

文章编号: 1000-4750(2011)09-0223-05

BaTiO₃ 单晶的正方形电畴翻转模型

*刘 峰, 张晖辉, 常福清

(燕山大学建筑工程与力学学院, 河北, 秦皇岛 066004)

摘要: 大量实验已经证实电畴翻转是铁电材料非线性和迟滞性本构行为的根本原因。研究者已经对 BaTiO₃ 单晶的微观电畴翻转行为进行了详细的研究, 给出了电畴纵向长大和横向扩张的速度公式。依据这些关系, 结合电畴翻转是一渐变过程提出了正方形电畴翻转模型, 目的是为了从微观上建立电畴翻转体积分数的演化方程。进一步, 应用模型对轴向应力和轴向电场作用下铁电陶瓷的本构行为进行了研究。理论结果与实验数据的比较表明, 模型能较好地描述铁电材料的非线性本构行为。

关键词: 单晶; 电畴翻转; 电畴翻转体积分数; 正方形电畴翻转模型; 非线性本构

中图分类号: O343.5 文献标志码: A

A SQUARE DOMAIN SWITCHING MODEL FOR BaTiO₃ SINGLE CRYSTAL

*LIU Feng, ZHANG Hui-hui, CHANG Fu-qing

(School of Civil Engineering and Mechanics, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

Abstract: It is proved by lots of experiments that, domain switching is the main reason for the nonlinear and hysteresis constitutive behaviors of ferroelectric ceramics. And a large number of studies have been conducted on the microscopic domain switching behaviors of BaTiO₃ single crystals. Through direct stroboscopic observation, the forward and sideway motion of 180° domain wall is measured, and the formula of velocity is given. In order to derive the evolution equation of the volume fraction of domain switching, a square domain switching model is developed according to the relation between the domain wall velocity and applied electric field. The proposed model is compared with the nonlinear behavior of BaTiO₃ single crystals subjected to mechanical loadings and electric field loadings. It demonstrates that the model presented can predict the typical nonlinear the nonlinear hysteresis of ferroelectrics under electrical or mechanical loading.

Key words: single crystal; domain switching; the volume fraction of domain switching; square domain switching model; nonlinear constitutive

铁电材料具有优良的力电耦合特性, 在传感器、致动器、换能器等电子器件方面有着非常重要的应用。同时现代高技术发展也对铁电材料提出了向高性能、复杂环境(如强电场, 力场)下使用的要求, 在这种情况下经典的线性压电理论已经不适用, 因此必须对铁电材料的非线性行为进行研究。铁电材料非线性和迟滞性本构曲线的根本原因在

于电畴翻转, 研究电畴的微观机制将涉及许多力学方面的基础问题。如何由电畴的观察、分布与演化, 准确预测材料的宏观性能, 已成为近年来的热门研究课题。

人们已经提出了许多理论来解释铁电材料的非线性本构行为。这些理论大体上可分为两类: 一类是微观力学模型, 模型从微观的电畴出发, 认为

收稿日期: 2010-01-18; 修改日期: 2010-03-31

基金项目: 燕山大学博士基金项目(B382)

作者简介: *刘 峰(1977—), 男, 河北人, 副教授, 博士, 从事压电铁电本构及断裂研究(E-mail: liufeng@ysu.edu.cn);

张晖辉(1975—), 女, 河北人, 副教授, 博士, 从事脆性材料的损伤破坏研究(E-mail: zhanghh@lnm.imech.ac.cn);

常福清(1955—), 男, 黑龙江人, 教授, 学士, 主要从事型钢结构强度及磁弹性理论(E-mail: changfq@ysu.edu.cn).

电畴在电场和应力的作用下，当能量变化达到或超过某一能量壁垒时，电畴会发生 90°或 180°翻转，整个材料的宏观物理量是通过大量的随机取向的电畴体积平均得到^[1~9]。微观力学模型反映了铁电材料非线性行为的物理本质，但是为了满足计算的准确性，必需选取成千上万个单元进行计算再加以平均，计算效率低，并且不能应用于解决工程实际问题。为了使非线性本构能够应用于结构分析，人们提出了一系列的唯象理论^[10~18]，模型不考虑微观的电畴，认为材料是连续的，采用宏观的物理量来描述电畴的状态。目的在于从宏观上描述铁电材料的非线性行为，如电滞回线、蝶形曲线等。

铁电材料非线性本构问题研究的最终目的是建立适合工程实际使用的非线性本构方程，从这一角度来说大部分微观模型有其局限性。建立本构方程过程中的难点也就是如何得到内变量的演化关系。

本文的主要目标就是试图在微观的电畴翻转和宏观的唯象本构之间建立联系。因此，我们从电场作用下微观电畴的纵向长大和横向扩张速度公式出发，通过渐变电畴翻转这一思想建立正方形电畴翻转模型得到电畴翻转体积分数的演化方程，对铁电单晶的非线性本构响应进行了预测。同时，该模型也为我们之前提出的唯象的力学模型^[19]奠定了坚实的物理基础。

1 以电畴翻转体积分数为内变量的本构关系

研究表明：瞬时电畴翻转模型，即能量变化达到翻转准则后电畴发生瞬时翻转不能很好地描述铁电陶瓷的非线性本构行为。而大量的实验证实，电畴翻转主要由下列 4 个阶段组成：新畴成核、新畴的纵向长大、新畴的横向扩张、新畴的合并^[20]。因此，每个单电畴材料元素的电畴翻转是一个渐变过程，也就是说畴变运动是一个渐变过程。为此 Liu 等^[19]引入电畴翻转体积分数来描述这一过程。Yu 等^[21]以及 Cheng 等^[22]也采用过体积分数来进行本构以及铁电陶瓷有效电弹性能方面的研究。

类似于文[19]，本文仍采用电畴翻转体积分数这个内变量来描述电畴翻转过程，即：

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_{ij} - \gamma_{ij}^{s(0)} - \sum_{I=1}^N \rho_I \Delta \gamma_{ij}^{s(I)} = S_{ijkl} \sigma_{kl} + d_{kij} E_k = \\ S_{ijkl} \sigma_{kl} + \left(d_{ikl}^{(0)} + \sum_{I=1}^N \rho_I \Delta d_{ikl}^{(I)} \right) E_k \\ D_i - D_i^{s(0)} - \sum_{I=1}^N \rho_I \Delta D_i^{s(I)} = d_{ikl} \sigma_{kl} + \varepsilon_{ik} E_k = \\ \left(d_{ikl}^{(0)} + \sum_{I=1}^N \rho_I \Delta d_{ikl}^{(I)} \right) \sigma_{kl} + \varepsilon_{ik} E_k \end{array} \right. \quad (1)$$

式中： S_{ijkl} 为弹性柔度系数； ε_{ik} 为介电系数； $D_i^{s(0)}$ 、 $\gamma_{ij}^{s(0)}$ 和 $d_{ikl}^{(0)}$ 为翻转前的自发极化强度、自发极化应变和压电系数； $D_i^{s(I)}$ 、 $\gamma_{ij}^{s(I)}$ 和 $d_{ikl}^{(I)}$ 为电畴全部翻转后的相应量； ρ_I 为第 I 类电畴翻转的体积分数； Δ 表示材料元素中的电畴全部翻转之后有关物理量的差。

2 正方形电畴翻转模型

问题的关键是如何找到内变量，也就是电畴翻转体积分数的演化方程。物理实验证实：BaTiO₃ 电畴的纵向长大速率符合经验公式^[23]：

$$v = 5500 \times \exp\left(\frac{-1.8}{E}\right) \quad (2)$$

可见，电畴的纵向长大速率 v 仅与电场强度有关且随电场 E 指数升高。

电畴的横向扩张速率 u 与电场 E 的关系根据电场的强弱而不同。对于 BaTiO₃，当 $E=0.1\text{kV/cm} \sim E=1.0\text{kV/cm}$ 时， u 与 E 有指数关系^[24~25]：

$$u = 100 \times \exp(-\delta / E) \quad (3)$$

式中 δ 为激活场。可以看出电畴的横向扩张速率 u 也仅与电场有关。

在高电场时， u 与 E 有幂率关系^[26]：

$$u \propto E^{1.4} \quad (4)$$

式(4)已经被大量实验^[20]所证实。并且 Miller 和 Weinreich^[27]提出了一个理论模型对电畴翻转机制进行了解释。他们的模型与直观想象的不同，扩张并不是整个畴壁平行于本身做整体的移动，而是在紧贴畴壁的区域出现一个三角阶梯形畴核。Miller-Weinreich 模型可以解释一些实验观测的现象，但也显示该模型从数量级上过高地估计了激活场的大小。同时实验^[25,28]和最新的计算^[29]表明电畴翻转的区域接近于正方形。因此，我们建立了一个更符合实际电畴翻转情况的正方形翻转模型来得到电畴翻转体积分数的演化方程。

将电畴翻转的过程分为3个阶段,首先发生90°电畴翻转, ρ_2 增大;当电场达到矫顽场 E_c 时,180°电畴翻转 ρ_1 启动,同时 ρ_2 保持不变;随着电场的增大,当达到 $\rho_1 + \rho_2 = 1$ 时,保持 $\rho_1 + \rho_2 = 1$, ρ_1 继续增加, ρ_2 开始减小,直到 ρ_1 达到1, ρ_2 减小到0。

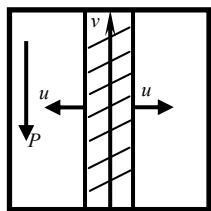


图1 正方形电畴翻转模型示意图

Fig.1 Schematics of square domain switching model

首先,假设电畴的翻转区域为正方形,边长由纵向长大的速度确定,厚度为1,如图1所示。在该模型中,施加的电场与中间的极化方向相同,电畴首先沿纵向长大,接着横向扩张。假设电畴翻转所需时间为 t ,饱和电场因受到应力的影响而不易确定^[16]。在本文中,饱和电场取为 $2E_c$ 。

假设 t 时间内,电场从0均匀变化至 $2E_c$ 。那么,电畴最终纵向长大到:

$$l = \int_0^{2E_c} 5500 \exp\left(\frac{-1.8}{E}\right) dE \quad (5)$$

又因为假设了电畴的翻转区域为正方形^[25,28~29],总的电畴区面积为:

$$V = l^2 = \int_0^{2E_c} v dE \int_0^{2E_c} v dE \quad (6)$$

现在,计算代表性单元中已经翻转部分的体积为低电场 $E = 0.1\text{kV/cm} \sim E = 1.0\text{kV/cm}$ 时:

$$V_{f1} = \int_0^{2E_c} v dE \int_0^E u dE = \\ \int_0^{2E_c} 5500 \exp\left(\frac{-1.8}{E}\right) dE \int_0^E 100 \exp(-\delta/E) dE \quad (7)$$

在高电场 $E > 1.0\text{kV/cm}$ 时:

$$V_{f2} = \int_0^{2E_c} v dE \int_0^1 u dE + \int_0^{2E_c} v dE \int_1^E u dE = \\ \int_0^{2E_c} v dE \int_0^1 100 \exp(-\delta/E) dE + \\ \int_0^{2E_c} v dE \int_1^E k E^{1.4} dE \quad (8)$$

其中 $k = 843.4$,由正方形的长宽相同确定。

因此,在较低电场时代表性单元的电畴翻体积分数为:

$$\rho_I = V_{f1}/V = \int_0^E 100 \exp(-\delta/E) dE / \int_0^{2E_c} v dE \quad (9)$$

在高电场时:

$$\rho_I = V_{f2}/V = \\ \int_0^1 100 \exp(-\delta/E) dE + \int_1^E 843.4 E^{1.4} dE / \int_0^{2E_c} v dE \quad (10)$$

根据式(10)计算出代表性单元的电畴翻体积分数 ρ_I ,再代入本构关系式(1)就可以直接求得每个单元的应变 γ_{ij} 和电位移 D_i ,得到材料的宏观本构响应。

3 计算及结果讨论

计算中利用Reuss平均来模拟BaTiO₃单晶的本构关系。在Reuss平均下,对于每个特定的外加载荷,铁电单晶中的任一电畴都受到同样的应力场和电场。即试样内部的应力和电场强度处处等于外加的应力和电场强度,这些宏观应力场和电场将引起电畴翻转。

对于BaTiO₃铁电单晶,计算中采用的材料参数分别为^[30] $S_{3333} = 15.7 \times 10^{-12} \text{m}^2/\text{N}$, $S_{1133} = -5.24 \times 10^{-12} \text{m}^2/\text{N}$, $P_s = 0.25 \text{C/m}^2$, $\gamma_s = 2.99 \times 10^{-3}$, $d_{333} = 85.6 \times 10^{-12} \text{C/N}$, $\epsilon_{33} = 2920$, $d_{311} = -34.5 \times 10^{-12} \text{C/N}$, $\epsilon_{11} = 168$, $E_c = 0.15 \text{MV/m}$ 。激活场强 δ 取为 0.47MV/m ^[22,25]。计算结果与Burcsu^[31]的实验结果进行了比较,如图2~图7所示。图2~图5中实线为实验数据,虚线为正方形电畴翻转模型的计算结果。

从图2、图3中可以看出,对于纯电场加载,当电场 $E \geq -1.0 \text{kV/cm}$ 时,由于横向扩张的速度较小,电畴翻转体积分数变化不大,电畴基本上不发生翻转,外加电场和电位移、应变之间的关系是线性的。电场逐渐反向增加至接近矫顽场时,90°电畴首先翻转,表现在电滞回线和蝶形曲线上,曲线开始下降。当电场达到矫顽场后,180°电畴翻转的趋势占据了主导地位, ρ_1 也逐渐增大,因此试样的电滞回线下降趋势变快,而蝶形曲线保持水平,这是因为90°翻转的 ρ_2 保持不变,所以蝶形曲线保持水平不变。而180°翻转的 ρ_1 对剩余应变不产生影响,仅影响剩余极化强度导致电滞回线下降趋势变快。直到 $\rho_1 + \rho_2 = 1$ 之后,蝶形曲线才重新上升,最后完成翻转。

应用该模型也对应力作用下的铁电单晶行为进行了计算。从图4、图5中可以看出,对于应力加载,当应力 $\sigma \geq -0.12 \text{MPa}$ 时,电畴翻转体积分

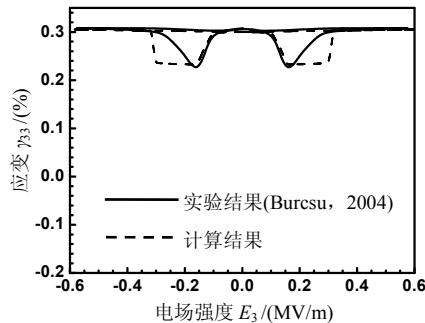


图2 纯电场作用 BaTiO_3 单晶蝶形曲线计算结果与实验比较
Fig.2 Comparison of simulated and measured electric field strain for a BaTiO_3 single crystal under purely electrical loading

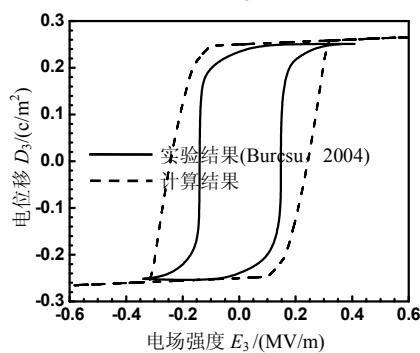


图3 纯电场作用 BaTiO_3 单晶电滞回线计算结果与实验比较
Fig.3 Comparison of simulated and measured electric field-electric displacement for a BaTiO_3 single crystal under purely electrical loading

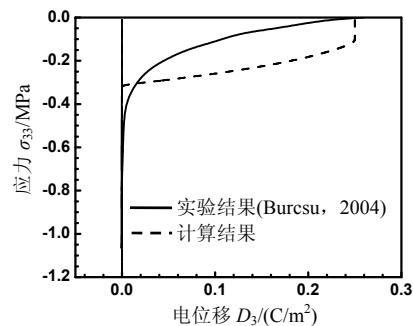


图4 纯应力作用 BaTiO_3 单晶应力电位移
计算结果与实验比较
Fig.4 Comparison of simulated and measured stress-electric displacement for a BaTiO_3 single crystal under purely mechanical loading

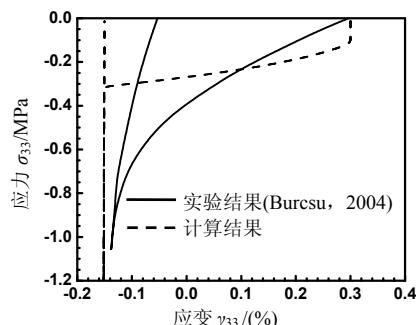


图5 纯应力作用 BaTiO_3 单晶应力-应变计算结果与实验比较
Fig.5 Comparison of simulated and measured stress-strain for a BaTiO_3 single crystal purely electrical loading

数 $ρ_2$ 变化很小, 因此曲线的变化较小, 当应力超过 0.12 MPa 后, 电畴翻转进行的比较迅速, 当达到 0.3 MPa 时完成翻转。

图6为纯电场作用下的电畴翻转体积分数的演化曲线。可见, 在低电场时电畴的翻转速度较慢, 因此电畴翻转体积分数增长非常缓慢。当电场 $E > 1.0 \text{ kV/cm}$ 时 90° 电畴开始加速, 当达到矫顽场时 90° 电畴体积分数保持不变, 180° 电畴开始迅速增加, 反向电场达到 3.12 kV/cm 时翻转达到饱和, 对应于图2中本构响应呈线性。

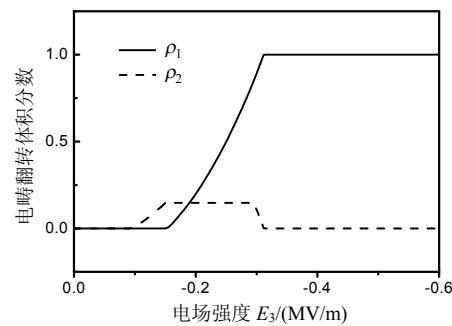


图6 电场作用下电畴翻转体积分数演化
Fig.6 Evolutions of the volume fraction of domain switching under purely electrical loading

图7为应力作用下的电畴翻转体积分数的演化曲线。应力载荷只产生 90° 电畴翻转, 因此模型只考虑了 $ρ_2$ 的演化方程。电畴翻转体积分数的演化与电场作用下类似。

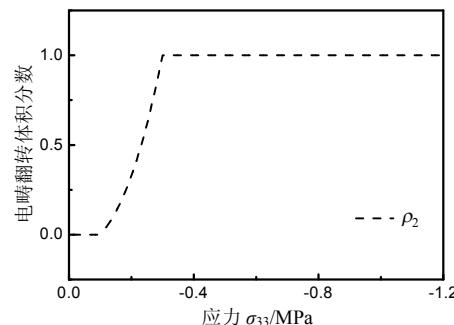


图7 应力作用下电畴翻转体积分数演化
Fig.7 Evolutions of the volume fraction of domain switching under purely electrical loading

从计算结果可以看出, 虽然正方形翻转模型是基于电场作用下电畴的长大速度建立的, 但同样能反映应力作用下的电畴翻转现象。进一步, 对比正方形模型和单电畴力学模型发现, 文[19]中 90° 强化关系采用了比较复杂的函数进行拟合, 而其强化曲线和本文中的指数函数近似, 因此, 可以采用更能符合物理实际的指数函数代替文[19]中 90° 强化关系。对于 180° 强化关系采用线性强化假设, 对比发

现,高电场时电畴翻转速度为幂函数形式,可以根据模型所揭示出的电畴微观翻转的物理本质对原有的模型加以改进。

4 结论

本文从考察电畴翻转的微观物理机制出发,通过铁电陶瓷电畴翻转速度与电场之间关系,利用电畴翻转体积分数这个反映电畴微观翻转的内变量,建立了考虑微观翻转行为的正方形电畴翻转模型。进而求得电畴翻转体积分数的演化方程。应用该模型对钛酸钡陶瓷在轴向压力以及电场作用下的非线性行为进行了计算。计算结果和实验数据的比较显示,模型能够模拟铁电陶瓷的非线性本构行为。同时,基于微观的电畴翻转体积分数的演化方程的建立也为进一步发展宏观唯象非线性本构奠定了坚实的物理基础。电畴翻转体积分数的演化方程的形式也说明了已有的本构理论局限性的问题所在,可以为宏观唯象本构的进一步改进提供指导。

参考文献:

- [1] Hwang S C, Lynch C S, McMeeking R M. Ferroelectric/ferroelastic interactions and a polarization switching model [J]. *Acta Metallurgica Materialia*, 1995, 43(5): 2073—2084.
- [2] Lu W, Fang D N, Li C Q, Hwang K C. Nonlinear electric-mechanical behavior and micromechanics modeling of ferroelectric domain evolution [J]. *Acta Materialia*, 1999, 47(10): 2913—2926.
- [3] Chen X, Fang D N, Hwang K C. Micromechanics simulation of ferroelectric polarization switching [J]. *Acta Materialia*, 1997, 45: 3181—3189.
- [4] Huo Y, Jiang Q. Modeling of domain switching in ferroelectric ceramics: an example [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1998, 35: 1339—1353.
- [5] Wan Q, Chen C, Shen Y P. Effects of stress and electric field on the electromechanical properties of $Pb(Mg1/3Nb2/3)O_3\text{-}0.32PbTiO_3$ single crystals [J]. *Journal of Applied Physics*, 2005, 98(2): 24103—24105.
- [6] 万强, 陈常青, 沈亚鹏. 铁电单晶 $Pb(Mg1/3Nb2/3)O_3\text{-}0.32PbTiO_3$ 的实验及本构模型研究[J]. 力学学报, 2007, 39(6): 767—773.
Wan Qiang, Chen Changqing, Shen Yapeng. Experimental and constitutive model study of $Pb(Mg1/3Nb2/3)O_3\text{-}0.32PbTiO_3$ relaxor ferroelectric single crystal poled along $\langle 001 \rangle$ crystallographic direction [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2007, 39(6): 767—773. (in Chinese)
- [7] Huber J E, Fleck N A. Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behaviour [J]. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 2004, 23: 203—217.
- [8] Zhang Z K, Fang D N, Soh A K. A new criterion for domain switching in ferroelectric materials [J]. *Mechanics of Materials*, 2006, 38: 25—32.
- [9] Shaikh M G, Phanish S, Sivakumar S M. Domain switching criteria for ferroelectrics [J]. *Computational Materials Science*, 2006, 37: 178—186.
- [10] Chen P J, Peercy P S. One dimensional dynamic electromechanical constitutive relations of ferroelectric materials [J]. *Acta Mechanica*, 1979, 31(4): 231—241.
- [11] Bassiouny A F, Ghaleb G, Maugin G. Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects- I Basic equations [J]. *International Journal of Engineering Science*, 1988, 26(12): 1279—1295.
- [12] Kamlah M, Tsakmakis C. Phenomenological modeling of the nonlinear electromechanical coupling in ferroelectrics [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1999, 36(5): 669—695.
- [13] Cocks A C F, McMeeking R M. A phenomenological constitutive law for the behavior of ferroelectric ceramics [J]. *Ferroelectrics*, 1999, 228: 219—228.
- [14] Landis C M. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002, 50: 127—152.
- [15] 周志东, 赵社戌, 匡震邦. 铁电陶瓷宏观单轴力电行为的双面模型[J]. 力学学报, 2004, 36(6): 688—694.
Zhou Zhidong, Zhao Sheshu, Kuang Zhenbang. Two-surface model of macroscopic electro-mechanical behavior for ferroelectrics under uniaxial loading [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2004, 36(6): 688—694. (in Chinese)
- [16] 李尧臣. 铁电-铁弹材料的非线性本构关系及其有限元实施[J]. 中国科学 G 辑, 2007, 37(1): 1672—1780.
Li Yaochen. Nonlinear constitutive law for ferroelectric-ferroelastic material and its finite element realization [J]. *Science in China Series G-Physics and Astronomy*, 2007, 37(1): 1672—1780. (in Chinese)
- [17] Kamlah M. Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics-modeling of electromechanical hysteresis phenomena [J]. *Continuum Mech Thermodyn*, 2001, 13: 219—268.
- [18] Landis C M. Non-linear constitutive modeling of ferroelectrics [J]. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2004, 8: 59—69.
- [19] Liu F, Li H J, Wang Z Q. Energy principle of ferroelectric materials and single domain mechanical model [J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2007, 23: 531—543.
- [20] 钟维烈. 铁电体物理学[M]. 北京: 科学出版社, 1996.
Zhong Weilie. Physics of ferroelectric [M]. Beijing: Science Press, 1996. (in Chinese)

(参考文献[21]—[31]转第 233 页)

- investigation of thrust augmentation by ejectors on a pulsed detonation tube [C]. 41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Tucson, Arizona, USA, 2005.
- [7] Wilson J. A simple model of pulsed ejector thrust augmentation [R]. Hanover, MD, USA, NASA CR 2003-212541, 2003.
- [8] Shehadeh R, Saretto S, Lee S Y. Thrust augmentation measurements for a pulse detonation engine driven ejector [C]. 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Fort Lauderdale, Florida, USA, 2004.
- [9] Choutapalli I, Krothapalli A, Lourenco L M. Pulsed jet: ejector characteristics [C]. 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, Nevada, USA, 2006.
- [10] 黄希桥, 严传俊, 范玮, 王治武, 郑龙席, 李牧. 脉冲爆震发动机引射器的实验研究[J]. 机械科学与技术, 2005, 24(8): 1000—1004.
- Huang Xiqiao, Yan Chuanjun, Fan Wei, Wang Zhiwu, Zheng Longxi, Li Mu. Experimental investigation of a pulse detonation engine (PDE) ejector [J]. Mechanical Science and Technology, 2005, 24(8): 1000—1004. (in Chinese)
- [11] 范育新, 王家骅, 李建中, 张义宁. 脉冲爆震发动机(PDE)引射增推装置试验[J]. 航空动力学报, 2005, 20(6): 983—988.
- Fan Yuxin, Wang Jiahua, Li Jianzhong, Zhang Yining. Experimental investigation on thrust augmentation of pulsed detonation engine (PDE) [J]. Journal of Aerospace Power, 2005, 20(6): 983—988. (in Chinese)
- [12] Berger M, Colella P. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics [J]. Computer and Physics, 1988, 82: 64—84.
- [13] 宫翔飞, 张树道, 江松. 界面捕捉 Level Set 方法的(AMR)数值模拟[J]. 计算物理, 2006, 23(4): 391—395. Gong Xiangfei, Zhang Shudao, Jiang Song. Numerical simulation of interface catch by the method of Level Set [J]. Computer and Physics, 2006, 23(4): 391—395. (in Chinese)
- [14] Jameson A, Schmidt W, Turkel E. Numerical solution of the Euler equations by finite-volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes [C]. AIAA 14th Fluid and Plasma Dynamic Conference, Palo Alto, California, USA, 1981.
- [15] Joseph M P. Review of multiscale modeling of detonation [J]. Journal of Propulsion and Power, 2006, 22(6): 1217—1229.
- [16] Papalexandris M V, Thomas J F, Jacobs C, Deledicque V. Structural characteristics of detonation expansion from a small channel to a larger one [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31: 2407—2414.

(上接第 227 页)

- [21] Yu L, Yu S W, Feng X Q. A simple constitutive model for ferroelectric ceramics under electrical/mechanical loading [J]. Acta Mechanics Solids Sinica, 2007, 20(1): 1—12.
- [22] Cheng J Q, Wang B, Du S Y. A statistical model for predicting effective electroelastic properties of polycrystalline ferroelectric ceramics with aligned defects [J]. International Journal of Solids and Structures, 2000, 37(35): 4763—4781.
- [23] Stadler H L. Forward velocity of 180° ferroelectric domain walls in BaTiO_3 [J]. Journal of Applied Physics, 1966, 37: 1947—1948.
- [24] Miller R C, Savage A. Motion of 180° domain walls in metal electroded barium titanate crystals as a function of electric field and sample thickness [J]. Journal of Applied Physics, 1960, 31: 662—669.
- [25] Miller R C, Savage A. Further experiments on the sidewise motion of 180° domain walls in BaTiO_3 [J]. Physical Review, 1959, 115: 1176—1180.
- [26] Stadler H L, Zachmanidis P L. Temperature dependence of 180° domain wall velocity in BaTiO_3 [J]. Journal of Applied Physics, 1964, 35: 2895—2899.
- [27] Miller R C, Weinreich G. Mechanism for the sidewise motion of 180° domain walls in barium titanate [J]. Physical Review, 1960, 117: 1460—1466.
- [28] Stadler H L, Zachmanidis P J. Nucleation and growth of ferroelectric domains in BaTiO_3 at fields from 2 to 450 kV/cm [J]. Journal of Applied Physics, 1963, 34: 3255—3260.
- [29] Shin Y H, Grinberg I, Chen I W, Rappe A M. Nucleation and growth mechanism of ferroelectric domain-wall motion. Nature, 2007, 449: 881—884.
- [30] Shu Y C, Bhattacharya K. Domain patterns and macroscopic behavior of ferroelectric materials [J]. Philosophical Magazine Part B, 2001, 81: 2021—2054.
- [31] Burcsu E, Ravichandran G, Bhattacharya K. Large electrostrictive actuation of barium titanate single crystals [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004, 52: 823—846.