

文章编号:1000-582x(2001)04-0078-03

铁电单晶材料力电耦合性能模型

贺岩松¹, 范镜泓²

(1.重庆大学机械工程学院,重庆 400044;2.重庆大学资源及环境科学学院,重庆 400044)

摘要:铁电材料是一类典型的非线性材料。作者借助晶体塑性理论的方法,采用铁电畴结构的非完全连续反转模式,考虑畴壁移动的能量耗散与外力做功及内能变化的平衡关系,建立起单晶铁电材料的电畴反转模型,以期作为确立多晶铁电陶瓷本构关系的基础。计算结果表明该模型能较好地描述铁电单晶地非线性力电耦合行为。

关键词:铁电材料;电畴反转;本构方程;迟滞现象

中图分类号:O334.1

文献标识码:A

智能结构与系统因其广阔应用前景正成为世界各国研究的热点,压电/铁电材料由于其结构的特殊性,具有高的介电系数及力电耦合性能,被认为是现今最具发展前途的智能材料,广泛应用于航天、光电子、激光及计算机技术等国民经济各领域,特别是在高技术领域具有重大战略意义,但人们对铁电材料的认识还很不充分,对材料的微结构、疲劳、损伤、断裂、破坏失效等的机理也不完全明了。作为典型的非线性材料,采用线性的压电方程来描述其在高工作电压、大应变响应、高灵敏度且微型化的传感器/执行器中的应用,已不能适应实际工作的需要,对铁电材料力电性能、本构关系的研究也就成了十分迫切的任务。作者采用铁电畴结构的非完全反转模式,借助晶体塑性理论的方法,建立单晶铁电材料电畴反转模型,以描述其非线性力电耦合性能,同时也为进一步构造多晶铁电陶瓷材料的本构关系打下基础。

1 铁电材料微结构及基本特性

铁电材料晶粒中存在着大量的自发极化取向一致的微小区域,即电畴,它被认为是铁电材料的基本单元。在外力或电场作用下,电畴可由一种取向状态向另一种取向状态发生电畴的反转,如四方相的铁电单晶具有6种可能的自发极化状态,也即有6种取向的电畴,每一种电畴都可以向其它的5种电畴发生180°或90°的反转。电畴反转是铁电材料表现出非线性的

内在原因。

大量的试验测试结果表明铁电材料都具有典型的迟滞现象,呈现出非线性力电特性,如:极化强度随电场变化的电滞回线(P-E曲线),应力与电场间的蝶状回线(σ-E线),应力-应变间表现出明显的应力平台特征的关系曲线(σ-ε线)等等^[1,2,4,6],这些非线性的力电耦合关系是铁电材料的最基本的特性。

2 单晶铁电材料的性能描述

2.1 铁电材料的力电耦合

在外加电场及应力场均较小的情况下,铁电材料的响应服从线性的压本构方程:

$$\varepsilon_j^L = S_{jk}^E \sigma_k + d_{mj} E_n \quad (1)$$

$$D_i^L = d_{ik} \sigma_k + k_{in}^E E_n \quad (2)$$

其中L表示线性,类似可以写出另外3类压电方程。

当材料处于极化状态时,内部存在着自发极化位移 D_i^p 及自发极化应变 ε_j^p ,它们是类似于不可逆的塑性部分,且当外加力、电场超过一定的界限值时电畴发生反转,即自发应变和自发极化位移的方向要发生改变,故完整的力电关系式应为:

$$\varepsilon_j = \varepsilon_j^L + \varepsilon_j^p, \quad D_i = D_i^L + D_i^p \quad (3)$$

D_i^p 及 ε_j^p 是由电畴的反转控制,电畴的反转是一个复杂的过程,多数描述压电/铁电材料的模型把畴的转变认为是在某一界限条件(如能量条件)达到时,会使一

· 收稿日期:2000-12-08

基金项目:国家自然科学基金资助项目(19772096)

作者简介:贺岩松(1968-),男,湖南双丰人,讲师,博士生,主要从事固体力学和汽车动力学的教学与科研工作。

种畴完整地转化为另外一种畴,不存在中间过程,即所谓的“完全翻转”,这与单晶材料的试验结果不完全相符,事实上畴的转变包括新畴的成核及成核后畴壁扩展运动的全过程^[3,4,5]。作者建立的模型把电畴的反转认为是一个其状态及参数渐进变化的过程,它通过畴壁的扩展来完成,而忽略新畴的成核过程。若用 f^I 来表示第 I 类电畴的体积分数的增量,则:

$$\dot{\epsilon}_y^p = C_1^I \dot{f}^I, \quad \dot{D}_i^p = c_2^I \dot{f}^I \quad (4)$$

其中 c_1^I, c_2^I 是与材料有关的系数。

对于钙钛矿结构的四方相铁电单晶而言,有 6 种可能的自发极化状态,即有 $M = 6$ 类取向的电畴,每一种电畴都可以向其它的 5 种电畴反转,类似金属位错滑移系,定义电畴反转的 $\alpha = 6 \times 5 = 30$ 个反转系。晶体中各类电畴的体积分用 f^I 表示,假设晶体内部应力及电场均匀,而应变及电位移的线性及非线性部分都可通过由体积平均得到,则第 I 类畴其线性应变及电位移为:

$$\epsilon_y^{L(I)} = S_{ym}^{E(I)} \sigma_m + d_{ny}^{(I)} E_n \quad (5)$$

$$D_i^{L(I)} = d_{im}^{(I)} \sigma_m + K_m^{\alpha(I)} E_n \quad (6)$$

晶粒体内平均的线性应变及电位移为:

$$\epsilon_y^L = \sum_{I=1}^M [f^I \epsilon_y^{L(I)}] = S_{ym}^E \sigma_m + d_{ny} E_n \quad (7)$$

$$D_i^L = \sum_{I=1}^M [f^I D_i^{L(I)}] = d_{im} \sigma_m + K_m^{\alpha} E_n \quad (8)$$

$$\text{其中: } S_{ym}^E = \sum_{I=1}^M [f^I S_{ym}^{E(I)}], \quad d_{ny} = \sum_{I=1}^M [f^I d_{ny}^{(I)}],$$

$$K_m^{\alpha} = \sum_{I=1}^M [f^I K_m^{\alpha(I)}] \quad (9)$$

剩余不可逆应变及极化电位移部分由式(4)确定。

2.2 电畴反转的驱动力

考虑畴壁运动的能量耗散与外力做功及内能变化的平衡关系,设定畴壁运动的耗散功率等于总功率 \dot{w} 减去可逆功率 \dot{w}^L ,可推导得到畴反转的驱动力,以判断某一类“畴反转系”是否开动,简述如下:

耗散功率:

$$\dot{w}^D = \dot{w} - \dot{w}^L = \sigma_y \dot{\epsilon}_y^R + E_i \dot{P}^R +$$

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha} [\sigma_y \sum_I A^k \epsilon_y^{L(I)} + E_i \sum_I A^k D_i^{L(I)}] \dot{f}^{\alpha} \quad (10)$$

若 α 系反转使第 I 类畴体积分数增加,则 $A^k = 1$,若使第 I 类畴体积分数减少,则 $A^k = -1$,其它情况下 $A^k = 0$ 。而驱动力:

$$G^{\alpha} = \tau^{\alpha} \gamma^{\alpha} + E^{\alpha} P^{\alpha} + \frac{1}{2} \sigma_y \sum_I A^k \epsilon_y^{L(I)} + \frac{1}{2} E_i \sum_I A^k D_i^{L(I)} \quad (11)$$

其中: $\tau^{\alpha} = \sigma_y \mu_y^{\alpha}$, $E^{\alpha} = E_i S_i^{\alpha}$ 为广义分解剪应力, n_i^{α} 为反转系 α 的法向, $\mu_y^{\alpha} = \frac{1}{2} (S_i^{\alpha} n_i^{\alpha} + S_j^{\alpha} n_j^{\alpha})$ 为 α 系的取向张量, S_i^{α} 为反转面上的反转方向。

当驱动力 G^{α} 达到畴壁运动能量耗散的限值 G_c^{α} 时,认为该反转系可以开动,开动的条件是: $G^{\alpha} = G_c^{\alpha}$, 则 $f^{\alpha} \geq 0$; 而当 $G^{\alpha} < G_c^{\alpha}$, 则 $f^{\alpha} = 0$ (即此反转系仍未启动) 反转后的体积分数增量为:

$$f^{\alpha} = \sum_{\beta} \left[(X^{\alpha\beta})^{-1} (\hat{\epsilon}_y^{\alpha}, \hat{D}_i^{\alpha}) \begin{bmatrix} C_{ym}^D & -h_{wy} \\ -h_{ym} & \beta_{\alpha} \end{bmatrix} (\hat{\epsilon}_m, \hat{D}_i)^T \right] \quad (12)$$

$$\text{其中: } X^{\alpha\beta} = H^{\alpha\beta} + (\hat{\epsilon}_y^{\alpha}, \hat{D}_i^{\alpha}) \begin{bmatrix} C_{ym}^D & -h_{wy} \\ -h_{ym} & \beta_{\alpha} \end{bmatrix} (\hat{\epsilon}_m^{\beta}, \hat{D}_i^{\beta})^T$$

$$\hat{\epsilon}_y^{\alpha} = \mu_y^{\alpha} \gamma^{\alpha} + \sum_I A^k \epsilon_y^{L(I)} \quad \hat{D}_i^{\alpha} = s_i^{\alpha} p^{\alpha} + \sum_I A^k D_i^{L(I)} \quad (13)$$

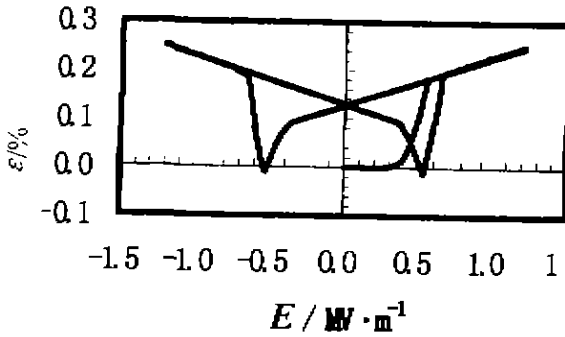
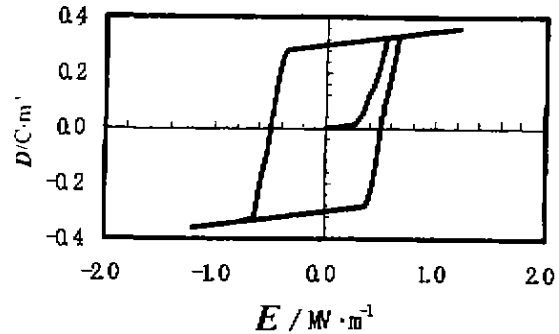
$H^{\alpha\beta}$ 表示材料强化系数矩阵, α, β 为开动的反转系。

而剩余应变及极化电位移增量:

$$\dot{\epsilon}_y^R = \sum_{\alpha} \dot{f}^{\alpha} \mu_y^{\alpha} \gamma^{\alpha}, \quad \dot{P}_i^R = \sum_{\alpha} \dot{f}^{\alpha} S_i^{\alpha} p^{\alpha} \quad (14)$$

3 结果与讨论

根据 2.1 及 2.2 的关系式,推导出畴反转的驱动力,判断某一类“畴反转系”开动的条件,并计算反转后每一类畴的体积分量的变化,相应得到各类畴的弹性及塑性应变增量 ($\Delta \epsilon_y^L, \Delta \epsilon_y^R$)、可逆及非可逆极化强度增量 ($\Delta P_i^L, \Delta P_i^R$),以及单元体的力电参量的改变,进行迭代计算,之后由总体平均得到宏观响应,可得到铁电材料的应力 σ 、应变 ϵ 、电场强度 E 、极化强度 P (或电位移 D) 之间的相互关系,即增量型的铁电材料本构关系。材料晶体具有 4mm 点群结构,取第 3 类畴的局部坐标与总体坐标一致,且局部坐标系的 z 方向取为自发极化方向,其力电参数为:杨氏模量 $E = 6.0 \times 10^{10}$ Pa,泊松比 $\nu = 0.38$,相对介电常数 $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_{33} = 5.0 \times 10^{-8}$,压电系数 $d_{311} = d_{322} = -0.5 \times 10^{-9}$ m/V, $d_{333} = 1.0 \times 10^{-9}$ m/V = d_{113} ,自发极化强度 $P_0 = 0.30$ C/m²,自发应变 $\epsilon_0 = 0.38\%$,其它 5 类畴的相应参数通过坐标变换得到。按所述的关系构造迭代格式,编程计算,部分结果如图 1、图 2 所示。

图1 应变与电场($\epsilon - E$)蝶形回线图2 电位移与电场($D - E$)滞回线

与现有试验及计算结果相比较(参见文献[1,3,6,7]),可见其较好地反映了电位移与电场强度的迟滞关系($D - E$ 回线),应变与电场的蝶形回线($\epsilon - E$ 曲线),特别是蝶形回线的蝶尖部分,显示出此方案的可行性;该方法计及了加载过程中由于电畴反转引起的晶体性能参数的变化,较“完全翻转”模型更接近实际状况;在计算中发现,通过与试验结果的比照,选择待定系数,如 180° 和 90° 反转的不同的驱动力限值、强化系数等,可以改变所得特性曲线的细节形状,使计算与实验结果能更好地近似。这一方面说明这些参数对性能计算的影响,同时也表现出模型的灵活性与适应性。多晶铁电陶瓷一般由金属氧化物的烧结工艺得到,是许多铁电单晶的集合,利用所建立的铁电单晶电畴反转模型,采用 Eshelby 椭球夹杂方法,通过改进的自洽计算,可以得到计及材料微结构相关的非均匀性与各向异性影响的宏观相统一的典型铁电材料的本构方程。

参考文献:

- [1] 许煜寰. 铁电与压电材料[M]. 北京:科学出版社,1978.
- [2] 姚熹,张良莹. 电介质物理[M]. 西安:西安交通大学出版社,1991.
- [3] HWANG S C, LYNCH C S, McMEEKING R M. Ferroelectric/ferroelastic interactions and polarization switching model. [J]. Acta Metall Mater, 1995, 45(5): 2073-2084.
- [4] LYNCH C S. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response 8/65/35 PLZT. [J]. Acta Mater, 1996, 44(10): 4137-4138.
- [5] HUBER J E, FLECK N A, McMEEKING R M. A crystal plasticity model for ferroelectrics. [J]. Ferroelectrics, 1999, 238: 39-52.
- [6] LINES M E, GLASS A M. Principles and applications of ferroelectrics and related materials. [M]. Cambridge: Oxford University Press, 1977.
- [7] 吕炜,方岱宁,黄克智. 铁电陶瓷宏观本构模型[J]. 力学学报,1998,30(5):540-551.

Model for Coupled Electro-Mechanical Behavior of Ferroelectric Crystal

HE Yan-song¹, FAN Jing-hong²

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

2. College of Resoure and Envitonment, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract: Ferroelectrics are important materials applied in smart structure and system. A model is developed to simulate the electro-mechanical behavior of ferroelectric crystal. An analogy is drawn between the slip system of dislocation in metals and domain wall movement in ferroelectrics. It's assumed that switching is resisted by the dissipation motion of domain walls. Simulation results show typical nonlinear electro-mechanical behavior of ferroelectric crystal.

Key words: ferroelectrics; domain switching; constitutive equation; hysteresis

(责任编辑 钟学恒)