

固体材料中微孔洞间挠曲电场的相互作用*

郝一涵¹, 田新鹏², 邓 谦¹

(1. 华中科技大学 航空航天学院 工程力学系, 武汉 430074;
2. 西安理工大学 土木建筑工程学院 工程力学系, 西安 710048)

摘要: 该文研究了固体材料中常见缺陷微孔洞间挠曲电场的相互作用,通过配点混合有限元法模拟并对比了单孔和双孔模型中孔洞附近的应力、应变梯度以及挠曲电场的分布情况.数值模拟结果表明,当两个孔洞间的距离逐渐减小时,两孔附近的挠曲电场开始发生相互作用.此外,进一步探讨了微孔洞间挠曲电场的相互作用随孔间距离和孔洞尺寸的变化规律.结果表明,当孔间距离越近,尺寸越小时,孔间挠曲电场的相互作用越强.

关键词: 微孔间相互作用; 挠曲电效应; 孔间距离; 孔洞尺寸

中图分类号: O34 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.450208

Interaction Between Flexoelectric Fields Associated With Microholes in Solids

HAO Yihan¹, TIAN Xinpeng², DENG Qian¹

(1. *Department of Engineering Mechanics, School of Aerospace Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, P.R.China;*

2. *Department of Engineering Mechanics, School of Civil Engineering and Architecture, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, P.R.China*)

Abstract: The flexoelectric fields' interactions between microholes of common defects in solid materials are studied. With the collocation mixed finite element method, the distributions of the stress, the strain gradient, and the flexoelectric field around the hole of the single hole and the double holes, respectively, are compared. The numerical simulation results indicate that, the flexoelectric fields' interaction around the double holes emerges with the gradual decrease of the distance between the double holes. In addition, the effects of the distance between holes and the size of holes on the flexoelectric fields' interaction between microholes are explored. The results show that, reducing the distance between double holes and shrinking the size of holes will induce to an enhanced interaction of the flexoelectric field between double holes.

Key words: interaction between microholes; flexoelectric effect; distance between holes; hole size

* 收稿日期: 2024-07-12; 修订日期: 2024-08-15

基金项目: 国家自然科学基金(12172142)

作者简介: 郝一涵(1998—),女,博士生(E-mail: d202280621@hust.edu.cn);

田新鹏(1990—)男,副教授(E-mail: xinpengtian@xaut.edu.cn);

邓谦(1978—),男,教授,博士生导师(通讯作者. E-mail: tonydqian@hust.edu.cn).

引用格式: 郝一涵, 田新鹏, 邓谦. 固体材料中微孔洞间挠曲电场的相互作用[J]. 应用数学和力学, 2024, 45(11): 1381-1391.

0 引言

挠曲电效应 (flexoelectric effect) 是指机械应变梯度与电极化间的机电耦合效应, 几乎普遍存在于所有介电材料中^[1-3]. 相比于压电效应 (均匀应变与电极化间的机电耦合), 应变梯度能够以尺寸相关的方式诱导电极化, 因此在纳米尺度中, 挠曲电效应会变得更加显著^[4]. 近年来, 随着器件小型化和纳米技术的发展, 越来越多的研究聚焦于利用挠曲电特性设计并制造纳米级能量收集器或传感器^[5]. 在现实中, 大多数具有高硬度和脆性的介电陶瓷材料都存在固有缺陷, 如裂纹、孔洞和夹杂, 这些缺陷会加速材料的破坏. 此外, 挠曲电材料内部存在的大量微纳米尺度缺陷附近产生的应变梯度, 会诱发大面积的挠曲电效应, 从而直接影响材料的整体力电耦合行为. 因此, 研究缺陷对挠曲电材料性能的影响具有广泛的现实价值.

对挠曲电材料中缺陷的研究已开展了很多^[6-11], 然而绝大部分工作都集中在含有单个缺陷的挠曲电效应上. 在实际工程材料中往往存在大量微纳米缺陷, 当两个或多个缺陷诱发的挠曲电场达到某种条件发生相互作用时, 其相互影响机理也会对材料的性能产生影响. 因此, 对含有多个缺陷的挠曲电材料进行研究是非常重要的. 这可以帮助我们更好地理解缺陷间的相互作用对材料性能的影响规律, 并为实际工程应用提供可能的模型和设计指导.

关于材料中常见缺陷-孔洞间相互作用的探讨, 科研领域已进行了大量的研究. 在理论方面, 我国学者曾用复变函数方法研究了无限平面上任意排列多个孔洞的应力集中问题^[12]. 在数值模拟方面, 刘文辉等^[13]用晶体塑性有限元法模拟研究了 FCC 晶体表面空洞的长大和相互作用行为, 分析了晶体取向和微空洞在表面的深度变化对表面空洞长大和相互作用的影响. Soutis 等^[14]使用二维有限元分析了一对直径为 5 mm 的孔间的相互作用, 模拟结果表明, 当孔中心相距超过四个孔直径时, 两孔间没有相互作用. 关于挠曲电材料中孔洞相互作用的专题研究, 尚未调研到公开发表的相关文献, 因此本文采用配点混合有限元法 (collocation mixed finite element method, CMFEM) 模拟双孔间的相互作用对孔洞附近挠曲电效应的影响. 对比了单孔和双孔模型下材料中的力学 (应力, 应变梯度) 和电学 (电场, 极化) 响应, 分析了孔洞间距与孔洞尺寸对孔间相互作用在挠曲电效应中的影响, 探讨了这些参数的作用规律.

1 挠曲电理论

对于具有正 (direct)、逆 (converse) 挠曲电效应的中心对称电介质, 电焓密度 H 是应变 ε_{ij} 、电场 E_i 、应变梯度 η_{ijk} 和电场梯度 Σ_{ij} 的函数, 可以写成^[15-16]

$$H = \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - \frac{1}{2} a_{ij} E_i E_j + \frac{1}{2} g_{jklmni} \eta_{jkl} \eta_{mni} - f_{ijkl} E_i \eta_{jkl} - b_{kl ij} \varepsilon_{ij} \Sigma_{kl}, \quad (1)$$

其中 c_{ijkl} , a_{ij} 和 g_{jklmni} 分别是四阶弹性常数张量、二阶介电常数张量和高阶弹性常数张量; f_{ijkl} 和 b_{ijkl} 分别是正挠曲电系数张量和逆挠曲电系数张量; 应变张量 ε_{ij} 、电场矢量 E_i 、应变梯度张量 η_{ijk} 和电场梯度张量 Σ_{ij} 的定义分别由下式给出:

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

其中 u_i 和 ϕ 分别是位移矢量和电势. 根据式 (1), 挠曲电系统中的本构方程可以表示为

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial H}{\partial \varepsilon_{ij}} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} - b_{kl ij} \Sigma_{kl}, \quad (3)$$

$$\tau_{ijk} = \frac{\partial H}{\partial \eta_{ijk}} = -f_{ijkl} E_l + g_{jklmni} \eta_{mni}, \quad (4)$$

$$D_i = \frac{\partial H}{\partial E_i} = a_{ij} E_j + f_{ijkl} \eta_{jkl}, \quad (5)$$

$$Q_{ij} = \frac{\partial H}{\partial \Sigma_{ij}} = b_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (6)$$

其中 σ_{ij} 和 τ_{ijk} 是应力张量和高阶应力张量, D_i 和 Q_{ij} 是电位移张量和高阶电位移张量. 它们分别与应变 ε_{ij} 、

应变梯度 η_{ijk} 、电场 E_i 和电场梯度 Σ_{ij} 功共轭.

基于正交各向异性假设,上述材料系数张量可以表示为^[7]

$$c_{ijkl} = \delta_{i1}\delta_{j1}(c_{11}\delta_{k1}\delta_{l1} + c_{12}\delta_{k2}\delta_{l2}) + \delta_{i2}\delta_{j2}(c_{12}\delta_{k1}\delta_{l1} + c_{22}\delta_{k2}\delta_{l2}) + c_{44}(\delta_{i1}\delta_{j2} + \delta_{i2}\delta_{j1})(\delta_{k1}\delta_{l2} + \delta_{k2}\delta_{l1}), \quad (7)$$

$$a_{ij} = a_{11}\delta_{i1}\delta_{j1} + a_{22}\delta_{i2}\delta_{j2}, \quad (8)$$

$$g_{ijklmn} = l^2 c_{jkmn} \delta_{li}, \quad (9)$$

$$f_{ijkl} = f_1 \delta_{jk} \delta_{il} + f_2 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl}), \quad (10)$$

$$b_{ijkl} = b_1 \delta_{jk} \delta_{il} + b_2 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl}), \quad (11)$$

其中 δ_{jk} 是 Kronecker delta 函数, c_{11}, c_{12}, c_{22} 和 c_{44} 是弹性常数, a_{11} 和 a_{22} 是介电系数, f_1 和 f_2 是正挠曲电系数, b_1 和 b_2 是逆挠曲电系数, l 是与应变梯度相关的材料内部长度尺度参数.

根据变分原理,可以导出考虑正、逆挠曲电效应的中心对称电介质的控制方程^[17-19]

$$\sigma_{ij,j} - \tau_{ijk,jk} = 0, \quad (12)$$

$$D_{i,i} - Q_{ij,j} = 0. \quad (13)$$

相应的边界条件如下:

1) 牵引或位移边界条件

$$\sigma_{ij}n_j - \tau_{ijk}n_jn_k - D_j(\tau_{ijk}n_k) + (D_l n_l)n_jn_k\tau_{ijk} = \bar{t}_i, \quad \text{on } \Gamma_t, \quad (14)$$

$$u_i = \bar{u}_i, \quad \text{on } \Gamma_u. \quad (15)$$

2) 高阶牵引或位移法向导数边界条件

$$\tau_{ijk}n_jn_k = \bar{r}_i, \quad \text{on } \Gamma_r, \quad (16)$$

$$u_{i,k}n_k = \bar{v}_i, \quad \text{on } \Gamma_v. \quad (17)$$

3) 电位移或电势边界条件

$$D_i n_i - Q_{ij}n_j - D_j(Q_{ij}n_j) + (D_l n_l)n_jn_k Q_{ij} = \bar{q}, \quad \text{on } \Gamma_q, \quad (18)$$

$$\phi = \bar{\phi}, \quad \text{on } \Gamma_\phi. \quad (19)$$

4) 高阶电位移或电势法向导数边界条件

$$Q_{ij}n_i n_j = \bar{\omega}, \quad \text{on } \Gamma_\omega, \quad (20)$$

$$\phi_{,k}n_k = \bar{\theta}, \quad \text{on } \Gamma_\theta. \quad (21)$$

式(14)–(21)满足条件 $\Gamma_t \cup \Gamma_u = \Gamma_r \cup \Gamma_v = \Gamma_q \cup \Gamma_\phi = \Gamma_\omega \cup \Gamma_\theta = \Gamma$ 和 $\Gamma_t \cap \Gamma_u = \Gamma_r \cap \Gamma_v = \Gamma_q \cap \Gamma_\phi = \Gamma_\omega \cap \Gamma_\theta = \emptyset$. Γ 表示挠曲电固体的整个边界,其外单位法向量为 n_k , \bar{t}_i 和 \bar{r}_i 是表面牵引力和高阶牵引力, \bar{u}_i 和 \bar{v}_i 是施加的表面位移及其法向导数, \bar{q} 和 $\bar{\omega}$ 分别是表面电荷和更高阶电荷, $\bar{\phi}$ 和 $\bar{\theta}$ 分别是施加的表面电势及其法向导数.

图 1 给出了考虑正、逆挠曲电效应的中心对称电介质边界条件: 在 Γ_t 受外部牵引力, 在 Γ_u 上施加表面位移, 其中 $\Gamma_u = \Gamma/\Gamma_t$; 在 Γ_r 受外部高阶牵引力, 在 Γ_v 上施加表面位移法向导数, 其中 $\Gamma_v = \Gamma/\Gamma_r$; 在 Γ_q 上施加表面电荷, 在 Γ_ϕ 上施加表面电势, 其中 $\Gamma_\phi = \Gamma/\Gamma_q$; 在 Γ_ω 上施加高阶表面电荷, 在 Γ_θ 上施加表面电势法向导数, 其中 $\Gamma_\theta = \Gamma/\Gamma_\omega$.

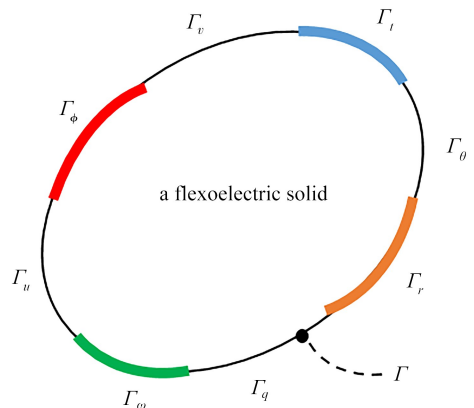


图 1 考虑正、逆挠曲电效应的中心对称电介质的边界条件

Fig. 1 Boundary conditions for centrosymmetric dielectrics considering direct and converse flexoelectric effects

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同.

2 数值模拟和讨论

在实际工程材料中,缺陷是普遍存在的.特别从微纳米尺度来看,材料中的缺陷是不可避免且分布多样的.作为常见缺陷-微孔洞问题是一个热门话题.对于挠曲电效应研究,多个孔洞的挠曲电效应相互作用机制仍不清楚.在本节中,我们利用二阶 CMFEM 研究了双孔洞间相互作用对介电材料中挠曲电效应的影响,关于二阶 CMFEM 的具体实现,可参考我们前期的工作^[20-22],在此不再赘述.

2.1 单孔及双孔模型介绍

当材料中两个孔洞相距较远时,它们之间的场(如应力、应变梯度、挠曲电)不会相互影响,孔洞是相互独立的,这时可以只对单个孔洞进行建模来研究其附近的挠曲电效应.然而,当两个孔洞的距离缩短至一定程度,两孔边界附近的场量将开始产生相互作用,此时单个孔洞的简化模型将不再适用.因此,本文分别建立了单孔和双孔模型来对孔间挠曲电效应的相互作用开展研究.

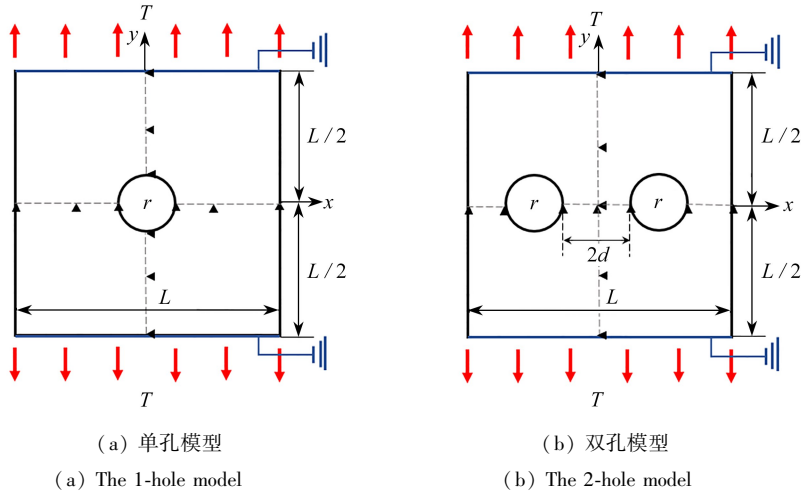


图2 圆形孔洞问题的直角坐标系及示意图

Fig. 2 The Cartesian coordinate system and the circular hole problem

如图2所示,方形板的长度为 $L = 1\ 000\ \text{nm}$,孔洞半径为 $r = 50\ \text{nm}$,其中单孔模型如图2(a)所示,圆形孔中心位于板的中心;双孔模型如图2(b)所示,两个孔在板中对称分布,孔间距离(韧带长度)为 $2d = 200\ \text{nm}$.对板施加 $T = 10\ \text{MPa}$ 的拉伸载荷,板在上下表面接地.位移边界条件如下:

单孔模型

$$\begin{cases} u_1 = 0, & \text{at } x = 0, r \leq |y| \leq \frac{L}{2}, \\ u_2 = 0, & \text{at } y = 0, r \leq |x| \leq \frac{L}{2}; \end{cases} \quad (22)$$

双孔模型

$$\begin{cases} u_1 = 0, & \text{at } x = 0, |y| \leq \frac{L}{2}, \\ u_2 = 0, & \text{at } y = 0, |x| \leq d \cup d + 2r \leq |x| \leq \frac{L}{2}. \end{cases} \quad (23)$$

图3显示了图2所示的孔洞模型的有限元网格.采用二次四边形单元,其中单孔模型的单元总数为924,共产生11 508个自由度,双孔模型的单元总数为1 272,共产生15 813个自由度.为了准确地捕捉孔洞附近的力学和挠曲电响应,网格围绕圆形边界进行细化.这里,为了对比单孔和双孔模型下挠曲电响应的区别,我们简化地只考虑了直接挠曲电效应.为突出描述孔洞间挠曲电场的相互作用,本文采用立方相PZT材料,材料参数如表1所示.

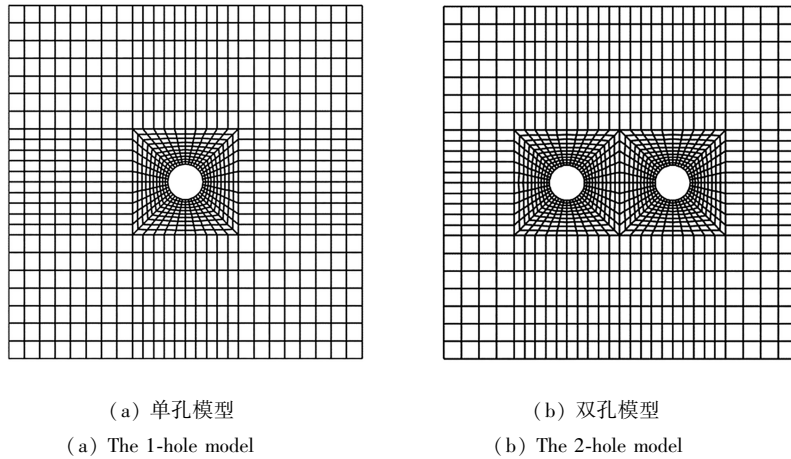


图 3 图 2 所示圆形孔洞问题的有限元网格
Fig. 3 The finite element meshes of the circular hole problem in fig. 2

表 1 PZT 的材料参数^[21]

Table 1 Material parameters of PZT^[21]

elastic constant				internal material length
c_{11} /Pa	c_{12} /Pa	c_{22} /Pa	c_{44} /Pa	l /m
1.26×10^{11}	5.3×10^{10}	1.17×10^{11}	3.53×10^{10}	2×10^{-9}
permittivity		flexoelectric coefficient		
a_{11} /($C^2/(N \cdot m^2)$)	a_{22} /($C^2/(N \cdot m^2)$)	f_1 /(C/m)	f_2 /(C/m)	
1.51×10^{-8}	1.30×10^{-8}	1×10^{-7}	0	

2.2 单孔与双孔附近挠曲电效应的比较

本小节利用 2.1 小节中建立的单孔和双孔模型对比了两种模型下孔洞附近的力学场和挠曲电场.如图 4 所示,我们模拟并绘制出了含单孔和双孔方形板的应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 云图.从图 4(a)中可以清楚地看出,相比于单孔模型,双孔模型下孔洞间会产生相互作用,使得孔洞周围高应力 σ_{22} 值的区域面积增大.由于应力集中,孔洞周围的不均匀性导致孔洞边界附近产生高应变梯度(图 4(b)),因此在孔洞周围激发了电场 E_1 和极化 P_1 ,产生了显著的挠曲电效应,如图 4(c)和 4(d)所示.

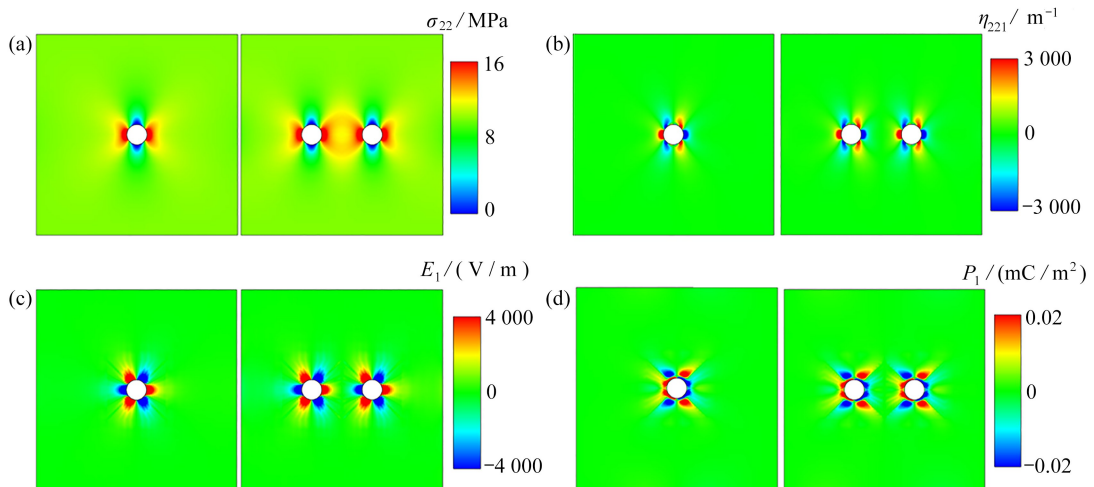


图 4 含单孔和双孔的方形板的应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 云图

Fig. 4 Contours of stress component σ_{22} , strain gradient component η_{221} , electric field component E_1 and polarization component P_1 of square plates with 1 hole and 2 holes, respectively

下面为更具体地从数值上分析双孔间的相互作用对方形板中挠曲电效应的影响,我们绘制了应力分量

σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 沿 x 轴的变化曲线,如图 5 所示.这里为了将单孔模型和双孔模型放在同一水平刻度下对比,在双孔模型中以左侧孔洞为研究对象,左侧孔洞的右边界处设为 $l = 0$,即 $l = x + d$.同样地,在单孔模型中将孔洞的右边界处设为 $l = 0$,即 $l = x - r$.从图 5 中可以清楚地看出,当远离孔洞边界时,所有物理量的数值均急剧下降.但相比于单孔模型,双孔模型中由于右侧孔洞的存在,图 5(a) 中 σ_{22} 的降低速度有所减缓,而且在孔边界和两孔中心处的 σ_{22} 值均略高于单孔模型,这一现象说明两孔间的相互作用可以使孔附近的应力集中现象增强.为对比两种模型下的挠曲电效应,我们对 η_{221} 、 E_1 和 P_1 进行了模拟.如图 5(b) 和 5(c) 所示,随着逐渐远离孔边界,双孔模型下 η_{221} 和 E_1 的变化趋势和单孔模型几乎重合,而在双孔模型的韧带处的 P_1 值却低于单孔模型,如图 5(d) 所示.从上述结果可知,相比于单个孔洞,相距一定距离的多个孔洞间会发生相互作用,进而影响材料的挠曲电行为.

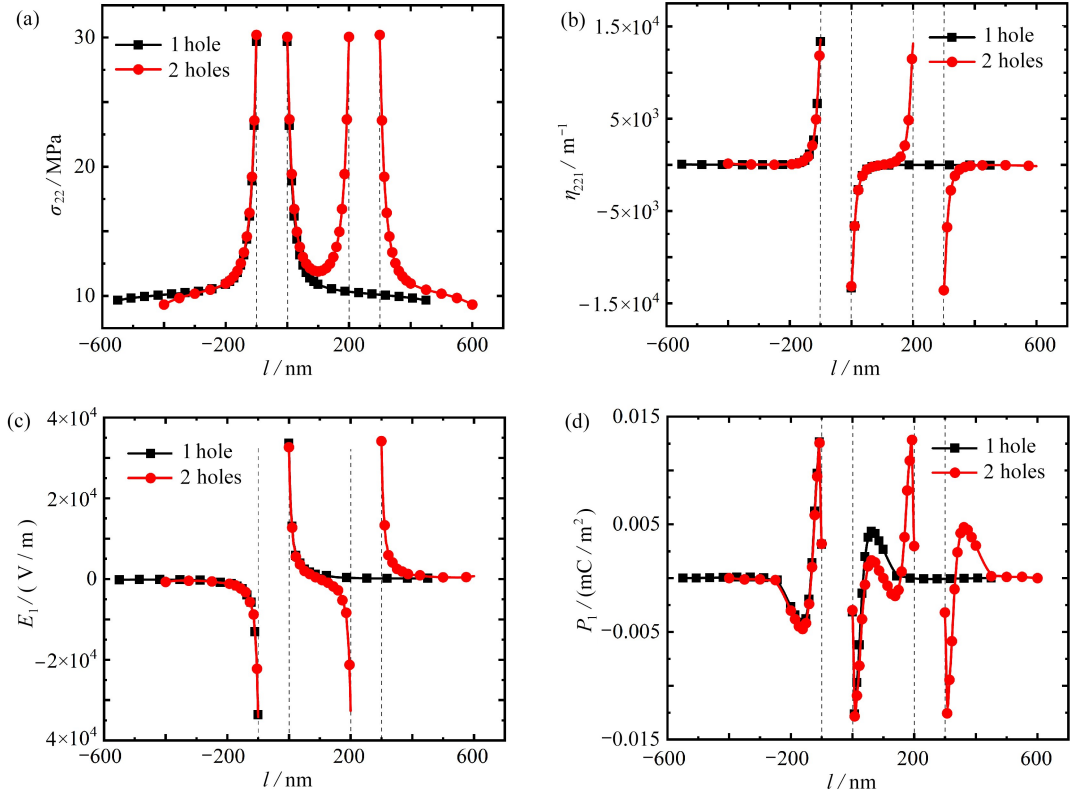


图 5 含单孔和双孔的方形板中应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 沿 x 轴的变化(虚线表示孔洞边界)

Fig. 5 The variations of stress component σ_{22} , strain gradient component η_{221} , electric field component E_1 and polarization component P_1 along the x -axis in square plates with 1 hole and 2 holes, respectively (with dashed lines representing the boundaries of holes)

2.3 孔间距离对孔洞附近挠曲电效应的影响

在上一小节中,我们通过对单孔和双孔模型进行模拟证明了相距一定距离的两个孔洞诱发的应力场和挠曲电场会产生相互作用,但显然不是任何情况下的两个孔洞之间都会产生相互作用.挠曲电效应与应变梯度有关,而在孔洞问题中,只有在孔洞附近的范围内会产生较大的应变梯度,进而诱导出较强的挠曲电效应.因此,孔洞间距离是影响其相互作用的一个重要因素.

对于固定的孔洞半径 $r = 50$ nm,不同孔间距离下 ($2d = 100$ nm, 200 nm, 300 nm, 400 nm) 方形板中应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 分布如图 6 所示.从图 6(a) 和 6(c) 中可以清楚地看出,随着孔间距离从 100 nm 增加到 400 nm,孔洞周围高 σ_{22} 和高 E_1 区域的范围明显减小,板中心处 σ_{22} 的数值逐渐降低.如图 6(b) 所示,这里和 2.2 小节相同,我们只绘制了应变梯度分量 η_{221} 的云图.虽然随着孔间距离的增大, η_{221} 的非零值区域面积并没有明显变化,但这无法说明孔间距离不会对挠曲电效应产生影响,

因为孔边界周围的挠曲电效应是一种复杂的局部现象,六个应变梯度分量均有贡献,这里为了简化阐述,只绘制了最大应变梯度分量 η_{221} 。

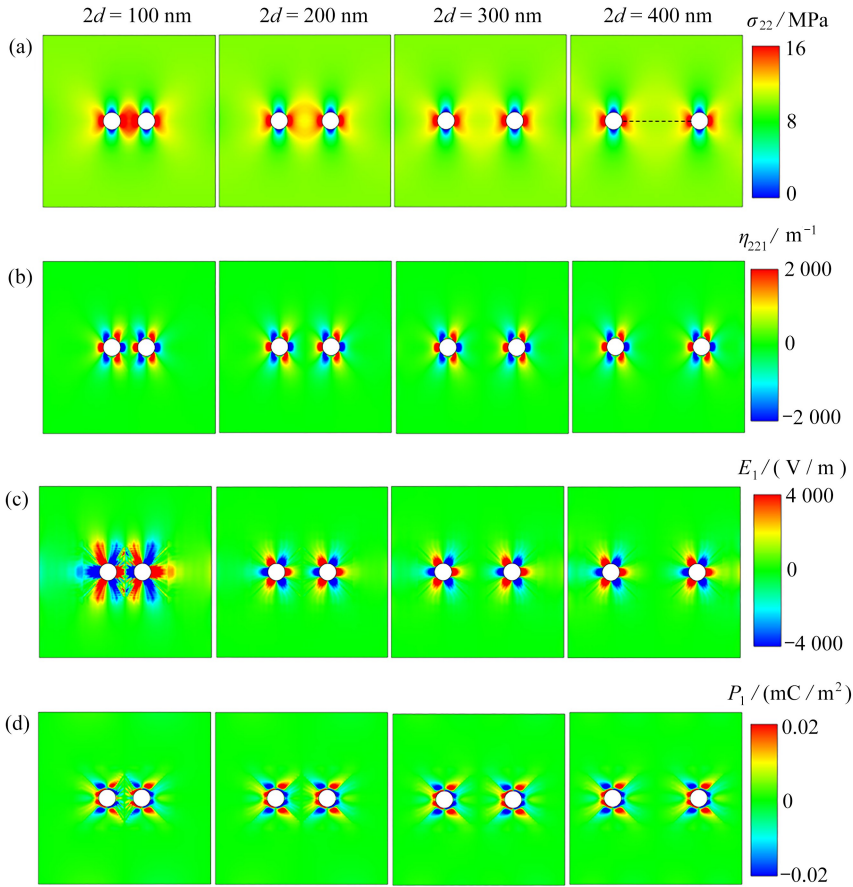
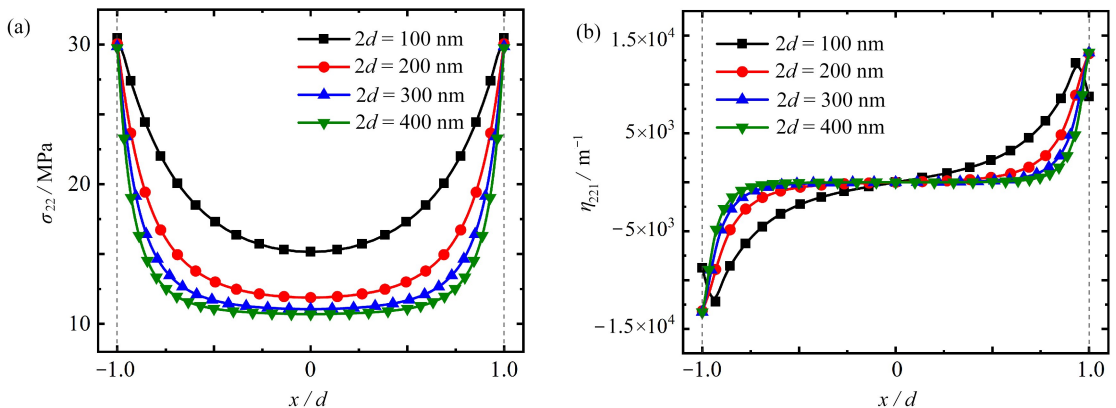


图 6 不同孔间距离下方形板的应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 云图

Fig. 6 Contours of stress component σ_{22} , strain gradient component η_{221} , electric field component E_1 and polarization component P_1 of square plates with different distances between 2 holes

为了进一步说明我们的结论,下面绘制了上述物理量沿韧带的变化曲线,如图 7 所示,这里横坐标按照孔间距离进行归一化处理.从图 7(a)中可以看出,随着孔间距离的减小,孔边界的 σ_{22} 略微增大,两孔间的 σ_{22} 也逐渐增大,说明两孔间的距离越小,两孔间的相互作用越强,孔附近的应力集中现象也越显著.并且从图 7 中还可以得出, σ_{22} , η_{221} , E_1 和 P_1 的曲线斜率均随着孔间距离的减小而相对降低.此外,当孔间距离减小到 100 nm 时,不同于 σ_{22} , η_{221} 和 E_1 在孔边界很小的范围内发生了反向的变化(图 7(b)和 7(c)), P_1 在整个韧带上的变化趋势都发生了反向(图 7(d)).



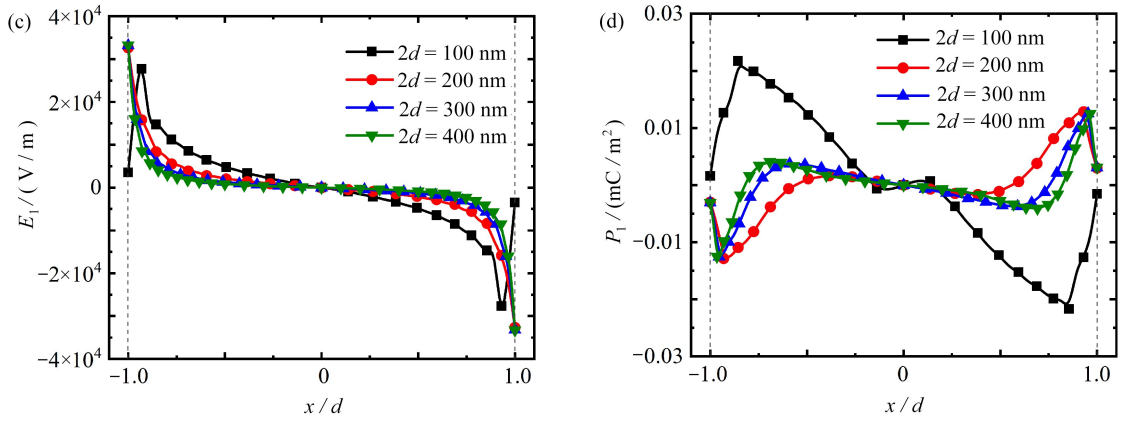


图7 不同孔间距离下方形板中应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 沿韧带的变化(虚线表示孔洞边界)

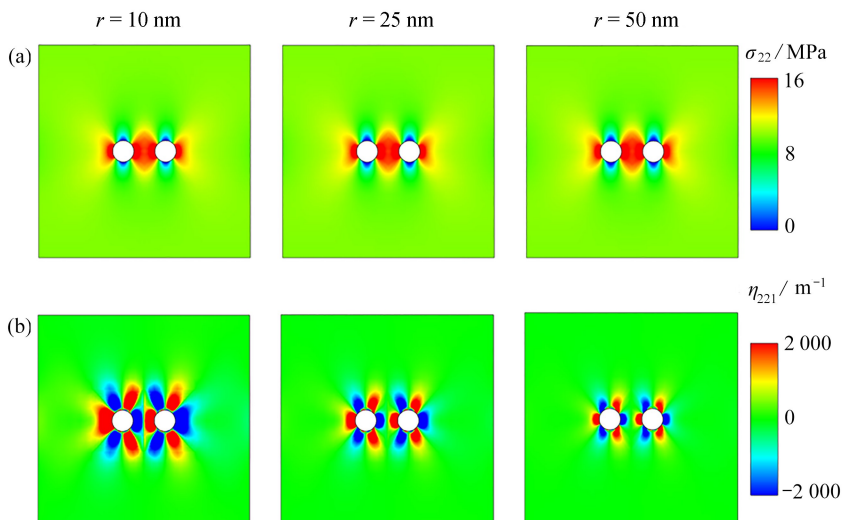
Fig. 7 The variations of stress component σ_{22} , strain gradient component η_{221} , electric field component E_1 , and polarization component P_1 along the ligament in square plates with different distances between 2 holes (with dashed lines representing the boundaries of holes)

这是因为,随着两个孔洞间距的逐步缩小,孔边界处的应变梯度弹性效应逐渐增强,直至其影响力与挠曲电效应相媲美,从而在两者之间形成了一种微妙的竞争关系。在现实世界的材料中,孔洞间的距离通常是不可预测的,实验操作也难以精确控制这一变量。因此,本小节通过数值模拟,探讨了材料中挠曲电效应随着孔洞间距离的变化规律,所得的结论旨在为相关的实验工作提供一些参考。

2.4 孔洞相互作用的尺寸依赖性

在2.3小节中,我们通过改变两孔间的距离在同一尺度下说明了孔间距对材料挠曲电效应的影响。在实际工程问题中,材料及缺陷的尺寸并不是固定的,在不同尺度下材料中的缺陷可能处于同一分布形态。因此本小节我们固定模型的孔隙比 $r:d = 1:1$,将模型整体进行放缩,对比了不同孔洞半径下($r = 10 \text{ nm}, 25 \text{ nm}, 50 \text{ nm}$)双孔间的相互作用对介电材料中挠曲电效应的影响。

不同孔洞半径下方形板中应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 分布如图8所示。从图中可以清楚地看出,随着孔半径的增大,方形板中高 σ_{22} 区域的面积没有明显变化(图8(a)),而 η_{221} , E_1 和 P_1 的非零值区域明显减小(图8(b)—8(d))。说明孔洞半径的改变对孔周围的挠曲电效应产生了显著的影响,孔半径越小,挠曲电效应越显著。



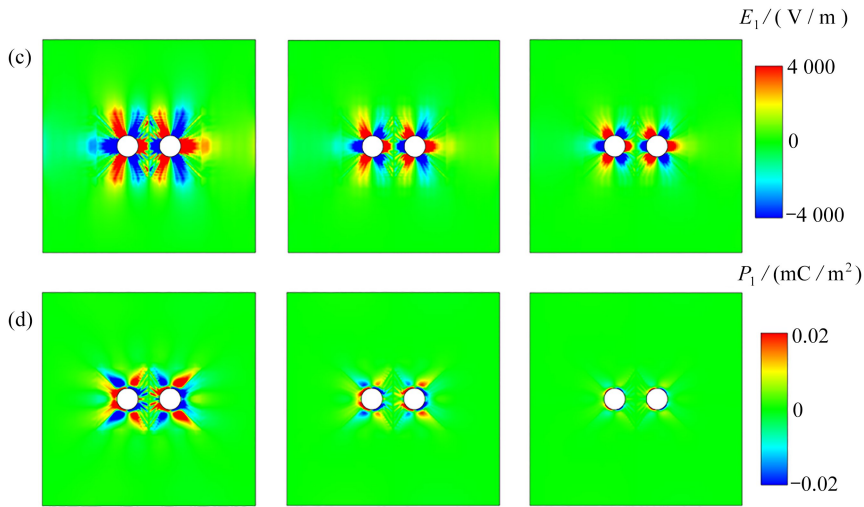


图 8 不同孔洞半径下方形板的应力分量 σ_{22} 、应变梯度分量 η_{221} 、电场分量 E_1 和极化分量 P_1 云图
 Fig. 8 Contours of stress component σ_{22} , strain gradient component η_{221} , electric field component E_1 and polarization component P_1 of shaped plates with different hole radii

然而仅从云图中,我们尚无法直接断定小孔半径下挠曲电效应的增强是否源自于孔与孔之间相互作用的加强,因为单个孔的尺寸效应同样对挠曲电效应有着不容忽视的影响.换言之,在这一现象的背后,可能隐藏着尺寸效应与孔间相互作用共同交织的复杂机制.

为了进一步说明我们的结论,下面对比了单孔和双孔模型同时改变孔间半径时应变梯度分量 η_{221} 和电场分量 E_1 沿孔间韧带的变化曲线,如图 9 所示.这里采用和 2.2 小节中相同的处理,将双孔模型中左侧孔洞和单孔模型中孔洞的右边界处设为 $l = 0$, 并且按照孔洞半径进行归一化处理.从图 9 中可以看出,随着孔间半径的减小,无论是单孔还是双孔模型,孔附近 η_{221} 和 E_1 均逐渐增大.这一现象表明,孔洞半径越小,挠曲电效应越显著,这与我们通常所理解的尺寸效应相一致.当孔间半径缩小至 10 nm 时,从图 9(a) 中可以清晰地观察到单孔和双孔的 η_{221} 曲线出现分离;相应地,在图 9(b) 中可以发现,两种模型下孔洞附近 E_1 的差异也随着孔洞半径的减小而增大,在 10 nm 时达到最大.因此,小尺度的孔洞缺陷使材料中的挠曲电效应增强,并且在相同孔隙比下,孔洞越小,孔洞间的相互作用越强,使得材料中的挠曲电效应越强.

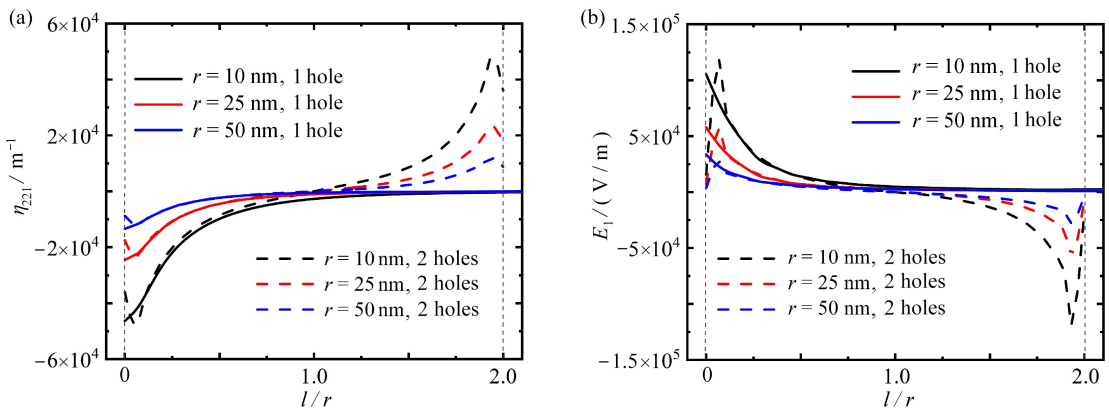


图 9 单孔和双孔模型在不同孔洞半径下方形板中应变梯度分量 η_{221} 和电场分量 E_1 沿韧带的变化(虚线表示孔洞边界)

Fig. 9 The variations of strain gradient component η_{221} and electric field component E_1 along the ligament in square plates of 1-hole and 2-hole models with different hole radii (with dashed lines representing the boundaries of holes)

3 结 论

本文利用 CMFEM 程序模拟了介电材料中孔洞附近的挠曲电效应.首先对单孔和双孔模型中的力学和电学响应进行对比,发现相距一定距离的两个孔洞间的相互作用会对材料中的挠曲电效应产生影响.并且当两孔间的距离逐渐靠近时,在孔洞边界的小范围区域内,应变梯度 η_{221} 、电场 E_1 和极化 η_1 会出现反向的结果,这是一个很有趣的现象.此外我们还对不同尺度下孔洞间的相互作用进行了模拟,结果表明在相同孔隙比下,孔洞半径越小,双孔与单孔模型中孔洞附近电场的差值越大,挠曲电效应越强.本文给出的数值结果不仅有助于研究孔洞问题中双孔间的相互作用对材料中挠曲电效应的影响规律,而且为实验观测工作提供了参考,有助于进一步的智能材料和超材料创新设计.

参考文献(References):

- [1] YUDIN P V, TAGANTSEV A K. Fundamentals of flexoelectricity in solids[J]. *Nanotechnology*, 2013, **24**(43): 432001.
- [2] WANG B, GU Y, ZHANG S, et al. Flexoelectricity in solids: progress, challenges, and perspectives[J]. *Progress in Materials Science*, 2019, **106**: 100570.
- [3] DENG Q, LV S H, LI Z Q, et al. The impact of flexoelectricity on materials, devices, and physics[J]. *Journal of Applied Physics*, 2020, **128**(8): 080902.
- [4] NGUYEN T D, MAO S, YEH Y W, et al. Nanoscale flexoelectricity[J]. *Advanced Materials*, 2013, **25**(7): 946-974.
- [5] JIANG X N, HUANG W B, ZHANG S J. Flexoelectric nano-generator: materials, structures and devices[J]. *Nano Energy*, 2013, **2**(6): 1079-1092.
- [6] ASKAR A, LEE P C Y, CAKMAK A S. The effect of surface curvature and discontinuity on the surface energy density and other induced fields in elastic dielectrics with polarization gradient[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1971, **7**(5): 523-537.
- [7] MARANGANTI R, SHARMA N D, SHARMA P. Electromechanical coupling in nonpiezoelectric materials due to nanoscale nonlocal size effects: Green's function solutions and embedded inclusions[J]. *Physical Review B*, 2006, **74**: 014110.
- [8] MAO S, PUROHIT P K. Defects in flexoelectric solids[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, **84**: 95-115.
- [9] TIAN X P, XU M K, ZHOU H Y, et al. Analytical studies on mode III fracture in flexoelectric solids[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2022, **89**(4): 041006.
- [10] XU M K, TIAN X P, DENG Q, et al. Modeling the interaction between inclusions and nanocracks in flexoelectric solids[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2023, **90**(10): 101005.
- [11] XIE J C, LINDER C. Analysis of flexoelectric solids with a cylindrical cavity[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2024, **91**(1): 011007.
- [12] 周承芳, 关长文. 无限大板包含任意排列多个椭圆孔洞的应力集中和多裂纹的应力强度因子计算[J]. 应用数学和力学, 1983, **4**(6): 789-800. (ZHOU Chengfang, GUAN Changwen. Stress concentration and stress intensity factors for an infinite plane with several rows of elliptic holes and cracks[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 1983, **4**(6): 789-800. (in Chinese))
- [13] 刘文辉, 何圳涛, 胡忠举. 表面微空洞长大和相互作用的晶体有限元分析[J]. 固体力学学报, 2012, **33**(4): 437-443. (LIU Wenhui, HE Zhentao, HU Zhongju. CPFEM analysis on growth and interaction behaviors of surface voids[J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2012, **33**(4): 437-443. (in Chinese))

- [14] SOUTIS C, FLECK N A, CURTIS P T. Hole-hole interaction in carbon fibre/epoxy laminates under uniaxial compression[J]. *Composites*, 1991, **22**(1): 31-38.
- [15] MINDLIN R D. Polarization gradient in elastic dielectrics[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1968, **4**(6): 637-642.
- [16] SHEN S P, HU S L. A theory of flexoelectricity with surface effect for elastic dielectrics[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2010, **58**(5): 665-677.
- [17] SLADEK J, SLADEK V, HRYTSYNA M, et al. Application of the gradient theory to interface crack between two dissimilar dielectric materials[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2022, **276**: 108895.
- [18] WANG S, SU H C, YI M, et al. Strain gradient finite element formulation of flexoelectricity in ferroelectric material based on phase-field method[J]. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 2024, **37**(4): 570-579.
- [19] BAO A W, LI X B, PU Y X, et al. Surface elastic effects on electromechanical responses of a piezoelectric semiconducting nanobeam[J]. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 2024, **37**(4): 598-612.
- [20] TIAN X P, SLADEK J, SLADEK V, et al. A collocation mixed finite element method for the analysis of flexoelectric solids[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2021, **217**: 27-39.
- [21] TIAN X P, XU M K, ZHOU H Y, et al. Modeling the flexoelectric effect around the tip of nano-cracks using a collocation MFEM[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2023, **289**: 109452.
- [22] TIAN X P, ZHOU H Y, DENG Q, et al. Modeling the flexoelectric effect in semiconductors *via* a second-order collocation MFEM[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2024, **264**: 108837.