

# 铁电陶瓷宏观单轴力电行为的双面模型<sup>1)</sup>

周志东 赵社戌 匡震邦

(上海交通大学工程力学系, 上海 200240)

**摘要** 铁电陶瓷以其优越的力电耦合性作为新型的智能材料使用. 提出基于弹塑性双面理论的宏观铁电本构模型. 根据铁电陶瓷内部电畴在外电场和机械场作用下的微观运动, 在宏观上除引入材料的畴变面外, 还首次引入饱和面, 并考虑以畴变面与饱和面之间的广义距离来表征铁电陶瓷的非线性行为. 数值计算结果与实验数据的比较表明所提出的初步理论可适当地反映力电加载下铁电陶瓷的宏观非线性行为.

**关键词** 铁电陶瓷, 双面本构模型, 力电耦合, 畴变

## 引 言

所谓铁电效应是指陶瓷材料由高温向低温变化时会在某一温度或某一温度范围发生结构相变而产生自发极化和自发应变, 相同方向的极化组成的区域称为电畴, 而这种自发极化和自发应变随着外加机械载荷与电载荷的变化而发生方向改变或简称翻转, 极化方向的翻转也称为畴变. 目前应用最为广泛的是钙钛矿型铁电陶瓷, 它具有  $ABC_3$  的分子结构, 如  $BaTiO_3$ ,  $PbTiO_3$  和 PZT 型陶瓷等. 以  $BaTiO_3$  为例, 在  $130^\circ$  以上是顺电相, 属立方晶系,  $Ba^{+2}$  位于角点,  $Ti^{+4}$  位于体心,  $O^{-2}$  位于面心, 此时正电荷和负电荷的中心重合而电呈中性; 在  $130^\circ$  以下是铁电相, 钛离子偏离中心, 正负电荷中心不重合, 从而产生电偶极矩而自发极化, 同时由立方相转为四方相产生自发相变应变. 铁电体极化后, 施加反极化方向电场, 当超过一定的矫顽值, 发生  $180^\circ$  的极化转换; 沿极化方向施加压应力, 或施加  $90^\circ$  电场, 超过矫顽值后, 发生  $90^\circ$  极化转换<sup>[1,2]</sup>. 铁电体内部这种电畴翻转在宏观上表现出很强烈的非线性现象, 且具有能量的耗散.

铁电陶瓷的力电耦合行为使它在许多电子元件、器件中得到应用, 因此深刻了解铁电陶瓷的力电耦合行为对材料的影响, 建立合适的、且便于应用的材料本构关系十分必要. Toupin<sup>[3]</sup>, Eringer<sup>[4]</sup> 采用连续介质热力学方法建立了铁电材料宏观唯象理论的一般框架. 文献 [1,5~9] 用宏微观的理论, 从不同角度讨论了铁电体的本构关系. Bassiouny 和

Maugin<sup>[10]</sup> 在热力学框架下引入内变量的概念, 这些变量反映了材料状态依赖加载历史的特性, 并且引入一个“屈服函数”, 各向同性硬化和随动硬化. Kamlah 和 Tsakmki<sup>[11]</sup> 把自发应变分解成两部分, 一部分由宏观极化产生, 与自发极化方向有关, 另一部分由铁弹性翻转产生, 与材料的宏观极化无关. Landis<sup>[12]</sup>, Huber 和 Fleck<sup>[13]</sup> 对多晶陶瓷提出一个完全耦合, 多轴, 对称的本构关系, 他们在模型中考虑了材料常数随着加载而变化, 在 Helmholtz 自由能中加入了材料常数变化引起的附加项, 推演出复杂的多轴本构方程.

本文针对钙钛矿型铁电陶瓷, 基于不可逆热力学的理论框架, 提出了包含“畴变面”和“饱和面”的单轴双面理论. 这个模型类似于 Dafalias 和 Popov<sup>[14]</sup> 的金属弹塑性双面理论. 在应力和电场构成的空间中存在两个凸曲面, 一个为材料极化“畴变面”, 另一个为材料极化“饱和面”, “畴变面”在“饱和面”内移动, 旋转和伸缩. 在“畴变面”内, 电位移和应变可逆且与应力和电场呈线性关系; 在“畴变面”与“饱和面”之间, 电位移和应变不可逆而与应力和电场呈非线性关系; 在“饱和面”外, 电畴的翻转达到饱和, 电位移和应变与应力和电场恢复为线性关系. 当加载点在“畴变面”上向外移动时, 电位移和应变在“畴变面”上沿曲面法向运动, 类似于经典塑性理论的法向流动规则. 在这个模型中, 我们引入“畴变面”上加载点与“饱和面”上相应点的广义位移  $\delta$  作为内变量, 用这个内变量来联系外加载荷与铁电陶瓷内部电畴翻转的程度, 从而反映材料电位

2002-05-08 收到第 1 稿, 2004-08-02 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (10132010, 10472069).

移和应变在外载下的非线性性质. 本文最后用此模型模拟 PZT-51 铁电陶瓷的相应, 并与实验数据进行了比较.

### 1 铁电体基本方程

铁电陶瓷一般工作在小变形, 等温的情况下, 因此我们考虑铁电体内无体力、无剩余电荷的小变形状态. 由力平衡方程和高斯定律得

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

其中  $\sigma_{ij}$  为柯西应力张量,  $D_i$  为电位移.

由小变形应变-位移关系和电学准静态条件得

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad E_i = -\phi_{,i} \quad (2)$$

其中  $\varepsilon_{ij}, u_i, E_i$  和  $\phi$  分别为应变张量, 材料位移分量, 电场强度和电势.

对于极化的铁电陶瓷, 应变和电位移可以分解成两部分: 应变的可逆部分  $\varepsilon_{ij}^r$  与不可逆部分  $\varepsilon_{ij}^p$ ; 电位移的可逆部分  $D_i^r$  与不可逆部分  $D_i^p$ .  $\varepsilon_{ij}^p$  和  $D_i^p$  系由电畴翻转引起. 类似于压电材料本构方程, 铁电材料的增量本构方程可以写为

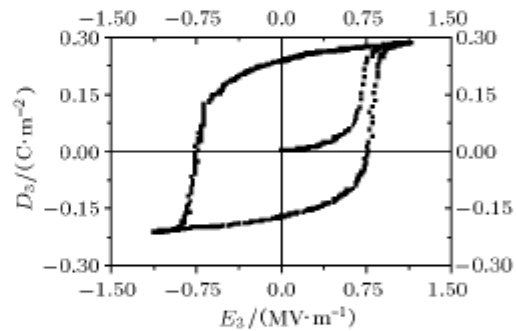
$$\left. \begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{ij} &= s_{ijkl}^E \dot{\sigma}_{kl} + d_{kij} \dot{E}_k + \dot{\varepsilon}_{ij}^p \\ \dot{D}_i &= d_{ikl} \dot{\sigma}_{kl} + \kappa_{ij}^{\sigma} \dot{E}_j + \dot{D}_i^p \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

其中  $s_{ijkl}^E$  为恒电场下测得的四阶弹性柔度张量,  $d_{kij}$  为三阶压电张量,  $\kappa_{ij}^{\sigma}$  为恒应力下测得的二阶介电张量. 从方程 (3) 中可以看出, 只要得到自发应变和自发极化变化率  $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$  和  $\dot{D}_i^p$ , 铁电陶瓷在外载作用下的整体非线性行为就可以得到.

### 2 铁电体宏观非线性现象的微观描述

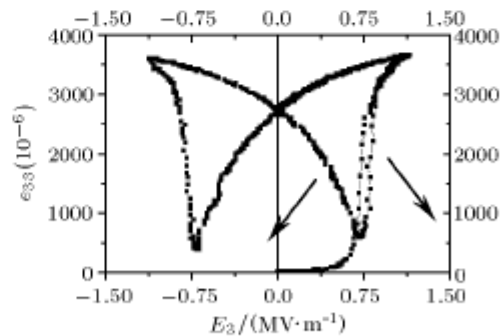
铁电陶瓷的电畴翻转是其非线性行为的根本原因. 钙钛矿型铁电陶瓷在室温下内部电畴有 6 种取向可能<sup>[1,2]</sup>, 因而在外载的作用下电畴的翻转有 180° 和 90° 两种可能. 从宏观现象来看, 铁电陶瓷有 3 种典型的非线性现象:  $D-E$  (或  $P-E$ ) 电滞回线,  $\varepsilon-E$  蝴蝶回线和  $\sigma-\varepsilon$  铁弹性回线. 从铁电体的微观结构来看, 正是由于各种取向的极化电畴在外载荷 (外应力和外电场) 的作用下发生翻转, 而且这种翻转随外加载荷具有一定的 (时间) 过程性, 使得铁电体在宏观上表现出很强烈的非线性效应. 这与金属由于内部位错发生、开动、堆积等微观现象导致宏观的塑性变形的机制有所不同, 但在宏观现象的描述上有很大的类似性.

未极化铁电体内部各方向的电畴取向呈均等状态, 宏观上没有极化现象. 当未极化铁电体上加载纯循环电场, 图 1(a) 为典型的电滞回线图. 在电场的初始加载阶段, 电位移线性变化, 即由于电畴内的正负离子在外电场作用下相互靠近或远离而使电位移线性变化, 属于线性介电现象; 当电场不断增大, 超过一门槛值或矫顽电场  $E_c$  时, 部分电畴内的正负离子迅速跳跃到新的位置, 即电畴发生 180° 翻转或先翻转 90° 再翻转 90° 的 90°-90° 翻转, 宏观上电位移有急剧的增加, 呈现很强烈的非线性现象; 当电场继续增加到一饱和值, 绝大部分电畴方向已趋近于与电场方向一致, 从而整个试件的电畴指向变化基本停止, 随后只是由于电畴内正负离子间相互分离, 而呈现线性变化. 在宏观上铁电体达到一个完全极化状态, 又重新出现线性介电现象. 因而在铁电体内部微观结构中, 整个过程可以分为 3 个阶段: 无铁电畴变化的线性阶段, 电畴的启动和继续翻转阶段以及电畴翻转的饱和阶段.



(a) 纯电场下电滞回线

(a) Electric field-displacement curve



(b) 纯电场下蝴蝶回线

(b) Electric field-strain curve

图 1 PZT-51 的实验值<sup>[17]</sup>

Fig.1 The experiment data of PZT-51<sup>[17]</sup>

图 1(b) 给出的是铁电体典型蝴蝶回线图, 初始电场加载时, 大部分电畴内部离子在电磁力的作用下而收缩, 由压电效应产生线性应变; 当电场达到矫顽电场时, 电畴有  $180^\circ$  或  $90^\circ$ - $90^\circ$  翻转, 应变有一个急剧的减小和随后的再增加过程. 本文认为铁电体内部电畴  $90^\circ$ - $90^\circ$  翻转比  $180^\circ$  翻转占优, 在宏观上应变先减小, 再增加; 当电场增加到饱和值, 电畴的翻转达到饱和, 在宏观上应变呈现线性增加, 恢复到压电效应. 对于单个电畴,  $180^\circ$  畴变并不能产生自发应变, 但由于电畴  $90^\circ$ - $90^\circ$  翻转和许多电畴翻转的延迟性与过程性, 使得应变在宏观上表现为非线性.

在沿铁电陶瓷极化方向的压应力作用下, 电位移和应变的变化有相似的非线性现象. 初始应力下, 铁电体内部电畴收缩, 电位移和应变线性变化; 当超过矫顽应力场时, 电畴只发生  $90^\circ$  翻转, 电位移和应变急剧降低, 具有强非线性; 当压应力达到饱和值, 内部电畴翻转饱和, 电位移和应变又恢复线性变化. 在微观上整个过程与纯电场加载下电畴翻转变类似, 在宏观上也表现出一定的相似性.

### 3 铁电体单轴双面模型

目前有效的铁电体本构实验绝大多数是单轴加载实验, 而多轴下有效的铁电体本构实验很少, 因而本文讨论单轴本构模型.

按照前节的讨论, 在电场和应力场同时加载时, 在力电空间中材料存在一个畴变面  $f$  和一个饱和面  $F$ , 且认为在材料变形过程中, 材料的饱和面固定不变; 由于力电空间和应变电位移空间的同构性, 与塑性力学中的 Drucker 理论类似, 假设存在法向规则, 这和塑性力学中的 Dafalias 和 Popov<sup>[14]</sup> 双面理论很相似, 引入畴变面上加载点到饱和面上相应加载点的广义距离  $\delta$  作为内变量来联系外加载荷与铁电陶瓷内部电畴翻转的程度, 描述材料极化和应变在外载下的非线性性质.

在沿极化方向压应力  $\sigma$  和与极化方向平行的电场  $E$  加载下, 变形具有单轴的性质, 此时铁电体的增量本构方程式 (3) 简化为

$$\left. \begin{aligned} \dot{\epsilon} &= s\dot{\sigma} + d\dot{E} + \dot{\epsilon}^p \\ \dot{D} &= d\dot{\sigma} + \kappa\dot{E} + \dot{D}^p \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式中  $s = s_{3333}^E$ ,  $d = \bar{d}\left(\frac{D^p}{D_s^p}\right)$ ,  $\kappa = \kappa_{33}^\sigma$ ,  $\bar{d}$  为极化铁电陶瓷的压电系数,  $D_s^p$  为极化铁电陶瓷的宏观剩余

极化, 它小于单个晶粒的饱和极化值, 因为在多晶铁电体内部不同电畴的取向不可能与外电场完全一致.  $D, D^p, \epsilon, \epsilon^p$  均为沿极化方向的分量.

定义畴变面  $f$  为

$$f(E - E_0, \sigma - \sigma_0) = [(E - E_0)^2 + \gamma_1(\sigma - \sigma_0)^2 - \beta_1|\sigma E|]^{1/2} = E_c \quad (5)$$

$E_c$  为铁电体宏观矫顽场,  $E_0, \sigma_0$  为力电空间中畴变面的中心坐标, 铁电材料初始未极化时位于  $\sigma = E = 0$  的原点, 当应力电场增加并且达到矫顽场, 屈服面开始移动, 旋转或收缩,  $E_0, \sigma_0$  达到新的值. 为了简化数学模型, 由一致性条件, 此单轴模型中假设畴变面中心的演化简单与外加载荷相关, 即

$$\left. \begin{aligned} \delta E_0 &= \delta E \left[ 1 - \frac{\beta_1|\sigma|\text{sgn}(E)}{2(E - E_0)} \right] \\ \delta \sigma_0 &= \delta \sigma \left[ 1 - \frac{\beta_1|E|\text{sgn}(\sigma)}{2\gamma_1(\sigma - \sigma_0)} \right] \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

考虑机械场和电场的耦合, 即电场变化时产生应变变化, 应力变化时产生电位移的变化, 类似于 Landis<sup>[12]</sup>, Huber 和 Fleck<sup>[13]</sup> 提出的屈服方程, 在畴变面  $f$  中加入耦合项  $\beta_1|\sigma E|$ ,  $\beta_1$  是与加载压应力有关的一个材料参数,  $\gamma_1$  是表征应力与电场等效的材料常数.

定义饱和面  $F$

$$F(E, \sigma) = [E^2 + \gamma_2\sigma^2 - \beta_2|E\sigma|]^{1/2} = E_S \quad (7)$$

其中  $E_S$  是铁电体宏观饱和值, 这是一个确定值. 此定义与塑性饱和面不同, 塑性体中的饱和面是一个不十分确定的概念, 因而采用饱和面的概念是十分恰当的. 单轴电场加载下, 如果铁电体在某一工作循环中电场最大只达到  $E_H < E_S$ , 则应用  $E_H$  代替  $E_S$ .  $\gamma_2$  是表征应力与电场等效的材料参数,  $\beta_2$  是表征机电耦合的材料参数.

类似于金属塑性流动变形, 当加载达到矫顽场时, 铁电体应变和电位移沿着畴变面的法向, 定义流动率

$$\dot{\Gamma} = \frac{\langle \dot{\Sigma} : n \rangle}{H} n, \quad \dot{\Sigma} : n = \dot{\Sigma}_{ab} n_{ab} \quad (8)$$

其中  $\Gamma = \{\epsilon^p, D^p\}$ ,  $\Sigma = \{\sigma, E\}$ ,  $H$  为等效模量,  $n$  为畴变面上加载点的法向矢量

$$n_{ab} = \frac{\partial f / \partial \Sigma_{ab}}{N}, \quad N = \left[ \frac{\partial f}{\partial \Sigma_{ab}} \frac{\partial f}{\partial \Sigma_{ab}} \right]^{1/2} \quad (9)$$

在单轴应力电场作用下, 方程 (8) 退化为

$$d\varepsilon^p = \frac{1}{N^2 H_1} \left\langle \frac{\partial f}{\partial \sigma} d\sigma + \frac{\partial f}{\partial E} dE \right\rangle \frac{\partial f}{\partial \sigma} \quad (10a)$$

$$dD^p = \frac{1}{N^2 H_2} \left\langle \frac{\partial f}{\partial \sigma} d\sigma + \frac{\partial f}{\partial E} dE \right\rangle \frac{\partial f}{\partial E} \quad (10b)$$

其中  $H_1, H_2$  为等效模量,  $\frac{1}{H_1} = \frac{[d\sigma]}{h_{11}} + \frac{[dE]}{h_{12}}$ ,  $\frac{1}{H_2} = \frac{[d\sigma]}{h_{21}} + \frac{[dE]}{h_{22}}$ ,  $[x]$  表示当  $x \neq 0$ ,  $[x] = 1$ ;  $x = 0$ ,  $[x] = 0$ ,  $\langle x \rangle = (|x| + x)/2$ . 理论上, 上列系数应由一致性条件确定, 但由于理论本身的不完善性, 采用一致性理论得到的结果并不理想, 为此作者采用双面理论的近似方法来半经验性地确定这些系数, 由于确定了初始畴变面和饱和面, 由此近似方法确定的系数能较好地与实验结果一致.

考虑当外电场达到矫顽值时, 电畴开始翻转, 电畴方向急剧变化, 有  $H_2 \rightarrow 0$ ; 当外电场达到饱和值时, 电畴的翻转停止, 电位移不再变化, 有  $H_2 \rightarrow \infty$ . 因此引入指数函数来描述等效模量的变化

$$h_{22} = \frac{1}{\kappa} \left[ \alpha \exp\left(\eta \left| \frac{2\delta - \delta_{in}}{\delta_{in}} \right| \right) - 1 \right] \quad (11)$$

其中  $\kappa = \kappa_{33}^e$ ;  $\delta_{in}$  为加载点刚达到初始畴变面时的初始广义距离  $\delta$ ;  $\alpha, \eta$  为模拟实验得到的材料参数.

根据自发应变与自发极化的内在联系, 自发应变写为

$$\varepsilon^p = \varepsilon_s \left| \frac{D^p}{D_s^p} \right|^m, \quad d\varepsilon^p = \varepsilon_s m \left| \frac{D^p}{D_s^p} \right|^{m-1} \frac{dD^p}{D^p} \quad (12)$$

把式 (10b) 代入式 (12) 的第二式, 经过简单的数学推导得到

$$h_{12} = \lambda |h_{22}|, \quad \lambda = \left( \frac{\partial f}{\partial \sigma} / \frac{\partial f}{\partial E} \right) D^p \left( \frac{D_s^p}{D^p} \right)^m / m \varepsilon_s \quad (13)$$

其中  $m$  为材料参数,  $\varepsilon_s$  表征极化铁电体在不同压应力下的外加电场  $E = 0$  时的剩余应变, 当压应力等于零时,  $\varepsilon_s$  与剩余应变  $\varepsilon_R$  相等.

$$\left. \begin{aligned} h_{11} &= \frac{1}{Y} \left[ \alpha_1 \exp\left(\eta \left| \frac{2\delta - \delta_{in}}{\delta_{in}} \right| \right) - 1 \right] \\ h_{21} &= \frac{1}{d} \left[ \alpha_1 \exp\left(\eta \left| \frac{2\delta - \delta_{in}}{\delta_{in}} \right| \right) - 1 \right] \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

其中  $Y$  为弹性柔度,  $d = \bar{d} \left( \frac{D^p}{D_s^p} \right)$ ,  $\alpha_1$  为模拟实验获得的材料参数.

畴变面上加载点到饱和面上响应加载点的广义距离  $\delta$  表示为

$$\delta = [(\bar{s} - s) \cdot (\bar{s} - s)]^{1/2} \quad (15)$$

$s$  为畴变面上当前加载点,  $\bar{s}$  为饱和面上相应加载点,  $\delta$  为两点之间通常的线性距离. 对于单轴简单加载, 即应力或电场有一个保持恒定, 饱和面上的加载点可以由饱和方程 (7) 确定. 而对于复杂的非比例加载工况, 饱和面上相应加载点需要由饱和方程 (7) 与非比例加载路径相关的参变量结合得到, 但此时用两点间的线性距离定义广义距离  $\delta$  将不是很合适, 而定义一种复杂的广义距离来精确描述铁电体内部电畴翻转在复杂力电加载下的时间过程性将十分必要 [14].

以上整个过程是一个非耦合的过程, 这里的非耦合不是指力电行为的非耦合, 而是本构方程的推演过程是非耦合的, 因为在流动率中模量并不是由一致性条件得到, 而是通过观测运动的畴变面与饱和面之间关系和电场应力与电位移应变之间的非线性变化得到. 这与通过一致性条件、运用随动硬化率得到流动率中模量的方法不同, 也和通过定义能量函数进行材料的本构模拟的方法不同 [13,15].

#### 4 数值算例与分析

最近不少学者进行了 PZT 铁电陶瓷的实验研究 [16,17], 本节应用单轴双面模型比较数值模拟结果与可靠的铁电陶瓷 PZT-51 的实验结果 [17]. 表 1 列出了 PZT-51 的材料常数.

根据 PZT-51 铁电陶瓷单轴电滞回线和蝴蝶回线 [17], 确定本文畴变条件中“畴变强度” $E_c = 0.776$  (MV/m), 饱和条件中“饱和强度” $E_s = 1.0$  (MV/m); 根据纯压应力加载下应力达到屈服、饱和时的值, 得应力屈服参数  $\gamma_1 = 0.0015$  (V<sup>2</sup>m<sup>2</sup>/N<sup>2</sup>), 应力饱和参数  $\gamma_2 = 0.000156$  (V<sup>2</sup>m<sup>2</sup>/N<sup>2</sup>); 根据不同

表 1 PZT-51 铁电陶瓷主要的材料常数

Table 1 Properties of the soft PZT-51 ceramic

$s_{3333}^E /$ (m <sup>2</sup> ·N <sup>-1</sup> )	$\bar{d} /$ (m·V <sup>-1</sup> )	$\kappa_{33}^e /$ (F·m <sup>-1</sup> )	$E_c /$ (MV·m <sup>-1</sup> )	$\sigma_c /$ /MPa	$\varepsilon_{33}^R$	$D_s^p /$ (C·m <sup>-2</sup> )
$3.03 \times 10^{-11}$	$1.52 \times 10^{-9}$	$6.666 \times 10^{-8}$	0.676	21.8	$2.7 \times 10^{-3}$	0.193 8

压应力下的电滞回线的不同矫顽电场, 得到耦合参数  $\beta_1(\text{Vm}/\text{N})$

$$\beta_1 = 0.015 - 0.0003(|\sigma| - \sigma_c) \quad (16)$$

根据不同压应力下电滞回线的不同饱和值, 得到耦合参数  $\beta_2(\text{Vm}/\text{N})$

$$\beta_2 = \begin{cases} 0.02, & |\sigma| \leq \sigma_c \\ 0.015, & |\sigma| > \sigma_c \end{cases} \quad (17)$$

根据不同压应力下剩余极化值, 得到材料参数  $\alpha$

$$\alpha = 1.01 + 0.04|\sigma/\sigma_c|^2 \quad (18)$$

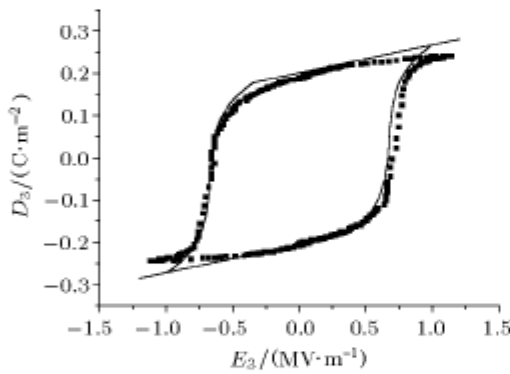
根据不同压应力下蝴蝶回线中的不同剩余应变, 得到等效极化应变  $\varepsilon_s$

$$\varepsilon_s = (0.27 - 0.04(|\sigma| - \sigma_c))\% \quad (19)$$

其余的材料参数  $\eta=0.36, \alpha_1=1.2$  和  $m=1.2$ . 本文

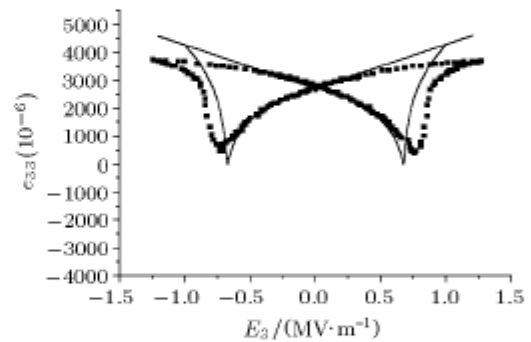
模型共采用了 9 个材料参数:  $\gamma_1, \gamma_2, \beta_1, \beta_2, \alpha, \alpha_1, \eta, m, \varepsilon_s$ , 从下述模拟实验看出其结果比文献 [15] 中采用 8 个材料参数的单轴模型获得的模拟结果更接近实验结果.

图 2 是本文模型计算不同常压应力作用下电滞回线和蝴蝶回线与实验数值的比较结果. 可以看出, 单轴双面模型能够较好地反映在不同常压应力状态下电场与电位移, 电场与应变的非线性效应, 当应力从 0 变化到 -80 MPa 时, 矫顽电场减小, 剩余极化和剩余应变也减小, 回线之间的面积也减小, 铁电体具有退极化效应, 这正是由于在压应力的作用下, 铁电体内部电畴方向更倾向于指向横轴方向而转向纵向变得很困难, 从整体来看, 电畴的运动越来越不活跃. 可以看出在压应力作用下  $90^\circ$  畴变比  $180^\circ$  畴变具有更多的优势, 图 3 是极化铁电体在压应力作用下的应力应变关系, 电位移应力关系的数值计算, 其结果和实验结果的趋势是一致的.



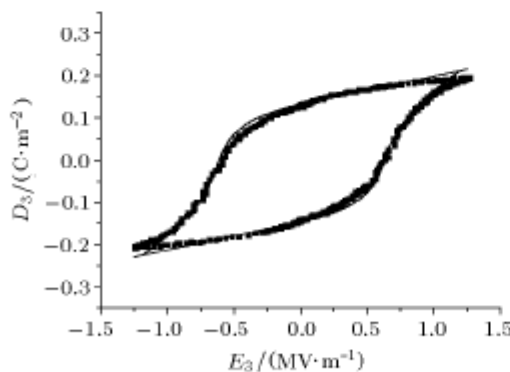
(a) 单轴压应力  $\sigma = 0$  MPa

(a) The axial compressive stress  $\sigma = 0$  MPa



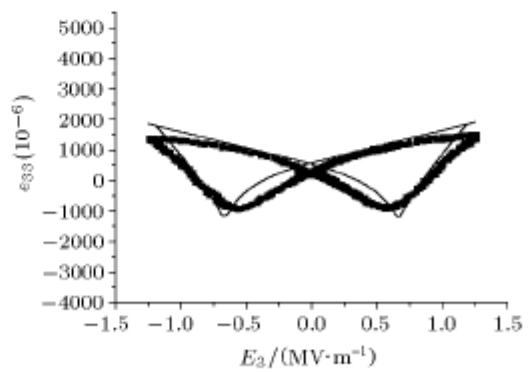
(b) 单轴压应力  $\sigma = 0$  MPa

(b) The axial compressive stress  $\sigma = 0$  MPa



(c) 单轴压应力  $\sigma = -20$  MPa

(c) The axial compressive stress  $\sigma = -20$  MPa

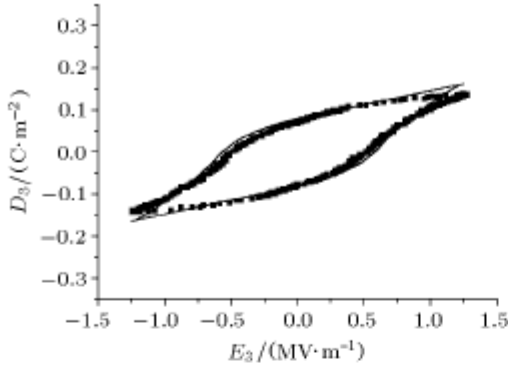


(d) 单轴压应力  $\sigma = -20$  MPa

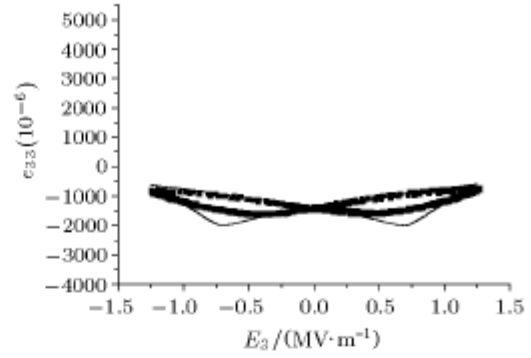
(d) The axial compressive stress  $\sigma = -20$  MPa

图 2 力电加载下理论结果 (—) 与实验 (■)<sup>[17]</sup> 比较

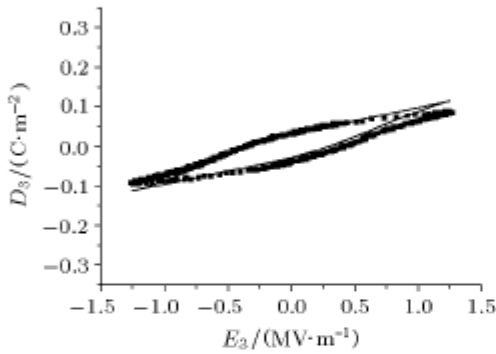
Fig.2 Comparison of theory (—) and experiment (■)<sup>[17]</sup>



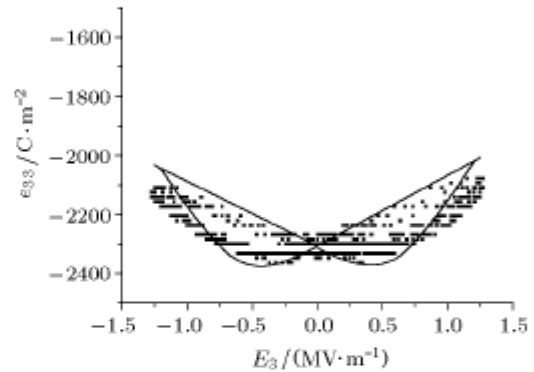
(e) 单轴压应力  $\sigma = -40$  MPa  
 (e) The axial compressive stress  $\sigma = -40$  MPa



(f) 单轴压应力  $\sigma = -40$  MPa  
 (f) The axial compressive stress  $\sigma = -40$  MPa



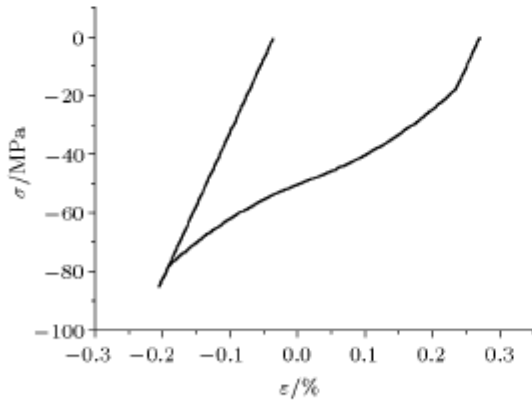
(g) 单轴压应力  $\sigma = -80$  MPa  
 (g) The axial compressive stress  $\sigma = -80$  MPa



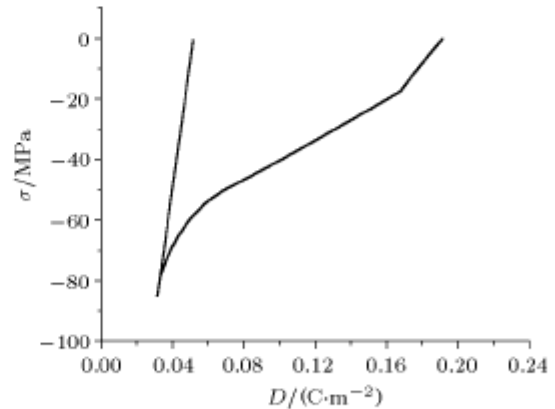
(h) 单轴压应力  $\sigma = -80$  MPa  
 (h) The axial compressive stress  $\sigma = -80$  MPa

图 2 力电加载下理论结果 (—) 与实验 (■)<sup>[17]</sup> 比较 (续)

Fig.2 Comparison of theory (—) and experiment (■)<sup>[17]</sup>(continued)



(a)  $\sigma$ - $\epsilon$   
 (a) Stress-strain curve



(b)  $\sigma$ - $D$   
 (b) Stress-electric displacement curve

图 3 极化铁电体 PZT-51 在不同压应力下曲线

Fig.3 The Curve of PZT-51 applied compressive stress

## 5 结 论

在外电场与机械场加载下, 铁电陶瓷具有强烈的宏观非线性效应, 这种现象与经典弹塑性变形有相似之处, 但是其表现更复杂, 内部演化机理更深奥. 铁电体内部电畴的翻转被认为是铁电陶瓷宏观非线性的根源. 本文根据铁电陶瓷内部畴变的微观行为(电场应力作用下  $90^\circ$  畴变和  $180^\circ$  畴变), 基于弹塑性双面理论在应力电场空间中定义材料畴变曲面与饱和曲面, 认为铁电材料内部电畴微观行为可通过畴变面上加载点与饱和面上相应加载点的广义距离来表征. 利用本文模型计算结果也较好地符合实验数值结果. 可以看出, 经过一定的材料参数拟合之后, 宏观双面本构模型能较好地反映铁电陶瓷在一定机械与电场加载下的非线性行为.

## 参 考 文 献

- 1 Kamlah M, Jiang Q. A constitutive model for ferroelectric PZT ceramics under uniaxial loading. *Smart Mater Struct*, 1999, 8: 441~459
- 2 匡震邦. 非线性连续介质力学. 上海: 上海交通大学出版社, 2002 (Kuang Zhenbang. The Nonlinear Continuum Mechanics. Shanghai: Shanghai Jiaotong University Press, 2002 (in Chinese))
- 3 Toupin RA. The elastic dielectric. *J Rational Mech Anal*, 1956, 5: 849~915
- 4 Eringen AC. Mechanics of Continua. revised edn. Krieger, New York, 1980
- 5 Hwang SC, Lynch CS, McMeeking RM. Ferroelectric/Ferroelastic interactions and a polarization switching model. *Acta Metall Mater*, 1995, 43(5): 2073~2084
- 6 吕炜, 方岱宁, 黄克智. 铁电陶瓷细观本构模型. 力学学报, 1998, 30(5): 540~551 (Lü Wei, Fang Daining, Hwang Ke-hchih. A macroscopic-microscopic constitutive model for ferroelectric ceramics. *Acta Mechanica Sinica*, 1998, 30(5): 540~551 (in Chinese))
- 7 Hwang SC, Huber JE, McMeeking RM, et al. The simulation of switching in poly-crystalline ferroelectric ceramics. *Journal of Applied Physics*, 1998, 84: 1530~1540
- 8 Chen W, Lynch CS. A micro-electro-mechanical model for polarization switching of ferroelectric materials. *Acta Mater*, 1998, 46 (15): 5303~5311
- 9 Lu W, Fang DN, Li CQ, et al. Nonlinear electric-mechanical behavior and micromechanics modeling of ferroelectric domain evolution. *Acta Mater*, 1999, 47 (10): 2913~2926
- 10 Bassiouny E, Maugin GA. Thermodynamical formulation for coupled electro-mechanical hysteresis effects-IV. Combined electromechanical loading. *Int J Engng Sci*, 1989, 27 (8): 989~1000
- 11 Kamlah M, Tsakmakis C. Phenomenological modeling of the non-linear electro-mechanical coupling in ferroelectrics. *Int J Solids Struct*, 1999, 36: 669~695
- 12 Landis CM. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for poly-crystalline ferroelectric ceramics. *J Mech Phys Solids* (in press)
- 13 Huber JE, Fleck NA. Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment. *J Mecha Phys Solids*, 2001, 49: 785~811
- 14 Dafalias YE, Popov EP. Plastic internal variables formalism in cyclic plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, 1976, 98: 645~651
- 15 Cocks ACF, McMeeking RM. A phenomenological constitutive law for the behaviour of ferroelectric ceramics. *Ferroelectrics*, 1999, 228: 219~228
- 16 Lynch CS. The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical responses 8/65/35 PLZT. *Acta Mater*, 1996, 44(10): 4137~4148
- 17 Fang DN, Li CQ. Nonlinear electric-mechanical behavior of a soft PZT-51 ferroelectric ceramic. *Journal of Materials Science*, 1999, 34: 4001~4010

## TWO-SURFACE MODEL OF MACROSCOPIC ELECTRO-MECHANICAL BEHAVIOR FOR FERROELECTRICS UNDER UNIAXIAL LOADING<sup>1)</sup>

Zhou Zhidong Zhao Shexu Kuang Zhenbang

(Department of Engineering Mechanics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

**Abstract** Ferroelectric ceramics are widely used as new smart materials due to their strong coupling between electric and mechanical fields. Our aim is to present a macroscopic constitutive model for ferroelectric ceramics based on Two-Surface theory of Plasticity. According to the microscopic evolvments of domains in ferroelectrics under electric and mechanical loadings, a switching surface of material is introduced, and a saturated surface of material is proposed firstly. The general distance between the switching surface and the saturated surface is regarded as the internal variable, which expresses the non-linear behavior of ferroelectric ceramics. The predicted hysteresis and butterfly loops by this model are in good agreement with the form of loops observed experimentally.

**Key words** ferroelectrics, two-surface constitutive model, electro-mechanical coupling, switching

Received 8 May 2002, revised 2 August 2004.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10132010, 10472069).