 、 $[011]_c$ 、 $[111]_c$ 方向极化的PMNT67/33单晶,结合欧拉旋转定理与张量计算方法,计算分析了3种单晶的优化切型分别为 $(ZXl)60.5^\circ$ 、 ZY 、 $(ZXl) - 22^\circ$,证明这3种切型对切角误差不敏感;为后续设计计算与数值模拟方便,本文计算给出了3种优化切型的相关物理性能张量。虽然由于单晶组成、极化方向、器件性能要求等不同,单晶的具体物理性能张量和切型判据也存在差异,但本文中的计算分析方法具有普适性。

参考文献:

[1] 马明. 基于具有垂直电极的压电悬臂梁的振动能量收集研究[D]. 西安:西安交通大学,2015.
 [2] 张森,孟庆丰,王宏金. 悬臂梁式压电振动能量收集器的疲劳分析[J]. 压电与声光,2014,36(5):757-760. ZHANG Miao, MENG Qingfeng, WANG Hongjin. Fatigue analysis for cantilever piezoelectric vibration energy harvester[J]. Piezoelectrics & Acousto-optics, 2014,36(5):757-760.

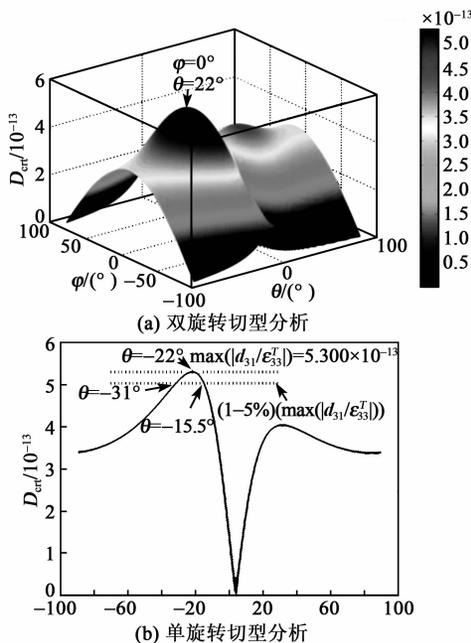


图4 $[111]_c$ 方向极化PMNT67/33单晶切型分析

经上述计算与讨论,获得了3种不同极化方向