

Моделирование процесса распространения тепла в керамических образцах титаната бария при воздействии импульса лазерного излучения

М. Д. Попова, А. П. Буровихин, А. И. Дедык

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

antonburovihhin@mail.ru

Аннотация. В работе проведено моделирование процесса распространения тепла в керамических образцах титаната бария различной геометрии при воздействии теплового импульса лазерного излучения для измерений пирозлектрических коэффициентов. Расчёты показали, что неоднородность распределения температуры по образцу, может привести к существенным изменениям результатов вычисления пироккоэффициентов.

На основании полученных результатов моделирования, сделаны выводы о необходимости доработки методики измерения пирозлектрических откликов и расчёта пирозлектрических коэффициентов в объёмных керамических образцах. Для более равномерного распределения температуры в образцах предложено: уменьшить площадь и толщину исследуемых образцов, увеличить область нагрева лазером, уменьшить теплообмен между образцом и измерительной ячейкой.

Ключевые слова: пирозлектричество; лазерный нагрев; моделирование распространения тепла; титанат бария

I. ВВЕДЕНИЕ

Сегнетоэлектрические материалы со структурой перовскита, широко применяются в технике [1–2]. Одним из наиболее перспективных направлений применения в настоящее время является использование перовскитов для устройств на основе пирозлектрического и связанного с ним электрокалорического эффектов [3–4]. Создание устройств на основе этих эффектов требует высоких скоростей изменения температуры [5].

Существует множество способов измерения пирозлектрических свойств материалов [6], однако практически все эти способы предполагают проведение измерений либо при постоянной температуре, либо при небольших скоростях изменения температуры (0,5–5 К/мин).

Величина поляризации P сегнетоэлектрического материала зависит от скорости изменения температуры [7], следовательно, и пироккоэффициент $p = \partial P / \partial T = (\partial P / \partial t) \cdot (\partial t / \partial T)$ также будет зависеть от скорости изменения температуры.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант номер FSEE – 2022-0017).

Нами была предложена методика измерения пирозлектрических свойств материалов при скоростях изменений температур (~100 К/с) [8].

Важным условием корректного измерения пирозлектрических свойств материалов является равномерное распределение температуры по толщине образца [9]. Это условие достаточно сложно достижимо при использовании быстрого нагрева. Для определения неравномерности нагрева было проведено моделирование распространения тепла в образце при воздействии импульса лазерного излучения и на основе полученных результатов проведены корректировка методики измерения и интерпретировании результатов пирозлектрических измерений.

II. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА

Для проведения моделирования использовался программный пакет COMSOL Multiphysics. В качестве материала образца для проведения моделирования был выбран классический представитель перовскитных материалов – титанат бария. Титанат бария (BaTiO_3) является одним из наиболее изученных сегнетоэлектрических материалов, что позволяет проводить моделирование по его известным физическим параметрам и сравнивать результаты моделирования с результатами других электрических измерений.

Моделируемый образец представляет собой плоскопараллельную структуру цилиндрической формы («таблетка») на основе керамики титаната бария, с металлическими электродами. В качестве электродов использовалась медь, сам образец располагался в измерительной ячейке на латунной подложке.

Для моделирования использовались следующие параметры материалов: плотность ρ , теплопроводность k , теплоёмкость C (таблица).

ТАБЛИЦА I ПАРАМЕТРЫ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Материал	BaTiO_3	Медь	Латунь
ρ , Кг/м ³	5800	8960	8560
k , Вт/(м·К)	3	400	200
C , Дж/(кг·К)	440	385	377

Так как наш образец имеет цилиндрическую форму и симметричен относительно оси Z (рис. 1), то целесообразно для экономии вычислительных ресурсов и ускорения времени расчёта проводить моделирование в осесимметричной системе координат.

Для моделирования распространения тепла использовался встроенный модуль COMSOL Multiphysics – Heat Transfer, в котором решаются уравнения теплопроводности, записанные в следующем виде:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$

где k – коэффициент теплопроводности, T – температура, ∇T – градиент температуры, а \mathbf{q} – плотность теплового потока, ρ – плотность материала, C_p – теплоёмкость материала, Q – количество теплоты, подводимое к образцу, t – время.

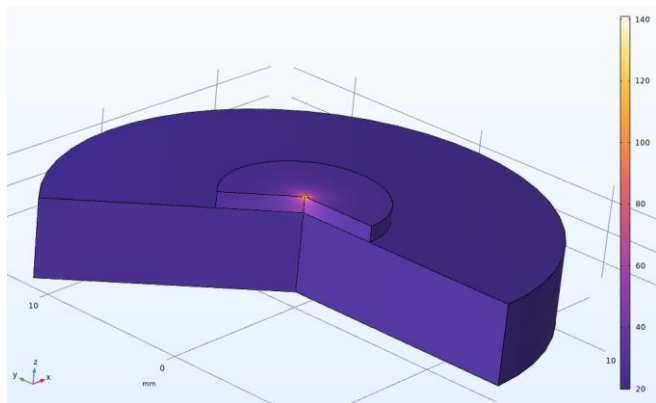


Рис. 1. Моделируемая структура в разрезе. Маленький цилиндр сверху – образец, большой цилиндр снизу – латунная подложка

Начальная температура образца составляла 20 °С. Подводимая от лазера мощность (P) варьировалась в пределах от 0,25 до 1 Вт. Диаметр лазерного пучка составлял 1 мм. Толщина образца (h) изменялась от 0,5 мм до 1 мм. Толщина электродов (d) изменялась в пределах от 1 мкм до 4 мкм. В модели учитывались потери тепла на конвекцию и излучение, а также неидеальность теплового контакта образец-подложка (ячейка). Время (t) моделируемого процесса распространения тепла ограничивалось 1 секундой. Примеры полученных результатов расчёта представлены на рис. 2–5. На этих рисунках изображено поперечное сечение образцов и распределение изотерм в поперечном сечении. При этом центр образца и нижняя поверхность образца соответствуют нулю по осям абсцисс и ординат соответственно. Справа от координатной сетки в градусах Цельсия изображена цветовая температурная шкала.

В результате моделирования распространения тепла в программном пакете COMSOL были получены следующие результаты:

- Распределение температуры по толщине образца является неравномерным, вследствие нескольких факторов: маленькой площади нагрева верхней границы образца; относительно небольшой теплопроводностью титаната бария и высокой теплопроводностью латунной подложки (в рабочей ячейке). Показанная на рис. 2–5 неравномерность распределения температуры может в значительной степени повлиять на расчёт пирозлектрических характеристик материала.

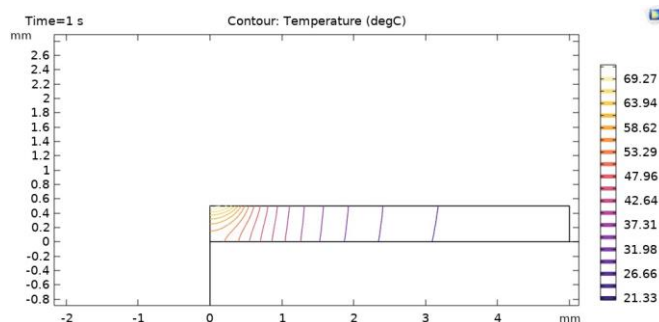


Рис. 2. Изотермический профиль моделируемого образца при следующих параметрах: $t = 1$ с, $P = 0,25$ Вт, $h = 0,5$ мм, $d = 2$ мкм

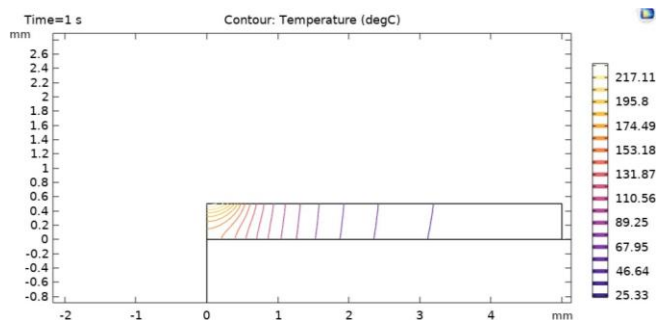


Рис. 3. Изотермический профиль моделируемого образца при следующих параметрах: $t = 1$ с, $P = 1$ Вт, $h = 0,5$ мм, $d = 2$ мкм

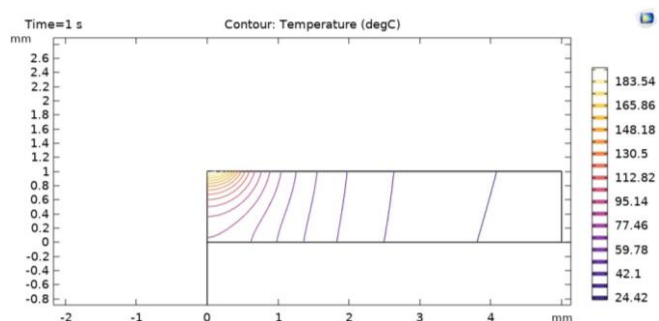


Рис. 4. Изотермический профиль моделируемого образца при следующих параметрах: $t = 1$ с, $P = 1$ Вт, $h = 1$ мм, $d = 2$ мкм

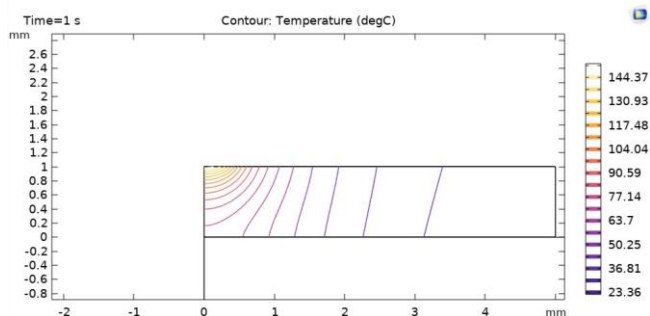


Рис. 5. Изотермический профиль моделируемого образца при следующих параметрах: $t = 1$ с, $P = 1$ Вт, $h = 1$ мм, $d = 4$ мкм

- Сравнение профилей распределения изотерм на рис. 2 и 3 позволяет сказать, что мощность лазерного пучка не влияет на характер распределения температуры, а только на само значение температуры.
- Толщина образца оказывает существенное влияние на распределение температуры (рис. 3 и 4). В зависимости от толщины образца наблюдаются различные профили распределения температуры. Более однородные изотермы по толщине образца наблюдается при его меньшей толщине.
- Рис. 4 и 5 демонстрируют, что толщина электродов существенно влияет на характер распределения и значение температуры. Чем толще электроды, тем ниже температура поверхности и изотермы более неравномерны по толщине (наклон изотерм). Влияние толщины электрода при проведении измерений ранее не учитывалась, однако для корректной интерпретации результатов и сравнения различных образцов, толщина электродов должна быть одинаковой на всех образцах.

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам проведённого моделирования были сделаны следующие выводы:

Распределение температуры по толщине образца при его нагреве является неравномерным, что может привести к значительным погрешностям при расчёте пирокэффициента.

Для устранения неравномерности распределения температуры предложено:

- Снизить теплообмен между образцом и подложкой путём добавления буферного слоя различной геометрии.
- Уменьшить площадь образца до размера пятна от лазерного источника.

- Уменьшить толщину образца до минимальных размеров с точки зрения механической прочности.
- Увеличить область нагрева, путём уменьшения удельной мощности излучения лазерного источника.
- Осуществлять контроль толщины металлических электродов, которые должны быть тонкими и иметь постоянный размер для всех образцов.

Выводы, сделанные в данной работе, будут использоваться в дальнейшем для изменения конструкции и создания новой измерительной ячейки, а также для усовершенствования методики измерения пирозлектрических откликов при импульсном воздействии лазерного излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Wu T., Gao P. Development of perovskite-type materials for thermoelectric application // *Materials*. 2018. Vol. 11. № 6. P. 999.
- [2] Wu T., Pisula W., Rashid M.Y.A., Gao P. Application of perovskite-structured materials in field-effect transistors // *Advanced Electronic Materials*. 2019. Vol. 5. № 12. P. 1900444.
- [3] Valant M. Electrocaloric materials for future solid-state refrigeration technologies // *Progress in Materials Science*. 2012. Vol. 57. № 6. pp. 980-1009.
- [4] Poprawski W., Gnutek Z., Radojewski J., Poprawski R. Pyroelectric and dielectric energy conversion—A new view of the old problem // *Applied Thermal Engineering*. 2015. Vol. 90. pp. 858-868.
- [5] Karmanenko S., Semenov A., Dedyk A., Es'kov A., Ivanov A., Beliaevskiy P., Pavlova Yu., Nikitin A., Starkov I., Starkov A., Pakhomov O. New Approaches to Electrocaloric-Based Multilayer Cooling. In the book *Electrocaloric Materials Ch. VIII*. Berlin Heidelberg: Springer, 2014, pp. 183-223.
- [6] Jachalke S., Mehner E., Stoecker H., Hanzig J., Sonntag M., Weigel T., Leisegang T., Meyer D.C. How measure the pyroelectric coefficient? // *Appl. Physics Rev.* 2017. Vol. 4, pp. 021303-1 – 021303-17.
- [7] Mylnikov I.L., Semenov A.A., Dedyk A.I., Pakhomov O.V., Belyavskiy P.Yu., Burovikhin A.P., Pavlova Yu.V., Ustinov A.B. Methods for assessing pyroelectric current in ferroelectrics with first order phase transition by dielectric measurements // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. Vol. 4, P. 077006.
- [8] Буровихин А.П., Мишинёв М.А., Дедык А.И., Мыльников И.Л. Пирозлектрические измерения конденсаторных структур на основе керамики ВаТiО3 // *СПБНТОРЭС: труды ежегодной НТК*. 2021. № 1. С. 389-392.
- [9] Буш А.А. Пирозлектрический эффект и его применения. Москва: технический университет, 2005. 212 с.