

文章编号: 1000-0887(2002) 11-1113-11

# 畴极化转动对多晶铁电材料断裂特性的影响<sup>\*</sup>

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)

(本刊编委王彪来稿)

**摘要:** 主要基于细观力学方法揭示了畴极化转动对多晶铁电陶瓷的各向异性断裂特性的平均影响。首先, 用 Eshelby-Mori-Tanaka 理论和统计模型分析了无穷大铁电材料体中一椭圆夹杂的内、外电弹性场, 得到畴极化转动对电弹性场的平均影响; 其次, 推导了等效多晶铁电陶瓷中含一钱币状裂纹的裂纹扩展力(能量释放率)  $G_{ext}$ , 并用它估计了畴极化转动对多晶铁电陶瓷断裂特性的影响。对  $BaTiO_3$  陶瓷中裂纹扩展力的计算结果表明, 对多晶铁电材料断裂特性分析必须考虑畴极化转动的影响。计算结果得出了与实验相一致的结论: 在受较小的力时, 外加电场对裂纹扩展产生较大的影响, 而且在某种程度上能促进裂纹扩展。

**关键词:** 铁电体; 闭域; 断裂特性

**中图分类号:** O482.41      **文献标识码:** A

## 引 言

最近, 铁电陶瓷由于具有良好的压电和热释电等性能成为最重要的功能材料之一。例如, 由于它的压电和热释电性能而被广泛地制成传感器、转换器和制动器等<sup>[1]</sup>。由于这些铁电器件都是工作在交替的强力场或电场条件下, 因此, 如何精确地表征多晶铁电陶瓷的有效宏观电弹性能以及分析它们的可靠性, 如断裂和破坏特性等, 是非常重要的。众所周知, 商用铁电陶瓷大都是多晶材料, 并且每个晶粒由许多自发极化和应变的畴组成的<sup>[2,3]</sup>。另外, 所有的实验结果都表明了, 在电场或力场作用下, 畴内自发极化场是通过一种复杂的新畴成核和畴壁运动方式来实现转动, 如图 1 所示。电场能同时产生  $90^\circ$  和  $180^\circ$  畴转动, 应力场作用下只能产生  $90^\circ$  畴转动, 其中只有  $90^\circ$  畴转动影响晶粒的自发应变。由于畴的极化转动, 单个晶粒的等效极化强度和应变(其为晶粒内部所有畴区各量的矢量和)的幅度和方向发生变化使得整个材料的体能最小。Cao 和 Evans<sup>[4]</sup>, Ansgar 等<sup>[5]</sup>以及 Zhang 等<sup>[6]</sup>采用了不同的实验方法证实了畴极化转动决定着铁电材料的电弹性能。而在理论上, Hwang 等<sup>[7,8]</sup>, Cheng 等<sup>[9]</sup>, Li 和 Weng<sup>[10]</sup>采用了不同的模型来考虑微结构演化-畴极化转动对铁电材料的有效电弹性能的影响。另外, 许多实验分析了多晶铁电材料的断裂特性, 发现由于畴极化转动而产生了内应力是产生微裂纹以致材料破坏的内在本质因素<sup>[2~5, 11~14]</sup>。所有的研究都表明了铁电材料的断裂方式主要与它本身特有的微结构及微结构级的畴极化转动有关, 同时, 畴极化转动能阻止平行极化方向

\* 收稿日期: 2000\_11\_18; 修订日期: 2002\_07\_15

基金项目: 国家杰出青年基金资助(19725209)

作者简介: 程锦泉(1971—), 福建闽侯人, 博士(E-mail: chengjq@ihpc.a-star.edu.sg)。

的裂纹扩展,但促进了垂直极化方向的裂纹扩展。同时,许多理论工作<sup>[15-20]</sup>采用线弹性断裂力学的方法研究了线性压电材料的电弹耦合断裂特性,尽管已经得到了线性压电材料的理论解,但由于没有考虑畴极化转动的影响,所得到的断裂强度理论预报值与实验结果分歧较大。Yang 和 Zhu<sup>[21]</sup>基于 Reuss 近似法采用应力导致的  $90^\circ$  畴极化转动来分析铁电材料的畴极化转动对断裂强度增强的机理。由于多晶铁电材料的实际断裂起因是由内部缺陷如孔洞、微裂纹等扩展引起的,因此,可以建立一个简单的细观力学模型用 Eshelby- Mori- Tanaka 方法来求解铁电材料中一椭圆夹杂的内外电弹性场,然后用细观力学方法得到了等效铁电材料中一币状裂纹的裂纹扩展力(能量释放率)  $G_{ext}$ ,并用它分析了畴极化转动对铁电陶瓷断裂特性的平均影响。

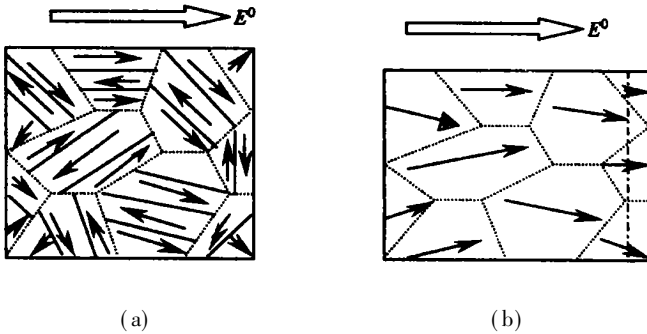


图 1 多晶铁电材料的微结构及其演化的示意图

## 1 一般方程

如果假设压电体中不存在自由电荷和体积力,根据 Gauss 法则和静力学平衡条件可得静力学平衡方程和电场方程如下:

散度方程

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

梯度方程

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

本构方程

$$\sigma_{ij} = C_{ijmn}\varepsilon_{mn} + e_{nj}\phi_{,n}, \quad D_i = e_{imn}\varepsilon_{mn} - k_{in}\phi_{,n} \quad (3)$$

上述方程中采用 Bameet 和 Lothe<sup>[22]</sup>的符号简化法则,可得如下简洁公式:

$$Z_{Mn} = \begin{cases} \varepsilon_{mn} & (M = 1, 2, 3), \\ \phi_{,n} & (M = 4), \end{cases} \quad (4)$$

和

$$U_M = \begin{cases} u_m & (M = 1, 2, 3), \\ \phi & (M = 4). \end{cases} \quad (5)$$

类似地,应力和电场位移表示为:

$$\Sigma_{Jj} = \begin{cases} \sigma_{ij} & (J = 1, 2, 3), \\ D_i & (J = 4). \end{cases} \quad (6)$$

同样,电弹材料系数张量表示成如下的简洁形式:

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

其中,  $E_{iJMn}$  的逆定义为  $F_{Abij}$ , 且  $E_{iJMn}$  和  $F_{Abij}$  显然为对角阵。

为了便于以后的推导, 上面的方程可表示为如下矩阵形式:

$$\Sigma_{9 \times 1} = E_{9 \times 9} Z_{9 \times 1}, \quad Z_{9 \times 1} = F_{9 \times 9} \Sigma_{9 \times 1}, \quad (8)$$

其中采用了如下的张量下标变换规律:

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

## 2 理论模型

对于未极化的铁电材料, 单个晶粒的有效极化强度为如图 1(a) 所示是随机分布的, 当电场作用于铁电材料时, 晶粒的有效极化场将通过新畴成核和畴壁运动(两种畴转化机理)来改变。因此, 为了使铁电体的体自由能最小, 有效极化场将趋于电场方向, 如图 1(b) 所示。因此基于多晶铁电材料的微结构特征, 我们可以利用 Eshelby\_Mori\_Tanaka 方法建立起统计模型来考虑畴极化转动对宏观电弹性能的平均影响。Mura<sup>[23]</sup> 曾提到: 对有效压电材料中一币状裂纹, 可用细观力学模型来考虑畴转动对裂纹扩展的平均影响, 如图 2 所示。因此, 如果将裂纹看成等效压电材料中的一夹杂, 我们只需计算外加电/力场与裂纹的相互作用能(裂纹扩展力)。

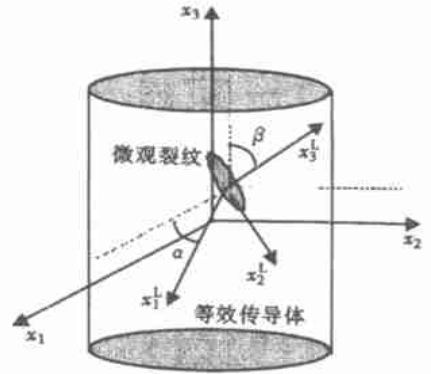


图 2 等效多晶铁电材料含一币状裂纹的理论模型

因此, 分析新转动晶粒和裂纹中的本征电弹性场  $Z^{**}$  和  $Z_c^*$  是非常重要的。在计算夹杂内的电弹性场  $Z^{**}$  的过程中, 根据[24]的分析结果, 可以不考虑币状裂纹的影响, 而是在后应力和电位移分析中考虑发生极化转动的晶粒于裂纹之间相互作用的影响, 这是合理的。

求得  $Z^{**}$  和  $Z_c^*$  后, 可以计算有效压电材料中币状裂纹的裂纹扩展力(能量释放率)  $G_{ext}$ , 为简单起见, 我们分别把基体、新转动晶粒和微裂纹区域表示为:  $\Omega_m$ 、 $\Omega_f$  和  $\Omega_c$ , 基体和晶粒的电弹张量系数分别表示为:  $E_m$ ,  $F_m$  和  $E_f$ ,  $F_f$ 。

## 3 求解过程

### 3.1 新转动晶粒内的电弹性场

众所周知, 畴极化转动是影响多晶铁电材料的宏观电弹性能的主要内因。Merz<sup>[25]</sup> 通过实验得出了一结论: 在电场作用下, 畴极化转动主要是新畴核的形成问题, 而单个新畴成核(畴极化转动)的概率经验表达式为<sup>[9, 25]</sup>:

$$P = P_0 \exp\left[-\frac{b}{E}\right], \quad (9)$$

其中,  $b$  是阈值电场值, 对于  $BaTiO_3$  陶瓷, 阈值电场值  $b$  为  $470 \text{ kV/m}$ 。  $P_0$  是无穷大电场  $E_\infty$  作用下的成核(畴极化转动) 概率, 由方程(9) 确定的畴转动概率仅与外加电场有关。在外力作用下, 我们可以用压电材料的本构关系将力场转换成适用于公式(9) 的等效电场。由于经验

表达式(9) 是从有限大材料得出的, 所以在本文中, 对于有限大铁电材料中所含单个晶粒的实际电场  $E$  应该是考虑各晶粒间相互作用的有效电场。因此新成核晶粒的体积分数  $V_f$  可由可发生极化转动的体积分数  $V_f^0$  与极化转动概率  $P$  获得。

$$V_f = V_f^0 P \quad (10)$$

根据 Eshelby 的等效夹杂理论, 外加电场导致的发生极化转动的晶粒(新成核畴)可看成一个夹杂, 那么电弹模量为  $E_m$  的基体的平均场可表示为:

$$\Sigma_m = \Sigma^0 + \Sigma_m^1 = E_m(\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1), \quad (11)$$

其中,  $\Sigma_m^1, \mathbf{Z}^1$  是由于基体中含有非均匀夹杂及相互作用引起的扰动场。在夹杂  $_$  发生极化转动的晶粒内的平均场则可表示为

$$\begin{aligned} \Sigma_f = \Sigma^0 + \Sigma_m^1 + \Sigma_f^1 = E_f(\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1 + \mathbf{Z}^{pl} \mathbf{Z}^*) = \\ E_m(\mathbf{Z}^0 + \mathbf{Z}^1 + \mathbf{Z}^{pl} \mathbf{Z}^* - \mathbf{Z}^{**}), \end{aligned} \quad (12)$$

其中,  $\mathbf{Z}_f^*$  是发生极化转动的晶粒的本征场, 其极化强度方向平行于外加电场或等效电场。  $\mathbf{Z}_f^{**}$  是由于夹杂与基体的性能不同而引起的虚拟本征场: 应变场和电场。

而扰动场  $\mathbf{Z}^{pl}$  可以写成:

$$\mathbf{Z}^{pl} = S(\mathbf{Z}^* + \mathbf{Z}^{**}), \quad (13)$$

其中, 电弹 Eshelby 张量  $S$  可以依据 Wang<sup>[26]</sup> 得到的压电材料中含一椭球压电夹杂的三维解推广得到(见附录)。

当铁电材料边界上受到外法向  $n_i$  方向的应力和电位移  $\Sigma_{ij}^0 n_j$  的作用时, 根据 Mori-Tanaka 的平均场理论, 整个铁电材料体的体平均场为

$$\langle \Sigma \rangle = \frac{1}{V} \int_{D-\Omega_f} \Sigma_m dV + \frac{1}{V} \int_{\Omega_f} \Sigma_f dV = \Sigma^0, \quad (14)$$

其中  $\langle \cdot \rangle$  表示体平均,  $V$  是铁电材料的总体积。

将方程(11), (12), (13) 代入方程(14) 得:

$$\mathbf{Z}^1 = -V_f(S - I)(\mathbf{Z}^* + \mathbf{Z}^{**}), \quad (15)$$

其中  $V_f$  就是公式(10) 表示的新成核晶粒的体积分数。

结合方程(11)~(15) 得:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^{**} = [E_m(S - I) - E_f S + V_f(E_f - E_m)(S - I)]^{-1} \times \\ (E_f - E_m)[\mathbf{Z}^0 + (1 - V_f)(S - I)\mathbf{Z}^*] \end{aligned} \quad (16)$$

因此, 在新极化晶粒中有:

$$\Sigma_f^1 = E_m(S - I)(\mathbf{Z}^* + \mathbf{Z}^{**}). \quad (17)$$

### 3.2 孔洞内电弹场的基本解

我们将进一步分析此时基体中含有空间分布币状裂纹的内部场。根据 Eshelby 等效夹杂理论, 在裂纹的局部坐标系上的电弹场  $\Sigma_c^L$  为:

$$\Sigma_c^L = \Sigma_c^0 + \Sigma_c^{ll} + \Sigma_c^{plL} = 0 = E_m(\mathbf{Z}^{0L} + \mathbf{Z}^{llL} + \mathbf{Z}_c^{plL} - \mathbf{Z}_c^{*L}), \quad (18)$$

其中上标“L”表示局部坐标系, 如图2所示。我们假定固定坐标系为  $(x_1, x_2, x_3)$ , 局部坐标系为  $(x_1^L, x_2^L, x_3^L)$ 。对称轴  $x_3^L$  与固定坐标系一致, 不失一般性, 我们假设  $x_1^L$  落在  $(x_1, x_2)$  平面内, 可得变换矩阵为:

$$T = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha \cos \beta & \cos \alpha \cos \beta & \sin \beta \\ \sin \alpha \sin \beta & -\sin \beta \cos \alpha & \cos \beta \end{bmatrix},$$

那么

$$\epsilon_{ij}^l = T_{im}T_{jn}\epsilon_m, \quad E_i^l = T_{in}E_n \quad (19)$$

其中电弹张量  $S$ , 由方程(18) 的  $Z_c^{*L}$  给出:

$$Z_c^{*L} = - (S_c - I)^{-1}(Z^{0L} + Z^{1L}) \quad (20)$$

利用坐标变换矩阵  $A$  (见附录 II), 可得:

$$Z_c^* = - A^{-1}(S_c - I)^{-1}A(Z^0 + Z^1) \quad (21)$$

### 3.3 铁电陶瓷中裂纹的裂纹扩展力

类似细观力学中有效弹性材料中裂纹能量释放率的定义, 铁电材料中由于夹杂存在引起的外加电/力场与夹杂间的相互作用能  $\Delta W$  表示为<sup>[19]</sup>:

$$\begin{aligned} \Delta W = & \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\Sigma^0_+ \Sigma^1) (Z^0_+ Z^1) dV - \int_{|D|} (\Sigma^0_{n_i}) (U^0_+ U^1) dV - \\ & \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Sigma^0 Z^0 dV - \int_{|D|} (\Sigma^0_{n_i}) U^0 dV \right], \end{aligned} \quad (22)$$

其中, 在基体中  $\Sigma^l$  为  $\Sigma_m^l$ , 夹杂中  $\Sigma^l$  为  $\Sigma_m^l + \Sigma_i^l$ .

将裂纹看成夹杂, 运用 Gauss 定理, 方程(22) 变为:

$$\Delta W = - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Sigma^0 Z_c^* dV = - \frac{1}{2} V_c \Sigma^0 Z_c^* \quad (23)$$

其中,  $V_c = (4\pi/3) c^2 t$  是裂纹的体积,  $c$  和  $t$  是钱币状裂纹的主轴尺寸.

又 Griffith 的断裂准则为:

$$\delta G = \delta(\Delta W + 2s\gamma) \quad (24)$$

其中,  $G$  是 Gibbs 自由能,  $\gamma$  是单位面积裂纹的表面能.

这样, 可的裂纹扩展力  $G_{ext}$

$$G_{ext} = - \frac{\partial \Delta W}{\partial s} \quad (25)$$

其中“ $s$ ”是裂纹的表面积.

当  $G_{ext} \geq \gamma$  时, 裂纹将扩展, 由于我们的目标是分析畴转动对裂纹扩展力的平均影响, 因此采用平均场理论来分析转动后晶粒间的相互作用能, 方程(23) 中的外场  $\Sigma^0$  用 Mori-Tanaka<sup>[24]</sup> 给出的有效电场表示如下:

$$\Sigma^{eff} = \Sigma^0 - V_f E_m (S - I) (\langle Z^* \rangle_+ + \langle Z^{* *} \rangle) \cdot$$

由方程 (25) 可得考虑畴转动影响的裂纹扩展力  $G_{ext}$  为:

$$G_{ext} = \frac{1}{3} c \rho \Sigma^{eff} Z_c^* \quad (26)$$

其中,  $\rho$  是裂纹的长短径比  $t/c$ .

如果不考虑畴转动的影响, 同样可得基体中钱币状裂纹的裂纹扩展力  $G_0$  为:

$$G_0 = - \frac{\partial W_0}{\partial s} = \frac{1}{3} c \rho \Sigma^0 Z_{c0}^* \quad (27)$$

其中,  $Z_{c0}^*$  可由 Eshelby 的等效夹杂理论得到,

$$Z_{c0}^* = - A^{-1}(S_c - I)^{-1} A Z^0 \quad (28)$$

由于表面能可以看成给定材料材料常数, 我们可以通过比较裂纹扩展力  $G_{ext}$  和  $G_0$  来验证畴转动的影响

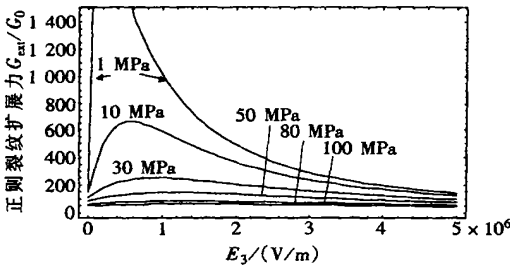


图 3 在  $\alpha = \beta = 0^\circ$  和  $c = 10 \text{ u/m}$  时, 外加电场  $E_3$  与力场  $\sigma_{33}$  对正则化裂纹扩展力  $G_{\text{ext}}/G_0$  的影响

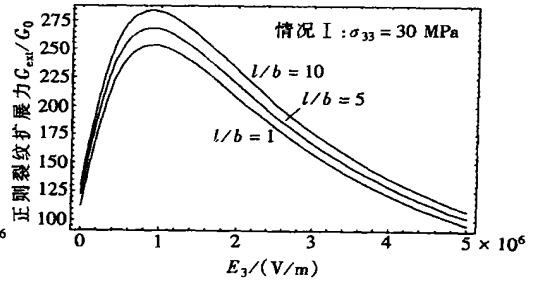


图 4 在给定机械载荷作用下, 晶粒形状比  $L/b$  对正则化裂纹扩展力  $G_{\text{ext}}/G_0$  的影响

### 4 数值结果和讨论

以  $\text{BaTiO}_3$  陶瓷为例, 来计算分析其裂纹扩展力。在常温下,  $\text{BaTiO}_3$  单晶胞为四方相, 其晶格常数  $a = 3.992 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.035 \text{ \AA}$ , 因此, 局部坐标系下的本征应变和本征电位移  $\epsilon_{11}^* = \epsilon_{22}^* = -0.005$ ,  $\epsilon_{33}^* = 0.01$ ,  $D_3^* = 0.26 \text{ C/m}^2$ , 其他分量为 0。在  $25^\circ\text{C}$  时多晶  $\text{BaTiO}_3$  材料及其单晶的相关弹性、压电和介电系数为:

多晶  $\text{BaTiO}_3$  陶瓷:

$$\begin{aligned} C_{11}^E &= 166 \text{ GPa}, C_{33}^E = 162 \text{ GPa}, C_{44}^E = 43 \text{ GPa}, \\ C_{12}^E &= 77 \text{ GPa}, C_{13}^E = 78 \text{ GPa}, \\ e_{31} &= -4.4 \text{ C/m}^2, e_{33} = 18.6 \text{ C/m}^2, e_{15} = 11.6 \text{ C/m}^2, \\ k_{11} &= 11.2 \times 10^{-9} \text{ C}^2/(\text{Nm}^2), k_{33} = 12.6 \times 10^{-9} \text{ C}^2/(\text{Nm}^2), \\ d_{31} &= -79 \times 10^{-12} \text{ C/N}, d_{33} = 191 \times 10^{-12} \text{ C/N}, d_{15} = 270 \times 10^{-12} \text{ C/N} \end{aligned}$$

$\text{BaTiO}_3$  单晶:

$$\begin{aligned} C_{11}^E &= 275 \text{ GPa}, C_{33}^E = 164.8 \text{ GPa}, C_{44}^E = 54.3 \text{ GPa}, \\ C_{12}^E &= 178.9 \text{ GPa}, C_{13}^E = 151.6 \text{ GPa}, \\ e_{31} &= -2.69 \text{ C/m}^2, e_{33} = 3.65 \text{ C/m}^2, e_{15} = 21.3 \text{ C/m}^2, \\ k_{11} &= 17.4 \times 10^{-9} \text{ C}^2/(\text{Nm}^2), k_{33} = 0.96 \times 10^{-9} \text{ C}^2/(\text{Nm}^2), \\ d_{31} &= -34.5 \times 10^{-12} \text{ C/N}, d_{33} = 85.6 \times 10^{-12} \text{ C/N}, d_{15} = 392 \times 10^{-12} \text{ C/N} \end{aligned}$$

基于上述模型, 我们计算了裂纹扩展力(能量释放率)  $G_{\text{ext}}$  来分析畴极化转动对多晶铁电材料中畴状裂纹的平均影响。当裂纹的长短径比为  $\rho = 1/100$ , 分布角  $\alpha = \beta = 0^\circ$  时, 裂纹扩展利于外加电场的函数关系如图 3 所示, 显然, 随着电场强度的增加, 正则化的裂纹扩展力  $G_{\text{ext}}/G_0$  是增加的, 直到矫顽场  $E_3 \approx 600 \text{ kV/m}$  时, 达到最大值, 然后减小到约 50, 图 3 还表明: 随着外加力场的增加, 裂纹扩展力是减小的。所有这些可以归功于畴转动的影响, 由于电场和力场都能导致畴转动, 随着电场或力场的增加, 越来越多的可转动畴将会转动, 因此铁电陶瓷的宏观有效性能将趋于单晶, 裂纹扩展力将近似为一有限值, 如方程(25), (28) 所述。

但所有的计算表明: 外加电场能促进裂纹的扩展, 即考虑畴转动时, 随着电场的增加, 临界断裂应力将减小。而晶粒长短径比的影响如图 4 所示, 长短比越大, 裂纹能量扩展力  $G_{\text{ext}}/G_0$  越大, 然而, 与外加电场相比, 转动晶粒的长短比对裂纹扩展的影响是不明显的。另外, 图 5 给出了外

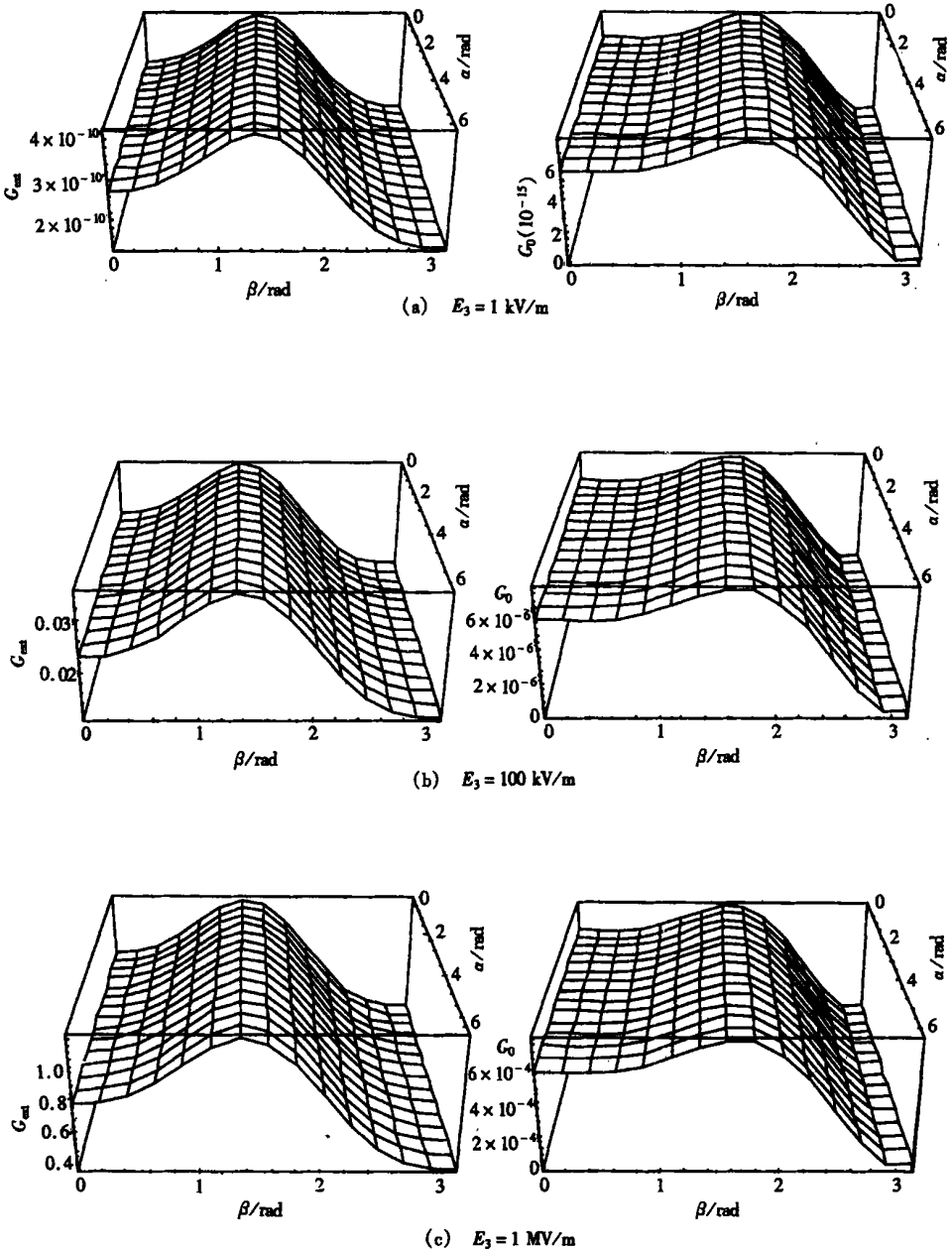


图5 在给定电场作用和  $c = 10 \text{ }\mu\text{m}$  时, 裂纹分布角度对裂纹扩展力  $G_{\text{ext}}$  和  $G_0$  (N/m) 的影响  
 加电场一定时, 裂纹方向与裂纹扩展力  $G_{\text{ext}}$  和  $G_0$  的关系图, 显然,  $\alpha = 0^\circ \sim 360^\circ$  间  $G_{\text{ext}}$  在  $\beta = 80^\circ \sim 90^\circ$  时增加到最大值, 然后减小到  $\beta = 180^\circ$ , 且由于考虑了畴转动,  $G_{\text{ext}}$  远大于  $G_0$ , 所有的结果得出了与[11 ~ 14] 中的结果较为一致, 平行极化方向的裂纹将比垂直极化方向的裂纹易于扩展。

## 5 结 论

根据铁电材料的内在微结构及微结构级演化机理, 我们运用 Cheng 等<sup>[9]</sup> 的统计模型及 Eshel

by\_Mori\_Tanaka 方法和 Wang<sup>[26]</sup> 压电基体中含一椭球夹杂的基本解研究了畴极化转动的影响, 求解了有效多晶铁电材料中一币状裂纹的裂纹扩展力(能量释放率)  $G_{\text{ext}}$  并用它分析了畴极化转动对铁电材料断裂行为的影响, BaTiO<sub>3</sub> 陶瓷中裂纹的裂纹扩展力的计算表明: 电场能促进裂纹的扩展, 即外加电场减小了铁电材料的断裂强度, 与实验结果<sup>[(11~14)]</sup> 较为一致。

## 附录

电弹 Eshelby 张量  $S$  的非零分量可以表示成如下形式

$$Z' = SZ^*,$$

这里

$$S_{11} = \frac{1}{4\pi} (C_{11}^0 N_{1111}^1 + C_{12}^0 N_{1212}^1 + C_{31}^0 N_{1313}^1 + e_{31}^0 N_{113}^2),$$

$$S_{12} = \frac{1}{4\pi} (C_{12}^0 N_{1111}^1 + C_{22}^0 N_{1212}^1 + C_{32}^0 N_{1313}^1 + e_{32}^0 N_{113}^2),$$

$$S_{13} = \frac{1}{4\pi} (C_{13}^0 N_{1111}^1 + C_{23}^0 N_{1212}^1 + C_{33}^0 N_{1313}^1 + e_{33}^0 N_{113}^2),$$

$$S_{14} = \frac{1}{4\pi} e_{24}^0 N_{113}^2,$$

$$S_{15} = \frac{1}{4\pi} e_{15}^0 N_{113}^2,$$

$$S_{19} = -\frac{1}{4\pi} (e_{31}^0 N_{1111}^1 + e_{32}^0 N_{1212}^1 + e_{33}^0 N_{1313}^1 - k_{33}^0 N_{113}^2),$$

$$S_{21} = \frac{1}{4\pi} (C_{11}^0 N_{2121}^1 + C_{21}^0 N_{2222}^1 + C_{31}^0 N_{2323}^1 + e_{31}^0 N_{223}^2),$$

$$S_{22} = \frac{1}{4\pi} (C_{12}^0 N_{2121}^1 + C_{22}^0 N_{2222}^1 + C_{32}^0 N_{2323}^1 + e_{32}^0 N_{223}^2),$$

$$S_{23} = \frac{1}{4\pi} (C_{13}^0 N_{2121}^1 + C_{23}^0 N_{2222}^1 + C_{33}^0 N_{2323}^1 + e_{33}^0 N_{223}^2),$$

$$S_{24} = \frac{1}{4\pi} e_{24}^0 N_{223}^2, \quad S_{25} = \frac{1}{4\pi} e_{15}^0 N_{223}^2,$$

$$S_{29} = -\frac{1}{4\pi} (e_{31}^0 N_{2121}^1 + e_{32}^0 N_{2222}^1 + e_{33}^0 N_{2323}^1 - k_{33}^0 N_{223}^2),$$

$$S_{31} = \frac{1}{4\pi} (C_{11}^0 N_{3131}^1 + C_{21}^0 N_{3232}^1 + C_{31}^0 N_{3333}^1 + e_{31}^0 N_{333}^2),$$

$$S_{32} = \frac{1}{4\pi} (C_{12}^0 N_{3131}^1 + C_{22}^0 N_{3232}^1 + C_{32}^0 N_{3333}^1 + e_{32}^0 N_{333}^2),$$

$$S_{33} = \frac{1}{4\pi} (C_{13}^0 N_{3131}^1 + C_{23}^0 N_{3232}^1 + C_{33}^0 N_{3333}^1 + e_{33}^0 N_{333}^2),$$

$$S_{34} = \frac{1}{4\pi} e_{24}^0 N_{333}^2, \quad S_{35} = \frac{1}{4\pi} e_{15}^0 N_{333}^2,$$

$$S_{39} = -\frac{1}{4\pi} (e_{31}^0 N_{3131}^1 + e_{32}^0 N_{3232}^1 + e_{33}^0 N_{3333}^1 - k_{33}^0 N_{333}^2),$$

$$S_{41} = \frac{1}{8\pi} e_{31}^0 N_{322}^2, \quad S_{42} = \frac{1}{8\pi} e_{32}^0 N_{322}^2, \quad S_{43} = \frac{1}{8\pi} e_{33}^0 N_{322}^2,$$

$$S_{44} = \frac{1}{4\pi} [C_{44}^0 (N_{3232}^1 + N_{3322}^1 + N_{2323}^1 + N_{2233}^1) + e_{24}^0 (N_{232}^2 + N_{322}^2) J],$$

$$S_{45} = \frac{1}{4\pi} e_{15}^0 N_{322}^2,$$

$$S_{48} = -\frac{1}{8\pi} [e_{24}^0 (N_{3232}^1 + N_{3322}^1 + N_{2323}^1 + N_{2233}^1) - k_{22}^0 (N_{232}^2 + N_{322}^2) J],$$

$$S_{51} = \frac{1}{8\pi} e_{31}^0 N_{311}^2, \quad S_{52} = \frac{1}{8\pi} e_{32}^0 N_{311}^2,$$

$$S_{53} = \frac{1}{8\pi} e_{33}^0 N_{311}^2, \quad S_{54} = \frac{1}{4\pi} e_{24}^0 N_{311}^2,$$



$$\begin{aligned}
 S_{55} &= \frac{1}{4\pi} [ C_{55}^0 (N_{113}^1 + N_{131}^1 + N_{311}^1 + N_{311}^1) + e_{15}^0 (N_{311}^2 + N_{311}^2) ], \\
 S_{57} &= - \frac{1}{8\pi} [ e_{15}^0 (N_{113}^1 + N_{131}^1 + N_{311}^1 + N_{311}^1) - k_{11}^0 (N_{311}^2 + N_{311}^2) ], \\
 S_{66} &= \frac{1}{4\pi} C_{66}^0 (N_{122}^1 + N_{122}^1 + N_{212}^1 + N_{212}^1), \\
 S_{75} &= - \frac{1}{2\pi} [ C_{33}^0 (N_{311}^2 + N_{311}^2) + e_{15}^0 N_{311}^3 ], \\
 S_{77} &= \frac{1}{4\pi} [ e_{15}^0 (N_{311}^2 + N_{311}^2) - k_{11}^0 N_{311}^3 ], \\
 S_{84} &= - \frac{1}{2\pi} [ C_{44}^0 (N_{322}^2 + N_{322}^2) + e_{24}^0 N_{322}^3 ], \\
 S_{88} &= \frac{1}{4\pi} [ e_{24}^0 (N_{322}^2 + N_{322}^2) - k_{22}^0 N_{322}^3 ], \\
 S_{91} &= - \frac{1}{4\pi} ( C_{11}^0 N_{113}^2 + C_{22}^0 N_{223}^2 + C_{31}^0 N_{333}^2 + e_{31}^0 N_{33}^3 ), \\
 S_{92} &= - \frac{1}{4\pi} ( C_{12}^0 N_{113}^2 + C_{22}^0 N_{223}^2 + C_{32}^0 N_{333}^2 + e_{32}^0 N_{33}^3 ), \\
 S_{93} &= - \frac{1}{4\pi} ( C_{13}^0 N_{113}^2 + C_{23}^0 N_{223}^2 + C_{33}^0 N_{333}^2 + e_{33}^0 N_{33}^3 ), \\
 S_{99} &= \frac{1}{4\pi} ( e_{31}^0 N_{113}^2 + e_{32}^0 N_{223}^2 + e_{33}^0 N_{333}^2 - k_{33}^0 N_{33}^3 ).
 \end{aligned}$$

附录II

矩阵 A 的分块矩阵可表示成如下形式

$$\begin{aligned}
 f_f &= \begin{bmatrix} n^2 & m^2 & 0 & 0 & 0 & 2mn \\ m^2 p^2 & n^2 p^2 & q^2 & 2npq & -2mpq & -2nmp^2 \\ m^2 q^2 & q^2 n^2 & p^2 & -2npq & 2mpq & -2mnq^2 \\ pqn^2 & -pqn^2 & qp & np^2 - nq^2 & mq^2 - mp^2 & nmpq \\ mnq & -mnq & 0 & mp & np & qn^2 - qn^2 \\ -nmp & nmp & 0 & mq & nq & pn^2 - pm^2 \end{bmatrix}, \\
 f_e &= \begin{bmatrix} n & m & 0 \\ -mp & np & q \\ mq & -nq & p \end{bmatrix},
 \end{aligned}$$

这里  $n = \cos\alpha, m = \sin\alpha, p = \cos\beta, q = \sin\beta, f_f$  是  $6 \times 6$  矩阵,  $f_e$  是  $3 \times 3$  矩阵。因此有:

$$A = \begin{bmatrix} f_f & \mathbf{0}_{6 \times 3} \\ \mathbf{0}_{3 \times 6} & f_e \end{bmatrix},$$

和

$$A^T = A^{-1}.$$

这里“T”表示矩阵转置,“-1”矩阵求逆

[参 考 文 献]

- [1] Jaff B, Cook W R, Jaff H. Piezoelectric Ceramic[M]. New York: Academic press, 1971.
- [2] Chueng H T, Kim H G. Characteristics of domain in tetragonal phase PZT ceramics[J]. Ferroelectrics, 1987, 76: 327—333.
- [3] Zenon B. Optical microscopic mapping of the domain structure of BaTiO<sub>3</sub> Microcrystals[J]. Ferroelectrics, 1994, 157: 13—18.
- [4] CAO Heng\_chu, Evans A G. Nonlinear deformation of ferroelectric ceramics[J]. J Am Ceram Soc, 1993, 76(4): 890—896.

- [5] Ansgar B, Schaufele, et al. Ferroelastic properties of lead zirconate titanate ceramics[J]. *J Am Ceram Soc*, 1996, **79**(10): 2637—2640.
- [6] Zhang Q M. Change of the weak - field properties of  $\text{Pb}(\text{ZrTi})\text{O}_3$  piezoceramics with compressive uniaxial stress and its links to the effect of dopants on the stability of the polarizations in the materials [J]. *J Mater Res*, 1997, **12**(1): 226—234.
- [7] Hwang S C, Lynch C S, McMeeking R M. Ferroelectric/ferroelastic interactions and a polarization switching model[J]. *Acta Metall Mater*, 1995, **43**(5): 2073—2084.
- [8] Hwang S C. The simulation of switching in polycrystalline ferroelectric ceramics[J]. *J Appl Phys*, 1998, **84**(3): 1530—1540.
- [9] Cheng J, Wang B, Du S. Effective electroelastic properties of polycrystalline ferroelectric ceramic predicted by a statistical model[J]. *Acta Mechanica*, 1999, **138**(3\_4): 163—175.
- [10] Li J, Weng G J. A theory of domain switch for the nonlinear behavior of ferroelectrics[J]. *Proc R Soc Lond, A*, 1999, **45**: 3493—3511.
- [11] Pohanka R C. Effect of the phase transformation on the fracture behavior of  $\text{BaTiO}_3$ [J]. *J Am Ceram Soc*, 1978, **61**(1- 2): 72—75.
- [12] Pisarenko G G. Anisotropy of fracture toughness of piezoelectric ceramic[J]. *J Am Ceram Soc*, 1985, **68**(5): 259—265.
- [13] Lynch C S. Crack growth in ferroelectric ceramics driven by cyclic polarization switching[J]. *J Intl Mater Sys*, 1995, **6**: 191—198.
- [14] Cook, R F. Fracture of ferroelectric ceramics[J]. *Ferroelectrics*, 1983, **50**: 267—272.
- [15] Pak Y E. Linear electro- elastic fracture mechanics of piezoelectric materials[J]. *International J Fracture*, 1992, **54**: 79—100.
- [16] ZHANG Tong\_yi, TONG Pin. Fracture mechanics for a mode III crack in a piezoelectric material[J]. *Int J Solids Structures*, 1996, **33**(3): 343—359.
- [17] Suo Z. Fracture mechanics for piezoelectric ceramics[J]. *J Mech Phys Solids*, 1992, **40**(4): 739—765.
- [18] Kumar S. Energy release rate and crack propagation in piezoelectric materials: Part I : Mechanical/ electrical load[J]. *Acta Mater*, 1997, **45**(2): 849—857.
- [19] CHAO Lu\_ping, HUANG Jin\_hui. Fracture criteria for piezoelectric materials containing multiple crack [J]. *J Appl Phys*, 1999, **85**(9): 6695—6703.
- [20] WANG Biao. Three\_dimensional analysis of a flat elliptical crack in a piezoelectric material[J]. *Int J Engng Sci*, 1992, **30**(6): 781—791.
- [21] Yang W, Zhu T. Switching toughening of ferroelectrics subjected to electric fields[J]. *J Mech Phys Solids*, 1998, **46**(2): 291—311.
- [22] Barnett D M, Lothe J. Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators[J]. *Phys Status Solidi, B*, 1975, **67**: 105—117.
- [23] Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids* [M]. Boston: Martinus Nijhoff, 1982.
- [24] Mori T, Tanaka K. Average stress in the matrix and average energy of materials with misfitting inclusion[J]. *Acta Metall*, 1973, **21**: 571—574.
- [25] Merz Walter J. Switching time in ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  and its dependence on crystal thickness[J]. *J Appl Phys*, 1956, **27**(8): 938—943.
- [26] WANG Biao. Three\_dimensional analysis of an ellipsoidal inclusion in a piezoelectric material[J]. *Int J Solids Structures*, 1992, **29**(3): 293—308.

# A Micromechanics Method to Study the Effect of Domain Switching on Fracture Behavior of Polycrystalline Ferroelectric Ceramics

CHENG Jin\_quan, WANG Biao, DU Shan\_yi

(Research Center of Composite Materials, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, P R China)

**Abstract:** The effect of domain switching on anisotropic fracture behavior of polycrystalline ferroelectric ceramics was revealed on the basis of the micromechanics method. Firstly, the electroelastic field inside and outside an inclusion in an infinite ferroelectric ceramics is carried out by the way of Eshelby-Mori-Tanaka's theory and a statistical model, which accounts for the influence of domain switching. Further, the crack extension force (energy release rate)  $G_{ext}$  for a penny\_shape crack inside an effective polycrystalline ferroelectric ceramics is derived to estimate the averaged effect of domain switching on the fracture behavior of polycrystalline ferroelectric ceramics. The simulations of the crack extension force for a crack in a BaTiO<sub>3</sub> ceramics are shown that the effect of domain switching must be taken into consideration while analyzing the fracture behavior of polycrystalline ferroelectric ceramics. These results also demonstrate that the influence of the applied electric field on the crack propagation is more profound at smaller mechanical loading and the applied electric field may enhance the crack extension in a sense, which are consistent with the experimental results.

**Key words:** ferroelectrics; domain switching; fracture behavior