

횡전기장이 강유전체 세라믹의 파괴거동에 미치는 영향

이종식*, 범현규#, 정경문*

Effect of Transverse Electric Fields on Fracture Behavior of Ferroelectric Ceramics

Jong Sik Lee*, Hyeon Gyu Beom# and Kyoung Moon Jeong*

ABSTRACT

Effect of transverse electric fields on fracture behavior in ferroelectric ceramics under purely electrical loading is investigated. It is shown that the shape and size of the domain switching zone depend strongly on the ratio of the transverse electric field to the coercive electric field as well as the direction of the applied electric field. Under small-scale conditions, the crack-tip mode I and II stress intensity factors induced by ferroelectric domain switching are numerically obtained. The crack kinking in ferroelectric ceramics is also discussed.

Key Words : Ferroelectric ceramics(강유전체 세라믹), Domain switching(분역회전), Transverse electric field(횡전기장), Stress intensity factor(응력확대계수), Crack kinking(균열킥크)

1. 서론

강유전체 세라믹(ferroelectric ceramics)은 전기와 광학분야 등 다양한 분야에 응용되고 있고, 최근에는 강유전체 세라믹 박막(thin film)을 이용한 LCD, 센서, 액추에이터, 트랜스듀서, 불휘발성 메모리(nonvolatile memory)와 미소전자 기계시스템(MEMS)등 활용범위가 점차 넓어지고 있다. 그러나 이러한 효용성에도 불구하고 강유전체 세라믹은 취성 재료로서 균열과 기공 등 다양한 결함이 존재하고, 특히 전기-기계적 하중을 받는 상태에서 내부의 결함은 치명적이다. 강유전체 세라믹에 균열이 존재할 경우 전기장을 인가하면 균열선단에 전기장이 집중되고 불균일하게 분포되어 분역

회전(domain switching)이 발생한다. 강유전체 세라믹내의 균열선단 부위의 분역회전 영역과 분극이 회전되지 않은 주위의 구속으로 인하여 부적합 변형률(strain mismatch)이 발생한다. 부적합 변형률은 균열선단에서 큰 응력을 일으키고 균열이 진전하게 되므로 강유전체를 이용한 구조물의 신뢰성에 미치는 영향이 아주 크다. 따라서, 강유전체 세라믹의 파괴거동에 대한 연구가 최근에 많은 연구자들에 의해서 활발하게 진행되고 있다.¹⁻⁴

전기장이 강유전체 세라믹의 파괴거동에 미치는 영향에 대한 실험적인 연구들은 다음과 같다. Tobin 과 Pak¹은 PZT-8 에 경도시험(indentation test)을 수행하여 분극 방향과 같은 방향으로 전기장을 인가하였을 때 파괴인성(fracture toughness)은 감소

접수일: 2004년 7월 27일; 게재승인일: 2004년 11월 19일

* 전남대학교 대학원 기계공학과

교신저자: 인하대학교 기계공학과

E-mail hgbeom@inha.ac.kr Tel. (032) 860-7310

하고, 반대방향으로 작용하였을 때 파괴 인성이 증가함을 보였다. 그러나, Wang 과 Singh³ 은 PZT EC-69 에 비커스 경도시험으로 기존의 실험결과^{1,2}와는 반대되는 결과를 제시하였다. 최근에 Fu 와 Zhang⁴ 은 PZT-841 시편에 CT 시험을 이용하여 전기장의 방향에 의존하지 않고 파괴인성이 감소함을 보였다. 이상과 같이 재료에 따라 각각 다른 실험결과들을 제시하고 있다.

강유전체 세라믹내의 균열진전에 대한 기존의 실험적 연구에 대한 이론적인 연구 결과들은 다음과 같다. Hwang 등⁵은 응력장과 전기장에 의한 에너지를 이용한 분역회전 조건식(domain switching criterion)을 제시하였고, Zhu 와 Yang⁶은 전기-기계적 하중상태에서 분역회전 조건식을 이용하여 균열선단에서 90° 분역회전 영역을 구하여 전기장이 강유전체 세라믹의 파괴인성에 미치는 영향을 해석하였다. 최근에 Beom 과 Atluri⁷는 비선형 분역회전 모델을 제안하여 강유전체 세라믹의 물성치인 항전기장(coercive electric field)과 항복전기장(yield electric field)의 비가 균열선단에서의 응력확대계수가 증가 또는 감소를 결정하는 중요한 인자임을 보였다. Cui 와 Yang⁸은 T-응력이 강유전체 세라믹의 파괴강도에 미치는 영향을 연구하였다. 실험에서 얻어지는 파괴강도는 실험방법과 시편의 종류에 따라 많은 차이를 가지고 있다. 이러한 결과를 설명하기 위해 응력장을 T-응력까지 고려하고 분역회전 조건식에 대입하여 90° 분역회전 영역을 계산하였다. T-응력이 분역회전 영역과 응력확대계수에 미치는 영향이 아주 크다는 것을 해석하였다. 응력장과 마찬가지로 전기장도 실험방법과 시편의 종류에 따라 영향을 크게 받는다. 그러나 횡전기장이 강유전체 세라믹의 파괴거동에 미치는 영향은 아직까지 해석되지 않았다.

본 연구의 목적은 횡전기장이 강유전체 세라믹내의 반무한 직선균열에 미치는 영향을 해석하고자 한다. 전기장이 강유전체 세라믹의 파괴거동에 미치는 영향을 알기 위하여 전기장 분포함수를 두 번째 항까지 고려하고, 이를 T-응력과 같은 개념으로서 횡전기장(transverse electric field)으로 정의한다. 횡전기장을 고려한 전기장 분포함수를 분역회전 조건식에 대입하여 균열선단에서 90°와 180° 분역회전 영역을 계산한다. 균열선단에서 모드 I

과 II 응력확대계수를 90° 분역회전 영역을 이용하여 구하고, 횡전기장과 항전기장의 비에 대한 함수로 나타낸다. 모드 혼합도(mode mixity)는 모드 I 과 II 응력확대계수로 표현하고, 킱크각(kink angle)은 모드 혼합도에 대한 함수이므로 모드 혼합도를 이용하여 킱크각을 구하고 강유전체 세라믹내의 균열 진전거동은 킱크각을 이용하여 해석한다.

2. 문제의 수식화

강유전체 세라믹에 대한 전기장의 영향을 해석하기 위하여 이상화된 이력곡선(hysteresis curve)을 도입한다. 강유전체 세라믹은 전기적 하중(E)이 작을 때, 전기 변위(D)는 선형이 되고 유전율(dielectric permittivity)은 D-E 곡선의 기울기로 구한다. 전기장의 세기를 증가시켜 항전기장에 도달하게 되면 강유전 분역회전이 발생한다. 이 때 분극 방향은 전기장의 작용방향과 일치하는 방향으로 바뀌게 된다.

기계적 하중을 무시하고 전기적 하중만을 고려한 강유전체 세라믹의 분역회전 조건식은 다음과 같이 쓸 수 있다.⁵

$$E_i \Delta P_i \geq 2P_s E_c \quad (1)$$

여기서 E_i 는 전기장 벡터를 나타내고, ΔP_i 는 자발분극(spontaneous polarization)의 변화량을 나타낸다. P_s 는 자발분극이고, E_c 는 페롭스카이트 구조를 갖는 강유전체의 분극을 역전시킬 때의 전기장의 크기로서 항전기장이라 한다. 식 (1)에서 90°와 180° 분역회전의 자발분극과 자발 변형률(spontaneous strain)의 변화량은 다음과 같이 각각 쓸 수 있다.⁶

For 90° switching

$$\Delta P_i = \sqrt{2} P_s \begin{Bmatrix} \cos\left(\phi \pm \frac{3}{4}\pi\right) \\ \sin\left(\phi \pm \frac{3}{4}\pi\right) \end{Bmatrix}$$

$$\Delta \gamma_{ii} = \gamma_s \begin{Bmatrix} -\cos 2\phi & -\sin 2\phi \\ -\sin 2\phi & \cos 2\phi \end{Bmatrix} \quad (2)$$

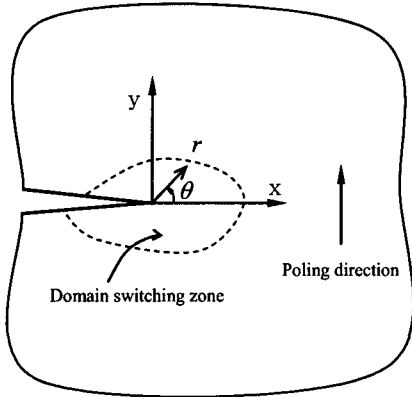


Fig. 1 Asymptotic problem of a crack in a ferroelectric ceramic

For 180° switching

$$\Delta P_i = -2P_s \begin{cases} \cos \phi \\ \sin \phi \end{cases}, \quad \Delta \gamma_{ij} = 0 \quad (3)$$

여기서 ϕ 는 초기 분극방향(polling direction)이고, $\Delta \gamma_{ij}$ 는 분역회전에 의한 자발변형률의 변화량이며, γ_s 는 강유전체 세라믹의 고유물성치인 분역회전에 의한 자발변형률이다. 식 (2)에서 $-3\pi/4$ 와 $+3\pi/4$ 는 시계방향과 반시계 방향의 90° 분역회전을 각각 나타낸다. 180° 분역회전은 자발변형률의 변화에 영향을 주지 않는다.

Fig. 1 은 강유전체 세라믹 내 반무한 직선균열의 점근문제를 표현한 것이다. 초기분극방향은 $\phi = 90^\circ$ 이다. 균열선단의 분역회전의 크기가 균열 길이에 비해 아주 작다고 가정하여 소규모 조건 하 전기적 하중만을 받는 강유전체 세라믹 내 반무한 직선균열 점근문제를 생각하고 균열면에서 트랙션(traction)과 전하(charge)는 없다고 가정한다. 재료는 등방성이고 선형유전체(linear dielectric)로 간주한다. 점근문제의 무한대에 작용하는 전기장은 횡전기장까지 고려하면 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$E_x = (-) \frac{K_E^\infty}{\sqrt{2\pi r}} \sin \frac{1}{2} \theta + T_E$$

$$E_y = \frac{K_E^\infty}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{1}{2} \theta \quad (4)$$

여기서 K_E^∞ 는 전기장 확대계수이며, T_E 는 횡전기장이다. (r, θ) 는 균열선단을 원점으로 하는 원통좌표계로 r 은 균열선단에서 거리이고, θ 는 x 축과 이루는 각이다.

강유전체 세라믹은 균열선단에서 분역회전영역으로 인해 부적합 변형률이 생성되고 이로 인해 응력이 발생한다. 이 때 응력확대계수는 Eshelby 방법으로 계산한다. 초기분극방향이 90° 일 때 응력확대계수는 다음과 같이 쓸 수 있다.^{9,10}

$$K_\alpha = \eta |K_E^\infty| F_\alpha \quad (\alpha = I, II)$$

$$F_I = \frac{3}{8} \pi \int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{\frac{r}{R_c}} \left(\cos \frac{7}{2} \theta - \cos \frac{3}{2} \theta \right) d\theta$$

$$F_{II} = -\frac{1}{8} \pi \int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{\frac{r}{R_c}} \left(\sin \frac{3}{2} \theta + 3 \sin \frac{7}{2} \theta \right) d\theta \quad (5)$$

여기서 K_α 는 균열선단에서 분역회전으로 발생하는 모드 I 과 II 에 대한 응력확대계수이고, r 은 90° 분역회전의 경계이며 무차원 변수 η 와 길이 변수 R_c 는 다음과 같이 정의한다.

$$\eta = \frac{Y \gamma_s}{(1-\nu^2) E_c}, \quad R_c = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K_E^\infty}{E_c} \right)^2 \quad (6)$$

여기서 Y, ν 는 각각 Young 계수와 Poisson 비이다.

3. 결과 및 토론

3.1 분역회전 영역

전기적 하중만을 고려하여 전기장의 방향에 따라 90°와 180° 분역회전 영역을 나누어 계산한다. 식 (2), (3)과 (4)를 식 (1)에 대입하여 분역회전영역을 구하면 다음과 같이 무차원 함수로 쓸 수 있다.

For +90° switching

$$\frac{r}{R_c} = \frac{1 - \sin \theta}{(2 + T_E/E_c)^2} \quad \frac{\pi}{2} < \theta < \pi \quad \text{for } K_E^\infty > 0$$

$$-\pi < \theta < \frac{\pi}{2} \quad \text{for } K_E^\infty < 0 \quad (7)$$

For -90° switching

$$\frac{r}{R_c} = \frac{1 + \sin \theta}{(2 - T_E/E_c)^2} \quad -\pi < \theta < -\frac{\pi}{2} \text{ for } K_E^\infty > 0$$

$$-\frac{\pi}{2} < \theta < \pi \text{ for } K_E^\infty < 0 \quad (8)$$

For 180° switching

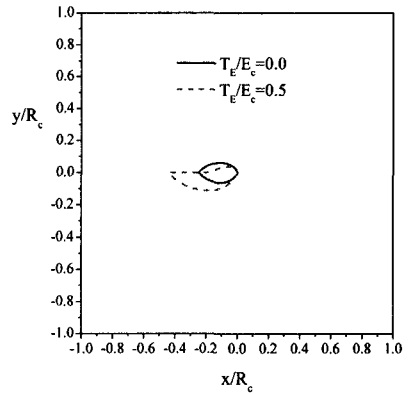
$$\frac{r}{R_c} = \frac{1 + \cos \theta}{2} \quad -\pi < \theta < \pi \text{ for } K_E^\infty < 0 \quad (9)$$

여기서 $K_E^\infty > 0$ 는 양의 전기장(positive electric field)으로 초기 분극방향과 전기장의 작용방향이 같은 경우이다. $K_E^\infty < 0$ 는 음의 전기장(negative electric field)로서 초기 분극방향과 전기장의 작용방향이 반대이다.

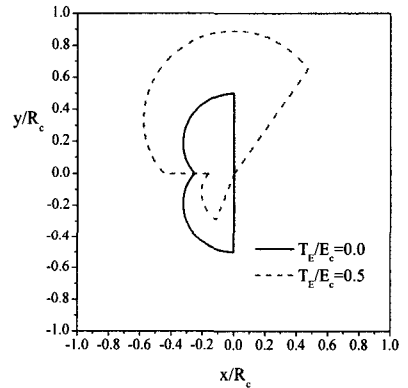
전기장의 작용방향에 따라 횡전기장을 고려하고 식 (7)-(9)를 이용하여 90° 분역회전 영역을 Fig. 2 에 나타내었다. 횡전기장을 고려하지 않으면 전기장의 작용방향에 상관없이 균열면을 중심으로 대칭을 이루지만 횡전기장을 고려하게 되면 비대칭을 이루게 된다. $T_E/E_c = 0.5$ 일 때 양의 전기장의 경우, 균열의 윗부분은 분역회전 영역이 작아지고 아랫부분은 반대로 커지는 것을 볼 수 있고 음의 전기장의 경우, 양의 전기장과는 반대로 분역회전 영역이 윗부분은 커지고 아랫부분에서 작아지는 것을 확인할 수 있다. 이와 같이 균열선단에서 비대칭 분역회전이 발생하게 되면 응력확대계수가 모드 I 뿐만 아니라 모드 II 도 발생하게 된다. 따라서 균열선단에서 분역회전 영역은 전기장의 작용방향뿐만 아니라 횡전기장에 의해 크게 영향을 받는다.

3.2 응력확대계수

강유전체 세라믹내의 부적합 변형률에 의해 발생한 균열선단에서 응력확대계수는 식 (5)를 이용하여 구한다. 전기장의 작용방향에 따라 균열선단에서 모드 I 과 II 응력확대계수를 횡전기장과 전기장의 비의 함수로 Fig. 3 에 나타내었다. 전기장의 작용방향에 상관없이 횡전기장을 무시할 경우 모드 II 응력확대계수가 0 이지만 횡전기장을 고려하게 되면 모드 II 응력확대계수가 생성된다. 횡전기장의 방향에 따라서 모드 I 응력확대계수는



(a) Positive electric field



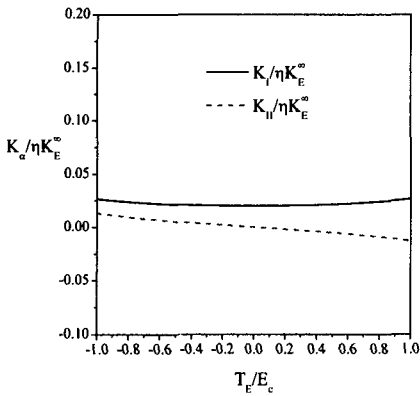
(b) Negative electric field

Fig. 2 Domain switching zones for 90° switching

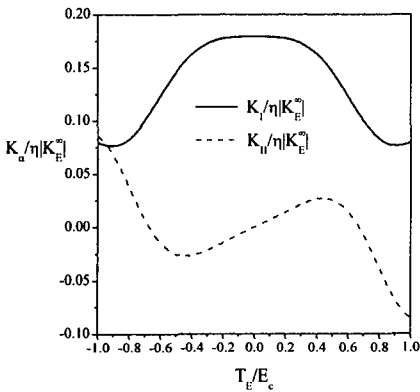
부호와는 상관없이 크기에만 영향을 받고, 모드 II 응력확대계수는 크기와 부호에도 영향을 주는 것을 알 수 있다. 모드 II 응력확대계수의 부호에 영향을 주는 의미는 균열이 진전하게 되면 위 또는 아래로 진전할 수 있다는 의미이다.

3.3 킹크각(Kink angle)

탄성재료에서 균열선단에 복합하중이 작용할 때 균열은 직선방향이 아닌 임의의 각을 가지고 킹크 된다. Fig. 4 는 균열의 킹크를 나타낸 것이다. 킹크각 Ω 는 양의 x 축으로부터 시계방향으로 측정한 각도이다. 강유전체 세라믹에서도 균열의 킹크가 일어난다.¹¹ 강유전체 세라믹 내 직선균열에 대한 파괴거동을 해석하기 위해 모드 I 과 II 응력확대계수를 이용하여 모드 혼합도를 구한다. 킹크각은 모드혼합도의 함수로 나타내고 킹크각을 통하여 균열의 진전양상을 설명할 수 있다. 균열 진



(a) Positive electric field



(b) Negative electric field

Fig. 3 Normalized stress intensity factors as a function of T_E/E_c

전의 양상을 해석하기 위한 조건은 최대에너지 방출률 조건식(maximum energy release rate criterion)과 순수모드 I 조건식(purely mode I criterion)이 있다. 두 가지 조건식의 균열진전 양상이 거의 일치하므로 본 연구에서 킹크각을 구하기 위해 순수모드 I 조건식을 적용한다.¹²

킹크균열에 대한 모드 II 응력확대계수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$k_{II} = C_{21}K_I + C_{22}K_{II} \quad (10)$$

여기서 k_{II} 는 킹크 길이가 무한히 작은 킹크균열에 대한 모드 II 응력확대계수이고, C_{21} 과 C_{22} 는 킹크각의 함수인 계수이며, K_I 과 K_{II} 는 균열선단에서 분역회전으로 인하여 발생하는 주균열에 대한 응력확대계수이다. 식 (10)의 C_{21} 과 C_{22} 계수

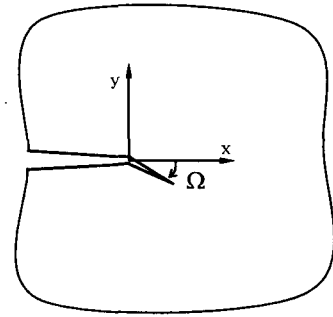


Fig. 4 Kinking of a crack

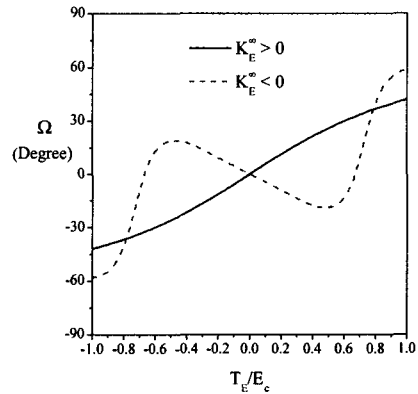


Fig. 5 Kink angle as a function of T_E/E_c

값은 여러 연구자들에 의하여 연구되었으나 본 연구에서는 Hayashi 와 Netmat-Nasser¹³ 이 얻은 값을 이용한다. 순수모드 I 조건식 $k_{II} = 0$ 을 식 (10)에 적용하면, 혼합 모드하에서의 킹크각은 모드 혼합도의 함수로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Omega = \Omega(\psi) \quad (11)$$

여기서 ψ 는 $\psi = \tan^{-1}(K_{II}/K_I)$ 와 같이 정의된 모드 혼합도이다.

전기장의 작용방향에 따라 횡전기장과 항전기장 비의 함수로 킹크각을 Fig. 5에 나타내었다. 양의 전기장의 경우 양의 횡전기장일 때 균열은 아래 방향으로 킹크 되고 음의 횡전기장일 때 윗방향으로 킹크 된다. 즉, 킹크 방향은 횡전기장의 부호에 따라 결정된다. 음의 전기장일 때 킹크방향은 횡전기장의 부호뿐만 아니라 크기에 의해 결정된다. 횡전기장은 강유전체 세라믹 내 균열의 킹크에 영향을 주는 중요한 인자임을 알 수 있다.

4. 결론

강유전체 세라믹내의 반무한 직선균열이 초기 분극방향과 수직일 때 횡전기장이 파괴거동에 미치는 영향을 해석하였다. 횡전기장을 고려한 전기장 분포함수를 분역회전 조건식에 대입하여 균열 선단에서 분역회전 영역을 구하고 모드 I 과 II 응력확대계수를 구하였다. 응력확대계수를 이용하여 모드 혼합도를 구하고 킥각을 분석하여 다음과 같은 결과를 얻었다.

- (1) 분역회전 영역의 모양과 크기는 전기장의 작용방향과 횡전기장과 항전기장의 비에 크게 영향을 받는다.
- (2) 횡전기장으로 인해 분역회전 영역이 균열면을 중심으로 비대칭을 이루고 모드 II 응력확대계수가 발생한다.
- (3) 킥각 방향은 양의 전기장의 경우 횡전기장의 부호에 따라 결정되고 음의 전기장의 경우 횡전기장의 부호뿐만 아니라 크기에 의해 결정된다. 횡전기장은 강유전체 세라믹 내 균열의 킥각에 영향을 주는 중요한 인자임을 알 수 있다.

후기

이 논문은 2003 년도 두뇌한국 21 사업에 의하여 지원되었음.

참고문헌

1. Tobin, A. G. and Pak, Y. E., "Effect of Electric Fields on Fracture Behavior of PZT Ceramics," Proc. SPIE, Smart Struct. Mater., 1916, pp. 78-86, 1993.
2. Park, S. and Sun, C.-T., "Fracture Criteria for Piezoelectric Ceramics," J. Am. Ceram. Soc., Vol. 78, pp. 1475-1480, 1995.
3. Wang, H. and Singh, R. N., "Crack Propagation in Piezoelectric Ceramic: Effects of Applied Electric Fields," J. Appl. Phys., Vol. 81, pp. 7471-7479, 1997.
4. Fu, R. and Zhang, T.-Y., "Effects of an Electric Field on the Fracture Toughness of Poled Lead Zirconate Titanate Ceramics," J. Am. Ceram. Soc., Vol. 83, pp. 1215-1218, 2000.
5. Hwang, S. C., Lynch, C. S. and McMeeking, R. M.,

"Ferroelectric/Ferroelastic Interactions and a Polarization Switching Model," Acta Metall. Mater., Vol. 43, pp. 2073-2084, 1995.

6. Zhu, T. and Yang, W., "Toughness Variation of Ferroelectrics by Polarization Switch Under Non-uniform Electric Field," Acta Mater., Vol. 45, pp. 4695-4702, 1997.
7. Beom, H. G. and Atluri, S. N., "Effect of Electric Fields on Fracture Behavior of Ferroelectric Ceramics," J. Mech. Phys. Solids, Vol. 51, pp. 1107-1125, 2003.
8. Cui, Y. Q. and Yang, W., "Effect of Transverse Stress on Switch-toughening of Ferroelectrics," Theoret. Appl. Frac. Mech., Vol. 39, pp. 137-142, 2003.
9. Rice, J. R., "Three-dimensional Elastic Crack Tip Interactions with Transformation Strains and Dislocations," Int. J. Solid Struct., Vol. 21, pp. 781-791, 1985.
10. Gao, H., "Application of 3-D Weight Functions - I. Formations of Crack Interfaces with Transformation Strains and Dislocations," J. Mech. Phys. Solids, Vol. 37, pp. 133-153, 1989.
11. Shang, J. K. and Tan, X., "A Maximum Strain Criterion for Electric-field-induced Fatigue Crack Propagation in Ferroelectric Ceramics," Mat. Sci. Eng. A301, pp. 131-139, 2001.
12. Hutchinson, J. W. and Suo, Z., "Mixed Mode Cracking in Layered Materials," Adv. Appl. Mech., Vol. 29, pp. 63-191, 1992.
13. Hayashi, K. and Nemat-Nasser, S., "Energy-Release Rate and Crack Kinking under Combined Loading," J. Appl. Mech., Vol. 48, pp. 520-524, 1981.