文章编号:1000-582X(2003)10-0108-04

压电/铁电陶瓷材料夹杂问题的力电耦合场*

贺岩松[1],范镜泓[2],陈 旭[1]
(1.重庆大学 机械工程学院,重庆 400044;2.重庆大学 资源与环境学院,重庆 400044)

摘 要:无限大基体中的椭球体夹杂问题是细观力学的核心问题。采用Eshelby方法,得到通过Green函数表征的压电Eshelby张量的表达关系;进而推导以应变及电位移为自变量的无限大基体中的同性及异性椭球体夹杂的力电耦合场问题解以及压电夹杂的约束张量。为建立铁电材料电畴翻转模型及材料的非线性力电耦合本构关系奠定基础。

关键词:铁电材料;夹杂;力电耦合;约束张量
中图分类号:O 334.1 **文献标识码**:A

铁电陶瓷是由大量包含电畴的晶粒组成的聚合体,根据细观力学的观点,可以把各个晶粒或电畴作为夹杂来处理,从而可以求解其内部的力电耦合场。Eshelhy[1-2]巧妙地将求解无穷大线弹性介质中含有一本征应变的夹杂问题,转化为求解在夹杂表面上受本征应力作用的弹性力学问题,从而得到采用Green函数表征的介质中各点处的位移、应力和应变的解析解,并得到其结论:无穷大线弹性介质中含有一具有本征应变的椭球夹杂,如果椭球夹杂的本征应变是均匀的,则夹杂内的实际应变也是均匀的。Deeg[3],Wang[4],Dunn[5-7]等人采用与Eshelby类似的方法对压电介质的夹杂问题进行了研究,在无穷大压电、铁电介质中含有一个具有本征应变和本征电场的椭球,当夹杂中的本征应变与本征电场均匀时,夹杂中的实际应变与实际电场也是均匀的,本征场与实际场之间的关系也可以用类似于Eshelby的关系表征,即由压电Eshelby张量来表示。在此基础上,本文推导了以应变及电位移为自变量的无限大基体中的同性及异性椭球体夹杂的力电耦合场问题解以及压电夹杂的约束张量,为建立铁电材料电畴翻转模型,研究铁电非线性力电耦合特性奠定基础。

1 椭球夹杂问题的压电Eshelby张量

压电Eshelby张量的表述可以选取不同的自变量来构成相应的描述体系,如Dunn[6]等采用的是以应变和电场作自变量来进行描述;考虑到应变与电位移在物理意义上的相似性,此处采用应变与电位移作为自变量,其方法与Eshelby的研究方法一致,以下作一简单表述。

无限大电压介质中的椭球夹杂用下式表示:

$$\left(\frac{x_1}{a}\right)^2+\left(\frac{x_2}{b}\right)^2+\left(\frac{x_3}{c}\right)^2=1 \tag{1}$$

其中:a、b、c为椭球体的三个半长轴,空间直角坐标x_i分别取为相应的长轴方向。假设夹杂在无应力及电场条件下,产生一个本征应变与电位移($\varepsilon_{ij}^T, D_i^T$),同时设基体无变形,应力和电场在无限远处趋于"0",记(ε_{ij}^c, D_i^c)为夹杂在受到基体的约束情况下的实际应变与电位移,参照Eshelby的结论,有:

$$\begin{bmatrix}\varepsilon_{ij}^c\\ D_i^c\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}S_{ijkl}^{\varepsilon\varepsilon} & S_{kij}^{\varepsilon D}\\ S_{ikl}^{D\varepsilon} & S_{ik}^{DD}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^T\\ D_k^T\end{bmatrix} \tag{2}$$

其中$S^{\varepsilon\varepsilon}$,$S^{\varepsilon D}$,$S^{D\varepsilon}$,$S^{DD}$称为压电Eshelby张量。

按照Eshelby对弹性材料的处理方法,通过"切割—变形—拼接"等步骤,可以得到压电夹杂问题的解,基本过程如下[8,9]:

步骤1:把夹杂从基体中切割出来,放到另外$C_{ijkl}^D=0$,$h_{kij}=0$,$\beta_{ij}^\varepsilon=0$的介质中,允许夹杂自由变形,得到

* 收稿日期:2003-07-20
作者简介:贺岩松(1968-),男,湖南双丰人,重庆大学副教授,博士生,主要从事铁电材料本构关系、车辆系统动力学领域的科研和教学工作。

本征量($\varepsilon_{ij}^T, D_i^T$)。

步骤2：通过在夹杂上施加应力 $-\sigma_{ij}^p$ 及电位移 $-D_i^p$，使夹杂的应变和电场为0，即 $\varepsilon_{ij}=0, E_i=0$。由压电方程，知：

$$\left.\begin{aligned} -\sigma_{ij}^p &= C_{ijkl}^E(\varepsilon_{kl}-\varepsilon_{kl}^T) - e_{kij}E_k \\ -D_i^p - D_i^T &= e_{ikl}(\varepsilon_{kl}-\varepsilon_{kl}^T) + K_{ik}^\varepsilon E_k \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

因为 $\varepsilon_{ij}=0, E_i=0$，从而有：

$$\left.\begin{aligned} \sigma_{ij}^p &= C_{ijkl}^E\varepsilon_{kl}^T \\ D_i^p &= -D_i^T + e_{ikl}\varepsilon_{kl}^T \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

($-\sigma_{ij}^p$, $-D_i^p$) 是通过在夹杂表面施加力和电荷来实现的：

$$\left.\begin{aligned} t_i &= -\sigma_{ij}^p n_j \\ Q &= D_i^p n_i \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

其中 n_i 为夹杂单位外法线方向。

步骤3：把夹杂拼接回无穷大介质中，为了抵消步骤2中的面力与电荷，在夹杂表面需施加力 $f_i=\sigma_{ij}^p n_j$ 及电荷 $q=-D_i^p n_i$，由此夹杂恢复到切割前的形状。由于基体的约束作用，在夹杂和基体中任意位置的位移 $u_i(x_j)$ 和电势 $\phi(x_j)$ 可以用 Green 函数表示：

$$\left.\begin{aligned} u_i(x) &= \int_{S'}[G_{ij}^{uf}(x-x')f_j(x')]\mathrm{d}S' + \\ &\int_{S'}[G_{ij}^{uq}(x-x')q(x')]\mathrm{d}S' \\ \phi(x) &= \int_{S'}[G_j^{\phi f}(x-x')f_j(x')]\mathrm{d}S' + \\ &\int_{S'}[G^{\phi q}(x-x')q(x')]\mathrm{d}S' \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

其中 $f_i=\sigma_{ij}^p n_j, q=-D_i^p n_i$。

对上两式取差分，并由定义：$\varepsilon_{ij}=\frac{1}{2}(u_{i,j}+u_{j,i})$ 及 $E_i=-\phi_{,i}$，可得 E_i^c 及 ε_{ij}^c 的表达式：

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{ij}^c \\ E_i^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{ijpq}^{uf} & P_{qij}^{uq} \\ P_{ipq}^{\phi f} & P_{iq}^{\phi q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{pq}^p \\ D_q^p \end{bmatrix} \tag{7}$$

其中：

$$\left.\begin{aligned} P_{ijpq}^{uf} &= -\int_{V'}\left[\frac{\partial G_{ip}^{uf}(x-x')}{\partial x_j \partial x_q}\right]_{(i,j)(p,q)}\mathrm{d}V' \\ P_{qij}^{uq} &= \int_{V'}\left[\frac{\partial G_{i}^{uq}(x-x')}{\partial x_j \partial x_q}\right]_{(i,j)}\mathrm{d}V' \\ P_{ipq}^{\phi f} &= -\int_{V'}\left[\frac{\partial G_{p}^{\phi f}(x-x')}{\partial x_i \partial x_q}\right]_{(p,q)}\mathrm{d}V' \\ P_{iq}^{\phi q} &= -\int_{V'}\left[\frac{\partial G^{\phi q}(x-x')}{\partial x_i \partial x_q}\right]\mathrm{d}V' \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

此处下标(i, j)表示关于 i, j 是对称的。

将(4)代入(7)式，有：

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{ij}^c \\ E_i^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{ijpq}^{uf} & P_{qij}^{uq} \\ P_{ipq}^{\phi f} & P_{iq}^{\phi q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{pqmn}^E & 0 \\ e_{qmn} & -\delta_{qm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{mn}^T \\ D_m^T \end{bmatrix} \tag{9}$$

要将(9)与(2)式相比较，以得到张量 S 的表达式，须先把 E_i^c 表示成($\varepsilon_{ij}^c, D_i^c$)的关系，由含本征量的第二类压电方程，有：

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{kl}^c \\ D_k^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{klij} & 0 \\ e_{kij} & K_{ki}^\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{ij}^c \\ E_i^c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -e_{kmn} & \delta_{km} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{mn}^T \\ D_m^T \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} I_{klij} & 0 \\ e_{kij} & K_{ki}^\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{ijpq}^{uf} & P_{qij}^{uq} \\ P_{ipq}^{\phi f} & P_{iq}^{\phi q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{pqmn}^E & 0 \\ e_{qmn} & -\delta_{qm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{mn}^T \\ D_m^T \end{bmatrix} +$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -e_{kmn} & \delta_{km} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{mn}^T \\ D_m^T \end{bmatrix} =$$

$$\left\{\begin{bmatrix} P_{iklq}^{uf}C_{pqmn}^E + e_{qmn}P_{klq}^{uq} & -P_{klm}^{uq} \\ e_{kij}P_{ipq}^{\phi f} + K_{ki}^\varepsilon P_{ipq}^{\phi f})C_{pqmn}^E + & \\ (e_{kij}P_{qij}^{uq} + K_{ki}^\varepsilon P_{iq}^{\phi q})e_{qmn} & -(e_{kij}P_{ijm}^{uq} + K_{ki}^\varepsilon P_{im}^{\phi q}) \end{bmatrix} + \right.$$

$$\left.\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -e_{kmn} & \delta_{km} \end{bmatrix}\right\} \begin{bmatrix} \varepsilon_{mn}^T \\ D_m^T \end{bmatrix}$$

上式与(2)式相比较，可得到 Eshelby 张量的如下表达式：

$$\left.\begin{aligned} S_{ijkl}^{\varepsilon\varepsilon} &\equiv P_{ijpq}^{uf}C_{pqkl}^E + P_{qij}^{uq}e_{qkl} \\ S_{qij}^{\varepsilon D} &\equiv -P_{qij}^{uq} \\ S_{imn}^{D\varepsilon} &\equiv e_{ijk}S_{jkmn}^{\varepsilon\varepsilon} + K_{il}^\varepsilon P_{lpq}^{\phi f}C_{pqmn}^E + K_{il}^\varepsilon P_{lq}^{\phi q}e_{qmn} - e_{imn} \\ S_{il}^{DD} &\equiv \delta_{il} + e_{ijk}S_{ljk}^{\varepsilon D} - K_{iq}^\varepsilon P_{ql}^{\phi q} \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

2 同性与异性夹杂问题的力电耦合场

2.1 同性椭球夹杂问题的力电耦合场

同性夹杂，是指夹杂的电弹模量与基体的量值相同，只是由于某种原因，在基体中的某个区域产生了本征量，这个小的区域即被称为是一个同性夹杂。设在无限大基体中含有同性夹杂，夹杂的本征应变和本征电位移分别为 ε_{ij}^* 和 D_i^*，则由上节的压电 Eshelby 张量所对应的关系，可知由本征量引起的约束应变和电位移可通过(2)式得到，即

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{ij}^c \\ D_i^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{ijkl}^{\varepsilon\varepsilon} & S_{kij}^{\varepsilon D} \\ S_{ikl}^{D\varepsilon} & S_{ik}^{DD} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{kl}^* \\ D_k^* \end{bmatrix} \tag{11}$$

把上式中的本征量作为压电方程中相应的剩余量对待，由第四类压电方程式，有：

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}C_{ijkl}^D & -h_{kij}\\-h_{ikl} & \beta_{ik}^{\varepsilon}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c-\varepsilon_{kl}^*\\D_k^c-D_k^*\end{bmatrix} \tag{12}$$

结合(11) 式,上式可简记为:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=L(S-I)\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^*\\D_k^*\end{bmatrix}$$

其中 L、S、I 分别表示材料的力电弹性模量张量、Eshelby 张量以及单位等同张量。由此即得到由于夹杂而引起的夹杂力电场。

2.2 异性椭球夹杂问题的力电耦合场

与同性夹杂问题不同,异性夹杂是指夹杂的电弹性模量与无限大基体的电弹性模量不同,要求得此类问题的解,可以采用"等效夹杂" 方法,即将异性夹杂等效为电弹性模量与基体相同的同性夹杂,并且使等效夹杂内的力电耦合场与异性夹杂内的力耦合场相同,这样求得等效同性夹杂内的力电耦合场,就可以得到所需的异性夹杂内的力电耦合场。

将夹杂有关的量用上标"r" 来区分,如夹杂的电弹性模量表示为 L^r,而基体的电弹性模量记为 l,则:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=L^r\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c-\varepsilon_{kl}^*\\D_k^c-P_k^*\end{bmatrix} \tag{13}$$

此式为异性夹杂情况,其中(ε^*,P^*) 为本征量。

对于等效夹杂情况,等效夹杂的本征量与异性夹杂不同,设为(ε^{**},P^{**}) 同样由铁电方程知等效同性夹杂内的力电场为:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=L\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c-\varepsilon_{kl}^{**}\\D_k^c-P_k^{**}\end{bmatrix} \tag{14}$$

根据等效性的要求,等效夹杂和异性夹杂的力电耦合场应相同,由(13) 和(14) 式,可得:

$$L^r\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c-\varepsilon_{kl}^*\\D_k^c-P_k^*\end{bmatrix}=L\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c-\varepsilon_{kl}^{**}\\D_k^c-P_k^{**}\end{bmatrix} \tag{15}$$

而对于等效的同性夹杂,有压电 Eshelby 张量的关系,有:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=S:\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^{**}\\P_k^{**}\end{bmatrix} \tag{16}$$

把(16) 式代入(15) 式:

$$L^rS\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^{**}\\P_k^{**}\end{bmatrix}-L^r\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^*\\P_k^*\end{bmatrix}=L(S-I)\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^{**}\\P_k^{**}\end{bmatrix}$$

即: $$L^r\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^*\\P_k^*\end{bmatrix}=((L^r-L)S+L)\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^{**}\\P_k^{**}\end{bmatrix}$$

所以有:

$$\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^{**}\\P_k^{**}\end{bmatrix}=[(L^r-L)S+L]^{-1}L^r\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^*\\P_k^*\end{bmatrix} \tag{17}$$

此即为等效同性夹杂的本征量与异性夹杂本征量间的关系。

3 压电夹杂的约束张量

通过同性或异性夹杂的本征量可以求解椭球夹杂内的力电耦合场,其中的关键就是压电 Eshelby 张量的求解。实际上希望更直接地表示由夹杂引起的广义应力和广义应变关系,可以定义如下的约束张量:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=-\begin{bmatrix}C_{ijkl}^{D*} & -h_{kij}^*\\-h_{ikl}^* & \beta_{ik}^{\varepsilon *}\end{bmatrix}[\varepsilon_{kl}^cD_k^c] \tag{18}$$

简记为: $$\begin{bmatrix}\sigma^c\\E^c\end{bmatrix}=L^*\begin{bmatrix}\varepsilon^c\\D^c\end{bmatrix} \tag{19}$$

为得到约束张量的表达式,由等效同性夹杂问题的解,知:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=L\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c-\varepsilon_{kl}^{**}\\D_k^c-P_k^{**}\end{bmatrix}$$

而$\begin{bmatrix}\varepsilon_{ij}^c\\D_i^c\end{bmatrix}=S\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^{**}\\P_k^{**}\end{bmatrix}$,故:

$$\begin{bmatrix}\sigma_{ij}^c\\E_i^c\end{bmatrix}=L\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c\\D_k^c\end{bmatrix}-LS^{-1}\begin{bmatrix}\varepsilon_{kl}^c\\D_k^c\end{bmatrix} \tag{20}$$

比较(19) 与(20) 两式得:

$$L^*\equiv L(I-S^{-1}) \tag{21}$$

其中 S^{-1} 为张量 S 的逆,记为如下形式:

$$S^{-1}=\begin{bmatrix}T_{ijkl}^{\varepsilon\varepsilon} & T_{kij}^{\varepsilon D}\\T_{ikl}^{D\varepsilon} & T_{ik}^{DD}\end{bmatrix}=T$$

则约束张量的各式可表示如下:

$$\left.\begin{aligned}C_{ijkl}^{D*}&=-C_{ijkl}^D+C_{ijpq}^DT_{pqkl}^{\varepsilon\varepsilon}-h_{pij}T_{pkl}^{D\varepsilon}\\h_{kij}^*&=-h_{kij}-C_{ijpq}^DT_{kpq}^{\varepsilon D}+h_{pij}T_{pk}^{DD}=\\&-h_{kij}+h_{kpq}T_{pqij}^{\varepsilon\varepsilon}-\beta_{kp}^{\varepsilon}T_{pij}^{D\varepsilon}\\\beta_{ik}^{\varepsilon *}&=-\beta_{ik}^{\varepsilon}-h_{ipq}T_{kpq}^{\varepsilon D}+\beta_{ip}^{\varepsilon}T_{pq}^{DD}\end{aligned}\right\} \tag{22}$$

由(21) 式可见,与 Eshelby 张量的性质相类似,约束张量与夹杂的力电弹性参数无关,而仅与基体材料及夹杂的形状、取向等有关。

4 结 论

无限大基体中的椭球体夹杂问题是细观力学研究的基础。笔者针对具有力电耦合的压电/铁电陶瓷情

况，采用 Green 函数表征方式，得到了压电 Eshelby 张量各分量的简明表达式；同时以应变及电位移作为自变量，来表述无限大基体中的同性及异性椭球体夹杂的力电耦合场问题，得到由于夹杂引起的夹杂力电场以及等效同性夹杂本征量与异性夹杂本征量间的转换关系，为研究多晶铁电陶瓷的本构模型奠定了基础。对压电约束张量的理论推导表明，与压电 Eshelby 张量一样，压电约束张量仅与基体材料及夹杂的形状、取向等有关，而与夹杂的力电参数无关。

参考文献：

[1] ESHELBY J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems[J]. Proc Roy Soc Lond,1957,A241:376 -396.

[2] ESHELBY J D. The elastic field otuside an ellipsoidal inclusion[J]. Proc Roy Soc Lond,1959,A252:561 -569.

[3] DEEG W F. The analysis of dislocation, crack, and inclusion problems in piezoelectric solids[D]. USA:Stanford University, 1980.

[4] WANG B. Three dimensional analysis of an ellipsoidal inclusion in a piezoelectric material[J]. Int J Solids & Structs, 1992, 29:293 -308.

[5] DUNN M L. Electroelastic Green's functions for transversely isotropic piezoelectric media and their application to the solution of inclusion and inhomogeneity problems[J]. Int J Engng Sci,1994, 32:119 -131.

[6] DUNN M L, WIENECKE H A. Green's function for transversely isotropic piezoelectric solids[J]. Int J Solids & Structs, 1996, 33:4 571 -4 581.

[7] DUNN M L, TAYA M. Micromechanics predictions of the effective electroelastic moduli of the piezoelectric composites[J]. Int J Solids & Structs, 1993, 30:161 -175.

[8] HUBER J E, FLECK N A, MCMEEKING R M. A crystal plasticity model for ferroelectrics[J]. Ferroelectrics,1999, 228:39 -52.

[9] HUBER J E, FLECK N A, LANDIS C M, et al. A constitutive model for ferroelectric polycrystals[J]. J Mmech Phys Solids,1999,47: 1 663 -1 697.

Electromechanical Coupling Field of Piezo/Ferroelectric Ceramic Materials

HE Yan-song[1], *FAN Jing-hong*[2], *CHEN Xu*[1]

(1. College of Mechanical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. College of Resource and Environment Science, Chongqing University, Chongqing 400044,China)

Abstract:The ellipsoid inclusion field in an infinite matrix is the key problem in meso-mechanics. Following Eshelby's method. The expression of Eshelby Tensor for piezoelectric inclusion is presented with Green functions. The electromechanical coupling field for syno or isomerism inclusions in infinite matrix, is derivated with strain and electric displacement as self variants, as well as that of piezoelectric constrain tensors. It is the foundation for domain switching model and nonlinear constitutive study of ferroelectric ceramics.

Key words:ferroelectric material; inclusion; electromechanical coupling; constrain tensor

(编辑　张小强)