含随机分布缺陷的多晶铁电材料的 有效电弹性能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 针对铁电材料含有随机分布缺陷以及微结构在外场作用下发生变化的特点,建立起一个 细观统计力学模型,考虑到缺陷和畴极化转动之间的相互影响,利用细观力学方法 ——Eshelby 等效夹杂法和 Mori-Tanaka 的平均场理论,具体分析了所含缺陷以及外场对铁电材料有效电 弹性能和模量的影响.针对 BaTiO3 铁电陶瓷的有效电弹性能与常数的预报结果表明了缺陷 的存在将增强材料的压电性能.

关键词 铁电材料,随机分布缺陷,极化转动,细观力学,有效电弹性能

引 言

在居里温度以下,铁电晶粒由许多区域 —— 畴组成,所谓畴就是一种特殊的微结构,其内 部的电偶极子沿同一方向排布而形成一个自发极化强度和应变场。因而对于一个晶粒、我们可 以等效为单畴体,其极化强度为晶粒中各个畴区的极化强度的矢量和.适当地施加外电场或力 场能引起复杂的 180° 畴或 90° 畴的成核和畴壁运动 (畴极化转动), 于是晶粒的极化强度和应变 发生了变化、铁电材料具有了将电能转化为机械能或将机械能转化为电能的特性 [1~3]. 因此, 铁电材料越来越广泛地用于制作智能材料结构的超精密位移转换器和致动器等工程器件,一般 铁电材料是通过烧结压缩的混合氧化物来制备的、冷却到居里温度以下、由于受氧化物的纯度 和压缩致密度的影响,铁电材料将含有一定量的缺陷^[2],如孔洞、气泡等. 许多实验的结果都 表明了畴极化转动不仅导致非线性滞后现象^[4,5],而且将产生大的局部内应力场导致了晶粒间 微裂纹的产生, 而裂纹能够降低 (或增强) 整个陶瓷材料的宏观性能 [6~8]. 因此典型的多晶铁电 陶瓷通常含有缺陷、如孔隙和微裂纹。由于铁电材料的整体性能与材料的微结构特性有着直接 的关系,因而难以分析.考虑到铁电陶瓷微结构变化的影响, Hwang 等^[9]和 Chen 等^[10,11]通 过一介观力学模型和畴极化转动的能量判据分别研究了单晶和多晶铁电体的电弹特性. Dunn 及其合作者 [12,13] 则采用了细观力学方法预报了含缺陷的未极化的多晶压电陶瓷的有效模量, 但这些工作都没有考虑到铁电陶瓷微结构变化的影响,本文将考虑在外场作用下、随机分布的 缺陷与畴极化转动的相互作用影响、利用 Eshelby-Mori-Tanaka 方法分析了含有随机分布缺陷 的多晶铁电材料有效电弹特性.

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 应变 ϵ_{ij} ,电势梯度 $\phi_{,i}$,应力 σ_{ij} 和电位移 D_i 的相互关系:

1999--05--31 收到第一稿, 1999--11--01 收到修改稿.

¹⁾ 国家杰出青年科学基金资助项目.

本构关系

$$\sigma_{ij} = C_{ijmn}\varepsilon_{mn} + e_{nij}\phi_{,n}, \quad D_i = e_{imn}\varepsilon_{mn} - k_{in}\phi_{,n} \tag{1}$$

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).

散度方程

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad D_{i,i} = 0 \tag{2}$$

梯度方程

$$\varepsilon_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2, \quad E_i = -\phi_{,i} \tag{3}$$

根据 Barnett 和 Lothe 的符号简化法则 ^[14], 应变 ε_{ij} , 电势梯度 $\phi_{,j}$, 应力 σ_{ij} , 电位移 D_j , 电场强度 E_i , 弹性位移 u_i 和电势 ϕ 可以进行如下的简化缩并

$$Z_{Mn} = \begin{cases} \epsilon_{mn}, & M = 1, 2, 3\\ \phi_{,n}, & M = 4 \end{cases}, \quad U_M = \begin{cases} u_m, & M = 1, 2, 3\\ \phi, & M = 4 \end{cases} \quad \text{for } \Sigma_{iJ} = \begin{cases} \sigma_{ij}, & J = 1, 2, 3\\ D_i, & J = 4 \end{cases}$$
(4)

根据以上的简化及合并的结果,相应的电弹系数张量可以简化成以下的形式:

$$E_{iJMn} = \begin{cases} C_{ijmn}, & J, M = 1, 2, 3\\ e_{nij}, & J = 1, 2, 3; \ M = 4\\ e_{imn}, & J = 4; \ M = 1, 2, 3\\ -k_{in}, & J, M = 4 \end{cases}$$
(5)

为了使本文后面的公式推导更加方便,我们可以进一步将公式 (4) 和 (5) 分别合并为 9×9 和 9×1 的矩阵形式,这需要利用以下的张量下标变换规律,在 J 和 $M \neq 4$ 时,其中, (nM) = (Mn), (iJ) = (Ji):

 $(11) \rightarrow 1, (22) \rightarrow 2, (33) \rightarrow 3, (23) \rightarrow 4, (13) \rightarrow 5, (12) \rightarrow 6, (14) \rightarrow 7, (24) \rightarrow 8, (34) \rightarrow 9$

2 含缺陷多晶铁电材料的细观力学模型分析

对于刚烧结完的、未极化的多晶铁电材料一般含有气泡、孔洞等缺陷,而且此时晶粒的极 化强度呈随机性分布,如图 1(a)所示;而在极化或使用过程中因畴的极化转动会产生微裂纹, 而且此时晶粒的极化强度呈定向分布,如图 1(b)所示. 1956 年, Merz^[15]利用间接观测的方 法对 BaTiO₃ 陶瓷做了大量实验并根据实验结果分析得到了铁电材料的极化转动机理主要是新 的铁电畴成核的结论并得到了一个非常有效的经验公式用来描述在外加电场作用下晶粒的成核 (极化转动)概率

$$P = P_0 \exp\left(-\frac{b}{E}\right) \tag{6}$$

其中, b 是一阀门电场值, 为激活场强. 实验证实了对于 BaTiO₃ 陶瓷, 其值约为 470 kV/m; Po 为在一无穷大的电场作用下发生极化转动 (成核)的概率. 当外加场为其它量时, 我们可以 通过初始态的本构关系将外加场的其它量转换为等量、等方向的电场使之适用于公式 (6). 如果假设一定体积 V 内含有 N 个可发生极化转动的体积为 v 的晶粒, 那么在外加电场 E 或等效电场的作用下,发生极化转动的晶粒个数为

$$n = N \times P \tag{7}$$

那么,发生极化转动的晶粒的体积分数为

$$V_1 = \frac{nv}{V} = \frac{NPv}{V} = V_f^0 P \tag{8}$$

其中, V⁰ 是可发生极化转动的晶粒的总体积分数.



Fig.1 The micromechanics models show the unpoled (a) and poled (b) ceramics

根据 Eshelby 的等效夹杂理论以及铁电畴在外加场作用下发生极化转动的细观机理分析, 我们可以把发生极化转动的晶粒和材料中所含的缺陷分别当作多晶铁电材料中的第1,2 相夹 杂,而以初始态的、未发生畴极化转动的铁电材料为基体.根据 Eshelby-Mori-Tanaka 方法,考 虑各相夹杂之间的相互作用影响,基体中的平均场可表示为

$$\boldsymbol{\Sigma}_m = \boldsymbol{\Sigma}^0 + \boldsymbol{\Sigma}^1 = \boldsymbol{E}_m (\boldsymbol{Z}^0 + \boldsymbol{Z}^1) \tag{9}$$

式中, Z^1 , Σ^1 为由于夹杂的存在以及各相之间相互作用而引起的扰动场, E_m 为基体的电弹 模量.

因为发生极化转动晶粒的等效极化强度方向平行于外加电场(或等效电场)的方向,所以 在固定坐标系上,发生极化转动的晶粒内平均场为

$$\Sigma_{1} = \Sigma^{0} + \Sigma^{1} + \Sigma_{1}^{pt} = E_{1} \left(Z^{0} + Z^{1} + Z_{1}^{pt} - Z_{1}^{*} \right) = E_{m} \left(Z^{0} + Z^{1} + Z_{1}^{pt} - Z_{1}^{*} - Z_{1}^{**} \right)$$
(10)

其中, Z₁^{*} 是发生极化转动的晶粒的自发极化强度和应变, Z₁^{**} 是由于晶粒与基体性能的不同 而引起的虚拟本征场, E₁ 是发生极化转动的晶粒的电弹系数.

对于第二相夹杂 (缺陷), 在局部坐标系上, 其平均场可表示为

$$\Sigma_{2}^{L} = \Sigma^{0L} + \Sigma^{1L} + \Sigma_{2}^{ptL} = 0 = E_{m} \left(Z^{0L} + Z^{1L} + Z^{ptL}_{2} - Z^{*L}_{2} \right)$$
(11)

这里, 上标 "L" 表示该量是在局部坐标系上的表达式. 对于铁电材料中所含的一个缺陷, 我们 可以用坐标系 (X₁, X₂, X₃) 来表示固定坐标系 (即物质坐标系), 而以 (X^L₁, X^L₂, X^L₃) 来表示缺陷 所在的局部坐标系. 其中 X₃, X¹ 分别为固定坐标系和局部坐标系的对称轴. 我们可以假设 X¹ 轴 蒋 (X_1, X_2) 平面上、那么、从固定坐标系到局部坐标系的转换矩阵为

$$\boldsymbol{T}_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0\\ -\sin\alpha\cos\beta & \cos\alpha\cos\beta & \sin\beta\\ \sin\alpha\sin\beta & -\sin\beta\cos\alpha & \cos\beta \end{bmatrix}$$
(12)

根据张量变换原理,可得

$$\varepsilon_{ij}^L = T_{im} T_{jn} \varepsilon_{mn}, \quad E_i^L = T_{in} E_n \tag{13}$$

依据上文介绍的简化符号, 上式可缩并成

$$\boldsymbol{Z}^{L} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{Z} \tag{14}$$

式中, A 为坐标变换矩阵.

利用 Wang^[16] 的压电材料含一椭球压电夹杂的三维解可以推导得到电弹 Eshelby 张量 S, 根据 Eshelby 的等效夹杂理论、各相夹杂的扰动场可表示为

$$\boldsymbol{Z}_{1}^{pt} = \boldsymbol{S}_{1} \left(\boldsymbol{Z}_{1}^{*} + \boldsymbol{Z}_{1}^{**} \right)$$
(15a)

$$Z_2^{ptL} = S_2 Z_2^{*L}$$
(15b)

同样、利用坐标转换矩阵 A 可得

$$Z_2^{pt} = A^{-1} S_2 A Z_2^*$$
 (16)

把 (15) 式代入式 (10) 和 (11) 可求得

$$\boldsymbol{Z}_{1}^{**} = [E_{1}\boldsymbol{S}_{1} - E_{m}(\boldsymbol{S}_{1} - \boldsymbol{I})]^{-1}(E_{m} - E_{1})[\boldsymbol{Z}^{0} + \boldsymbol{Z}^{1} + (\boldsymbol{S}_{1} - \boldsymbol{I})\boldsymbol{Z}_{1}^{*}]$$
(17a)

$$Z_2^{*L} = -(S_2 - I)^{-1}(Z^{0L} + Z^{1L})$$
(17b)

基于坐标转换矩阵 A, 进而可以得到

$$Z_2^* = -A^{-1}(S_2 - I)^{-1}A(Z^0 + Z^1)$$
(18)

当作用在铁电材料两极边界上的远场是应力和电位移 Σ_{ii}n_i (其中 n_i 是外法线方向上的单 位矢量) 时, 根据 Mori-Tanaka 平均场理论, 考虑到铁电畴发生极化转动, 整个铁电材料内的体 平均场可表示为

$$\langle \boldsymbol{\Sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_{D-\Omega 1-\Omega 2} \boldsymbol{\Sigma}_{m} dv + \frac{1}{V} \int_{\Omega 1} \boldsymbol{\Sigma}_{1} dv + \frac{1}{V} \int_{\Omega 2} \boldsymbol{\Sigma}_{2} dv = \boldsymbol{\Sigma}^{0} = \frac{1}{V} \int_{D-\Omega 1-\Omega 2} E_{m} (\boldsymbol{Z}^{0} + \boldsymbol{Z}^{1}) dv + \frac{1}{V} \int_{\Omega 1} E_{m} (\boldsymbol{Z}^{0} + \boldsymbol{Z}^{1} + \boldsymbol{Z}_{1}^{pt} - \boldsymbol{Z}_{1}^{*} - \boldsymbol{Z}_{1}^{**}) dv + \frac{1}{V} \int_{\Omega 2} E_{m} (\boldsymbol{Z}^{0} + \boldsymbol{Z}^{1} + \boldsymbol{Z}_{2}^{pt} - \boldsymbol{Z}_{2}^{*}) dv$$
(19)

利用上面对铁电材料所含各相的平均场分析,上式可简化为 $\mathbf{0} = \frac{1}{V} \int_{D-O(1-O2)} E_m Z^1 dv + \frac{1}{V} \int_{O(1)} E_m (Z^1 + Z_1^{pt} - Z_1^* - Z_1^{**}) dv + \frac{1}{V} \int_{O(2)} E_m (Z^1 + Z_2^{pt} - Z_2^*) dv$ (20)

?1994-2015 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

当铁电材料所含的缺陷呈三维空间随机分布时,其分布函数是 $f = \sin \beta / 2\pi$. 那么,由夹杂引起的扰动场 Z^1 可由式 (17), (18) 和 (20) 求得

$$Z^{1} = -v_{1}(S_{1} - I) \left(Z_{1}^{*} + Z_{1}^{**} \right) - v_{2} \left\langle Z_{2}^{pt} - Z_{2}^{*} \right\rangle$$
(21)

其中,式(21)定义了

$$\left\langle \boldsymbol{Z}_{2}^{pt} - \boldsymbol{Z}_{2}^{*} \right\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{\pi} \sin\beta \boldsymbol{A}^{-1} (\boldsymbol{S}_{2} - \boldsymbol{I}) \boldsymbol{A} \boldsymbol{Z}_{2}^{*} \mathrm{d}\beta \mathrm{d}\alpha$$
(22a)

$$\left\langle \boldsymbol{Z}_{2}^{*}\right\rangle =\frac{1}{2\pi}\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{\pi}\sin\beta\boldsymbol{Z}_{2}^{*}\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\alpha\tag{22b}$$

联立式 (18), (21) 和 (22) 可导出

$$Z^{1} = \frac{1}{(1-v_{2})} \left[Z^{0} - v_{1} (S_{1} - I) \left(Z_{1}^{*} + Z_{1}^{**} \right) \right]$$
(23)

把式 (23) 代入 (17a) 式可求出 Z₁^{**} 的表达式

$$\boldsymbol{Z}_{1}^{**} = \left[E_{1}\boldsymbol{S}_{1} - E_{m}(\boldsymbol{S}_{1} - \boldsymbol{I}) + \frac{v_{1}}{1 - v_{2}}(E_{m} - E_{1})(\boldsymbol{S}_{1} - \boldsymbol{I}) \right]^{-1}(E_{m} - E_{1}) \times \left[\frac{1}{1 - v_{2}}\boldsymbol{Z}^{0} + \frac{1 - v_{1} - v_{2}}{1 - v_{2}}(\boldsymbol{S}_{1} - \boldsymbol{I})\boldsymbol{Z}_{1}^{*} \right]$$
(24)

基于 (24) 式,我们就可以很容易地求出缺陷内的本征场 Z₂ 的表达式.

此时,根据 Mori-Tanaka 的平均场理论整个多晶铁电材料体的体平均应变和电场 (Z) 可由 基体和各相夹杂的应变和电场加权平均得到

$$\langle \mathbf{Z} \rangle = \frac{1}{V} \left[\int_{D-\Omega 1 - \Omega 2} (\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1) dv + \int_{\Omega 1} (\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1 + \mathbf{Z}_1^{pt} - \mathbf{Z}_1^*) dv + \int_{\Omega 2} (\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1 + \mathbf{Z}_2^{pt}) dv \right] = \mathbf{Z}^0 + v_1 \mathbf{Z}_1^{**} + v_2 \langle \mathbf{Z}_2^* \rangle$$
(25)

式中, v₁ 为在外加场的作用下新发生极化转动的晶粒的体积分数; v₂ 为多晶铁电材料中所含的随机分布缺陷的体积含量.

联立式 (8), (18), (24) 和 (25) 可以得到含随机分布缺陷的多晶铁电材料的有效电弹性能的 预报式

$$\langle \boldsymbol{\varSigma} \rangle = \boldsymbol{E}^* \langle \boldsymbol{Z} \rangle = \boldsymbol{\varSigma}^0$$
 (26)

3 数值计算与讨论

基于上面理论模型的分析,本部分以多晶钛酸钡陶瓷为例进行数值计算,并分析说明随机 分布的缺陷对多晶铁电材料的有效电弹性能的影响.其中,钛酸钡材料的弹性、压电和介电系 数由表1具体给出,其自发电位移与自发应变等计算参数为

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{*} = \begin{bmatrix} -0.005 & 0 & 0 \\ 0 & -0.005 & 0 \\ 0 & 0 & 0.01 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{D}^{*} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0.26 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$

?1994-2015 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

| 表 | ŧ1 在 | $25^{\circ}C$ | 时相应 | 的 Bal | ГіOз А́ | 自晶和陶瓷 | 的弹性、 | 压电利 | 口介电系 | 【数 ^[1] | |
|--------------|-------------------------|---------------|-------------------------|------------|----------|-----------------|-----------|----------|----------|--------------------------|------------------|
| Table | 1 The | e elasti | c, piezc | electric | c and d | ielectric c | oefficien | ts of B | aTiO₃ | at 25° | C ^[1] |
| | | | | | | | | | | | |
| C_{11}^{E} | $C_{33}^{\overline{E}}$ | C_{44}^E | $C_{12}^{\overline{E}}$ | C_{13}^E | k_{11} | k ₃₃ | e_{31} | e_{33} | e_{15} | d_{31} | d ₃₃ |

| | C_{11}^{E} | C_{33}^{E} | C_{44}^{E} | C_{12}^{E} | C_{13}^{E} | k_{11} | k_{33} | e_{31} | e_{33} | e_{15} | d_{31} | d_{33} | d_{15} |
|---------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|------------------------|----------|-----------|----------|----------------------|-----------------|----------|------------|
| | (GPa) | | | | | $(10^{-9} C^2 / Nm^2)$ | | (C/m^2) | | | $(10^{-12}C/N)$ | | |
| crystal | 275 | 164.8 | 54.3 | 178.9 | 151.6 | 17.4 | 0.96 | -2.69 | 3.65 | 2 1. 3 | -34.5 | 85.6 | 392 |
| ceramic | 166 | 162 | 43 | 77 | 78 | 11.2 | 12.6 | -4.4 | 18.6 | 11.6 | -79 | 191 | 270 |

在计算过程中,为了计算中数学处理的方便,我们可以假设晶粒夹杂为圆球形,缺陷为币型微裂纹,利用式 (26) 预报含随机分布的币型裂纹的钛酸钡陶瓷的有效电弹性能.图 2 和图 3



图 2 压电系数 d₃₃ 随外场和缺陷含量的变化情况 Fig.2 The effects of the external applied electrical, mechanical field and the volume fraction v₂ of defects on effective piezoelectric modulus d₃₃ of BaTiO₃ ceramics





给出了有效压电系数 d₃₃ 和 d₃₁ 随外加电场和压应力场以及微裂纹的体积含量变化的情况.由图 2 可以看出在任意外加场作用下, d₃₃ 都随着微裂纹体积含量的增加而上升.但是, d₃₃ 却随着外加电场或力场的增大呈非线性下降.对于所含缺陷含量在一定范围时,缺陷的存在将增大 d₃₁,另外,对于外加场的影响, |d₃₁| 将随外加压应力或电场的增加而非线性减小.

对于含随机分布的缺陷对多晶铁电材料的弹性性能的影响,已由图 4 给出.从图 4 的预报 结果,可以看出弹性系数 S₁₃ 将随着微裂纹的体积含量的增加而下降.图 4 的结果也表明了, 随着外加电场的增大将引起越来越多铁电畴发生极化转动,因而使得铁电材料的非线性减弱而 越来越呈线弹性.



图 4 弹性系数 S₁₃ 随外场和缺陷含量的变化情况 Fig.4 The effects of the external applied electrical and mechanical field, volume fraction v₂ of defects on effective elastic constant S₁₃ of BaTiO₃ ceramics

4 结 论

本文基于一个细观统计力学模型,利用细观力学方法 ——Eshelby 等效夹杂法和 Mori-Tanaka 的平均场理论,考虑到所含缺陷和极化转动的影响,给出了含随机分布缺陷铁电材料的 本构关系以及有效电弹性能预报等式.针对 BaTiO3 铁电陶瓷的有效电弹性能与常数的预报结 果表明了缺陷的存在使材料的压电性能增强,但是材料的弹性性能却降低了.

参考文献

- 1 Jaff B, Cook WR, Jaff H. Piezoelectric Ceramic. New York: Academic Press, 1971
- 2 Chueng HT, Kim HG. Characteristics of domain in tetragonal phase PZT ceramics. Ferroelectrics, 1987, 76: 327~333
- 3 Zenon B. Optical microscopic mapping of the domain structure of BaTiO₃ microcrystals. Ferroelectrics, 1994, 157: 13~18
- 4 Ansgar BS, et al. Ferroelastic properties of lead zirconate titanate ceramics. J Am Ceram Soc, 1996, 79(10): 2637~2640
- 5 Cao Hengchu, Evans AG. Nonlinear deformation of ferroelectric ceramics. J Am Ceram Soc, 1993, 76(4): 890~896
- 6 Lynch CS, et al. Electric field induced cracking in ferroelectric ceramics. Ferroelectrics, 1995, 166: 11~30
- 7 Zhang QM, et al. Change of the weak-field properties of $Pb(ZrTi)O_3$ piezoceramics with the compressive uniaxial stresses and its links to the effect of dopants on the stability of the polarizations in the materials. J Mater Res, 1997, 12(1): 226~234
- 8 Hideaki, Aburatani, et al. Destruction mechanisms in ceramic multilayer actuators. Jpn J Appl Phys, 1994, 33: 3091~3094
- 9 Hwang SC, Lynch CS, McMeeking RM. Ferroelectric/ferroelastic interactions and a polarization switching model. Acta Metall Mater, 1995, 43(5): 2073~2084

414

- 10 Chen Xi, Fang Daining, Hwang Keh-Chih. A mesoscopic model of the constitutive behavior of monocrystalline ferroelectrics. Smart Mart Struct, 1997, 6: 145~151
- 11 Chen Xi, Fang Daining, Hwang Keh-Chih. Micromechanics simulation of ferroelectric polarization switching. Acta Mater, 1997, 45(8): 3181~3189
- 12 Dunn ML, Taya M. Electromechanical properties of porous piezoelectric ceramics. J Am Ceram Soc, 1993, 76(7): 1697~1706
- 13 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
- 14 Barnett DM, Lothe J. Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators. Phys Status Solidi, 1975, B(67): 105~117
- 15 Merz WJ. Switching time in ferroelectric BaTiO₃ and its dependence on crystal thickness. J Appl Phys, 1956, 27(8): 938~943
- 16 Wang Biao. Three-dimensional analysis of an ellipsoidal inclusion in a piezoelectric material. Int J Solids Structures, 1992, 29(3): 293~308

THE EFFECTIVE ELECTROELASTIC PROPERTIES OF POLYCRYSTALLINE FERROELECTRIC CERAMICS WITH RANDOMLY ORIENTED DEFECTS¹⁾

Cheng Jinquan Wang Biao Du Shanyi

(Center for Composite Materials, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract In terms of the microstructure characteristics of polycrystalline ferroelectric ceramics, a statistical micromechanics model is employed to predict the effective electroelastic properties of polycrystalline ferroelectric ceramics with randomly oriented defects, such as voids and microcracks, by the method of Eshelby's equivalent inclusion theory and Mori-Tanaka's mean field concept. The model incorporates the effects of crystallographic domain switching under external mechanical or electric field and the randomly oriented defects on the macroscopic behaviors of the polycrystalline ferroelectric ceramics. The analytical predictions of BaTiO₃ polycrystalline ceramics are shown that the defects can enhance the effective piezoelectric properties but reduce the elastic properties, which are consistent with the experimental results.

Key words ferroelectrics, randomly oriented defects, domain switching, micromechanics, electroelastic properties

Received 31 May 1999, revised 1 November 1999.

¹⁾ The project supported by the National Science Foundation of China with Excellent Young Investigator Award.