

铁电材料非线性本构关系和有限元分析

王自强 邓其林

(LNM, 中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要 众所周知铁电材料的力学行为是非线性的。线性假设只有在力和电场都比较小的时候才能成立。当力场或电场很大时,其本构关系的非线性效应就会产生很大的影响。本文研究了铁电材料非线性本构关系,在此基础上,建立了有限元模型,并对紧凑拉伸试样断裂实验进行有限元分析,成功地解释了正电场对外加断裂载荷的非线性影响。

关键词 铁电材料,非线性,本构关系,有限元

引言

压电材料在智能元件中得到广泛应用。它既可作具有感知功能的传感器,又可用作具有致动功能的执行器。由于电和力的耦合作用,压电材料的电致断裂、电致疲劳时有发生。对于压电材料断裂行为研究日益受到重视。

Parton^[1], Deeg^[2], Pak 和 Herrmann^[3], McMeeking^[4], Pak^[5], Sosa^[6], Suo, et al.^[7], Suo^[8], Zhang 和 Hack^[9], Yang 和 Suo^[10], Dunn^[11], Zhang 和 Tong^[12]等人对压电材料断裂进行了理论研究。但是理论与 Park 和 Sun^[13]实验存在明显差异。Gao 等人^[14]针对理论与实验的明显差异,提出了一个条状电饱和区模型。他们认为钛酸钡(BaTiO₃)、锆钛酸铅(PZT)等铁电晶体可以看作是“理想”的弹性体,塑性屈服比较困难,而电屈服比较容易。为了考虑电屈服对压电材料断裂行为的影响,比较简单的是引入条状饱和区模型。Gao 等人^[14]引入局部能量释放率准则,定性地解释了实验现象。Wang^[15]对条状电饱和区模型进行了严格的数学分析,进一步确认条状电饱和区模型仍不能定量解释实验现象。由于实验中试件含有的是细切口而不是尖裂纹,因此他提出用细切口端部的应力作为起裂准则,与实验的线性部分实现了较好的吻合。

压电材料尤其是铁电材料的力、电响应具有明显的非线性,而且铁电材料当电场、应力场到达一定条件时,它们的电畴会发生翻转。本文从铁电材料的势能表达式出发,提出铁电材料的非线性本构关系。在这个非线性本构的基础上建立有限元模型,采用临界断裂应力准则,对紧凑拉伸试样断裂实验进行了有限元分析,很好地解释了当正电场逐渐增大时,电场对断裂载荷的非线性影响。

1 非线性本构关系

铁电材料的线性本构关系可表示为

$$\left. \begin{aligned} \gamma_{ij} &= \gamma'_{ij} + s_{ijkl}\sigma_{kl} + d_{kij}E_k \\ D_i &= D'_i + d_{ikl}\sigma_{kl} + \epsilon_{ik}E_k \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

式中 s_{ijkl} 是弹性柔度张量; d_{ijk} 是压电系数; ϵ_{ik} 是介电系数; γ'_{ij} 是剩余应变; D'_i 是剩余电位移矢量分量。

铁电材料的能量函数 W 可以表示为

$$W = \int (\sigma_{ij}d\gamma_{ij} + E_i dD_i) \quad (2)$$

相应的余能函数 W^* 为

$$W^* = \sigma_{ij}\gamma_{ij} + E_i D_i - W$$

由此得到

$$dW^* = \gamma_{ij}d\sigma_{ij} + D_i dE_i \quad (3)$$

将本构方程(1)代入式(3),积分后得到

$$W^* = \sigma_{ij}\gamma'_{ij} + E_i D'_i + \frac{1}{2}s_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl} + \frac{1}{2}\epsilon_{ij}E_i E_j + d_{ijk}E_k \sigma_{ij} \quad (4)$$

由式(3)直接导出

$$\gamma_{ij} = \frac{\partial W^*}{\partial \sigma_{ij}}, D_i = \frac{\partial W^*}{\partial E_i} \quad (5)$$

因此余能函数 W^* 也可称为本构势。

铁电材料线性本构关系(1)只适用于应力和电场强度相当小的情况。当应力或电场强度比较大时,必须考虑非线性的影响。铁电材料的宏观非线性行为可以归之为材料非线性和细观层次电畴翻转引起的非线性。

本文限于篇幅,只讨论材料非线性。众所周知,铁电材料是横观各向同性材料,它的对称轴是极轴,因此本构势函数 W^* 必是应力张量 σ_{ij} 和电场强度矢量 E_i 的横观各向同性的标量值函数。依靠不变量理论^[16,17], W^* 必是下列不变量(也称为完备基)的函数

$$I_1 = \text{tr} \boldsymbol{\sigma} \quad I_2 = \frac{1}{2} \{ (\text{tr} \boldsymbol{\sigma})^2 - \text{tr} \boldsymbol{\sigma}^2 \} \quad I_3 = \det \boldsymbol{\sigma}$$

$$a \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot a, a \cdot \boldsymbol{\sigma}^2 \cdot a, a \cdot \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot a, \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\sigma}^2 \cdot a, \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\sigma}^2 \cdot \boldsymbol{E}$$

式中 a 是剩余极化矢量方向上的单位矢量

$$a = \frac{\boldsymbol{P}'}{|\boldsymbol{P}'|}$$

设想铁电陶瓷的非线性主要是电场及力电耦合引起的,鉴于公式(2),不妨设想非线性本构势 W^* 可表示为

$$W^* = \sigma_{ij}\gamma'_{ij} + E_i D'_i + \frac{1}{2}f_1 \epsilon_{ij}E_i E_j + f_2 d_{ijk}E_k \sigma_{ij} + \frac{1}{2}s_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl} \quad (6)$$

式中 f_1, f_2 为 σ_{ij}, E_k 的横观各向同性函数,也就是 f_1, f_2 必是不可约完备基的函数。为了简化分析起见,不妨考虑最简单的情况,设想对铁电陶瓷非线性行为最有影响的是不变量 $I_E = a \cdot \boldsymbol{E}$ 。因此可认为 f_1, f_2 只依赖于 I_E ,他们的具体表达式可取为

$$f_1 = 1 - \alpha \left\{ \left[\text{th}k_1 \left(\frac{I_E}{E_C} + 1 \right) \right] / \text{th}k_1 - 1 \right\} + \left\{ \left[\text{th}mk_1 \left(\frac{I_E}{E_C} + 1 \right) \right] / \text{th}mk_1 - 1 \right\} \quad (7)$$

式中 I_E 为电场强度在极轴方向的分量, α, k_1, m 是材料常数,可以由只受电场作用的电滞回

线确定

$$f_2 = 1 - \beta \left[\left(\operatorname{th} k_2 \left(\frac{I_E}{E_C} + 1 \right) / \operatorname{th} k_2 \right)^n - 1 \right] \quad (8)$$

材料常数 β, k_2, n 可以由只受电场作用的蝶形曲线确定。

将式(7),(8)代入式(6),由式(5)导出

$$\gamma_{ij} = \gamma'_{ij} + s_{ijkl}\sigma_{kl} + f_2 d_{kij}E_k \quad (9)$$

$$D_i = D'_i + f_1 \epsilon_{ik}E_k + f_2 d_{ikl}\sigma_{kl} + \frac{1}{2} \epsilon_{kl}E_k E_l \frac{\partial f_1}{\partial I_E} a_i + d_{kmn}E_k \sigma_{mn} \frac{\partial f_2}{\partial I_E} a_i \quad (10)$$

令 $\tilde{D}^r = \frac{1}{2} \epsilon_{kl}E_k E_l \frac{\partial f_1}{\partial I_E} + d_{kmn}E_k \sigma_{mn} \frac{\partial f_2}{\partial I_E}$, \tilde{D}^r 为一个坐标变换的不变量。记 $\gamma_{ij}^* = \gamma_{ij} - \gamma'_{ij}$, $D_i^* = D_i - D'_i - \tilde{D}^r a_i$, 则有

$$\gamma_{ij}^* = s_{ijkl}\sigma_{kl} + f_2 d_{kij}E_k \quad (11)$$

$$D_i^* = f_2 d_{ikl}\sigma_{kl} + f_1 \epsilon_{ik}E_k \quad (12)$$

式(11),(12)为以应力、电场强度为自变量的本构关系。

为了进行有限元分析,需要建立以应变、电场强度为自变量的本构关系。由式(11)得

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\gamma_{kl}^* - f_1 e_{kij}E_k \quad (13)$$

式中 $e_{ijk} = c_{ijmn}d_{mn}$ 。将式(13)代入式(12)中,得到

$$D_i^* = f_1 e_{ikl}\gamma_{kl}^* + \hat{\epsilon}_{ik}^r E_k \quad (14)$$

式中 $\hat{\epsilon}_{ik}^r = \epsilon_{ik} - f_2 d_{imn}e_{kmn}$ 。

式(13),(14)就是进行有限元计算所需要的以应变、电场强度为自变量的本构关系。

根据线性压电材料不同本构关系的系数转换关系,我们可以直接从 $s_{ijkl}, e_{kij}, \epsilon_{ik}, f_1, f_2$ 求出 $c_{ijkl}, e_{kij}, \hat{\epsilon}_{ik}^r$ 。

根据本构式(13),(14),我们建立有限元模型,采用类似非线性弹性问题的有限元处理方法,用迭代法求解有限元建立起的非线性方程组,可对铁电材料力学行为进行分析。

2 算例

2.1 本构关系中材料常数 $\alpha, k_1, m, \beta, k_2, n$ 的确定

PLZT 的材料参数取自 Lynch^[18]。根据式(9),(10)在 $\sigma_{ij} = 0, E_1 = E_2 = 0$ 时有电场和应变、电场和电位移的关系为

$$\begin{aligned} \gamma_{33} &= \gamma'_{33} + f_2 d_{333}E_3 \\ D_3 &= D'_3 + f_1 \epsilon_{33}E_3 + \frac{1}{2} \epsilon_{kl}E_k E_l \frac{\partial f_2}{\partial I_E} a_3 \end{aligned} \quad (15)$$

根据式(15)拟合实验曲线得到 $\alpha = 0.9624, k_1 = 0.9150, m = 20, \beta = 3.331, k_2 = 0.1143, n = 0.07619$ 并和实验结果对比得出图1,图2。从图1,图2可以看出在不考虑翻转的情况下,式(6),(7),(8)所提出的对压电材料的本构的描述是合适的。

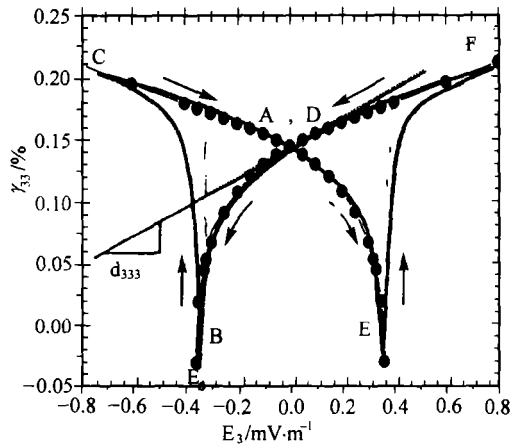


图1 电场-应变图

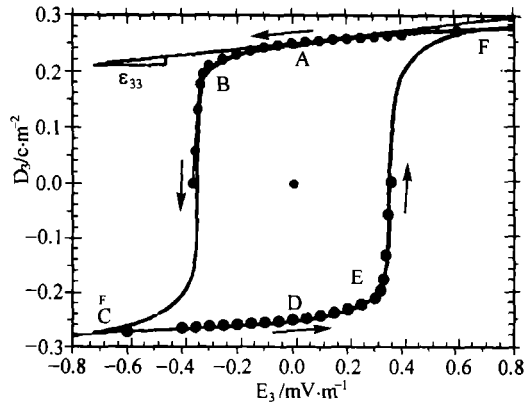


图2 电场-电位移图

图1,图2中,实线为实验结果^[18],黑点是公式(15)拟合结果。

2.2 有关紧凑拉伸试样的断裂分析

下面我们对 Park 和 Sun^[13]紧凑拉伸试样断裂实验进行计算,试样如文献[13]所述,试样是 PZT-4 材料制成的,裂隙中间介质是硅油,采用物理实际电导通电边界条件。本文没有考虑在强电场下裂隙中间介质和裂隙顶端压电材料的电击穿。并根据样品制作过程设想裂纹尖端是半径为 r 半圆,后部为 0.46 mm 宽的细缺口,这部分长为 10.5 mm,在半圆和细缺口过渡部分为梯形。根据模型的对称性,可以只计算上部分。在裂隙顶端的网格划分如图 3 所示。有限元计算使用了 3188 个 8 结点单元,共 9651 个结点。

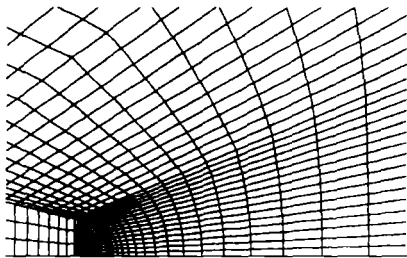


图3 缺口端部的网格划分

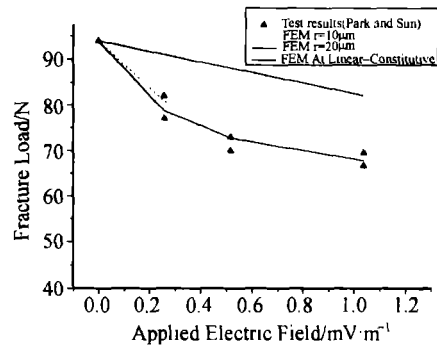


图4 紧凑拉伸试样有限元结果和实验结果对比

PZT-4 材料的参数取自 Park 和 Sun^[13]。本文使用临界断裂应力准则,即裂纹的扩展是因为裂隙顶端最大正应力值达到临界值。这样以外加零电场下的裂隙顶端应力最大值 194.4MPa ($r=0.020\text{mm}$)为断裂强度(断裂应力临界值),得到其他外电场下的断裂载荷,并和文献[13]的实验比较,结果如图 4。图中列出了在缺口顶端半径是 0.020mm 和 0.010mm 的半圆时的有限元结果,可以看出缺口的形状对结果有一定的影响。图 4 中同时列出了从线性本构出发得到的外加电场-断裂载荷示意图,明显看出采用非线性本构后,有限元计算和实验符合要有很大程度的提高。从以上结果还可以看出,非线性本构解释了为什么在正电场的增强,电场对断裂应力的影响会趋于平缓。在外加负电场时,在裂纹顶端有 $E_3 < -E_C$,电畴要发生翻转,将在另外文章中讨论。实际上本文主要是在外加正电场的情况下,研究压电材料

的力学行为。图5是在外加电场为0.52MV/m、外加应力为71.4N时的裂纹尖端电场强度 E_3 的分布示意图,并和线性解进行对比。

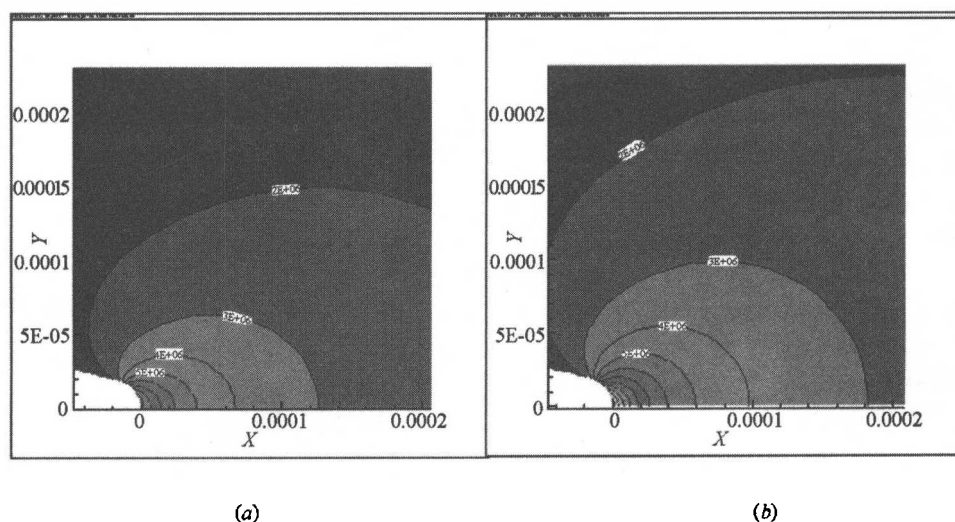


图5 线性解的 E_3 场(a)和基于非线性材料本构关系求解的缺口顶端电场强度 E_3 (b)

从图5可以看出,在同样边界条件下,用非线性本构计算出来的电场强度要比线性本构所得出来的电场强度大。这个规律在裂纹问题时同样适用。

3 结论

压电材料非线性性质对它的力学行为有着很重要的影响。虽然电饱和模型能定性解释紧凑拉伸试样断裂试样的基本实验现象,但是电饱和模型不能解释当电场持续增大时,断裂载荷的非线性响应。采用本文提出的铁电材料非线性本构模型,就可以很好地解释紧凑拉伸的断裂实验,并证明了临界断裂的应力判断准则是适用的。

参考文献

- 1 Parton VZ. Fracture mechanics of piezoelectric materials. Acta Astronautica, 1976, (3): 671~683
- 2 Deeg WF. The analysis of dislocation, crack and inclusion problems in piezoelectric solids. [Ph. D Thesis] Stanford University, 1980
- 3 Pak YE, Herrmann G. Conservation laws and the material momentum tensor for the elastic dielectric. Int J Engng Sci, 1986, 24: 1365~1374
- 4 McMeeking RM. Electrostrictive forces near crack like flaws. J Appl Phys, 1989, 40: 615~627
- 5 Pak YE. Crack extension force in a piezoelectric material. J Appl Mech, 1990, 57: 647~653
- 6 Sosa H. On the fracture mechanics of piezoelectric solids. Int J Solids Structures, 1992, 29: 2613~2622
- 7 Suo Z, Kuo CM, Barnett DM, et al. Fracture mechanics for piezoelectric ceramics. J Mech Phys Solids, 1992, 40: 739~765
- 8 Suo Z. Models for breakdown-resistant dielectric and ferroelectric ceramics. J Mech Phys Solids, 1993, 41: 1155~1176
- 9 Zhang TY, Hack IE. Mode III cracks in piezoelectric materials. J Appl Phys, 1992, 71: 5865~5870
- 10 Yang W, Suo Z. Cracking in ceramic actuators caused by electrostriction. J Mech Phys Solids, 1994, 42: 649~663

- 11 Dunn ML. The effects of crack face boundary conditions on the fracture mechanics. *Eng Frac Mech*, 1994, 48: 25~39
- 12 Zhang TY, Tong P. Fracture mechanics for a mode III crack in a piezoelectric material. *Int J Solids Structures*, 1996, 33: 343~359
- 13 S Park, Sun CT. Fracture criteria for piezoelectric ceramics. *J Am Ceram Soc*, 1955, 78(6): 1475~1480
- 14 Gao HJ, Zhang TY, Tong P. Local and global energy release rates for an electrically yielded crack in a piezoelectric ceramic. *J Mech Phys Solids*, 1997, 45: 491~510
- 15 T. C. Wang. Analysis of strip electric saturation model of crack problem in piezoelectric materials. *Int J Solids Structures*, 1999, 37: 6031~6049
- 16 Spencer AJM. The Formulation of Constitutive Equation for Anisotropic Solids. *NO295-Comportement Mecanique Des Solides Anisotropes*, 1980. 2~25
- 17 Spencer AJM. Part III: Theory of Invariants. *NO295-Comportement Mecanique Des Solides Anisotropes*, 1980. 239~353
- 18 Lynch CS. The effect of uniaxial stress on the electromechanical response of 8/65/35 PLZT *Acta mater*, 44: 4137~4148
- 19 Ralph C Smith, Zoubeida Ounaies. Domain Wall Model for Hysteresis in Piezoelectric Materials. *NASA/CR-1999-209832*. ICASE Report No. 99-52