

전기장이 강유전체 내의 균열킹크에 미치는 영향

이 종 식[†] · 범 현 규^{*}

Effect of Electric Fields on Crack Kinking in Ferroelectrics

Jong Sik Lee and Hyeon Gyu Beom

Key Words : Crack Kinking (균열킹크), Domain Switching(분역회전), Ferroelectric Ceramics(강유전체 세라믹), Stress Intensity Factor(응력강도계수), Transverse Electric Field(T-전기장)

Abstract

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

1. 서 론

강유전체 세라믹은 전기와 광학분야 등 다양한 영역에서 널리 응용되고 있고, 최근에는 강유전체 세라믹 박막(thin film)을 이용한 MEMS(microelectromechanical system), 불휘발성(nonvolatile) 메모리와 LCD 등 활용범위가 점차 넓어지고 있다.

그러나, 이러한 효용성에도 불구하고 강유전체 세라믹은 균열과 기공 등 다양한 결함이 존재하고, 특히 전기적-기계적 하중상태에서 균열에 취약하다. 강유전체 세라믹에 균열이 존재할 경우 전기장을 인가하면 균열선단에 전기장이 집중되고 이로 인해 분역회전영역(domain switching zone)이 발생되어 부적합 변형률이 생긴다. 부적합 변형률은 균열선단에 큰 응력을 일으키고 균열은 진전하게 된다. 이러한 문제를 해결하기 위해 강유전체의 분역회전에 대한 영향과 균열발생에 대한 해석과 연구가 활발하게 진행되고 있다.

지금까지 강유전체 세라믹의 파괴거동에 전기장이 미치는 영향에 대한 실험적인 연구가 진행되었

다. Tobin 과 Pak⁽¹⁾은 PZT-8 시편에 경도시험(indentation test)을 하여 분극방향과 같은 방향으로 전기장을 인가하였을 때 파괴인성치는 작아지고 반대방향으로 인가하였을 때 증가됨을 발견하였다. Park 과 Sun⁽²⁾은 PZT-4 시편에 CT 시험을 하여 Tobin 과 Pak⁽¹⁾의 결과와 같음을 보여주었다. 그러나, Wang 과 Singh⁽³⁾은 PZT EC-69 시편에 비커스(vickers)경도시험으로 반대결과를 발견하였다. 최근에 Fu 와 Zhang⁽⁴⁾은 PZT-841 시편에 CT 시험을 하여 전기장의 방향에 상관없이 파괴인성이 줄어드는 것을 발견하였다.

실험적인 연구와 더불어 강유전체 세라믹에 대한 실험데이터를 이론해석하기 위한 노력도 있어왔다. Hwang 등⁽⁵⁾은 기계적 하중과 전기장 사이의 상호작용을 통한 분역회전 조건식을 제시하였고 Zhu 와 Yang⁽⁶⁾은 기계적, 전기적 하중 상태에서 분역회전 조건식을 이용하여 90° 분역회전영역을 구하고 이를 통해 전기장이 파괴강도에 미치는 영향을 예측하였다. 최근에 Beom 과 Atluri⁽⁷⁾는 단일화된 비선형 분역회전모델을 제안하고, 강유전체 세라믹의 물성치인 항전기장(coercive electric field)과 항복전기장(yield electric field)의 비가 균열선단에서 응력강도계수의 증가 또는 감소를 결정하는 중요한 인자임을 해석하여 기존 연구자들의 실험결과들⁽¹⁻⁴⁾에 대한 이론적 설명이 가능하게 되었다.

[†] 전남대학교 대학원 기계공학과

E-mail : tomi@netian.com

TEL : (062)530-0012 FAX : (062)530-1689

^{*} 전남대학교 기계공학과

Cui 와 Yang⁽⁸⁾은 T-응력(transverse stress)이 파괴 강도에 미치는 영향을 연구하였다. 실험에서 얻어지는 파괴강도는 실험방법과 시편의 종류에 따라 많은 차이를 보인다. 분역회전 조건식에 T-응력을 고려하여 T-응력이 기존 실험에 대한 연구결과를 설명하였다. 그러나 아직까지 강유전체 세라믹의 분역회전에 T-전기장을 고려하여 T-전기장이 강유전체 세라믹의 파괴거동에 미치는 영향에 대한 연구가 이루어지지 않았다. 또한 균열선단에 혼합모드 하중이 작용할 경우 균열은 임의의 각을 가지고 킁크된다.^(9,10) 강유전체 세라믹에서도 킁크균열이 발견되었으나 아직까지 강유전체의 킁크균열에 대한 관심이 부족한 현실이다.

본 연구에서는 강유전체 세라믹 내의 반무한 직선균열과 분극방향이 수직일 때 T-전기장의 영향을 해석하기 위해 분역회전 조건식에 T-전기장을 고려한다. 균열선단에서 소규모조건(small-scale condition)하에서 T-전기장으로 인한 90° 분역회전 영역을 작용전기장의 방향에 따라 구하고 분역회전영역을 이용하여 균열선단에서 모드 I 과 II 에 대한 응력강도계수를 구한다. 모드 I 과 II 응력강도계수를 이용하여 모드 혼합도(mode mixity)를 구하고 균열선단에서 킁크각을 이용하여 강유전체 내의 균열진전거동을 해석한다.

2. 문제의 수식화

강유전체 세라믹의 파괴거동에 전기장의 영향을 해석하기 위하여 이상화된 이력곡선을 도입한다. 강유전체는 전기장이 작을 때, 전기변위는 선형이 되고 유전율(dielectric permittivity)을 기울기로 표현할 수 있다. 전기장의 크기를 증가시켜 항전기장에 도달하게 되면 분역회전이 발생하고 이 때 분극의 방향은 전기장의 방향과 일치하게 된다. 전기장이 항전기장 이상으로 인가될 때 강유전체는 90° 와 180° 분역회전이 발생한다. 전기적 하중만을 고려한 강유전체의 분역회전 조건식은 다음과 같이 쓸 수 있다.⁽⁵⁾

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

여기서 E_i 는 인가된 전기장, ΔP_i 는 자발분극의 변화량을 각각 나타낸다. 강유전체 세라믹은 고유물성치인 자발분극(spontaneous polarization) P_s 과 항전기장 E_c 을 갖는다. 90° 와 180° 분역회전으로 인한 분극과 자발변형률의 변화량은 다음과 같이 각각 쓸 수 있다.⁽⁶⁾

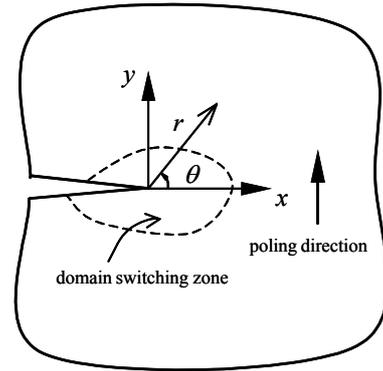


Fig. 1 Asymptotic problem of a crack in ferroelectrics

→ For 90° switching

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

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

→ For 180° switching

$$\Delta P_i = -2P_s \begin{Bmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{Bmatrix}$$

$$\Delta \gamma_{ij} = 0 \quad (3)$$

여기서 ϕ 는 x 축과 이루고 있는 초기 분극벡터의 각도이고, γ_s 는 자발변형률(spontaneous strain)이다. 식 (2)에서 $-3\pi/4$ 와 $+3\pi/4$ 는 분극방향이 각각 시계방향과 반시계 방향의 90° 분역회전을 나타낸 것이다.

Fig. 1은 강유전체 세라믹 내의 반무한 직선균열의 점근문제를 표현한 것이다. 균열선단의 분역회전의 크기는 균열 길이에 비해 아주 작다고 가정하여 소규모 조건하에서 전기적 하중을 받는 강유전체 세라믹 문제를 생각하고 균열 면에서 트랙션(traction)과 전하(charge)는 없다고 가정한다. 좌표계는 균열선단을 원점으로 원통좌표계를 이용한다. 재료는 등방성이고 선형유전체(linear dielectric)로 가정하면 균열선단에서 전기장은 무한 멱급수로 표현하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$E_i = \frac{K_E^\infty}{\sqrt{2\pi r}} \tilde{E}_i(\theta) \quad (4)$$

여기서 E_i 는 전기장 벡터이고, $\tilde{E}_i(\theta)$ 는 전기장의

일반적인 분포 함수이며, K_E^∞ 는 인가된 전기장에 의한 응력강도계수이다. 응력장에서 두 번째 항인 T-응력과 마찬가지로 전기장도 두 번째 항을 고려하여 전기장분포함수를 유도한다. 전기장 분포함수를 T-전기장까지 고려하면 식 (4)는 다음과 같이 쓸 수 있다.

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

$$E_y = \frac{K_E^\infty}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \quad (5)$$

여기서 r 은 균열선단에서 거리이고, θ 는 균열선단에서 x 축과 이루는 각이며, L 은 T-전기장이다.

강유전체 세라믹은 균열선단에서 분역회전으로 인해 부적합 변형률이 생성되고 이로인해 응력이 발생한다. 이때 응력강도계수는 Eshelby 방법으로 계산한다. 초기분극방향이 균열선단과 $\phi = 90^\circ$ 이면 응력강도 계수는 다음과 같이 쓸 수 있다.^(11,12)

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

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

$$F_{II} = (-) \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{\frac{r}{R_c}} \left(\sin \frac{3}{2}\theta + 3 \sin \frac{7}{2}\theta \right) d\theta \quad (6)$$

여기서 K_α 는 균열선단에서 모드 I 와 II 에 대한 응력강도계수이고 r 은 90° 분역회전영역의 경계이며, 재료변수 η 와 무차원 변수 R_c 는 다음과 같이 정의한다.

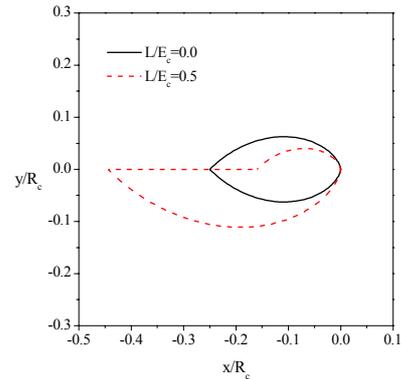
$$\eta = \frac{Y\gamma_s}{(1-\nu^2)E_c}$$

$$R_c = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K_E^\infty}{E_c} \right)^2 \quad (7)$$

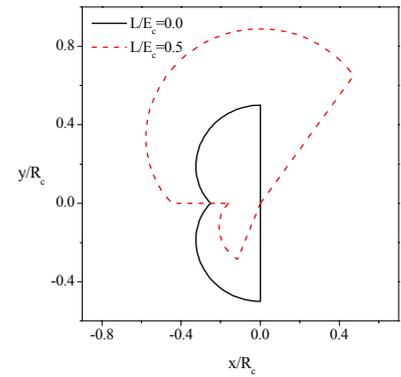
여기서 Y, ν 는 각각 Young 계수와 Poisson 비이다.

3. 분역회전영역

전기적 하중만을 고려하여 전기장의 작용방향에 따라 90° 와 180° 분역회전영역을 나누어 계산한다. 식 (2), (3)과 (5)를 식 (1)에 대입하여 R_c 로 무차원 화시키고 분역회전에 따라 각각 정리하면



(a) Positive electric field



(b) Negative electric field

Fig. 2 90° domain switching zones

분역회전영역 조건식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

→ $+90^\circ$ switching

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

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

→ -90° switching

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

$$-\frac{\pi}{2} < \theta < \pi \quad \text{for } K_E^\infty < 0 \quad (9)$$

→ 180° switching

$$\frac{r}{R_c} = \frac{1 + \cos \theta}{2} \quad -\pi < \theta < \frac{\pi}{2} \quad \text{for } K_E^\infty < 0 \quad (10)$$

여기서 $K_E^\infty > 0$ 은 양의 전기장, $K_E^\infty < 0$ 은 음의 전기장을 나타내고, L/E_c 는 T-전기장을 항전기장으로 무차원화시킨 값이다. 양의 전기장에서는 180° 분역회전이 발생하지 않는다.

Fig. 2 는 전기장의 작용방향에 따라 T-전기장을 고려하고 식 (8)~(10)을 이용하여 90° 분역회전영역을 나타낸 것이다. 균열선단에서 분역회전영역은

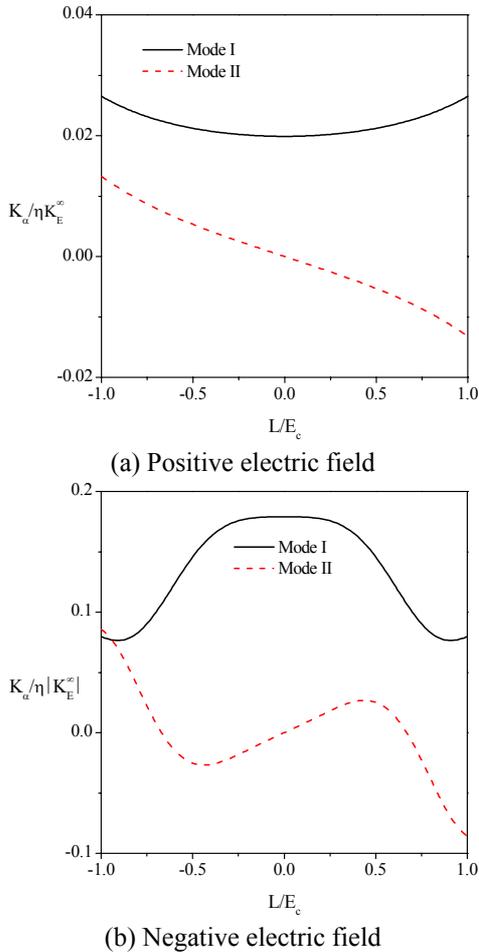


Fig. 3 Normalized stress intensity factor at crack tip as a function of transverse electric field

전기장의 작용방향뿐만 아니라 T-전기장에 크게 영향을 받는다. T-전기장을 고려하지 않으면 인가된 전기장의 작용방향에 상관없이 균열선단을 중심으로 대칭을 이루지만 T-전기장을 고려하게 되면 비대칭을 이루게 된다. $L/E_c = 0.5$ 일 때 전기장을 양의 전기장의 경우, 균열의 윗부분은 분역회전영역이 작아지고, 아래부분은 반대로 커지는 것을 볼 수 있고 음의 전기장의 경우, 양의 전기장과는 반대로 분역회전영역이 윗부분에서 커지고 아래부분에서 작아지는 것을 확인할 수 있다. 음의 값을 갖는 T-전기장에서는 반대의 경향을 보인다. 이와 같이 균열선단에서 비대칭 분역회전이 발생하게 되면 응력강도계수가 모드 I 뿐만 아니라 모드 II도 발생하게 된다.

4. 응력강도계수

90° 분역회전영역으로 인한 강유전체 내의 균열에 대한 응력강도계수는 식 (6)을 이용하여 구한다.

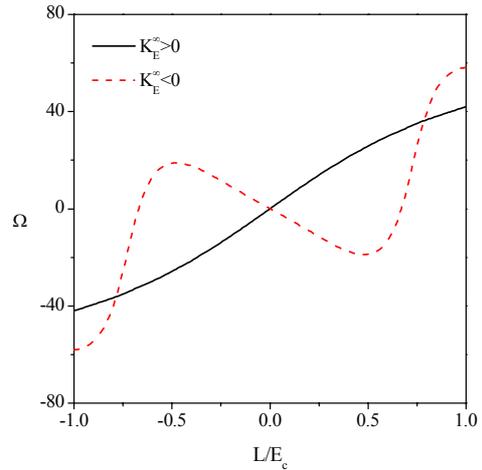


Fig. 4 Kinking angle as a function of L/E_c

Fig. 3 은 전기장의 작용방향에 따라 모드 I 과 II 응력강도계수를 T-전기장의 함수로 나타낸 것이다. 음의 전기장이 양의 전기장보다 전체적으로 응력강도계수 값이 크다. 모드 I 응력강도계수는 전기장의 작용방향과 무관하게 y 축대칭을 보이고 모드 II 응력강도계수는 원점대칭을 보인다. 이것은 모드 I 응력강도계수는 T-전기장의 작용방향에 무관하고, 모드 II 응력강도계수는 T-전기장의 작용방향에 의존한다.

5. 킹크 각(Kinking angle)

균열선단에 혼합모드 하중시 직선균열의 진전방향이 직선방향이 아닌 임의의 각을 가지고 균열이 진전한다. 모드 I 과 II 응력강도계수를 이용하여 모드 혼합도를 구하고 킹크각은 모드 혼합도의 함수로 나타낼 수 있다. 균열진전에 대한 조건식은 최대에너지방출을 조건식과 순수 모드 I 조건식이 있다. Hutchison 과 Suo⁽⁹⁾는 두 가지 조건식의 균열진전 방향이 거의 일치함을 보여주었다. 균열진전으로 인한 모드 II 에 대한 응력강도계수를 순수모드 I 조건식을 이용하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$K_{II}' = C_{21}K_I + C_{22}K_{II} \tag{11}$$

여기서 C_{21}, C_{22} 은 계수이다. $K_{II}' = 0$ 이므로 식 (11)은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$C_{21}(\Omega) + C_{22}(\Omega) \tan \psi = 0 \tag{12}$$

여기서 Ω 는 킹크각이고 ψ 는 모드 혼합도로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi = \tan^{-1}(K_{II} / K_I) \quad (13)$$

식 (11)의 계수 C_{21}, C_{22} 값은 여러 연구자에 의해 연구되었으나, Hayashi⁽¹³⁾의 연구값을 이용한다. Fig. 4는 전기장의 작용방향에 따라 T-전기장의 합수로 킱크각의 변화를 나타내었다. 킱크각은 모드 II 응력강도계수와 마찬가지로 전기장의 작용방향과 무관하게 원점대칭을 보이고 있다. 이것은 강유전체 내의 직선균열이 T-전기장의 방향에 따라 시계방향 또는 반시계방향의 각도를 이루면서 균열이 킱크됨을 의미한다.

6. 결론

강유전체 세라믹 내의 반무한 직선균열이 분극방향과 수직일 때 전기적 하중에 의한 T-전기장이 파괴거동에 미치는 영향을 해석하였다. T-전기장을 고려하여 균열선단에서 90° 분역회전영역을 구하고 모드 I 과 II 응력강도계수를 구하였다. 응력강도계수를 이용하여 모드 혼합도를 구하고 킱크각을 분석하여 다음과 같은 결과를 얻었다.

- 1) 분역회전영역의 모양과 크기는 전기장의 작용방향과 T-전기장과 항전기장의 비에 크게 의존하고 균열선단을 중심으로 비대칭을 보인다.
- 2) T-전기장으로 인해 모드 II 응력강도계수가 발생하였고 모드 I 응력강도계수는 전기장의 작용방향과 무관하게 y 축대칭을 보이고 모드 II 응력강도계수는 원점대칭을 보인다.
- 3) 전기적 하중을 받는 강유전체 세라믹 내의 균열이 킱크되어 진전하는데 T-전기장의 영향이 크다는 것을 알 수 있다.

후기

본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(R05-2002-000-00851-0)지원으로 수행되었음.

참고문헌

- (1) Tobin, A. G. and Pak, Y. E., 1993, "Effect of Electric Fields on Fracture Behavior of PZT Ceramics," Proc. SPIE, *Smart Struct. Mater.*, 1916, pp. 78-86.
- (2) Park, S. and Sun, C. T., 1995, "Fracture Criteria for Piezoelectric Ceramics," *J. Am. Ceram. Soc.*, Vol. 78, pp. 1475-1480.
- (3) Wang, H. and Singh, R. N., 1997, "Crack Propagation in Piezoelectric Ceramic : Effects of Applied Electric Fields," *J. Appl. Phys.*, Vol. 81, pp. 7471-7479.
- (4) Fu, R. and Zhang, T.-Y., 2000, "Effects of an Electric Field on the Fracture Toughness of Poled Lead Zirconate Titanate Ceramics," *J. Am. Ceram. Soc.*, Vol. 83, pp. 1215-1218.
- (5) Hwang, S. C., Lynch, C. S. and McMeeking, R. M., 1995, "Ferroelectric/Ferroelastic Interactions and a Polarization Switching Model," *Acta Metall. Mater.*, Vol. 43, pp. 2073-2084.
- (6) Zhu, T. and Yang, W., 1997, "Toughness Variation of Ferroelectrics by Polarization Switch Under Non-uniform Electric Field," *Acta Mater.*, Vol. 45, pp. 4695-4702.
- (7) Beom, H. G. and Atluri, S. N., 2003, "Effect of Electric Fields on Fracture Behavior of Ferroelectric Ceramics," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 51, pp. 1107-1125.
- (8) Cui, Y. Q. and Yang, W., 2003, "Effect of Transverse Stress on Switch-toughening of Ferroelectrics," *Theoret. Appl. Frac. Mech.*, Vol. 39, pp. 137-142.
- (9) Hutchinson, J. W. and Suo, Z., 1992, "Mixed Mode Cracking in Layered Materials," *Adv. Appl. Mech.*, Vol. 29, pp. 63-191.
- (10) Shang, J. K. and Tan, X., 2001, "A Maximum Strain Criterion for Electric-field-induced Fatigue Crack Propagation in Ferroelectric Ceramics," *Mat. Sci. Eng. A301*, pp. 131-139.
- (11) Rice, J. R., 1985, "Three-dimensional Elastic Crack Tip Interactions with Transformation Strains and Dislocations," *Int. J. Solid Struct.*, Vol. 21, pp. 781-791.
- (12) Gao, H., 1989, "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.
- (13) Hayashi, K. and Nemat-Nasser, S., 1981, "Energy-Release Rate and Crack Kinking under Combined Loading," *J. Appl. Mech.*, Vol. 48, pp. 520-524.