中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学　2009 年 第 39 卷 第 12 期: 1762 ~ 1769
www.scichina.com　phys.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE IN CHINA PRESS

具有挠曲电效应的纳米电介质变分原理及控制方程

胡淑玲, 申胜平*

西安交通大学航天航空学院强度与振动教育部重点实验室, 西安 710049

* E-mail: sshen@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期: 2009-06-08; 接受日期: 2009-10-12

国家重点基础研究发展计划(编号: 2007CB707702)和国家自然科学基金(批准号: 10672130, 10972173)资助项目

摘要　纳米电介质具有较强的挠曲电效应, 并且该效应与大的应变梯度相耦合. 在纳米尺度, 静电力不能被忽略. 我们基于电学焓, 建立了可考虑应变及极化梯度效应以及静电力影响的纳米电介质变分原理. 由此变分原理, 导出了其控制方程, 给出了广义静电应力的表达式. 广义静电应力由两部分组成, 一部分为与极化及应变有关的 Maxwell 应力, 另一部分为与极化梯度及应变梯度有关的应力. 我们的工作为研究纳米电介质中的力电耦合问题提供了基础.

关键词
挠曲电效应
变分原理
控制方程
电介质
静电应力
纳米尺度

作为电介质材料力电耦合问题分析和计算的基础, 变分原理长期以来都得到很多研究者的重视. 对于线弹性电介质, Toupin[1]建立了线性压电材料变分原理, Eringen[2]推导了线性微型态材料变分原理, Shen和Kuang[3]推导了热释电材料动态变分原理, 等等. 对于非线性问题, Kuang[4~7]系统地建立了基于吉布斯自由能和内能的电介质热力学普适变分原理, 基于这些变分原理, 可以得到相应的完整的控制方程组, 并且可以得到麦克斯韦尔应力(静电力)的表达式. 但是, 这些工作, 不管是线性还是非线性问题, 都没有考虑应变梯度和极化梯度效应.

应变梯度或非均匀应变场能够局部地破坏反演对称, 从而导致晶体, 甚至中心对称晶体发生极化, 这就是所谓的挠曲电效应. 相反地, 逆挠曲电效应表示极化梯度导致应变场[8,9]. 挠曲电效应已经被晶格动力学所证实[10,11]. 挠曲电理论与晶格动力学都预测出薄膜电容小于经典理论的结果[11,12]. 理论上, 挠曲电效应存在于所有的电介质中, 但是对于许多材料, 挠曲电效应微不足道, 可以忽略. 对于一些电介质, 在纳米尺度, 挠曲电效应非常强, 与大应变梯度耦合, 此时不能忽略挠曲电效应. Mindlin[13]给出了一个考虑极化梯度效应的电介质变分原理, 但没有考虑挠曲电效应. Sahin与Dost[14]给出了一个同时考虑应变梯度与极化梯度效应的电介质变分原理, 并由此得到控制方程. 挠曲电理论与经典的压电理论不同之处在于, 它含有特征长度, 是尺寸相关的. 最近, 人们发现挠曲电理论在纳米科技扮演着重要角色[15]. 例如, 它能极大地提高纳米结构中的能量获取[16], 为能量收集提供了方法. 文献[17]综述了挠曲电理论的研究, 并给出了挠曲电理论的完整数学框架. 利用挠

引用格式: 胡淑玲, 申胜平. 具有挠曲电效应的纳米电介质变分原理及控制方程. 中国科学 G 辑, 2009, 39(12): 1762—1769
Hu S L, Shen S P. Variational principles and governing equations in nano-dielectrics with the flexoelectric effect. Sci China Phys Mech Astron, doi: 10.1007/s11433-010-0098-x

曲电效应, Fousek等人[18]最先提出了不采用压电材料制备具有压电特性的纳米复合材料的可能性, 随后Sharma等人[19]数值分析了这种纳米复合材料. Majdoub等人[20]指出挠曲电效应显示了尺寸效应, 对纳米结构的表观压电和弹性行为有重大影响. 挠曲电理论最近已吸引了许多研究者的兴趣, 但它还远未成熟.

前述工作虽然对挠曲电理论贡献很大, 但他们都没有考虑电场力的作用. 纳米科技所面临的临界尺度从几百纳米到仅仅几个纳米, 如纳机电系统(NEMS). 在微机电系统(MEMS)设计中可被忽略的静电力在纳机电系统(NEMS)设计中起到非常重要的作用. 例如, Gao等人[21]用透射电子显微镜在线测量纳米结构, 观察到源于强静电力的拉伸导致响应频移. Dequesnes等人[22]研究了基于单壁碳纳米管的纳机电开关, 在这个开关中, 单壁碳纳米管被模拟成两端固支的线弹性电介质梁, 而这个开关仅仅由静电力来驱动. 随后, Dequesnes等人[23,24]又采用线性与非线性理论研究了纳机电开关, 在这个开关中, 单壁碳纳米管被模拟成两端固支或悬臂电介质梁, 这个开关由静电力与范德华氏力共同来驱动. 这些研究都表明了, 在纳米尺度, 即使是线弹性问题, 静电力的影响也是非常强的. 因此, 在纳米结构中, 如何正确地考虑静电力是纳尺度力电耦合问题的关键之一.

本文将建立考虑应变梯度和极化梯度效应的纳米电介质变分原理. 在纳米尺度, 即使是线性电介质, 虚位移不仅产生虚应变, 而且产生电势或电荷的变化, 这与以前的考虑应变梯度和极化梯度效应的变分理论是不同的, 如Mindlin[13], Sahin和Dost[14]. 本文基于这个变分原理来推导完整的控制方程组, 并得到广义静电力的表达式.

1 电学焓

对于计及应变及极化梯度的线性电介质, 内能密度函数 U 的最一般的表达式为

$$\begin{aligned}U=&\frac{1}{2}a_{kl}P_kP_l+\frac{1}{2}b_{ijkl}P_{i,j}P_{k,l}+\frac{1}{2}c_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}\\&+e_{ijkl}\varepsilon_{ij}P_{k,l}+d_{ijk}\varepsilon_{ij}P_k+h_{ijk}P_iP_{j,k}\\&+f_{ijkl}P_iu_{j,kl}+r_{ijklm}\varepsilon_{ij}u_{k,lm}+\eta_{ijkmn}P_{i,j}u_{k,mn}\\&+\frac{1}{2}g_{ijklmn}u_{i,jk}u_{l,mn},\end{aligned}\tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$, $\boldsymbol{e}$, $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{h}$, $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{\eta}$, 和 $\boldsymbol{g}$ 为材料性能张量. 特别地, $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{c}$ 分别为二阶互易电介质极化率和四阶弹性常数张量. $\boldsymbol{e}$ 的分量为逆挠曲电系数, $\boldsymbol{f}$ 的分量为挠曲电系数. 张量 $\boldsymbol{g}$ 代表纯非局部弹性效应, 对应着应变梯度弹性理论. $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 分别为位移和极化矢量, 逗号表示微分. $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为应变张量, 定义为

$$\varepsilon_{ij}=\frac{1}{2}\left(u_{i,j}+u_{j,i}\right).\tag{2}$$

对不同的材料, 上述各材料性能张量可取不同值. 如果不考虑力电耦合, 所有对应力电耦合的材料性能张量等于 0, 即 $\boldsymbol{e}$, $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{f}$ 和 $\boldsymbol{\eta}$ 为 0. 对于中心对称电介质, $\boldsymbol{d}$ 与 $\boldsymbol{\eta}$ 等于 0. 由方程(1), 可以发现, 即使是中心对称材料, 力电耦合作用仍然可以通过 逆挠曲电系数 $\boldsymbol{e}$ 和挠曲电系数 $\boldsymbol{f}$ 实现. 在文献[19]中, 除了 $\boldsymbol{d}$ 和 $\boldsymbol{\eta}$ 等于 0 外, $\boldsymbol{h}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 也为 0.

Toupin[1]把经典压电理论中的电焓密度分成内能密度 U 及其剩余. 通过把它推广到挠曲电理论, 电焓密度 H 可以取如下形式:

$$H=U-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i}+\varphi_{,i}P_i,\tag{3}$$

式中 ε_0 为真空介电常数, φ 为 Maxwell 势, 定义为

$$E_i^{MS}=-\varphi_{,i},\tag{4}$$

本构方程可表示为

$$\sigma_{ij}=\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_{ij}}=c_{ijkl}\varepsilon_{kl}+e_{ijkl}P_{k,l}+d_{ijk}P_k+r_{ijklm}u_{k,lm};\tag{5}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{ijm}&=\frac{\partial U}{\partial u_{i,jm}}\\&=f_{kijm}P_k+r_{klijm}\varepsilon_{kl}+\eta_{klijm}P_{k,l}+g_{ijmknl}u_{k,nl};\end{aligned}\tag{6}$$

$$E_i=\frac{\partial U}{\partial P_i}=a_{ij}P_j+d_{jki}\varepsilon_{jk}+h_{ijk}P_{j,k}+f_{ijkl}u_{j,kl};\tag{7}$$

$$E_{ij}=\frac{\partial U}{\partial P_{i,j}}=b_{ijkl}P_{k,l}+e_{klij}\varepsilon_{kl}+h_{kij}P_k+\eta_{ijkmn}u_{k,mn},\tag{8}$$

式中 σ_{ij} 为应力张量, E_i 为电场强度, σ_{ijm} 和 E_{ij} 分别为高阶应力和高阶场强.

利用方程(5)~(8), 方程(1)可简化为

$$U=\frac{1}{2}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}+\frac{1}{2}\sigma_{ijm}u_{i,jm}+\frac{1}{2}E_iP_i+\frac{1}{2}E_{ij}P_{i,j}.\tag{9}$$

2 电焓变分原理

由于电场存在于除理想导体之外的任何材料中,

静电分析应该同时考虑电介质和其环境. 类似Mindlin[13], 假设电介质材料所占体积为V_0, 边界表面a把V_0同外部真空(或环境)V'分开, 总体积可记为$V=V_0+V'$.

变分原理可表示与Mindlin[13]一样, 即

$$-\delta\int_V H\mathrm{d}V+\delta W=0, \tag{10}$$

式中

$$\delta W=\int_{V_0}\left(f_k-\rho\ddot{u}_k\right)\delta u_k\mathrm{d}V+\int_{V_0}E_i^0\delta P_i\mathrm{d}V+\int_{a_\sigma}t_i\delta u_i\mathrm{d}a, \tag{11}$$

这里δ为变分符号, f_k, ρ, t_i, E_i^0 分别为体积力、质量密度、表面外力及外电场, a_σ 为力边界.

根据 Reynold 输运理论可得

$$\delta\int_V H\mathrm{d}V=\int_V\delta H\mathrm{d}V+\int_V H\delta u_{k,k}\mathrm{d}V, \tag{12}$$

于是便有

$$\begin{aligned}\delta\int_V U\mathrm{d}V&=\int_V\delta U\mathrm{d}V+\int_V U\delta u_{k,k}\mathrm{d}V\\&=\int_V\left(\sigma_{ij}\delta u_{i,j}+\sigma_{ijm}\delta u_{i,jm}+E_i\delta P_i+E_{ij}\delta P_{i,j}\right)\mathrm{d}V\\&\quad+\int_V\frac{1}{2}\left(\sigma_{ij}u_{i,j}+\sigma_{ijm}u_{i,jm}+E_iP_i+E_{ij}P_{i,j}\right)\delta u_{k,k}\mathrm{d}V.\end{aligned} \tag{13}$$

正如文献[4~7]所指出, 虚位移不仅引起虚应变, 也引起电势、极化及其梯度的变化, 于是我们可得

$$\delta P_i=\delta_P P_i+\delta_u P_i=\delta_P P_i+P_{i,j}\delta u_j, \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\delta P_{i,j}&=\delta_P P_{i,j}+\delta_u P_{i,j}=\delta_P P_{i,j}+P_{i,jk}\delta u_k\\&=\delta_P P_{i,j}+P_{i,kj}\delta u_k,\end{aligned} \tag{15}$$

$$\delta\varphi=\delta_\varphi\varphi+\delta_u\varphi=\delta_\varphi\varphi+\varphi_{,j}\delta u_j, \tag{16}$$

$$\begin{aligned}\delta\varphi_{,i}&=\delta_\varphi\varphi_{,i}+\delta_u\varphi_{,i}=\delta_\varphi\varphi_{,i}+\varphi_{,ij}\delta u_j\\&=\delta_\varphi\varphi_{,i}+\varphi_{,ji}\delta u_j,\end{aligned} \tag{17}$$

其中 $\delta_P P_i$ 和 $\delta_P P_{i,j}$ 由虚电极化产生, $\delta_\varphi\varphi$ 和 $\delta_\varphi\varphi_{,i}$ 由虚电势产生, $\delta_u P_i=P_{i,j}\delta u_j$, $\delta_u P_{i,j}=P_{i,jk}\delta u_k=P_{i,kj}\delta u_k$, $\delta_u\varphi=\varphi_{,j}\delta u_j$ 和 $\delta_u\varphi_{,i}=\varphi_{,ij}\delta u_j=\varphi_{,ji}\delta u_j$ 由虚位移产生.

应用高斯散度定理, 方程(13)的第一部分可化为

$$\begin{aligned}\int_V\delta U\mathrm{d}V&=\int_V\left(\sigma_{ij}\delta u_{i,j}+E_i\delta P_i+E_{ij}\delta P_{i,j}+\sigma_{ijm}\delta u_{i,jm}\right)\mathrm{d}V\\&=\int_a\sigma_{ij}n_j\delta u_i\mathrm{d}a-\int_V\sigma_{ij,j}\delta u_i\mathrm{d}V+\int_V E_i\delta P_i\mathrm{d}V\\&\quad+\int_a E_{ij}n_j\delta_P P_i\mathrm{d}a-\int_V E_{ij,j}\delta_P P_i\mathrm{d}V+\int_V E_{ij}P_{i,kj}\delta u_k\mathrm{d}V\\&\quad+\int_a\sigma_{ijm}n_m\delta u_{i,j}\mathrm{d}a-\int_V\sigma_{ijm,m}\delta u_{i,j}\mathrm{d}V\\&=\int_a\sigma_{ij}n_j\delta u_i\mathrm{d}a-\int_V\sigma_{ij,j}\delta u_i\mathrm{d}V+\int_V E_i\delta P_i\mathrm{d}V\\&\quad+\int_a E_{ij}n_j\delta_P P_i\mathrm{d}a-\int_V E_{ij,j}\delta_P P_i\mathrm{d}V\\&\quad+\int_V E_{ij}P_{i,kj}\delta u_k\mathrm{d}V+\int_a\sigma_{ijm}n_m\delta u_{i,j}\mathrm{d}a\\&\quad-\int_a\sigma_{ijm,m}n_j\delta u_i\mathrm{d}a+\int_V\sigma_{ijm,mj}\delta u_i\mathrm{d}V.\end{aligned} \tag{18}$$

为了确定所需的边界条件, 我们注意到, $\delta u_{i,j}$ 在表面 a 上并非与 δu_i 无关. 如果 δu_i 在 a 上已知, 那么 δu_i 在 a 上的切向梯度也已知. 因此, 对于这类问题, 需要表面上的 6 个独立的位移边界条件及法向导数.

为了确定独立的力边界条件, 我们把含 $\delta u_{i,j}$ 的积分改写为

$$\sigma_{ijm}n_m\delta u_{i,j}=\sigma_{ijm}n_mD_j\delta u_i+\sigma_{ijm}n_mn_jD\delta u_i, \tag{19}$$

上式是通过把梯度 $\delta u_{i,j}$ 分解为切向梯度 $D_j\delta u_i$ 和法向梯度 $n_jD\delta u_i$ 而得到, 即

$$\delta u_{i,j}=D_j\delta u_i+n_jD\delta u_i, \tag{20}$$

式中

$$D_j\equiv\left(\delta_{jk}-n_jn_k\right)\partial_k,\quad D\equiv n_k\partial_k, \tag{21}$$

其中 ∂_k 表示对 x_k 的偏微分. (19)式中的项可有多种进一步分解途径, (19)式右边第一项包含非独立变分 $\sigma_{ijm}n_mD_j\delta u_i$, 可分解为[25]

$$\begin{aligned}\sigma_{ijm}n_mD_j\delta u_i&=D_j\left(\sigma_{ijm}n_m\delta u_i\right)-n_mD_j\sigma_{ijm}\delta u_i\\&\quad-D_j\left(n_m\right)\sigma_{ijm}\delta u_i,\end{aligned} \tag{22}$$

(22)式的最后两项只含独立变分 δu_i. 对第一项, 我们注意到, 在表面 a 上有

$$\begin{aligned}D_j\left(\sigma_{ijm}n_m\delta u_i\right)&=\left(D_ln_l\right)n_jn_m\sigma_{ijm}\delta u_i\\&\quad+n_qe_{qpk}\partial_p\left(e_{klj}n_ln_m\sigma_{ijm}\delta u_i\right),\end{aligned} \tag{23}$$

其中 e_{qpk} 为置换张量. 根据斯托克斯定理, (23)式最后一项沿光滑表面积分为 0. 如果表面存在边界 c, 由斯托克斯定理给出:

$$\int_a n_q e_{qpk}\partial_p\left(e_{klj}n_l n_m\sigma_{ijm}\delta u_i\right)\mathrm{d}a = \int_c \left\lfloor n_m m_j\sigma_{ijm}\right\rfloor\delta u_i \mathrm{d}c, \tag{24}$$

式中 $m_j = e_{qpk}s_k n_l$, s_m 为 $\boldsymbol{c}$ 的单位切向矢量的分量. 符号$\lfloor\ \rfloor$表示间断值.

再一次应用高斯散度定理, 方程(18)中含 $P_{i,kj}$ 的项可化为

$$\begin{aligned}
&\int_V E_{ij}P_{i,kj}\delta u_k \mathrm{d}V \\
&= \int_a E_{ij}P_{i,k}n_j\delta u_k \mathrm{d}a - \int_V\left(E_{ij}\delta u_k\right)_{,j}P_{i,k}\mathrm{d}V \\
&= \int_a E_{ij}P_{i,k}n_j\delta u_k \mathrm{d}a - \int_V E_{ij,j}P_{i,k}\delta u_k \mathrm{d}V - \int_V E_{ij}P_{i,k}\delta u_{k,j}\mathrm{d}V \\
&= \int_a E_{ij}P_{i,k}n_j\delta u_k \mathrm{d}a - \int_V E_{ij,j}\delta_u P_i \mathrm{d}V - \int_V E_{ij}P_{i,k}\delta u_{k,j}\mathrm{d}V \\
&= \int_a E_{ij}n_j\delta_u P_i \mathrm{d}a - \int_V E_{ij,j}\delta_u P_i \mathrm{d}V \\
&\quad - \int_a E_{ij}P_{i,k}n_j\delta u_k \mathrm{d}a + \int_V\left(E_{ij}P_{i,k}\right)_{,j}\delta u_k \mathrm{d}V,
\end{aligned} \tag{25}$$

同样, 应用高斯散度定理, 方程(13)中的第二部分可化为

$$\begin{aligned}
&\int_V \frac{1}{2}\left(\sigma_{ij}u_{i,j} + \sigma_{ijm}u_{i,jm} + E_iP_i + E_{ij}P_{i,j}\right)\delta u_{k,k}\mathrm{d}V \\
&= \frac{1}{2}\int_a\left(\sigma_{ij}u_{i,j} + \sigma_{ijm}u_{i,jm} + E_iP_i + E_{ij}P_{i,j}\right)n_k\delta u_k \mathrm{d}a \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_V\left(\sigma_{ij}u_{i,j} + \sigma_{ijm}u_{i,jm} + E_iP_i + E_{ij}P_{i,j}\right)_{,k}\delta u_k \mathrm{d}V.
\end{aligned} \tag{26}$$

于是可得

$$\begin{aligned}
\delta\int_V U\mathrm{d}V &= \int_a \sigma_{ij}n_j\delta u_i \mathrm{d}a - \int_V \sigma_{ij,j}\delta u_i \mathrm{d}V + \int_V E_i\delta P_i \mathrm{d}V \\
&+ \int_a\left(D_l n_l\right)\sigma_{ijm}n_m n_j\delta u_i \mathrm{d}a - \int_a D_j\left(\sigma_{ijm}n_m\right)\delta u_i \mathrm{d}a \\
&+ \int_a \sigma_{ijm}n_m n_j D\delta u_i \mathrm{d}a - \int_a \sigma_{ijm,m}n_j\delta u_i \mathrm{d}a \\
&+ \int_V \sigma_{ijm,mj}\delta u_i \mathrm{d}V + \int_a E_{ij}n_j\delta P_i \mathrm{d}a - \int_V E_{ij,j}\delta P_i \mathrm{d}V \\
&- \int_a E_{ij}P_{i,k}n_j\delta u_k \mathrm{d}a + \int_V\left(E_{ij}P_{i,k}\right)_{,j}\delta u_k \mathrm{d}V \\
&+ \frac{1}{2}\int_a\left(\sigma_{ij}u_{i,j} + \sigma_{ijm}u_{i,jm} + E_iP_i + E_{ij}P_{i,j}\right)n_k\delta u_k \mathrm{d}a \\
&- \frac{1}{2}\int_V\left(\sigma_{ij}u_{i,j} + \sigma_{ijm}u_{i,jm} + E_iP_i + E_{ij}P_{i,j}\right)_{,k}\delta u_k \mathrm{d}V.
\end{aligned} \tag{27}$$

现在, 我们考虑电学焓的剩余部分的变分, 即

$$\begin{aligned}
B &= \delta\int_V\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i} + \varphi_{,i}P_i\right)\mathrm{d}V \\
&= \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i}\delta\varphi_{,i} + \delta\varphi_{,i}P_i + \varphi_{,i}\delta P_i\right)\mathrm{d}V \\
&\quad + \int_V\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i} + \varphi_{,i}P_i\right)\delta u_{k,k}\mathrm{d}V,
\end{aligned} \tag{28}$$

(28)式中第一个积分的前两项可化为

$$\begin{aligned}
&\int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i}\delta\varphi_{,i} + \delta\varphi_{,i}P_i\right)\mathrm{d}V \\
&= \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad + \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)\varphi_{,pi}\delta u_p \mathrm{d}V \\
&= \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad + \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta u_p\varphi_{,p}\mathrm{d}a \\
&\quad - \int_V\left[\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)\delta u_p\right]_{,i}\varphi_{,p}\mathrm{d}V \\
&= \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad + \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_u\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_u\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)\delta u_{p,i}\varphi_{,p}\mathrm{d}V \\
&= \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad + \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_u\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_u\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad - \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta u_p\varphi_{,p}\mathrm{d}a \\
&\quad + \int_V\left[\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)\varphi_{,p}\right]_{,i}\delta u_p \mathrm{d}V \\
&= \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_\varphi\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad + \int_a\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)n_i\delta_u\varphi \mathrm{d}a - \int_V\left(-\varepsilon_0\varphi_{,i} + P_i\right)_{,i}\delta_u\varphi \mathrm{d}V \\
&\quad - \int_a D_i^e\varphi_{,p}n_i\delta u_p \mathrm{d}a + \int_V\left[D_i^e\varphi_{,p}\right]_{,i}\delta u_p \mathrm{d}V,
\end{aligned} \tag{29}$$

式中电位移 D_i^e 定义为

$$D_i^e=-\varepsilon_0\varphi_{,i}+P_i. \tag{30}$$

(28)式中第二个积分可化为

$$\begin{aligned}&\int_V\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i}+\varphi_{,i}P_i\right)\delta u_{k,k}\mathrm{d}V\\&=\int_a\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i}+\varphi_{,i}P_i\right)n_k\delta u_k\mathrm{d}a\\&\quad-\int_V\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i}+\varphi_{,i}P_i\right)_{,k}\delta u_k\mathrm{d}V,\end{aligned} \tag{31}$$

于是, (28)式可写为

$$\begin{aligned}B=&\int_a D_i^e n_i\delta\varphi\mathrm{d}a-\int_V D_{i,i}^e\delta\varphi\mathrm{d}V\\&-\int_a D_i^e\varphi_{,p}n_i\delta u_p\mathrm{d}a+\int_V\left[D_i^e\varphi_{,p}\right]_{,i}\delta u_p\mathrm{d}V\\&+\int_V\varphi_{,i}\delta P_i\mathrm{d}V+\int_a\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i}+\varphi_{,i}P_i\right)n_k\delta u_k\mathrm{d}a\\&-\int_V\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,i}\varphi_{,i}+\varphi_{,i}P_i\right)_{,k}\delta u_k\mathrm{d}V.\end{aligned} \tag{32}$$

然后, 把方程(11), (27)和(32)代入(10)中, 可得

$$\begin{aligned}&\int_V\left[\left(\sigma_{ij}-\sigma_{ijm,m}+\sigma_{ij}^{ES}\right)_{,j}+f_i-\rho\ddot{u}_i\right]\delta u_i\mathrm{d}V\\&-\int_V\left(E_i-E_{ij,j}+\varphi_{,i}-E_i^0\right)\delta P_i\mathrm{d}V+\int_V D_{i,i}^e\delta\varphi\mathrm{d}V\\&-\int_{a_\sigma}\left[\left(\sigma_{ij}-\sigma_{ijm,m}+\sigma_{ij}^{ES}\right)n_j\right.\\&\left.+\left(D_l n_l\right)\sigma_{ijm}n_m n_j-D_j\left(\sigma_{ijm}n_m\right)-t_i\right]\delta u_i\mathrm{d}a\\&+\int_a\sigma_{ijm}n_m n_j D\delta u_i\mathrm{d}a+\int_a E_{ij}n_j\delta P_i\mathrm{d}a\\&-\int_a D_i^e n_i\delta\varphi\mathrm{d}a=0,\end{aligned} \tag{33}$$

其中 σ_{ij}^{ES} 为广义静电应力:

$$\begin{aligned}&\sigma_{ij}^{ES}\\&=-E_{kj}P_{k,i}+\frac{1}{2}\left(\sigma_{kl}u_{k,l}+\sigma_{klm}u_{k,lm}+E_kP_k+E_{kl}P_{k,l}\right)\delta_{ij}\\&\quad-D_j^e\varphi_{,i}+\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,k}\varphi_{,k}+\varphi_{,k}P_k\right)\delta_{ij},\end{aligned} \tag{34}$$

由于应变很小, $\sigma_{kl}u_{k,l}$ 和 $\sigma_{klm}u_{k,lm}$ 与 σ_{ij} 和 $\sigma_{ijm,m}$ 相比, 可以忽略. 因此, 方程(34)可化为

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}^{ES}=&-E_{kj}P_{k,i}+\frac{1}{2}\left(E_kP_k+E_{kl}P_{k,l}\right)\delta_{ij}\\&-D_j^e\varphi_{,i}+\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,k}\varphi_{,k}+\varphi_{,k}P_k\right)\delta_{ij}\\=&\sigma_{ij}^M+\sigma_{ijm,m}^M,\end{aligned} \tag{35}$$

其中 σ_{ij}^M 和 $\sigma_{ijm,m}^M$ 分别为麦克斯韦尔应力和对应极化梯度与应变梯度的静电应力, 其定义为

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}^M=&\frac{1}{2}E_kP_k\delta_{ij}-D_j^e\varphi_{,i}\\&+\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,k}\varphi_{,k}+\varphi_{,k}P_k\right)\delta_{ij},\end{aligned} \tag{36}$$

$$\sigma_{ijm,m}^M=E_{kj}P_{k,i}+\frac{1}{2}\left(E_{kl}P_{k,l}\right)\delta_{ij}. \tag{37}$$

由于 δu_i, δP_i 和 $\delta\varphi$ 的任意性, 由方程(33)可得如下控制方程:

$$\left(\sigma_{ij}-\sigma_{ijm,m}+\sigma_{ij}^{ES}\right)_{,j}+f_i=\rho\ddot{u}_i, \tag{38}$$

$$E_i-E_{ij,j}+\varphi_{,i}-E_i^0=0, \tag{39}$$

$$-\varepsilon_0\varphi_{,ii}+P_{i,i}=0,\quad \text{i.e.,}\quad D_{i,i}^e=0,\quad \text{in } V_0, \tag{40}$$

$$\varphi_{,ii}=0,\quad \text{in}\quad V', \tag{41}$$

在 a 上的边界条件为

$$\begin{aligned}&\left(\sigma_{ij}-\sigma_{ijm,m}+\sigma_{ij}^{ES}\right)n_j\\&+\left(D_ln_l\right)\sigma_{ijm}n_mn_j-D_j\left(\sigma_{ijm}n_m\right)=t_i;\end{aligned} \tag{42}$$

$$\sigma_{ijm}n_mn_j=0; \tag{43}$$

$$E_{ij}n_j=0; \tag{44}$$

$$\left(-\varepsilon_0\left\lfloor\varphi_{,i}\right\rfloor+P_i\right)n_i=0. \tag{45}$$

方程(38)~(41), 以及边界条件(42)~(45), 构成了求解考虑梯度效应及静电力影响纳米线性电介质的控制方程组. 经过适当的简化与变换, 这些方程可化为文献已有理论. 例如, 如果不考虑应变梯度和极化梯度效应, 这些方程可退化为经典力电耦合问题[12].

如果不考虑极化梯度和应变梯度效应, 方程(37)将消失, 于是 $\sigma_{ij}^{ES}=\sigma_{ij}^M$. 然后, 在没有外电场作用下, 方程(39)可化为

$$E_i+\varphi_{,i}=0, \tag{46}$$

从而, 方程(36)可写为

$$\sigma_{ij}^M=\frac{1}{2}E_kP_k\delta_{ij}+D_j^eE_i+\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_0E_kE_k-E_kP_k\right)\delta_{ij}$$

$$=D_j^e E_i-\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 E_k E_k+E_k P_k\right)\delta_{ij}$$
$$=D_j^e E_i-\frac{1}{2}D_k^e E_k\delta_{ij}, \tag{47}$$

上式与文献[7]中的一样.

如果不考虑静电力, 控制方程将简化为文献[17]中的情况. 需要指出的是, 边界条件与文献[17]中的不同, 在文献[17]中仅仅考虑三个力学边界, 即边界条件(43)消失, 边界条件(42)左边后两项去掉. 但是, 如我们在(18)式后面讨论, 正确描述这类问题需要 6 个独立的位移边界条件.

值得注意的是, 广义静电力直接由虚位移引起, 因为虚位移不仅产生电势和极化的变化, 也产生体积的变化, 而这将引起整个电能的变化. 正如文献[5]所指出, 广义静电应力并非真正的应力, 它的梯度为外加体积力, 见方程(38).

3 算例

在引言中, 我们已经介绍, 一些研究[21~24]表明在纳米尺度, 即使是线弹性问题, 静电力的影响也非常强. 在这一部分, 我们将通过一个非常简单的例子来阐明这个事实. 考虑一厚度为h的无限大各项同性电介质层, $x=h$表面固定, 另一表面$x=0$ 自由, 在这两个表面上分别施加电场 $\pm V$. 这种情况下, 问题简化为一维的. 本构关系简化为[13]

$$\begin{aligned}&E_1=aP_1;\\&\sigma_{11}=d_{11}P_{1,1}+c_{11}u_{1,1};\\&E_{11}=b_{11}P_{1,1}+d_{11}u_{1,1}.\end{aligned}\tag{48}$$

这里, 与文献[13]一样, 不考虑应变梯度. 控制方程(38)~(40)化为

$$\begin{aligned}&\left(\sigma_{11}+\sigma_{11}^{ES}\right)_{,1}=0;\\&E_1-E_{11,1}+\varphi_{,1}=0;\\&-\varepsilon_0\varphi_{,11}+P_{1,1}=0.\end{aligned}\tag{49}$$

根据方程(35), 广义静电应力可写为

$$\sigma_{11}^{ES}=\frac{1}{2}\left(aP_1^2-b_{11}P_{1,1}^2-d_{11}u_{1,1}P_{1,1}\right)+\frac{1}{2}\varepsilon_0\varphi_{,1}^2, \tag{50}$$

表面 $x=h$ 上的边界条件为

$$u_1=0; \tag{51a}$$
$$E_{11}=0; \tag{51b}$$
$$\varphi=V. \tag{51c}$$

表面 $x=0$ 上的边界条件为

$$\sigma_{11}+\sigma_{11}^{ES}=0; \tag{52a}$$
$$E_{11}=0; \tag{52b}$$
$$\varphi=-V. \tag{52c}$$

考虑如下函数

$$\begin{aligned}&u_1=A_1\mathrm{e}^{-x/l}+B_1\mathrm{e}^{x/l}+C_1x+D_1,\\&P_1=A_2\mathrm{e}^{-x/l}+B_2\mathrm{e}^{x/l}+C_2x+D_2,\\&\varphi=A_3\mathrm{e}^{-x/l}+B_3\mathrm{e}^{x/l}+C_3x+D_3,\end{aligned}\tag{53}$$

其中 l 为材料常数, 其量纲为长度, 可由方程(49)确定. 把(53)式代入(49)式, 可以得到

$$\begin{aligned}&C_2=0,\ A_2=-\frac{\varepsilon_0}{l}A_3=-\frac{c_{11}}{d_{11}\left(1-\frac{1}{2}C_1\right)}A_1,\\&-aD_2=C_3,\ B_2=\frac{\varepsilon_0}{l}B_3=-\frac{c_{11}}{d_{11}\left(1-\frac{1}{2}C_1\right)}B_1,\\&l=\left[\frac{c_{11}b_{11}-d_{11}^2\left(1-C_1/2\right)}{c_{11}\left(a+\varepsilon_0^{-1}\right)}\right]^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{54}$$

能量密度函数的正定性要求 l 为实数. 利用边界条件(51)和(52), 可以得到

$$C_3=\frac{2V}{h}, \tag{55}$$

$$A_2=\frac{l\left(\mathrm{e}^{h/l}-1\right)C_1}{\left(2w_1+w_2C_1\right)\sinh\frac{h}{l}}, \tag{56}$$

$$B_2=\frac{l\left(\mathrm{e}^{-h/l}-1\right)C_1}{\left(2w_1+w_2C_1\right)\sinh\frac{h}{l}}, \tag{57}$$

其中 $w_1=\frac{b_{11}}{d_{11}}-\frac{d_{11}}{c_{11}}$, $w_2=\frac{d_{11}}{c_{11}}$. C_1 可通过将(52a)式化为下式来决定:

$$\begin{aligned}&c_{11}C_1\left(2w_1+w_2C_1\right)^2+16l^2C_1^2\left(\frac{a}{2}+\frac{1}{2\varepsilon_0}\right)\tanh^2\frac{h}{2l}\\&+2\left(\frac{d_{11}^2}{c_{11}}-b_{11}\right)C_1^2-\frac{d_{11}^2}{c_{11}}C_1^3\\&=-\left(\frac{2}{a}+2\varepsilon_0\right)\frac{V^2}{h^2}\left(2w_1+w_2C_1\right)^2,\end{aligned}\tag{58}$$

D_1 可由式(51a)求得. 求得 C_1 后, A_i, B_i $(i=1,\ 2,\ 3)$可

以通过(56)和(57)式确定. 如果不考虑广义静电力, 方程(58)或(52a)将化为

$$c_{11}C_1 = 0, \tag{59}$$

从而, $A_i = B_i = 0$, $(i = 1,2,3)$. 于是可得

$$\begin{aligned} u_1 &= 0, \\ P_1 &= -\frac{2V}{ah}, \\ \varphi &= \frac{2V}{h}x - V, \end{aligned} \tag{60}$$

上式正是经典理论的解, 电介质层没有发生变形. 但是, 如果考虑广义静电力, $C_1 \neq 0$, 广义静电力将在电介质层中产生随厚度变化的变形.

方程(58)非常复杂, 只能得到数值解. 然而, 通过只考虑 C_1 或 $1/C_1$ 的一阶项, 我们可以近似分析它的两个极限情况. 当 C_1 非常小时, 我们有

$$C_1 \approx \frac{-w_1\left(\frac{2}{a}+2\varepsilon_0\right)V^2}{c_{11}w_1h^2 + w_2\left(\frac{2}{a}+2\varepsilon_0\right)V^2}, \tag{61}$$

当 C_1 非常大时:

$$C_1 \approx \frac{-w_2^2\left(\frac{2}{a}+2\varepsilon_0\right)\frac{V^2}{h^2} - 4w_1w_2c_{11} - 16l^2\left(\frac{a}{2}+\frac{1}{2\varepsilon_0}\right)\tanh^2\frac{h}{2l} - 2\left(\frac{d_{11}^2}{c_{11}} - b_{11}\right)}{c_{11}w_2^2 - \frac{d_{11}^2}{c_{11}}}. \tag{62}$$

从方程(61)和(62), 我们可以发现, C_1 的绝对值是电介质层厚 h 的函数, 随着 h 减小而增大. 随着电介质层厚 h 的减小, 静电力的作用越来越明显. 当 h 很大时, 由(61)式可得 C_1 趋向于 0, 静电力的作用消失. 当 h 很小时, 由(62)式可得 C_1 的绝对值变得很大, 静电力的作用必须考虑.

但是, 要求得精确的 C_1, 必须数值求解方程(58). 这里, 这个简单的例子仅仅说明静电力的作用依赖于电介质层的厚度. 当电介质层很薄时, 静电力的作用必须考虑, 所得的解(53)完全不同于不考虑静电力的经典理论的解(60).

4 结论

纳米电介质具有较强的挠曲电效应, 并且该效应与大的应变梯度相耦合. 在纳米尺度力电耦合问题分析中, 一个关键问题是如何正确地考虑静电力的作用. 本文建立了可考虑应变及极化梯度效应以及静电力影响的纳米电介质电学焓变分原理. 由此变分原理可以导出包含静电力的控制方程, 以及广义静电应力的表达式. 广义静电应力由两部分组成, 一部分为与极化及应变有关的麦克斯韦尔应力, 另一部分为与极化梯度及应变梯度有关的应力. 本文工作为纳米电介质中的力电耦合问题的分析及计算提供了基础.

参考文献

1 Toupin R A. The elastic dielectric. J Rat Mech Anal, 1956, 5: 849—914

2 Eringen A C. Balance laws of micromorphic continua revisited. Int J Eng Sci, 1992, 30: 805—810[DOI]

3 Shen S, Kuang Z B. An active control model of laminated piezothermoelastic plate. Int J Solids Struct, 1999: 36: 1925—1947[DOI]

4 Kuang Z B. Some problems in electrostrictive and magnetostrictive materials. Acta Mech Solida, 2007, 20: 219—227

5 Kuang Z B. Some variational principles in elastic dielectric and elastic magnetic materials. Eur J Mech A/Solids, 2008, 27: 504—514[DOI]

6 匡震邦. 有限变形下电弹性介质中的某些变分原理. 中国科学 G 辑: 物理 力学 天文学, 2008, 38(7): 919—930

7 Kuang Z B. Internal energy variational principles and governing equations in electroelastic analysis. Int J Solids Struct, 2009, 46: 902—911[DOI]

8 Bursian E V, Trunov N N. Nonlocal piezoelectric effect. Fiz Tverd Tela, 1974, 16: 1187—1190[DOI]

9 Catalan G, Sinnamon L J, Gregg J M. The effect of flexoelectricity on the dielectric properties of inhomogeneously strained ferroelectric thin films. J Phys Condens Matter, 2004, 16: 2253—2264

10 Askar A, Lee P C Y, Cakmak A S. A lattice dynamics approach to the theory of elastic dielectrics with polarization gradient. Phys Rev

B, 1970, 1: 3525—3537[DOI]
11 Mindlin R D. Continuum and lattice theories of influence of electromechanical coupling on capacitance of thin dielectric films. Int J Solids Struct, 1969, 5: 1197—1208[DOI]
12 Yang J S. An Introduction to the Theory of Piezoelectrocity. Boston: Kluwer Academic Publishers, 2004
13 Mindlin R D. Polarization gradient in elastic dielectrics. Int J Solids Struct, 1968, 4: 637—642[DOI]
14 Sahin E, Dost S. A strain-gradients theory of elastic dielectrics with spatial dispersion. Int J Eng Sci, 1988, 26: 1231—1245[DOI]
15 Cross L E. Flexoelectric effects: Charge separation in insulating solids subjected to elastic strain gradients. J Mater Sci, 2006, 41: 53—63[DOI]
16 Majdoub M S, Sharma P, Cagin T. Dramatic enhancement in energy harvesting for a narrow range of dimensions in piezoelectric nanostructures. Phys Rev B, 2008, 78: 121407[DOI]
17 Maranganti R, Sharma N D, Sharma P. Electromechanical coupling in nonpiezoelectric materials due to nanoscale size effects: Green's function solutions and embedded inclusions. Phys Rev B, 2006, 74: 014110[DOI]
18 Fousek J, Cross L E, Litvin D B. Possible piezoelectric composites based on flexoelectric effect. Mater Lett, 1999, 39: 289—291
19 Sharma N D, Maranganti R, Sharma P. On the possibility of piezoelectric nanocomposites without using piezoelectric materials. J Mech Phys Solids, 2007, 52: 2328—2350[DOI]
20 Majdoub M S, Sharma P, Cagin T. Enhanced size-dependent piezoelectricity and elasticity in nanostructures due to the flexoelectric effect. Phys Rev B, 2008, 77: 125424[DOI]
21 Gao R P, Pan Z W, Wang Z L. Work function at the tips of multiwalled carbon nanotubes. Appl Phys Lett, 2001, 78: 1757—1759[DOI]
22 Dequesnes M, Rotkin S V, Aluru N R. Parameterization of continuum theories for single wall carbon nanotube switches by molecular dynamics simulations. J Comput Electron, 2002, 1: 313—316[DOI]
23 Dequesnes M, Rotkin S V, Aluru N R. Calculation of pull-in voltages for carbon nanotube based nanoelectromechanical switches. Nanotechnology, 2002, 13: 120—131[DOI]
24 Dequesnes M, Tang Z, Aluru N R. Static and dynamic analysis of carbon nanotube-based switches. ASME J Engin Mater Tech, 2004, 126: 230—237[DOI]
25 Mindlin R D. Micro-structure in linear elasticity. Arch Rat Mech Anal, 1964, 16: 51—78