

# 多結晶圧電セラミックス分極材料の電界下における応力集中

卒業論文要旨

機能性材料工学研究室 1180077 澤田 健太

## 1. 緒言

チタン酸ジルコン酸鉛 (PZT) は圧電性に優れ、キュリー点も高いことから、センサーやアクチュエータに広く使用されている。しかし、PZT を含むセラミックス材料は脆性材料で、遅れ破壊が生じることも知られており、機械的強度に対する信頼性が低いことが問題とされている。

これまでに著者らのグループでは、各種雰囲気条件下において、PZT 分極材の 4 点曲げ試験を行い、静的強度及び遅れ破壊強度に及ぼす環境の影響を明らかにしてきた<sup>(1)</sup>。その結果、温度 40°C、相対湿度 80% という高温かつ高湿度環境下において、PZT に電界を負荷した場合、強度が電界の強さに大きく依存し、400V/mm の電界下では電界がない時の強度に対し、約 63% も強度が低下することが明らかになった。このような環境と電界の重畳した効果による圧電材料の著しい強度低下の原因として、微視的な圧電ひずみがもたらす応力集中が考えられる。すなわち、多結晶でドメイン構造を有する圧電セラミックスでは微視的な分極方位に起因して、電界負荷時に応力集中が生じ、これに環境の効果が加わることで、著しい強度低下を引き起こした可能性がある。

そこで、本研究では、多結晶圧電セラミックスモデルを構築し、有限要素解析により粒界で生じる応力集中分布をシミュレートした。さらに、その時の最大応力の推定を試みた。

## 2. 解析モデル

先行研究において、40 × 5 × 1(mm) の PZT 試験片について厚さ方向(分極方向)に 400V/mm の電界をかけながら 4 点曲げ試験が恒温恒湿器内で行われた。本研究では、最大引張り応力が生じる内スパン内の下表面から 10μm × 10μm の領域について多結晶モデルを構築することとした。まず、領域にはボロノイ分割を行うため、ボロノイ点を 20 個、ランダムに配置させ、分割した。その後、周期境界条件を適用するために次のような作業を行った。まず、10μm 四方のモデルを作成し、それを 50μm 四方になるように並べた。次に、粒界をマージし(図 1)、10μm 四方となるように切り取った。

モデルの巨視的な分極方位は Y 軸方向となるため、各結晶内の微視的な分極方位を Y 軸に対し ±45° の範囲内でランダムに定めた。

次に有限要素解析においては、以上の分極方位がそれぞれ異なる各結晶を材料特性が異なる領域として扱った。すなわち表 1 に示す分極方向とこれに垂直な方向で与えられている PZT の各種材料特性を局所分極方位モデルの全体座標へ座標変換した値を使用した。その後、8 節点アイソパラメトリック要素を用いて分割し、 $\sigma_x = 40\text{MPa}$ 、 $E_y = 400\text{V/mm}$  条件下で解析を行った。なお、解析には ANSYS を用いた。

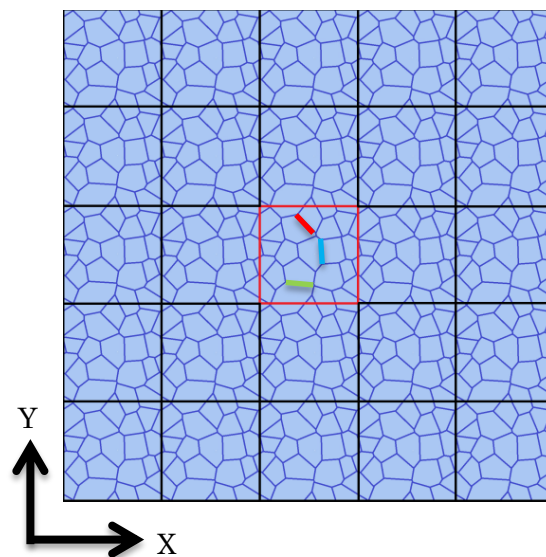


Fig. 1 Polycrystalline model for analysis

Table 1 Material properties

Density[kg/m <sup>3</sup> ]	$\rho = 7800$
Elastic constants [10 <sup>-12</sup> m <sup>2</sup> /N]	$S_{11} = 15.7$ $S_{12} = -4.87$ $S_{13} = -3.89$ $S_{22} = 15.7$ $S_{23} = -3.89$ $S_{33} = 16.3$ $S_{44} = 48$ $S_{55} = 48$ $S_{66} = 41.2$
Piezoelectric constants [pC/N]	$d_{31} = -310$ $d_{33} = 588$ $d_{15} = 1062$
Dielectric constants	$\epsilon_{11} = 4930$ $\epsilon_{22} = 4930$ $\epsilon_{33} = 4895$

## 3. 解析結果

先に述べた結晶モデルに対し、局所的分極方向を 100 種類変えて解析を行った。高温高湿度環境で電界をかけながらの曲げ試験において、比較的ゆっくりとき裂が進展する遅れ破壊の場合、き裂は粒界を進展する。そこで、粒界と応力軸がほぼ垂直 ( $\phi \cong 0^\circ$ ) と約 45° ( $\phi \cong 45^\circ$ ) およびほぼ平行 ( $\phi \cong 90^\circ$ ) の粒界に注目し、そこでの第 1 主応力(以下では主応力)の分布を求めた。しかし、粒界に沿って応力分布を求めると、粒界の端部すなわち結晶三重付近は特異性により応力が発散する傾向にある。そこで、

粒界長さの約 10%に相当する粒界両端での応力を除いて、平均値として粒界における主応力を求めた。

図 2 は粒界角度  $\phi$  が  $0^\circ$  付近と  $45^\circ$  付近、 $90^\circ$  付近における主応力を正規分布に当てはめた結果で示す。図 2 より  $\phi \cong 0^\circ$  の場合、主応力のバラつきが最小であり、 $\phi \cong 45^\circ$  の場合、バラつきは最大であることが分かる。以上により、 $\phi \cong 45^\circ$  の粒界において、主応力が最大になる可能性が高いと考えられる。

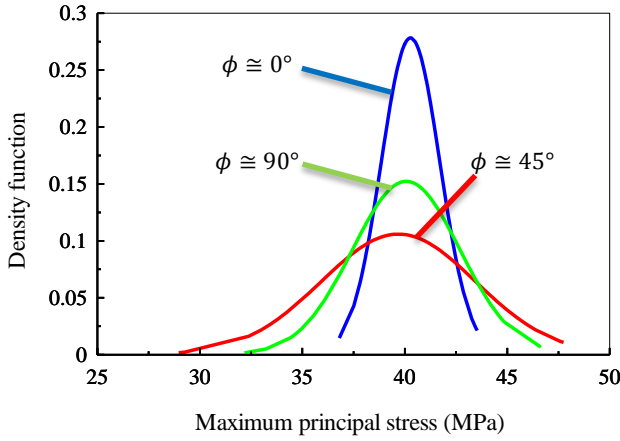


Fig. 2 Normal distribution of stress on grain boundaries

そこで、 $\phi \cong 45^\circ$  の場合に注目し、図 2 で使用した解析データを用いて、粒界に隣り合う結晶粒の分極方位差  $\Delta\psi$  と主応力の関係を求め、図 3 に表した。図 3 より  $\Delta\psi=0^\circ$  つまり隣り合う結晶粒の分極方位が揃っている場合に主応力がより大きくなる傾向が見られる。

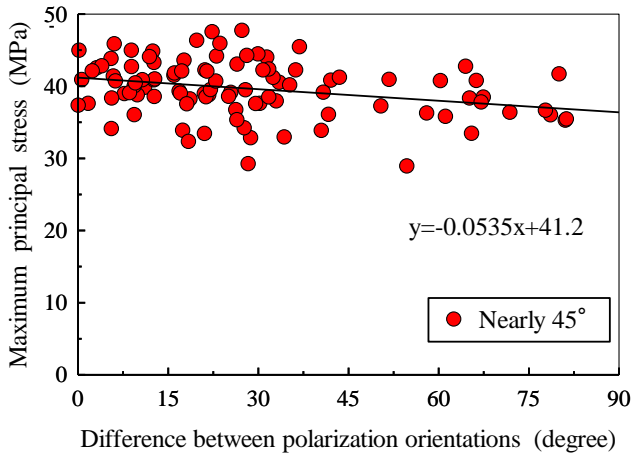


Fig. 3 Relationship between difference of polarization orientations and principal stress

次に、主応力が最大になると予想される条件すなわち  $\phi \cong 45^\circ$ 、 $\Delta\psi=0^\circ$  の条件において注目粒界に隣接する 2 結晶の分極方位  $\psi$  を  $-45^\circ \sim 45^\circ$  の範囲で変化させて、他の結晶粒の分極方位  $\psi'$  を  $-45^\circ \sim 45^\circ$  の範囲で定義したモデル 100 個に対し解析を行った。図 4 に結果を示す。

図 4 より、分極方位  $\psi$  と主応力は上に凸の関係を示していることが分かる。 $\psi \cong 15^\circ$  の時、主応力の最大値 51MPa を得た。

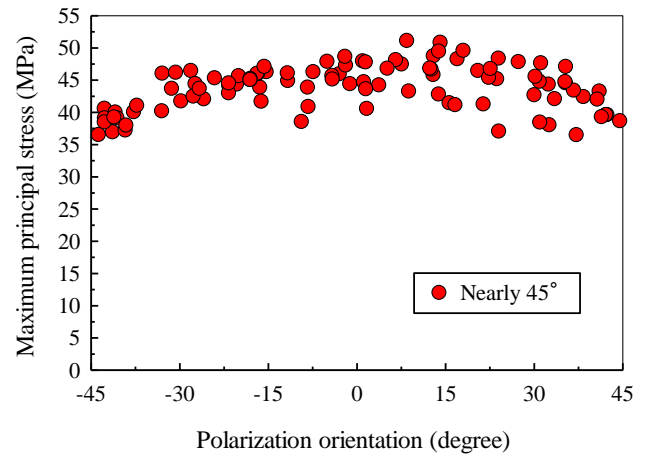


Fig. 4 Relationship between polarization orientations and principal stress

最後に、 $\phi \cong 45^\circ$  の粒界に隣り合う結晶粒の分極方位  $\psi$  を  $15^\circ$  に固定し、他の結晶粒の分極方位  $\psi'$  を  $-45^\circ \sim 45^\circ$  の範囲で定義したモデルを作成し、解析を行った。この解析結果を用いて極値統計解析を行い、図 5 を作成した。分布は

$$x = 2.18y + 40.6 \quad (1)$$

と表すことが可能であり、 $F=99.5(\%)$  の基準化変数  $y$  の値は

$$y = -\ln[-\ln(0.995)] \cong 5.296 \quad (2)$$

と求めた。(2)を(1)に代入すると、主応力の最大値は 52.2(MPa)と推定できることが分かった。

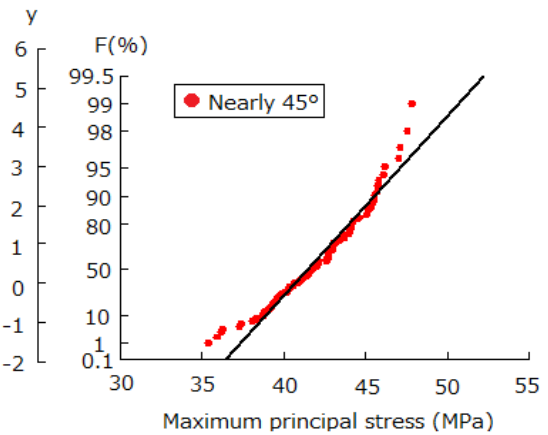


Fig. 5 Extreme value statistics of maximum principal stress

#### 4. 結言

多結晶圧電体モデルを構築し、有限要素解析を行った結果、以下の結論に至った。

- (1) 結晶粒界の角度が約  $45^\circ$  で粒界に隣接する 2 つの結晶粒の分極方位がそれぞれ約  $15^\circ$  で一致する時、主応力は最大になる。
- (2) 極値統計解析により推定される応力集中係数は 1.31 であった。

#### 参考文献

- (1) 原浩之, 楠川量啓, 高坂達郎, “多結晶圧電体における電界誘起応力の有限要素解析”, 日本機械学会中国四国支部第 55 期総会・講演会(2017)