PMNT和PZNT单晶的压电模量表示中的问题探讨*

罗豪苏** 王评初 殷之文
(中国科学院上海硅酸盐研究所无机功能材料开放实验室,上海 201800)

摘 要 对于具有 $3m$ 点群结构的 PMNT和 PZNT单晶,按照三方晶系标准定向的要求,z 轴应取[111]方向。但一些文献中用 d_{33} 来表示在(100)晶面上受到正应力作用时的压电模量,这种表示中 z 轴的取向不符合三方晶系的标准定向,影响了 PMNT和 PZNT单晶压电性能的研究。文章详细讨论了具有 $3m$ 点群结构的晶体,在其(100)晶面上受正应力作用时的压电模量和机电耦合因数的表示关系。通过对压电系数和机电耦合因数的分析,以加深对 PMNT和 PZNT单晶压电性能的理解和认识。

关键词 PMNT单晶;PZNT单晶;压电模量;机电耦合因数
分类号 O73

1 引言

美国著名的《科学》杂志在1997年3月介绍了材料科学领域的一项重大突破[1],美国宾州大学在实验室成功地研制出了弛豫铁电单晶 [$x\,Pb(Zn_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$(1-x)\,PbTiO_3$,即 PZNT和 $x\,Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$(1-x)\,PbTiO_3$,即 PMNT],其压电系数 d'_{33}、机电耦合因数 k'_{33} 比通常为 600 pC/N和 70%左右的 PZT压电陶瓷要高出许多,分别达到 2 000 pC/N和 92%,其应变量比通常所用的压电陶瓷高出10倍,达到了1.7%。可以预料压电单晶的优异性能,使得它可以替代传统的压电陶瓷,在声纳、驱动器、超声成像等换能器件上得到广泛的应用。在美国海军研究办公室(ONR)和美国国防尖端研究项目署(DARPA)的推动下,有关弛豫铁电单晶的材料制备,性能和应用研究在世界范围内兴起了一个热潮。

对于具有 $3m$ 点群结构的弛豫铁电体 PMNT和 PZNT单晶,它的自发极化为[111]方向,但是人们发现当受到正应力作用时,(100)面上压电模量比(111)面上压电模量的值要大,这一特性,可能与晶体在不同方向上电极化时的电畴运动的难易程度以及晶体的退极化特性有关。在弛豫铁电体 PMNT和 PZNT单晶的(100)面上受到正应力时,一些文献[2,3]用 d_{33} 来表示其压电模量,这一表示中 z 轴的取向不符合三方晶系的标准定向。对于具有 $3m$ 点群结构的 PMNT和 PZNT单晶,按照标准定向的规定其笛卡尔坐标系的 z 轴,应取[111]方向。由正压电效应的表示式 $P_z = d_{33}T_{zz}$ 可知,在(111)面上施加单位正应力 T_{zz} 时,产生的电极化强度 P_z 和 T_{zz} 成线性关系,其比例系数才是压电模量 d_{33}。故一些文献中用 d_{33} 来表示三方坐标系下的(100)晶面上所受正应力时的压电模量,这是一种错误的表示方法,容易引起人们对

收稿日期: 1999-02-14
* 国家自然科学基金重大资助项目(59995520),国家自然科学基金面上资助项目(59872048),上海市重点基金资助项目(98JC14017)
** 男 1959年生 博士 研究员

$3m$ 点群结构的 PMNT和 PZNT单晶压电模量的错误理解。

本文详细地讨论了三方晶系的(100)面上受到正应力时的压电系数 d'_{33} 的表示式,希望能够促进对 PMNT和 PZNT单晶的压电性能和应用的研究。

2 PMNT和 PZNT单晶的压电模量

2.1 压电模量的 d_{33} 和 d'_{33}

在晶体表面施加应力 $\boldsymbol{T}$ 时,由正压电效应可知,晶体感生的电极化强度 $\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{T}$ 成线性关系

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{d} : \boldsymbol{T}$$

PMNT和 PZNT单晶的铁电相具有四方和三方两种结构,由于在接近准同型相界(MPB)附近的三方相结构的单晶的压电和机电耦合性能要明显好于四方相结构,所以通常都是制备的 PMNT和 PZNT弛豫铁电单晶具有 $3m$ 点群的三方相结构。对于三方结构的 PMNT和 PZNT单晶,其晶面可以用 $(hkl)_R$ 的面指数来表示,晶体的自发极化方向为 $[111]_R$。如果取 c_3 轴方向为此笛卡尔坐标系的 z 轴,m 面垂直于 x 轴,并且 x、y、z 符合右手规则。在笛卡尔坐标系下,压电模量矩阵为 (d_{ijk}),元素 d_{ijk} 对于 jk 可以对换,可以用二个指标表示成 d_{iJ},用群论的方法可以方便地求出 $3m$ 点群的晶体的压电模量矩阵的 (d_{iJ})[4]为

$$(d)_{3\times 6} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

其中独立的压电系数有 4个,分别为 d_{22}、d_{33}、d_{31}、d_{15}。式(1)中按 Voigt记法的 d_{iJ} 和 d_{ijk} 之间的关系见表 1。

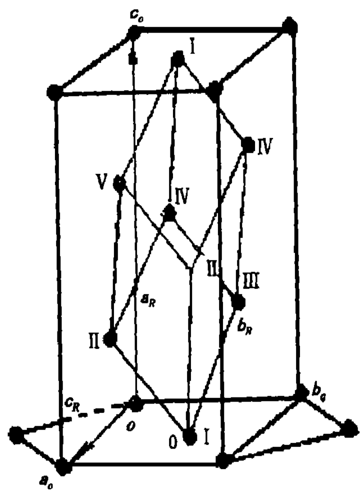
表 1 J 与 jk 的关系

J	1	2	3	4	5	6
jk	xx	yy	zz	yz	zx	xy

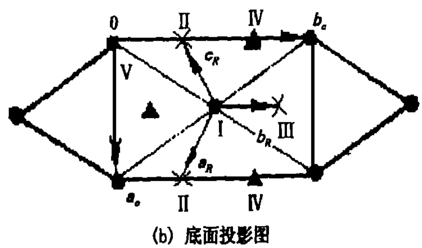
对于三方坐标系下的(100)的晶面,由于该面不和 c_3 对称轴(z 轴)垂直,故不能用 d_{33} 来表示(100)晶面受到正应力时的压电模量,文献[2,3]中 d_{33} 是一种错误的表示方法。当(100)晶面受到正应力作用时,如果用 d'_{33} 来表示一笛卡尔坐标系的 z 轴和(100)晶面的压电模量,则可以通过坐标变换来求出 d'_{33} 和式(1)中各元素之间的关系。

2.2 坐标系的选取

图 1为选取三方晶系 R 的一基矢为 $\boldsymbol{a}_R$、$\boldsymbol{b}_R$、$\boldsymbol{c}_R$ 的坐标系和基矢 $\boldsymbol{a}_o$、$\boldsymbol{b}_o$、$\boldsymbol{c}_o$ 的直角坐标系 o。



(a) 立体图



(b) 底面投影图

图 1 三方晶系 R 定向单胞 $\{a_R, b_R, c_R\}$ 和 o 定向单胞 $\{a_o, b_o, c_o\}$ 的相互关系示意图

图中 0、I、II、III、IV、V 为 o 定向单胞内的六个格点,它们的坐标为:

0:$[[000]]$,I:$\left[\left[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0\right]\right]$,II:$\left[\left[0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\right]\right]$,

III:$\left[\left[\frac{1}{2}\ \frac{5}{6}\ \frac{1}{3}\right]\right]$,IV:$\left[\left[0\ \frac{2}{3}\ \frac{2}{3}\right]\right]$,

V:$\left[\left[\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{2}{3}\right]\right]$

三方晶系 R 的基矢量 $\boldsymbol{a}_R$,$\boldsymbol{b}_R$,$\boldsymbol{c}_R$,与直角坐标系 o 的基矢 $\boldsymbol{a}_o$,$\boldsymbol{b}_o$,$\boldsymbol{c}_o$ 的关系为

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_o \\ \boldsymbol{b}_o \\ \boldsymbol{c}_o \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_R \\ \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{c}_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_R \\ \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{c}_R \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_R \\ \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{c}_R \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}^{-1}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_o \\ \boldsymbol{b}_o \\ \boldsymbol{c}_o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_o \\ \boldsymbol{b}_o \\ \boldsymbol{c}_o \end{pmatrix} \tag{2}$$

三方晶系 R的晶胞参数 $|\boldsymbol{a}_R| = |\boldsymbol{b}_R| = |\boldsymbol{c}_R| = a$; $\alpha=\beta=\gamma$ 令 $\cos\alpha = x$,由直角坐标系 o可作一笛卡尔坐标系 e,其基矢为 $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{a}_o / |\boldsymbol{a}_o|$, $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{b}_o / |\boldsymbol{b}_o|$, $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{c}_o / |\boldsymbol{c}_o|$,由式 (2)可得

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\boldsymbol{a}_o}{|\boldsymbol{a}_o|} \\ \frac{\boldsymbol{b}_o}{|\boldsymbol{b}_o|} \\ \frac{\boldsymbol{c}_o}{|\boldsymbol{c}_o|} \end{pmatrix} = \boldsymbol{C}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_R \\ \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{c}_R \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{a\sqrt{2-2x}} & 0 & -\frac{1}{a\sqrt{2-2x}} \\ -\frac{1}{a\sqrt{6-3x}} & \frac{2}{a\sqrt{6-3x}} & -\frac{1}{a\sqrt{6-3x}} \\ \frac{1}{a\sqrt{3+3x}} & \frac{1}{a\sqrt{3+3x}} & \frac{1}{a\sqrt{3+3x}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_R \\ \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{c}_R \end{pmatrix} \tag{3}$$

或

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_R \\ \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{c}_R \end{pmatrix} = \boldsymbol{C}^{-1}\begin{pmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{a\sqrt{2-2x}}{2} & -\frac{a\sqrt{6-3x}}{6} & \frac{a\sqrt{3+3x}}{3} \\ 0 & \frac{a\sqrt{6-3x}}{3} & \frac{a\sqrt{3+3x}}{3} \\ -\frac{a\sqrt{2-2x}}{2} & -\frac{a\sqrt{6-3x}}{6} & \frac{a\sqrt{3+3x}}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{pmatrix} \tag{4}$$

2.3　d'_{33}的变换关系

垂直于三方坐标系下的 (100)面的矢量,即为倒格矢 $\boldsymbol{c}^*$ 的方向,由式 (4)可知

$$\boldsymbol{c}^* = \boldsymbol{a}_R \times \boldsymbol{b}_R / V = a^2\left(-\frac{1}{6}\sqrt{6-3x}\sqrt{3+3x}\,\boldsymbol{i} - \frac{1}{6}\sqrt{2-2x}\cdot\sqrt{3+3x}\,\boldsymbol{j} + \frac{1}{6}\sqrt{2-2x}\sqrt{6-3x}\,\boldsymbol{k}\right)/V = \frac{a^2}{V}\sqrt{2-2x}\sqrt{6-3x}\sqrt{3+3x}\cdot\left(-\frac{1}{\sqrt{2-2x}}\boldsymbol{i} - \frac{1}{\sqrt{6-3x}}\boldsymbol{j} + \frac{1}{\sqrt{3+3x}}\boldsymbol{k}\right)$$

其中 V为平行六面体 $\{\boldsymbol{a}_R, \boldsymbol{b}_R, \boldsymbol{c}_R\}$的体积。

对坐标系 e作一正交变换 $\boldsymbol{B}$,使新的笛卡尔坐标系 e' 的 z 轴取 $\boldsymbol{c}^*$ 方向,它垂直于原三方

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{i}' \\ \boldsymbol{j}' \\ \boldsymbol{k}' \end{pmatrix} = \boldsymbol{B}\begin{pmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2(1-x)(2-x)}{\sqrt{(8-5x)(4-x-x^2)}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{6(2-x)(1-x)}}{8-5x} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2(2-x)(1-x^2)}}{4-x-x^2} \end{pmatrix}\cdot$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2-2x}} & \frac{1}{\sqrt{6-3x}} & \frac{(8-5x)\sqrt{3+3x}}{6(2-x)(1-x)} \\ \frac{1}{\sqrt{6-3x}} & -\frac{1}{\sqrt{2-2x}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2-2x}} & -\frac{1}{\sqrt{6-3x}} & \frac{1}{\sqrt{3+3x}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{(2-x)\sqrt{2-2x}}{\sqrt{8-5x}(4-x-x^2)} & \frac{2(1-x)\sqrt{(2-x)}}{\sqrt{3(8-5x)}(4-x-x^2)} & \sqrt{\frac{(8-5x)(1+x)}{3(4-x-x^2)}} \\ \sqrt{\frac{2-2x}{8-5x}} & -\sqrt{\frac{6-3x}{8-5x}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{(2-x)(1+x)}{4-x-x^2}} & -\sqrt{\frac{2(1-x^2)}{3(4-x-x^2)}} & \sqrt{\frac{2(2-x)(1-x)}{3(4-x-x^2)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{pmatrix} \tag{5}$$

坐标系下的(100)面。在后面将证明，d_{33}的值和式(5)中 $\boldsymbol{i}'$、$\boldsymbol{j}'$ 轴的选取无关。

在操作矩阵为 $\boldsymbol{D}(\hat{\boldsymbol{R}})$的正交刚性变换的操作$\hat{\boldsymbol{R}}$作用下，笛卡尔坐标系 e中的压电模量矩阵 $\boldsymbol{d}$和笛卡尔坐标系 e'中的压电模量矩阵 $\boldsymbol{d}'$有如下关系

$$(\boldsymbol{d}') = \boldsymbol{D}(\hat{\boldsymbol{R}})(\boldsymbol{d})\boldsymbol{F}(\hat{\boldsymbol{R}})^{-1} = \boldsymbol{D}(\hat{\boldsymbol{R}})(\boldsymbol{d})\boldsymbol{H}(\hat{\boldsymbol{R}})^{T} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{D}(\hat{\boldsymbol{R}}) = \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(2-x)\sqrt{2-2x}}{\sqrt{(8-5x)}(4-x-x^2)} & \frac{2(1-x)\sqrt{(2-x)}}{\sqrt{3(8-5x)}(4-x-x^2)} & \sqrt{\frac{(8-5x)(1+x)}{3(4-x-x^2)}} \\ \sqrt{\frac{2-2x}{8-5x}} & -\sqrt{\frac{6-3x}{8-5x}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{(2-x)(1+x)}{4-x-x^2}} & -\sqrt{\frac{2(1-x^2)}{3(4-x-x^2)}} & \sqrt{\frac{2(2-x)(1-x)}{3(4-x-x^2)}} \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{H}(\hat{\boldsymbol{R}}) = \begin{pmatrix} b_{11}^2 & b_{12}^2 & b_{13}^2 & b_{12}b_{13} & b_{13}b_{11} & b_{11}b_{12} \\ b_{21}^2 & b_{22}^2 & b_{23}^2 & b_{22}b_{23} & b_{23}b_{21} & b_{21}b_{22} \\ b_{31}^2 & b_{32}^2 & b_{33}^2 & b_{32}b_{33} & b_{33}b_{31} & b_{31}b_{32} \\ 2b_{21}b_{31} & 2b_{22}b_{32} & 2b_{23}b_{33} & b_{22}b_{33}+b_{23}b_{32} & b_{21}b_{33}+b_{23}b_{31} & b_{21}b_{32}+b_{22}b_{31} \\ 2b_{31}b_{11} & 2b_{32}b_{12} & 2b_{33}b_{13} & b_{12}b_{33}+b_{13}b_{32} & b_{11}b_{33}+b_{13}b_{31} & b_{11}b_{32}+b_{12}b_{31} \\ 2b_{11}b_{21} & 2b_{12}b_{22} & 2b_{13}b_{23} & b_{12}b_{23}+b_{13}b_{22} & b_{11}b_{23}+b_{13}b_{21} & b_{11}b_{22}+b_{11}b_{21} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{H}(\hat{\boldsymbol{R}})$为操作$\hat{\boldsymbol{R}}$的 W. L. bond矩阵

这样由式(6)可知

$$d'_{33} = (b_{31}\ b_{32}\ b_{33}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{31}^2 \\ b_{32}^2 \\ b_{33}^2 \\ b_{32}b_{33} \\ b_{33}b_{31} \\ b_{31}b_{32} \end{pmatrix} = (b_{31}\ b_{32}\ b_{33}) \begin{pmatrix} d_{15}b_{33}b_{31} - 2d_{22}b_{31}b_{32} \\ d_{22}(b_{32}^2 - b_{31}^2) + d_{15}b_{32}b_{33} \\ d_{31}(b_{31}^2 + b_{32}^2) + d_{33}b_{33}^2 \end{pmatrix}$$

$$= d_{15}(b_{32}^2 + b_{31}^2)b_{33} + d_{22}(b_{32}^2 - 3b_{31}^2)b_{32} + d_{31}(b_{31}^2 + b_{32}^2)b_{33} + d_{33}b_{33}^3 \tag{8}$$

将式(7)中的 b_{ij}代入后得

$$d'_{33} = \frac{8+3x-5x^2}{3(4-x-x^2)}\sqrt{\frac{2(2-x)(1-x)}{3(4-x-x^2)}}(d_{15}+d_{31}) + \frac{16+9x-7x^2}{3(4-x-x^2)}\sqrt{\frac{2(1-x^2)}{3(4-x-x^2)}}d_{22} + \left[\frac{2(2-x)(1-x)}{3(4-x-x^2)}\right]^{\frac{3}{2}}d_{33} \tag{9}$$

当三方晶系 R 的晶胞参数的 $\alpha=\beta=\gamma$约为 90°时，$x=\cos\alpha=0$,

$$d'_{33} = \frac{1}{3\sqrt{3}}\left(2d_{15} + 2d_{31} + \frac{3}{2}\sqrt{2}d_{22} + d_{33}\right) \tag{10}$$

由于 PMNT或 PZNT单晶从铁电相($m3m$点群)到铁电相($3m$点群)的变化中 α接近 90°，故式(10)为 PMNT或 PZNT单晶的(100)面上受到正应力作用时，其压电模量的近似表达式。需要进一步说明的是，d'_{33}的

表示式与笛卡尔坐标系 e' 的 x' 轴和 y' 轴的选取无关,这不仅可以从 $d'_{33}= P'_z / T'_{zz}$的物理意义来说明,也可以直接通过旋转变换来得到证明,即笛卡尔坐标系 e',如果绕 z' 轴旋转 θ 角变换成笛卡尔坐标系 e'',仍然有 $d''_{33}= d'_{33}$。令 $\cos\theta= x$,则

$$\boldsymbol{D}(\hat{\boldsymbol{R}})=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x & -y & 0\\ y & x & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}(\hat{\boldsymbol{R}})=\begin{pmatrix}x^2 & y^2 & 0 & 0 & 0 & -xy\\ y^2 & x^2 & 0 & 0 & 0 & xy\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & x & y & 0\\ 0 & 0 & 0 & -y & x & 0\\ xy & -xy & 0 & 0 & 0 & x^2-y^2\end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{d}'')=\boldsymbol{D}(\hat{\boldsymbol{R}})(\boldsymbol{d}')\boldsymbol{H}(\hat{\boldsymbol{R}})^T=$$

$$\begin{pmatrix}x & -y & 0\\ y & x & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d'_{11} & d'_{12} & d'_{13} & d'_{14} & d'_{15} & d'_{16}\\ d'_{21} & d'_{22} & d'_{23} & d'_{24} & d'_{25} & d'_{26}\\ d'_{31} & d'_{32} & d'_{33} & d'_{34} & d'_{35} & d'_{36}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}x^2 & y^2 & 0 & 0 & 0 & xy\\ y^2 & x^2 & 0 & 0 & 0 & -xy\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & x & -y & 0\\ 0 & 0 & 0 & y & x & 0\\ -xy & xy & 0 & 0 & 0 & x^2-y^2\end{pmatrix}$$

若 $\sin\theta= y$,则变换后有

$$\boldsymbol{d}''_{33}=(001)\begin{pmatrix}d'_{11} & d'_{12} & d'_{13} & d'_{14} & d'_{15} & d'_{16}\\ d'_{21} & d'_{22} & d'_{23} & d'_{24} & d'_{25} & d'_{26}\\ d'_{31} & d'_{32} & d'_{33} & d'_{34} & d'_{35} & d'_{36}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$$

$$=\boldsymbol{d}'_{33}$$

2.4 机电耦合系数 $\boldsymbol{k}_{33}$

和 d_{33}的表示一样,一些文献[2,3,5]中有关机电耦合系数 k_{33}的表示也存在着问题。这是因为按照纵向长度伸缩振动的压电振子的 k_{33}的定义有

$$k_{33}^2= d_{33}^2/X_{33}s_{33}$$

如前面所述,按照 d_{33}的定义,笛卡尔坐标系的 z 轴应取三方晶系 PMNT和 PZNT单晶的 [111]方向,所以由垂直于(100)面为 z' 轴所定义的 d'_{33}而得到的 k'_{33}与 k_{33}的标准定义不同,文献中有关 k_{33}的表示是一个错误的表示。

文献报道,三方晶系的 PMNT和 PZNT单晶的 k_{33}可以高达 92%,其实际意义是对由 z 轴取垂直于(100)面的纵向长度伸缩振动的压电振子,它的 k_{33}为 92%。

3 结论

一些文献中用 d_{33}来表示具有 $3m$ 点群结构的 PMNT和 PZNT晶体的(100)面上受到正应力时的压电模量,这是一种错误的表示方法。不能用 d_{33}来表示具有三方结构的晶体(100)面上受到正应力时的压电模量。有关纵向长度伸缩振动的压电振子的机电耦合因数 k_{33}的表示也存在着同样的问题。

如果用 d'_{33}来表示(100)晶面受到正应力时的压电模量,通过坐标变换可以得到 d'_{33}和标准 d_{ij}之间的关系式。通过对 d'_{33}变换分析,可以知道它包含有 $3m$ 点群的所有压电振动模式,这样可以准确地分析具有 $3m$ 点群结构的 PMNT和 PZNT单晶的各种振动模式,指导单晶的压电性能和应用研究。

参 考 文 献

1 Robert F. Service. shape-changing crystals get shiftier. Science, 1997, 275: 1 878

2 Park S E, Thomas R. Shrout. characteristics of relaxor-based pieezoelectric single crystals for ultrasonic transducers. IEEE Trans on Ultra Ferr, and Freq Cont, 1997, 44: 1 140~ 1 147

3 Jun Kuwata. Phase transitions in the Pb($Zn_{1/3}Nb_{2/3}$)O_3-$PbTiO_3$ system. Ferroelectrics, 1981, 37: 579~ 582

4 陈 纲,廖理几. 晶体物理学基础. 北京: 科学出版社, 1992

5 Senji Shimanuki, Shiroh Saito. Single crystal of the Pb($Zn_{1/3}Nb_{2/3}$)O_3-$PbTiO_3$ system grown by the vertical bridgeman methaod and its characterization. Jpn J Appl Phys, 1998, 37, 3 382~ 3 385

(下转第 298页)

Science Bulletin, 1993, 38 (14): 1 168~1 170

4 李景德 . 铁电测量数字分析法 . 中山大学学报, 1981(3): 40~ 45

5 Merz W J. Ferroelectricity of BT single crystal. Phys Rev, 1954, 95 690~ 698

6 李景德, 李家宝, 符史流 . 时域方法在铁电相变研究中的应用 . 物理学报, 1993, 42 (4): 674~ 680

Difficulty of Phenomenological Theory of Ferroelectricity

Shen Han Sun Shaofeng Li Jingde

(Dept. Physics Zhongshan University, Guangzhou, 510275)

Abstract The phenomenoloeical theory of ferroelectricity is just an early simple mathematical model. Quantitative comparison of ferroelectric hysteresis loop between experiment and theory is given in this article. It proves that this model is too simple to be used to deal with and explain the experimental results in material research.

Key words ferroelectricity; ferroelectric hysteresis loop; phenomenological theory

(上接第 285页)

Some Problems in the Expressions of Piezoelectric Properties of PMNT and PZNT Single Crystals

Luo Haosu Wang Pingchu Yin Zhiwen

(Shanghai Insitute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghain, 201800)

Abstract For the structure of 3m pint group in PMNT and PZNT single crystals the z-axis should be along [111] according to the standard orientation of rhombohedral system. But in some references d_{33} was expressed as the piezoelectric coefficieint for the normal stress applied on (100) face, where z-axis is not corresponding with the standard orientation or rhombohedral system. The formulation of piezoelectric coefficient d'_{33} and electromechanical coupling coefficient k'_{33} are deducted by the corrdination transformation, while the normal stress is applied on the (100) face of the crystal structure of $3m$ point group, in order to study the piezoelectric properties of PMNT and PZNT single crysuals further.

Key words PMNT single crystal; PZNT single crystal; piezoelectric coefficient; electromaechanical coupling coefficient