

多晶铁电材料的有效电弹性能预报¹⁾

程锦泉 王 彪 杜善义

(哈尔滨工业大学复合材料研究所, 哈尔滨 150001)

摘要 本文利用细观力学方法——Eshelby 等效夹杂法和 Mori-Tanaka 的平均场理论, 根据铁电材料的微结构特点, 建立了一个细观统计模型对多晶铁电材料的有效电弹性能和模量进行分析预报. 在本细观统计模型中, 不仅考虑到单晶粒的形状影响, 而且考虑铁电畴在外场作用下发生极化转动的影响. 本文针对 BaTiO₃ 铁电陶瓷的有效电弹性能与系数的预报结果与实验观测结果相符.

关键词 铁电材料, 极化转动, 细观力学, 统计模型, 有效电弹性能

引 言

众所周知, 在居里温度下, 铁电材料^[1~8], 例如: BaTiO₃、PZT 和 PLZT 等, 都有特殊的微结构-畴以及畴极化转动的特性. 在稳态时, 一个晶粒是由许多极化强度方向不同的畴组成的, 而相邻两个极化强度方向不同的畴之间就形成 90°或 180°的畴壁. 在外场作用下, 新畴的形成(成核)和畴壁的运动而使整个晶粒的极化强度发生变化, 即极化转动, 最终可以形成一个晶粒就只含有一个畴. 实验证明^[1~3], 应力只能引起 90°极化转动, 电场却能引起 90°和 180°极化转动, 只有 90°极化转动才能引起应变的变化. 正是由于铁电畴的极化转动, 铁电材料才显示出很好的压电、热电等特性, 作为功能材料^[1~5]而被广泛地应用于工程中, 例如应用于制作高精密的传感器、致动器和反应器等. 因此为了提高这些元器件的使用精度和可靠性, 计算铁电/压电材料的有效性能也变得越来越重要. 事实上, 一般使用的铁电/压电材料都是极化了的铁电材料. 在极化过程中, 一个强电场作用于烧结好的铁电材料上, 由于强电场的作用使晶粒的畴发生极化转动以至整个晶粒的极化强度方向最接近于外电场方向而使得能量最小^[6]. 实验证实了畴极化转动是引起宏观材料性能呈非线性的主要原因^[7, 8], 因此铁电材料的有效性能是与外加场息息相关的. 许多文章^[9~12]仅针对线性压电材料的有效性能进行了预报. 最近, Nan^[13]应用有效介质原理考虑到单晶粒分布角度和形状的影响预报了压电常数, Kuo 和 Huang^[14]也考虑了单晶粒分布角度对压电材料有效性能的影响, 但是他们都没有考虑到在外场作用下畴极化转动与材料宏观性能变化的内在必然联系. Chen 等^[15]根据铁电材料的微结构特点假设材料由六类铁电畴组成的, 针对单晶铁电材料的电弹性能进行了分析. 在本文中, 我们考虑到在外场作用下铁电材料的微结构变化特点及其与宏观性能变化的内在联系, 建立起一个统计细观力学的模型, 应用平均场方法对多晶铁电材料的有效电弹性能进行预报.

1 基本方程式

根据弹性平衡条件和 Gauss 的静电学法则, 在没有自由电荷以及体力的条件下, 可以得到

1998-01-07 收到第一稿, 1998-06-25 收到修改稿.

1) 国家杰出青年基金资助项目.

散度方程

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad D_{i,i} = 0 \tag{1}$$

其中, 应变 ϵ_{ij} 和电场 E_i 可以从弹性位移 u_i 和电势 ϕ 导出.

梯度方程

$$\epsilon_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2, \quad E_i = -\phi_{,i} \tag{2}$$

压电材料的本构关系可以用应变 ϵ_{ij} , 电势梯度 $\phi_{,i}$, 应力 σ_{ij} 和电位移 D_i 来描述如下:
本构方程

$$\sigma_{ij} = C_{ijmn}\epsilon_{mn} + e_{nij}\phi_{,n}, \quad D_i = e_{imn}\epsilon_{mn} - k_{in}\phi_{,n} \tag{3}$$

其中, C_{ijmn} , e_{nij} 和 k_{in} 分别是弹性系数(在恒定电场下测得), 压电系数(在恒定应变或恒定电场下测得)和介电常数(在恒定应变下测得).

为了压电夹杂问题求解的方便, 我们引用 Barnett 和 Lothe (1975)^[19] 引进的符号如下

$$Z_{Mn} = \begin{cases} \epsilon_{mn}; & M = 1, 2, 3 \\ -\phi_{,n}; & M = 4 \end{cases} \tag{4}$$

其中 Z_{Mn} 可以从下式的 U_M 导出

$$U_M = \begin{cases} u_m; & M = 1, 2, 3 \\ \phi; & M = 4 \end{cases} \tag{5}$$

同理可得

$$\Sigma_{iJ} = \begin{cases} \sigma_{ij}; & J = 1, 2, 3 \\ D_i; & J = 4 \end{cases} \tag{6}$$

而电弹模量可表示为

$$E_{iJMn} = \begin{cases} C_{ijmn}; & J, M = 1, 2, 3 \\ e_{nij}; & J = 1, 2, 3; M = 4 \\ e_{imn}; & J = 4; M = 1, 2, 3 \\ -k_{in}; & J, M = 4 \end{cases} \tag{7}$$

注意这里我们将 E_{iJMn} 的逆定义为 F_{abij} , 显然 E_{iJMn} 和 F_{abij} 是呈对称性的.

通常, 我们可以把式(4)~(7)表示为 9×1 和 9×9 的矩阵利用以下的变换符号(其中 $(nM) = (Mn)$, $(iJ) = (Ji)$ 在 J 和 $M \neq 4$ 时):

(11) $\rightarrow$ 1, (22) $\rightarrow$ 2, (33) $\rightarrow$ 3, (23) $\rightarrow$ 4, (13) $\rightarrow$ 5, (12) $\rightarrow$ 6, (14) $\rightarrow$ 7, (24) $\rightarrow$ 8, (34) $\rightarrow$ 9; 因此, 我们可以利用变换符号来简化以上的各式, 那么, 本构关系可表达为

$$\begin{aligned} \Sigma_{9 \times 1} &= \mathbf{E}_{9 \times 9} \mathbf{Z}_{9 \times 1} \\ \mathbf{Z}_{9 \times 1} &= \mathbf{F}_{9 \times 9} \Sigma_{9 \times 1} \end{aligned}$$

2 多晶铁电材料的 Eshelby-Mori-Tanaka 方法

考虑结合完好的多晶铁电材料, 如图 1 所示. 在居里温度下, 一个晶粒是由许多畴构成的, 而整个晶粒的极化强度则是各个畴的极化强度的矢量和. 对于未极化的多晶铁电材料, 其每个

晶粒的极化强度方向取向混乱,呈随机分布的(图 1(a)所示),此时的材料呈非压电-各向同性.经过外加电场极化后,由于外加电场的作用,晶粒内将出现成核和畴壁运动(极化转动的机理)而使晶粒成为单畴,即等效于晶粒的极化转动(如图 1(b)所示),其极化强度方向最接近于外电场的方向,极化强度大小为自发极化强度,使其能量最小,结构最稳定.通常针对极化转动的理论分析与描述主要是依据 Kolmogorov-Avrami (K-A)统计理论^[17]. Merz^[18] 根据对 BaTiO₃ 陶瓷做的大量实验得到了铁电材料的极化转动机理主要是成核问题的结论,并由实验结果得到了在外电场作用下晶粒的成核(极化转动)的概率^[3, 18]为

$$P = P_0 \exp(-b/E)$$

(8)

其中, b 是一阈值,为激活场强.实验证实了对于 BaTiO₃ 陶瓷,其值约为 470 kV/m; P_0 为在一无穷大电场作用下发生极化转动(成核)的概率.

如果在铁电材料中总共含有 N 个可能发生极化转动的晶粒,那么在一定电场作用下,极化强度方向已经转向外电场方向的晶粒的个数为

$$n = NP$$

(9)

那么,已经转动的晶粒的体积分数为

$$V_f = nv / V = Nv / V \times P = V_f^0 \times P$$

(10)

其中, V_f^0 是总的可能发生极化转动的晶粒的体积分数, v 是单个晶粒的体积.

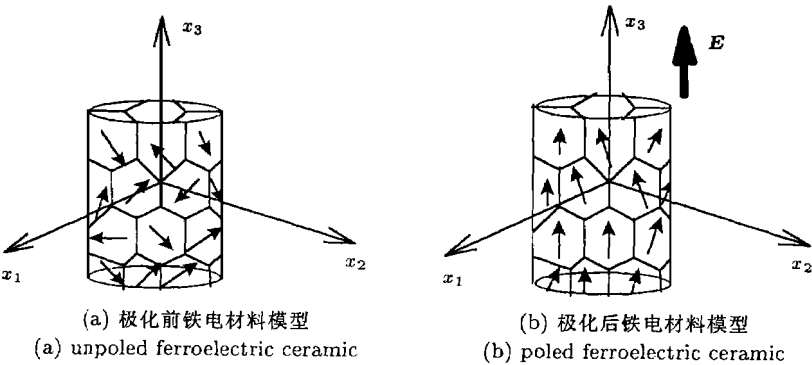


图 1 极化前(a)与极化后(b)的铁电材料以及畴极化转动模型

Fig. 1 Theoretical model for the domain switching under the action of external field

根据 Eshelby 的等效夹杂法和铁电材料的微结构特点,把已发生极化转动的晶粒(如图 1 所示)等效为夹杂,那么,电弹模量为 E_m 的基体中的平均场为

$$\Sigma_m = \Sigma^0 + \Sigma^1 = E_m (Z^0 + Z^1)$$

(11)

其中, Z^1 , Σ^1 由于基体中含有电弹模量为 E_m 的非均匀夹杂 Ω 相互作用引起的扰动场.而在夹杂中的平均场为

$$\Sigma_{in} = \Sigma^0 + \Sigma^1 + \Sigma^r = E_m (Z^0 + Z^1 + Z^r - Z^*) = E_m (Z^0 + Z^1 + Z^r - Z^* - Z^{**})$$

(12)

其中 $\mathbf{Z}^*$ 是已转动晶粒的本征场, 不失常理可假设其极化强度方向平行于外加电场. $\mathbf{Z}^{**}$ 是虚拟本征场: 应变场和电场. 依据 Wang^[19] 的压电材料中含一椭球夹杂的三维解, 可以得到电弹 Eshelby 张量 $\mathbf{S}$ (见附录 A), 扰动场 Σ^p , 可表示为

$$\mathbf{Z}^{pt} = \mathbf{S}(\mathbf{Z}^* + \mathbf{Z}^{**})$$

(13)

由 Mori-Tanaka 的平均场理论, 可得到整体材料的平均场为

$$\langle \Sigma \rangle = 1/V \int_{D-\Omega} \Sigma_m dv + 1/V \int_{\Omega} \Sigma_f dv = \Sigma^0$$

(14)

其中 $\langle \cdot \rangle$ 表示体平均, V 是整体材料的体积. 那么

$$\left. \begin{aligned} \langle \mathbf{Z}^1 \rangle &= -V_f (\langle \mathbf{Z}^{pt} \rangle - \langle \mathbf{Z}^* \rangle - \langle \mathbf{Z}^{**} \rangle) \\ \langle \mathbf{Z}^1 \rangle &= -V_f (\mathbf{S} - \mathbf{I}) (\langle \mathbf{Z}^* \rangle + \langle \mathbf{Z}^{**} \rangle) \end{aligned} \right\}$$

(15)

其中 V_f 是已发生转动的晶粒的体积分数.

联立方程(11)~(15)可得到

$$\mathbf{Z}^{**} = [\mathbf{E}_m(\mathbf{S} - \mathbf{I}) - \mathbf{E}_{in}\mathbf{S} + V_f(\mathbf{E}_{in} - \mathbf{E}_m)(\mathbf{S} - \mathbf{I})]^{-1}(\mathbf{E}_{in} - \mathbf{E}_m)[\mathbf{Z}^0 + (1 - V_f)(\mathbf{S} - \mathbf{I})\mathbf{Z}^*]$$

(16)

那么, 由各相材料的应变和电场的平均可得到整体的应变场和电场

$$\langle \mathbf{Z} \rangle = 1/V \left[\int_{D-\Omega} (\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1) dv + \int_{\Omega} (\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1 + \mathbf{Z}^{pt} - \mathbf{Z}^*) dv \right] = \langle \mathbf{Z}^0 \rangle + V_f \langle \mathbf{Z}^{**} \rangle$$

(17)

那么, 由等式(10), (16)和(17)可以得到预报有效电弹特性和有效电弹模量的等式

$$\langle \Sigma \rangle = \mathbf{E}^* \langle \mathbf{Z} \rangle = \Sigma^0$$

(18)

3 数值计算与讨论

在本部分, 根据上述模型的分析 and 推导的公式, 对 BaTiO₃ 陶瓷的宏观有效电弹性能和模量进行了计算与分析. 在 25 °C 时, 相应的 BaTiO₃ 单晶和陶瓷的弹性、压电和介电系数, 由表 1 给出. 实验表明, BaTiO₃ 单晶胞在室温下是呈四方相, 其中四方相的特征长度 $a = 3.992 \text{ \AA}$ 和 $c = 4.035 \text{ \AA}$, 其自发极化强度为 $P_s = 0.26 \text{ C/m}^2$. 那么, 极化了的单晶的本征应变和本征电位移为: $\epsilon_{11}^* = \epsilon_{22}^* = -0.005$, $\epsilon_{33}^* = 0.01$, $D_3^* = 0.26$, 其余均为零.

根据表 1 的电弹系数, 我们利用(18)式计算得到了极化了的铁电材料的有效电弹性能与模量. 图 2 所示的在各恒定压应力 σ_{22} 作用下 BaTiO₃ 陶瓷的压电系数 d_{33} 预报结果表明了压电系数 d_{33} 是外加场的函数并随外加场呈非线性变化. 从图 2 可看出, 在恒定压应力 σ_{22} 值较小时, d_{33} 值将随外加电场 E_3 的增大而呈非线性地下降, 并且随电场 E_3 的不断增大而渐近

表 1 在 25 °C 时 BaTiO₃ 单晶和陶瓷的弹性, 压电和介电系数^[1]

Table 1 The elastic, piezoelectric and dielectric coefficients of BaTiO₃ at 25 °C^[1]

	C_{11}^E	C_{33}^E	C_{44}^E	C_{12}^E	C_{13}^E	e_{31}	e_{33}	e_{15}	k_{11}	k_{33}	d_{31}	d_{33}	d_{15}
	(GPa)			(C/m ²)			(10 ⁻⁹ C ² /Nm ²)			(10 ⁻¹² C/N)			
single-crystal	275	164.8	54.3	178.9	151.6	-2.69	3.65	21.3	17.4	0.96	-34.5	85.6	392
ceramic	166	162	43	77	78	-4.4	18.6	11.6	11.2	11.6	-79	191	270

于单晶的 d_{33}^s 值. 这是因为随着电场强度不断地增大所有晶粒中的大部分将发生畴极化转动, 其极化方向将平行于或接近于外加电场的方向; 那么, 此时的整个多晶铁电材料就近似等效于一个极化强度方向平行于外电场的大单晶. 计算所得到的 d_{33} 结果与文[9, 13] 相似. 图 2 也表明了 d_{33} 值随应力 σ_{22} 的增大而呈非线性下降. 在一足够大的应力 σ_{22} 作用下, d_{33} 将趋近于零. 依据 d_{33} 的定义: $d_{33} = \partial \epsilon_{33} / \partial E_3$, 当压应力 σ_{22} 增大时, 将发生 90° 畴极化转动而平行于外电场方向. 因而在一大压应力作用下, 即使是很大的电场作用也只能引起 180° 畴转动却不影响整体材料的应变变化, 这一点已由实验[7, 8] 得到了证实. 从图 3 所示的计算所得的应变 ϵ_{33} 结果可以得出在一大的压应力作用下, 施加电场并不引起 ϵ_{33} 的变化, 这一点也证实了 180° 畴极化转动不会引起应变的变化. 图 4 给出了压电系数 d_{31} 随外电场和力场变化呈非线性变化的关系. 这些计算结果都证实了外力场和电场将引起 90° 或 180° 畴极化转动, 而且极化转动影响并决定着材料的宏观性能变化.

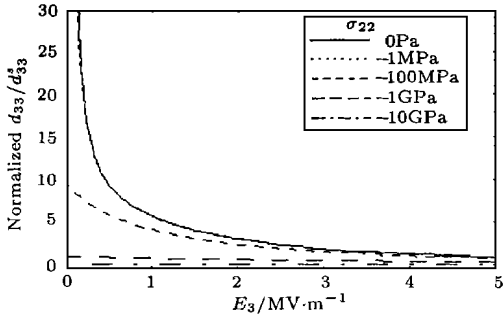


图 2 压电系数 d_{33} 与外加电场 E_3 和应力场的关系以及理论与实验值比较

Fig. 2 Effects of external electric field E_3 and stress σ_{22} on the effective piezomodulus d_{33} of polycrystalline BaTiO₃ ceramics

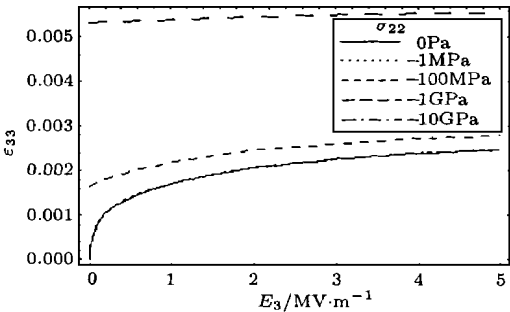


图 3 应变 ϵ_{33} 与外加电场 E_3 和应力场 σ_{22} 的关系

Fig. 3 Strain ϵ_{33} vs. electric field E_3 and stress σ_{22} of polycrystalline BaTiO₃ ceramics

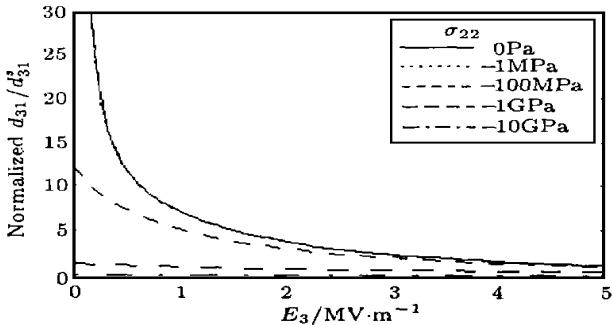


图 4 压电系数 d_{31} 与外加电场 E_3 和应力场 σ_{22} 的关系以及理论与实验值比较

Fig. 4 Effects of external electric field E_3 and stress σ_{22} on the effective piezomodulus d_{31} of polycrystalline BaTiO₃ ceramics

4 结 论

基于 Wang^[19] 关于压电材料中含一椭圆夹杂的基本解和 Mori-Tanaka 的平均场理论, 我们考虑到铁电材料畴极化转动的影响, 建立了一细观统计模型对多晶铁电材料的有效电弹性能进行了分析并预报了多晶铁电材料的有效电弹系数. 在本文中, 我们对 BaTiO₃ 陶瓷的电弹性能和有效电弹系数进行了具体地计算与分析. 计算所得的压电系数 d_{33} 和 d_{31} 值与实验结果相符.

参 考 文 献

- 1 Jaff B, Cook WR, Jaff H. Piezoelectric ceramic. New York: Academic press, 1971
- 2 田中哲郎. 钛酸钡及其应用. 北京: 国防工业出版社, 1965 (Konan Tanaka. BaTiO₃ and Its Applications. Beijing: National Defence Press, 1965 (in Chinese))
- 3 许煜寰等. 铁电与压电材料. 北京: 科学出版社, 1978 (Xu Yuhuan, et al. Ferroelectrics and piezoelectrics. Beijing: Science Press, 1978 (in Chinese))
- 4 三井利夫, 达崎达, 中村英二. 铁电物理学导论. 北京: 科学出版社, 1983 (Mitsui T, Tatsuzaki I, Nakamura E. An Introduction to the Physics of Ferroelectrics. Beijing: Science Press, 1983 (in Chinese))
- 5 江冰, 李兴丹, 吴代华. SMART 结构及其应用. 力学进展, 1994, 24(3): 353~361 (Jiang Bing, Li Xindan, Wu Daihua. Smart structure and its applications. *Advances in Mechanics*, 1994, 24(3): 353~361 (in Chinese))
- 6 Redin R Daiek, et al. Symmetry limitations to polarization of polycrystalline ferroelectrics. *J Appl Phys*, 1963, 34(3): 600~610
- 7 Cao Hengchu, Evans AG. Nonlinear deformation of ferroelectric ceramics. *J Am Ceram Soc*, 1993, 76(4): 890~896
- 8 Schaufele Ansgar B, et al. Ferroelastic properties of lead zirconate titanate ceramics. *J Am Ceram Soc*, 1996, 79(10): 2637~2640
- 9 Marutak M. A Calculation of physical constants of ceramic barium titanate. *J Phys Soc Jpn*, 1965, 11(8): 807~814
- 10 Chen HD, et al. Dielectric Ferroelectric and piezoelectric properties of lead zirconate titanate thick films on silicon substrates. *J Appl Phys*, 1995, 77(7): 3349~3353
- 11 Dunn ML. Effects of grain shape anisotropy, porosity, and microcracks on the elastic and dielectric constants of polycrystalline piezoelectric ceramics. *J Appl Phys*, 1995, 78(3): 1533~1541
- 12 Wang Bao. Effective behavior of piezoelectric composites. *Appl Mech Rev*, 1994, 47(1): s112~s121
- 13 Nan Ce-wen, Clarke David R. Piezoelectric moduli of piezoelectric ceramics. *J Am Ceram Soc*, 1996, 79(10): 2563~2566
- 14 Kuo Wen-Shyong, et al. On the effective electroelastic properties of piezoelectric composites containing spatially oriented inclusions. *Int J Solids Structures*, 1997, 34(19): 2445~2461
- 15 Chen Xi, Fang Daining, Hwang Keh-Chih. A mesoscopic model of the constitutive behavior of monocrystalline ferroelectrics. *Smart Mart Struct*, 1997 (6): 145~151
- 16 Barnett DM, Lothe J. Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators. *Phys Status Solidi*, 1975, B(67): 105~117
- 17 Fatuzzo E. Theoretical considerations on the switching transient in ferroelectrics. *Physical review*, 1962, 127(6): 1999~2005
- 18 Merz Walter J. Switching time in ferroelectric BaTiO₃ and its dependence on crystal thickness. *J Appl Phys*, 1956, 27(8): 938~943
- 19 Wang Biao. Three-dimensional analysis of an ellipsoidal inclusion in a piezoelectric material. *Int J Solids Structures*, 1992, 29(3): 293~308

附录 A

根据 Wang^[19] 针对压电材料中含一椭球夹杂的分析和得到的三维解, 考虑在弹性系数为 C^0 , 压电系数为 e^0 和介电系数为 k^0 的压电材料中含一椭球夹杂 Ω , 材料常数为 C , e 和 k , 由于非均匀夹杂的存在, 引进虚构本征应变 ϵ_{ij}^* 和本征电场 E_i^* , 由散度方程(1)和本构方程(3)可以得到

$$C_{ijkl}^0 u_{k,j} + e_{mij}^0 \phi_{,mj} = \left[\left(C_{ijkl}^0 u_{k,l}^* + e_{mij}^0 \phi_{,m}^* \right) h(x) \right]_{,j} \quad (A1)$$

$$e_{mij}^0 u_{i,jm} - k_{ml}^0 \phi_{,lm} = \left[\left(e_{mij}^0 u_{i,j}^* - k_{ml}^0 \phi_{,l}^* \right) h(x) \right]_{,m} \quad (A2)$$

其中: $h(x)$ 为特征函数并定义为

$$h(x) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega \\ 0 & \text{其余} \end{cases}$$

引进 Green 函数 G^1 , G^2 , F^1 , F^2 可得

$$\left. \begin{aligned} C_{ijkl}^0 G_{kp, lj}^1 + e_{mij}^0 F_{p, mj}^1 &= -\hat{\alpha}_p \alpha(x-x') \\ e_{jkl}^0 G_{kp, lj}^1 - k_{jk}^0 F_{p, jk}^1 &= 0 \\ C_{ijkl}^0 G_{k, lj}^2 + e_{kij}^0 F_{kj}^2 &= 0 \\ e_{jkl}^0 G_{k, lj}^2 - k_{jk}^0 F_{j, k}^2 &= -\hat{\alpha}(x-x') \end{aligned} \right\} \tag{A3}$$

对式(A3)进行 Fourier 变化,并用四阶矩阵表示

$$\begin{bmatrix} C_{ij\tilde{k}l}^0 \tilde{\xi}_i \tilde{\xi}_j & e_{kij}^0 \tilde{\xi}_k \tilde{\xi}_j \\ e_{jkl}^0 \tilde{\xi}_k \tilde{\xi}_j & -k_{jk}^0 \tilde{\xi}_k \tilde{\xi}_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{kp}^{1T} & F_p^{1T} \\ G_k^{2T} & F^{2T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_p & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{A4}$$

其中

$$G_{kl}^1(x-x') = (2\pi)^{-3} \int G_{kp}^{1T}(\xi) \exp[i\xi(x-x')] d\xi$$

同理可得 G_k^{2T} , F_p^{1T} 和 F^{2T} .

$$G_{kp, ij}^1(x-x') = -(2\pi)^{-3} \int G_{kp}^{1T}(\xi) \xi_i \xi_j \exp[i\xi(x-x')] d\xi$$

利用式(A4),可以得到弹性位移 u_m , 电势 ϕ , 应变场和电场. 类似于 Mura(1987)推导在非压电材料中一各向异性椭球夹杂的弹性场过程, 根据梯度公式(2)可以推导得到夹杂内的电场和弹性场

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha\beta}^I &= (2\pi)^{-3} \left(N_{\alpha\beta j}^1 + N_{\beta\alpha j}^1 \right) \left(C_{ijkl}^0 u_{k, l}^* + e_{mj}^0 \phi_{, m}^* \right) + \\ &\quad (2\pi)^{-3} \left(N_{\alpha\beta j}^2 + N_{\beta\alpha j}^2 \right) \left(e_{mij}^0 u_{i, j}^* - k_{ml}^0 \phi_{, l}^* \right) \end{aligned} \tag{A5}$$

$$E_{\alpha}^I = -(4\pi)^{-1} N_{j\alpha}^2 \left(C_{ijkl}^0 u_{k, l}^* + e_{mj}^0 \phi_{, m}^* \right) - (4\pi)^{-1} N_{\alpha}^3 \left(e_{mij}^0 u_{i, j}^* - k_{ml}^0 \phi_{, l}^* \right) \tag{A6}$$

其中

$$\begin{aligned} N_{ijkl} &= \int_{-1}^1 dw_3 \int_0^{2\pi} G_{ij}^{1T}(w) w_k w_l d\theta \\ N_{ijk}^2 &= \int_{-1}^1 dw_3 \int_0^{2\pi} G_i^{2T}(w) w_k w_j d\theta \\ N_{ij}^3 &= \int_{-1}^1 dw_3 \int_0^{2\pi} F^{1T}(w) w_i w_j d\theta \end{aligned}$$

如果基体是横观各向同性压电材料,可以得到 N^1 , N^2 , N^3 的非零项(可以参见 Wang^[19]的结果). 那么, 简化上式可以得到类似于 Eshelby 弹性张量的电弹张量.

根据第一部分的简化公式, (A5)和(A6)式可简化为

$$\mathbf{Z}^I = \mathbf{S} \mathbf{Z}^* \tag{A7}$$

其中 $\mathbf{S}$ 是 9×9 的矩阵, 其中的非零项分别为:

$$\begin{aligned} S(1, 1) &= (4\pi)^{-1} \left(C_{11}^0 N_{1111}^1 + C_{12}^0 N_{1212}^1 + C_{31}^0 N_{1313}^1 + e_{31}^0 N_{113}^2 \right) \\ S(1, 2) &= (4\pi)^{-1} \left(C_{12}^0 N_{1111}^1 + C_{22}^0 N_{1212}^1 + C_{32}^0 N_{1313}^1 + e_{32}^0 N_{113}^2 \right) \\ S(1, 3) &= (4\pi)^{-1} \left(C_{13}^0 N_{1111}^1 + C_{23}^0 N_{1212}^1 + C_{33}^0 N_{1313}^1 + e_{33}^0 N_{113}^2 \right) \\ S(1, 4) &= (4\pi)^{-1} e_{24}^0 N_{113}^2 \\ S(1, 5) &= (4\pi)^{-1} e_{15}^0 N_{113}^2 \\ S(1, 9) &= -(4\pi)^{-1} \left(e_{31}^0 N_{1111}^1 + e_{32}^0 N_{1212}^1 + e_{33}^0 N_{1313}^1 - k_{33}^0 N_{113}^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S(2, 1) &= (4\pi)^{-1} \left\{ C_{11}^0 N_{2121}^1 + C_{21}^0 N_{2222}^1 + C_{31}^0 N_{2323}^1 + e_{31}^0 N_{223}^2 \right\} \\
S(2, 2) &= (4\pi)^{-1} \left\{ C_{12}^0 N_{2121}^1 + C_{22}^0 N_{2222}^1 + C_{32}^0 N_{2323}^1 + e_{32}^0 N_{223}^2 \right\} \\
S(2, 3) &= (4\pi)^{-1} \left\{ C_{13}^0 N_{2121}^1 + C_{23}^0 N_{2222}^1 + C_{33}^0 N_{2323}^1 + e_{33}^0 N_{223}^2 \right\} \\
S(2, 4) &= (4\pi)^{-1} e_{24}^0 N_{223}^2 \\
S(2, 5) &= (4\pi)^{-1} e_{15}^0 N_{223}^2 \\
S(2, 9) &= -(4\pi)^{-1} \left\{ e_{31}^0 N_{2121}^1 + e_{32}^0 N_{2222}^1 + e_{33}^0 N_{2323}^1 - k_{33}^0 N_{223}^2 \right\} \\
S(3, 1) &= (4\pi)^{-1} \left\{ C_{11}^0 N_{3131}^1 + C_{21}^0 N_{3232}^1 + C_{31}^0 N_{3333}^1 + e_{31}^0 N_{333}^2 \right\} \\
S(3, 2) &= (4\pi)^{-1} \left\{ C_{12}^0 N_{3131}^1 + C_{22}^0 N_{3232}^1 + C_{32}^0 N_{3333}^1 + e_{32}^0 N_{333}^2 \right\} \\
S(3, 3) &= (4\pi)^{-1} \left\{ C_{13}^0 N_{3131}^1 + C_{23}^0 N_{3232}^1 + C_{33}^0 N_{3333}^1 + e_{33}^0 N_{333}^2 \right\} \\
S(3, 4) &= (4\pi)^{-1} e_{24}^0 N_{333}^2 \\
S(3, 5) &= (4\pi)^{-1} e_{15}^0 N_{333}^2 \\
S(3, 9) &= -(4\pi)^{-1} \left\{ e_{31}^0 N_{3131}^1 + e_{32}^0 N_{3232}^1 + e_{33}^0 N_{3333}^1 - k_{33}^0 N_{333}^2 \right\} \\
S(4, 1) &= (8\pi)^{-1} e_{31}^0 N_{322}^2 \\
S(4, 2) &= (8\pi)^{-1} e_{32}^0 N_{322}^2 \\
S(4, 3) &= (8\pi)^{-1} e_{33}^0 N_{322}^2 \\
S(4, 4) &= (4\pi)^{-1} [C_{44}^0 (N_{3232}^1 + N_{3322}^1 + N_{2323}^1 + N_{2233}^1) + e_{24}^0 (N_{232}^2 + N_{322}^2)] \\
S(4, 5) &= (4\pi)^{-1} e_{15}^0 N_{322}^2 \\
S(4, 8) &= -(8\pi)^{-1} [e_{24}^0 (N_{3223}^1 + N_{3322}^1 + N_{2332}^1 + N_{2233}^1) - k_{22}^0 (N_{232}^2 + N_{322}^2)] \\
S(5, 1) &= (8\pi)^{-1} e_{31}^0 N_{311}^2 \\
S(5, 2) &= (8\pi)^{-1} e_{32}^0 N_{311}^2 \\
S(5, 3) &= (8\pi)^{-1} e_{33}^0 N_{311}^2 \\
S(5, 4) &= (4\pi)^{-1} e_{24}^0 N_{311}^2 \\
S(5, 5) &= (4\pi)^{-1} [C_{55}^0 (N_{1133}^1 + N_{1313}^1 + N_{3113}^1 + N_{3311}^1) + e_{15}^0 (N_{311}^2 + N_{131}^2)] \\
S(5, 7) &= -(8\pi)^{-1} [e_{15}^0 (N_{1133}^1 + N_{1331}^1 + N_{3113}^1 + N_{3311}^1) - k_{11}^0 (N_{311}^2 + N_{131}^2)] \\
S(6, 6) &= (4\pi)^{-1} C_{66}^0 (N_{1122}^1 + N_{1221}^1 + N_{2112}^1 + N_{2211}^1) \\
S(7, 5) &= -(2\pi)^{-1} [C_{13}^0 (N_{311}^2 + N_{131}^2) + e_{15}^0 N_{11}^3] \\
S(7, 7) &= (4\pi)^{-1} [e_{15}^0 (N_{311}^2 + N_{131}^2) - k_{11}^0 N_{11}^3] \\
S(8, 4) &= -(2\pi)^{-1} [C_{44}^0 (N_{322}^2 + N_{232}^2) + e_{24}^0 N_{22}^3] \\
S(8, 8) &= (4\pi)^{-1} [e_{24}^0 (N_{322}^2 + N_{232}^2) - k_{22}^0 N_{22}^3] \\
S(9, 1) &= -(4\pi)^{-1} \left\{ C_{11}^0 N_{113}^2 + C_{21}^0 N_{223}^2 + C_{31}^0 N_{333}^2 + e_{31}^0 N_{33}^3 \right\} \\
S(9, 2) &= -(4\pi)^{-1} \left\{ C_{12}^0 N_{113}^2 + C_{22}^0 N_{223}^2 + C_{32}^0 N_{333}^2 + e_{32}^0 N_{33}^3 \right\} \\
S(9, 3) &= -(4\pi)^{-1} \left\{ C_{13}^0 N_{113}^2 + C_{23}^0 N_{223}^2 + C_{33}^0 N_{333}^2 + e_{33}^0 N_{33}^3 \right\} \\
S(9, 9) &= (4\pi)^{-1} \left\{ e_{31}^0 N_{113}^2 + e_{32}^0 N_{223}^2 + e_{33}^0 N_{333}^2 - k_{33}^0 N_{33}^3 \right\}
\end{aligned}$$

EFFECTIVE ELECTROELASTIC PROPERTIES OF POLYCRYSTALLINE FERROELECTRIC CERAMICS¹⁾

Cheng Jinquan Wang Biao Du Shanyi

(*Research Center for Composite Material, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*)

Abstract As increasing applications of the ferroelectric ceramics in the field of engineering, how to predict their effective electroelastic properties and improve the reliability of their structure becomes more and more important. As we all know, below the Curie temperature, the ferroelectric ceramics have special microstructure-domain and one grain may be composed of many domains. Under the action of external field, the particular domain switching, which has two types of mechanism-nucleation and domain wall-motion, occurs so that one grain can only contain one domain which polarization is closest to the direction of external electric field. According to these characteristics of ferroelectric ceramics, we established a micro-statistical model to describe the process of the domain switching. Further, basing on the Wang's^[19] solution for an inclusion in a piezoelectric matrix, we used the methods of micromechanics——Eshelby's equivalent inclusion theory and Mori-Tanaka's mean field theory to predict and analyze the effective electroelastic properties and moduli of polycrystalline ferroelectric ceramics. This model incorporated the effects of the shape of individual grain and crystallographic domain switching under the action of external field. We took the BaTiO₃ ceramics as example to analyze these effects of domain switching and the shape of individual grain on the effective electroelastic properties. These calculated values confirm that 90° domain switching can affect the strain variation but 180° domain switching can not. The model's prediction of the effective electroelastic properties and moduli of BaTiO₃ ceramics is shown to be in agreement with the experimental results.

Key words ferroelectric ceramics, micromechanics, statistical model, effective electroelastic properties

Received 7 January 1998, revised 25 June 1998.

¹⁾The project supported by the National Foundation of China for Excellent Young Investigators.

©1994-2017 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>