

具有挠曲电效应的薄膜-有限厚度 基底结构的屈曲行为研究*

王辰宇^{1,2} 王博^{1,2**} 张博涵^{1,2} 黄永安³ 欧阳华江⁴

(¹ 西北工业大学工程力学系, 西安, 710072)(² 西北工业大学深圳研究院, 深圳, 518063)

(³ 华中科技大学智能制造装备与技术全国重点实验室, 武汉, 430074)(⁴ 西南交通大学机械工程学院, 成都, 610031)

摘要 本文建立了一个具有挠曲电效应薄膜-有限厚基底结构屈曲的理论模型, 通过最小能量法对结构总能量进行分析, 研究了挠曲电效应对薄膜-基底结构发生屈曲演化的影响, 并对全局屈曲和局部起皱两种屈曲模式进行了区分. 目前研究表明薄膜中挠曲电效应越强, 结构越细长, 越倾向于发生全局屈曲. 同时, 结构发生失稳所需的临界应变越大, 且挠曲电效应对局部起皱失稳模式的影响更突出. 挠曲电效应的存在会增大结构的刚度, 改善结构的可拉伸性. 褶皱薄膜中挠曲电效应的可控性对材料极性的产生与控制有着重要意义. 这些发现将有助于微纳尺度上机电设备的设计与应用.

关键词 挠曲电效应, 有限厚度基底, 薄膜-基底结构, 屈曲模式

DOI: 10.19636/j.cnki.cjasm42-1250/o3.2024.037

0 引言

挠曲电效应(Flexoelectric effect), 是指由非均匀变形或应变梯度诱导产生的电极化现象^[1,2], 已被证明在纳米尺度的电介质膜中极性结构的形成中起主导作用, 挠曲电效应不受材料结构对称性和居里温度的限制, 广泛存在于固体介电材料中^[3,4]. 由于其独特的优势, 挠曲电效应在柔性电子器件、微纳机电系统(M/NEMS)、应变梯度工程、生物医疗和电子/光电子学等领域具有广阔的应用前景^[5-7]. 然而由于无机材料的固有脆性, 需要进行特别的结构设计才能实现大的应变梯度^[8,9]. 由于在无机纳米膜和纳米线中, 应变梯度随着结构尺寸从体积减小到纳米尺度而增加, 挠曲电效应变得显著^[10,11], 因此提出一种具有大面积且可调节应变梯度的结构设计方法成为了研究的重点问题.

普遍存在的褶皱现象作为一种表面不稳定性, 已广泛应用于柔性电子产品、生物医疗和微结构制

造等领域^[12-14]. 基于屈曲失稳原理的褶皱薄膜中的非均质变形已被证明可以引入大范围且可调节的应变梯度^[15,16], 可以实现对薄膜中的挠曲电效应的充分利用. Wang等^[17]建立了一个考虑挠曲电效应的机电耦合模型来研究自由薄膜的屈曲性质, 发现更小尺寸的薄膜表现出更强的抗屈曲性能, 证实了挠曲电效应在纳米尺度的屈曲薄膜中的关键作用. Shang等^[15]提出了一种考虑表面失稳的薄膜-基底结构中挠曲电效应的理论模型, 为机械改变介电材料极性提供一种无电压的策略. Shang等^[18]进一步研究了一种通过褶皱薄膜中的挠曲电效应来机械调控极化结构的新途径, 通过改变褶皱薄膜形态, 实现了从非极性状态到极性状态的转变, 为极化拓扑结构提供更广泛的结构选项. 这些发现证明了褶皱压电或铁电薄膜中挠曲电效应的存在和应用前景.

此外, Zhang等^[19]和 Patidar等^[20]的研究表明, 有限厚度基底上的无机薄膜在失稳时存在整体屈曲和局部起皱两种模式. 其中, 较薄的基底更容易发生

* 国家自然科学基金(12172282), 广东省基金(2024A1515010767)和中央高校基本科研业务费专项资金资助.

2024-08-14 收到修改稿, 2024-09-02 网络首发.

** 通讯作者. E-mail: bowang@nwpu.edu.cn.

整体屈曲, 较厚的基底更容易发生局部起皱^[21,22]. 不同模式的失稳褶皱将引起不同的应变梯度, 在整体和局部屈曲两种模式间切换有助于实现大范围且可调节的挠曲电效应. 而目前针对褶皱薄膜挠曲电效应的研究还没有考虑到无机薄膜中不同的失稳模式的影响.

本文研究挠曲电效应对薄膜-基底结构发生屈曲演化的影响. 在第 1 节中, 给出了薄膜-基底结构的总能量推导过程, 在第 2 节中, 对两种屈曲模式出现的条件进行区分, 讨论不同模式下的临界应变、褶皱形

态与可拉伸性. 最后, 第 3 节给出了本文主要结论.

1 理论模型

图 1 显示了用于制备褶皱薄膜基底结构的预拉伸策略. 薄膜粘合到平坦的预应变软基底上(图 1(a)). 然后释放预应变, 基底收缩导致薄膜压缩, 并出现两种不同的屈曲状态(图 1(b)和(c)), 该过程已被实验观测^[21,23].

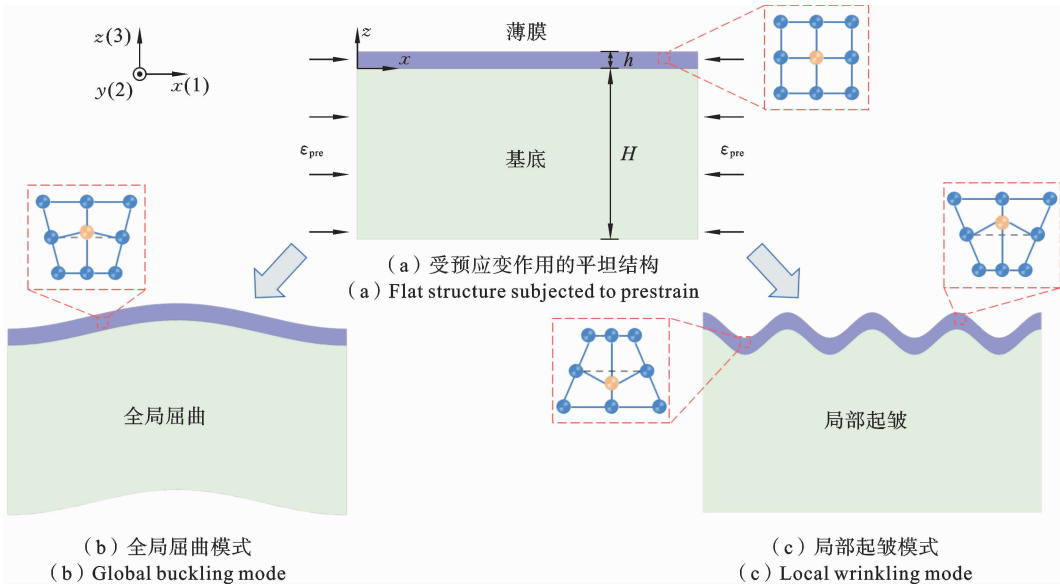


图 1 薄膜-基底结构的两种屈曲模式

Fig. 1 There are two buckling modes of film-substrate structure

同时, 薄膜中出现了不同的挠曲电极化现象. 平坦结构(图 1(a))中, 内在材料是中心对称的; 全局屈曲模式(图 1(b))中, 对称性破坏产生挠曲电极化; 局部起皱模式(图 1(c))中, 对称性破坏产生更复杂的挠曲电极化. 薄膜和基底的厚度分别用 h 和 H 表示, 结构的长度为 L .

1.1 基于挠曲电效应的薄膜的能量

在这一节, 我们首先推导考虑挠曲电效应的屈曲薄膜的能量, 其能量密度可以表示为:

$$H_b = \frac{1}{2} \sigma_{xx} \epsilon_{xx} + \frac{1}{2} \tau_{xxz} \epsilon_{xx,z} - \frac{1}{2} D_z E_z \quad (1)$$

其中, σ_{xx} 、 ϵ_{xx} 、 τ_{xxz} 和 $\epsilon_{xx,z}$ 分别为柯西应力、应变、高阶应力和应变梯度. D_z 为电位移, E_z 表示静电场.

根据文献^[24-26], 屈曲薄膜的力电耦合本构方程可以表示为:

$$\frac{\partial H_b}{\partial \epsilon_{xx}} = \sigma_{xx} = c_{11} \epsilon_{xx} - e_{31} E_z \quad (2)$$

$$\frac{\partial H_b}{\partial \epsilon_{xx,z}} = \tau_{xxz} = -\mu_{31} E_z \quad (3)$$

$$\frac{\partial H_b}{\partial E_z} = -D_z = -a_{33} E_z - e_{31} \epsilon_{xx} - \mu_{31} \epsilon_{xx,z} \quad (4)$$

其中, a_{33} 、 c_{11} 、 e_{31} 和 μ_{31} 分别为介电常数、弹性常数、压电常数和挠曲电常数. 将式(2)-(4)代入式(1)中, 屈曲薄膜的能量密度 H_b 可改写为:

$$H_b = -\frac{1}{2} a_{33} E_z E_z + \frac{1}{2} c_{11} \epsilon_{xx} \epsilon_{xx} - e_{31} \epsilon_{xx} E_z - \mu_{31} \epsilon_{xx,z} E_z \quad (5)$$

接下来,我们考虑屈曲薄膜的位移形式. 根据文献^[27],薄膜的横向位移和轴向位移分别可以假设为:

$$w_f = A \cos(kx) \quad (6)$$

$$u_f = \gamma_1 A \sin(kx) + \gamma_2 k A^2 \sin(2kx) \quad (7)$$

其中, A 和 k 是屈曲后的振幅和波数, γ_1 和 γ_2 是待定的弹性参数.

将薄膜建模为非线性 Euler-Bernoulli 梁,薄膜的位移应变关系可表示为:

$$\epsilon_x = \frac{\partial u_f}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w_f}{\partial x} \right)^2 - z \left(\frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} \right) - \epsilon_{\text{pre}} \quad (8)$$

其中, ϵ_{pre} 为释放预拉伸基底产生的薄膜平面内压缩应变, ϵ_x 为薄膜的轴向总应变.

接下来,我们推导电场的表达式. 在没有自由电荷的情况下,要求电位移满足高斯定理.

$$\frac{dD_z}{dz} = 0 \quad (9)$$

z 方向上电场强度为:

$$E_z = -\frac{\partial \varphi}{\partial z} \quad (10)$$

利用电学边界条件 $\varphi(h/2) = V$ 和 $\varphi(-h/2) = 0$, 并将式(4)代入(9)、(10)求解得到在不考虑电场梯度逆效应的情况下,电势、电场及其梯度的表达式:

$$\varphi(z) = \frac{V}{2} + \frac{Vz}{h} + \frac{e_{31}}{2a_{33}} \left(\frac{h^2}{4} - z^2 \right) \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} - \frac{\mu_{31} z}{2a_{33}} \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} \quad (11)$$

$$E_z(z) = -\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{V}{h} + \frac{e_{31} z}{a_{33}} \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} + \frac{\mu_{31}}{2a_{33}} \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} \quad (12)$$

$$E_{z,z} = \frac{e_{31}}{a_{33}} \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} \quad (13)$$

屈曲薄膜的总能量可以写为:

$$U_f = \frac{k}{2\pi} \int_{-h/2}^{h/2} \int_0^{2\pi/k} H_b dx dz = \frac{\bar{E}_f h \epsilon_{\text{pre}}^2}{2} - V e_{31} \epsilon_{\text{pre}} - \frac{V^2 a_{33}}{2h} + \frac{\bar{E}_f h}{4} \left(\frac{k^2 h^2}{12} + \gamma_1^2 - \epsilon_{\text{pre}} + \frac{\chi k^2}{\bar{E}_f h} \right) k^2 A^2 + \frac{\bar{E}_f h}{4} \left[\left(2\gamma_2 - \frac{1}{4} \right)^2 + \frac{1}{8} \right] k^4 A^4 \quad (14)$$

其中, $\bar{E}_f = E_f (1 - \nu_f^2)$ 表示薄膜的等效弹性模量, E_f 和 ν_f 分别为薄膜的弹性模量和泊松比. χ 为挠曲电参数引起的项,其值为 $\chi = \frac{3\mu_{31}^2 h}{4a_{33}} + \frac{h e_{31} \mu_{31} \gamma_1}{k a_{33}} + \frac{e_{31}^2 h^3}{12a_{33}}$

$$+ \frac{V e_{31}}{k^2}.$$

1.2 有限厚弹性基底的能量

薄膜-基底界面处法向应力 p 与剪应力 τ_x 可以表示为:

$$p = \frac{\bar{E}_f h_f^3}{12} \frac{\partial^4 w_f}{\partial x^4} - \epsilon_x \bar{E}_f h_f \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} \quad (15)$$

$$\tau_x = \bar{E}_f h_f \left(\frac{\partial^2 u_f}{\partial x^2} + \frac{\partial w_f}{\partial x} \frac{\partial^2 w_f}{\partial x^2} \right) \quad (16)$$

为了准确地捕捉薄膜基底结构的屈曲行为,本文采用完整的薄膜轴向位移形式(包括 $\sin(kx)$ 和 $\sin(2kx)$). 因此,作用在界面上的法向应力和剪应力的表达式为:

$$p = p_1 \cos(kx) + p_2 \cos(2kx) \quad (17)$$

$$\tau_x = \tau_1 \sin(kx) + \tau_2 \sin(2kx) \quad (18)$$

为了求解基底的平面应变问题,采用 Airy 应力函数方法,基底的平衡方程为:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = 0 \quad (19)$$

其中, $\sigma_x = \partial^2 F / \partial z^2$, $\sigma_z = \partial^2 F / \partial x^2$, $\tau_{xz} = -\partial^2 F / \partial x \partial z$ 是 $F = F(x, z)$ 的应力, $F = F(x, z)$ 需满足:

$$\frac{\partial^4 F}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 F}{\partial x^2 \partial z^2} + \frac{\partial^4 F}{\partial z^4} = \nabla^4 F = 0 \quad (20)$$

其中, ∇ 为梯度算子. 由于薄膜的横向位移形式为 $w_f = A \cos(kx)$, 同时根据薄膜基底结构的位移连续性条件,基底的 Airy 应力函数可以被假设为:

$$F(x, z) = \sum_{n=1}^2 F_n(z) \cos(nkx) \quad (21)$$

$$F_n(z) = C_1^{(n)} e^{nkz} + C_2^{(n)} z e^{nkz} + C_3^{(n)} e^{-nkz} + C_4^{(n)} z e^{-nkz} \quad (22)$$

其中, $C_1^{(n)}$, $C_2^{(n)}$, $C_3^{(n)}$ 和 $C_4^{(n)}$ 为待确定的系数.

根据薄膜和基底之间完整的剪切力表达式,基底边界条件可以定义为:

$$\begin{cases} w_s = A \cos(kx), & \tau_{xz} = \tau_1 \sin(kx) + \tau_2 \sin(2kx) \\ \text{at } z=0 \\ \sigma_z = 0, & \tau_{xz} = 0 \text{ at } z=-H \end{cases} \quad (23)$$

将应力函数(21)带入边界条件(23)中,求解该方程可得到 $C_1^{(n)}$, $C_2^{(n)}$, $C_3^{(n)}$, $C_4^{(n)}$. 进而可以得到基底上表面法向应力 $\sigma_z|_{z=0}$ 和剪应力 $u_s|_{z=0}$ 的表达式为:

$$\sigma_z|_{z=0} = (kc_{11}^{(1)}A + c_{12}^{(1)}\tau_1)\cos(kx) + c_{11}^{(2)}\tau_2\cos(2kx) + \frac{c_{11}^{(1)}}{k^2}] \quad (24) \quad (31)$$

$$u_s|_{z=0} = \left(c_{21}^{(1)}A + \frac{1}{k}c_{22}^{(1)}\tau_1\right)\sin(kx) + \frac{1}{2k}c_{21}^{(2)}\tau_2\sin(2kx) \quad (25) \quad g = \frac{4c_{21}^{(2)}\zeta_2^2}{E_fhk} + 8\left(2\gamma_2 - \frac{1}{4}\right)^2 \quad (32)$$

其中的系数为:

$$\begin{cases} c_{11}^{(1)} = \frac{2\eta_1^2 - \cosh(2\eta_1) + 1}{(2\nu_s - 2)[2\eta_1 + \sinh(2\eta_1)]} \frac{E_s}{1 + \nu_s} \\ c_{12}^{(1)} = \frac{2\eta_1^2 + (1 - 2\nu_s)[\cosh(2\eta_1) - 1]}{(2\nu_s - 2)[2\eta_1 + \sinh(2\eta_1)]} \\ c_{11}^{(2)} = \frac{2\eta_2^2 + (1 - 2\nu_s)[\cosh(2\eta_2) - 1]}{(2\nu_s - 2)[2\eta_2 + \sinh(2\eta_2)]}, \quad c_{21}^{(1)} = -c_{12}^{(1)} \\ c_{22}^{(1)} = \frac{2\eta_1^2 + (3 - 4\nu_s)\cosh(2\eta_1) + 8\nu_s^2 - 12\nu_s + 5}{(2 - 2\nu_s)[2\eta_1 + \sinh(2\eta_1)]} \frac{E_s}{1 + \nu_s} \\ c_{21}^{(2)} = \frac{2\eta_2^2 + (3 - 4\nu_s)\cosh(2\eta_2) + 8\nu_s^2 - 12\nu_s + 5}{(2 - 2\nu_s)[2\eta_2 + \sinh(2\eta_2)]} \frac{E_s}{1 + \nu_s} \\ \eta_n = nkH \end{cases} \quad (26)$$

薄膜中性轴处的轴向位移为 $u_f = u_s|_{z=0} - (h_f\partial w_f/\partial x)/2$, 根据薄膜和基底之间界面处的平衡条件, 求解得到待定系数 τ_1, τ_2 :

$$\begin{cases} \tau_1 = -\frac{1}{2} \frac{\bar{E}_f h k (h k + 2c_{21}^{(1)})}{\bar{E}_f h k c_{22}^{(1)} + 1} k A = -\zeta_1 k A \\ \tau_2 = \frac{1}{2} \frac{\bar{E}_f h k}{2\bar{E}_f h k c_{21}^{(2)} + 1} k^2 A^2 = \zeta_2 k^2 A^2 \end{cases} \quad (27)$$

因此, 薄膜中性轴处的轴向位移可重新写为:

$$u_f = \gamma_1 A \sin(kx) + \gamma_2 k A^2 \sin(2kx) \quad (28)$$

其中, $\gamma_1 = \frac{\zeta_1}{E_f h k}, \gamma_2 = \frac{1}{8} - \frac{\zeta_2}{4E_f h k}$. 根据式(23)以及(24)(25), 可以得到基底能量表达式为:

$$U_s = \frac{1}{2} \frac{k}{2\pi} \int_0^{2\pi/k} (\sigma_z w + \tau_{xz} u) \Big|_{z=0} dx = \frac{A^4 k^3 c_{21}^{(2)} \zeta_2^2}{8} + \frac{A^2}{4} \left\{ [\zeta_1^2 c_{22}^{(1)} - (c_{12}^{(1)} + c_{21}^{(1)})\zeta_1] k + \frac{c_{11}^{(1)}}{k} \right\} \quad (29)$$

1.3 薄膜-基底结构的总能量

薄膜-基底结构总能量可以写为:

$$U_{\text{total}} = U_s + U_f = \frac{\bar{E}_f h \epsilon_{\text{pre}}^2}{2} - V e_{31} \epsilon_{\text{pre}} - \frac{V^2 a_{33}}{2h} + \frac{\bar{E}_f h}{4} (f - \epsilon_{\text{pre}}) k^2 A^2 + \frac{\bar{E}_f h}{32} (1 + g) k^4 A^4 \quad (30)$$

其中:

$$f = \frac{k^2 h^2}{12} + \gamma_1^2 + \frac{\gamma_2 k^2}{E_f h} + \frac{1}{E_f h k} \left[\zeta_1^2 c_{22}^{(1)} - \zeta_1 (c_{12}^{(1)} + c_{21}^{(1)}) \right]$$

从总能量方程(30)可以看出: 当 $f \geq \epsilon_{\text{pre}}$ 时, 总能量在振幅 $A=0$ 时最小, 这意味着柔性膜基结构不会屈曲. 另一方面, 当 $f < \epsilon_{\text{pre}}$ 时, 结构会发生屈曲失稳, 由于 $g \ll 1$ [22,27], 故可将其忽略, 令 $\partial U_{\text{total}}/\partial A = 0$ 可以得到该结构起皱失稳时的振幅为:

$$A = \frac{2}{k} \sqrt{\epsilon_{\text{pre}} - f} \quad (33)$$

将式(33)回代到总能量表达式(30)中, 可以将总能量可以写为关于波数 k 的函数:

$$U_{\text{total}} = \frac{\bar{E}_f h \epsilon_{\text{pre}}^2}{2} - V e_{31} \epsilon_{\text{pre}} - \frac{V^2 a_{33}}{2h} - \frac{\bar{E}_f h}{2} \frac{(f - \epsilon_{\text{pre}})^2}{2} \quad (34)$$

2 结果与讨论

2.1 屈曲失稳模式分析

根据公式(34)可以得到, 总能量 U_{total} 依赖于 $f(kh)$, 且是 f 的二次函数. 显然, 当 $f < \epsilon_{\text{pre}}$ 时, 公式(34)中的总能量 U_{total} 是关于波数 k 的最小化, 它决定了薄膜-基底结构的屈曲状态. 在下面数值仿真中使用到的参数为: $\nu_f = 0.33, \nu_s = 0.48, E_f = 210 \text{ GPa}, E_s = 2.5 \text{ MPa}$.

为了区分薄膜-基底结构的屈曲区域, 并评估挠曲电效应强弱对屈曲区域的影响, 绘制了图 2.

由图 2 的数值结果可以发现: 在基底与薄膜厚度比 $H/h = 104$ 时, 当薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 1 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ 时, 函数 f (图 2(a) 中蓝色三角曲线) 是关于 kh 单调递增函数, 这意味着当 $k=1$ 和 $\lambda=L$ 时, f 最小. 即, 此时结构仅会出现全局屈曲一种失稳模式. 然而, 当薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$ 和 $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ 时, 函数 f (图 2(a) 中红色圆圈曲线) 不是关于 kh 单调递增函数, 存在局部极小值点. 此时, 随结构长度 L 的不同可能出现整体屈曲或起皱失稳两种失稳模式, 而且这两种屈曲状态可以通过比较与它们对应的 f 函数值来确定. 如图 2(b) 所示, 函数 f 关于 kh 有一个极小值点, 该点对应于的屈曲状态为起皱失稳, 但是, 当 $kh < 2\pi h/L_c$ 时, 结构的

屈曲状态为整体屈曲. 为了更清楚地区分这两种屈曲模式, 给出了临界长度 L_c . 当 $L < L_c$ 时(即图中橙色部分), 结构发生起皱失稳; 否则, 结构只会发生整

体屈曲(即图中蓝色部分). 因此, 可以得到薄膜挠曲电系数越小, 结构越容易发生局部起皱. 挠曲电效应的存在会增大结构的刚度, 改善结构的可拉伸性.

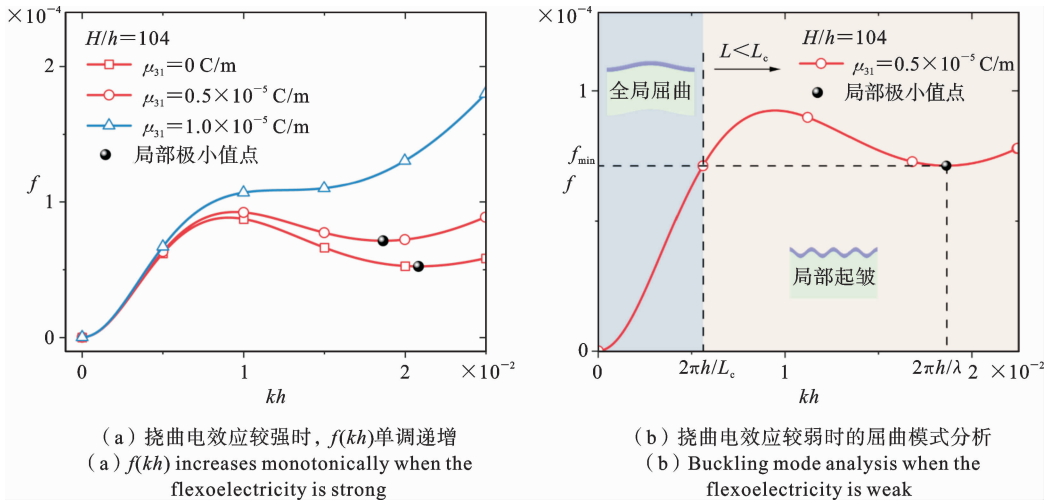


图 2 不同挠曲电系数下 f 和 kh 的关系

Fig. 2 The relationship between f and kh under different flexoelectric coefficients

为了区分薄膜-基底结构的屈曲区域, 并评估薄膜和基底的厚度对屈曲区域的影响, 绘制了图 3. 由图 3 的数值结果可以发现: 在薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 1 \times 10^{-5}$ C/m 时, 当基底与薄膜厚度比 $H/h \leq 104$ 时, 函数 f 是关于 kh 的单调递增函数, 此时不论结构长度 L 如何变化, 结构仅会出现全局屈曲一种失稳模式. 然而, 当基底与薄膜的厚度比 $H/h >$

104 时, 随结构长度 L 的不同可能出现整体屈曲或起皱失稳两种失稳模式. 因此, 可以得到结构基底厚度越大, 结构越容易发生局部起皱. 在进行结构设计时需要根据不同的目标考虑薄膜材料的挠曲电参数、厚度、基底的厚度与结构的长度来诱导结构产生相应的屈曲模式.

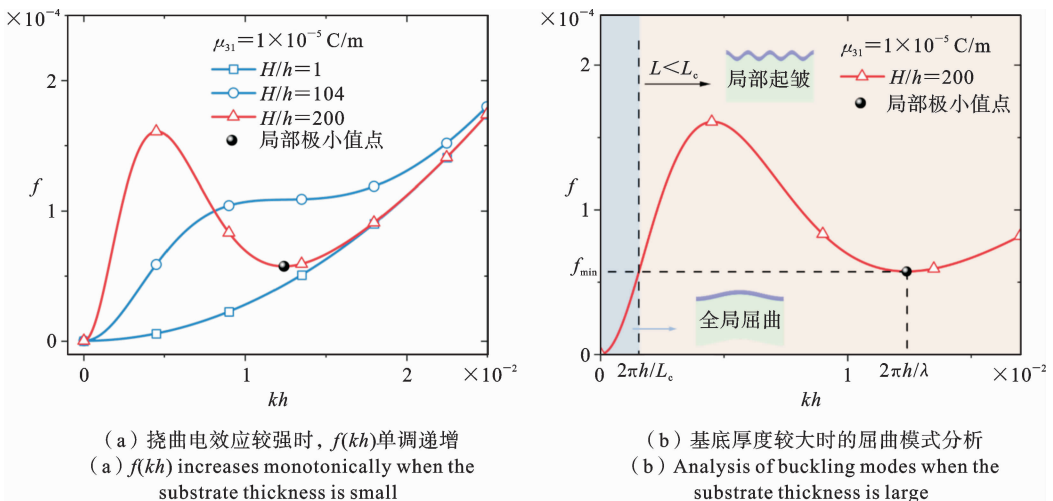


图 3 不同厚度比下 f 和 kh 的关系

Fig. 3 The relationship between f and kh under different thickness ratios

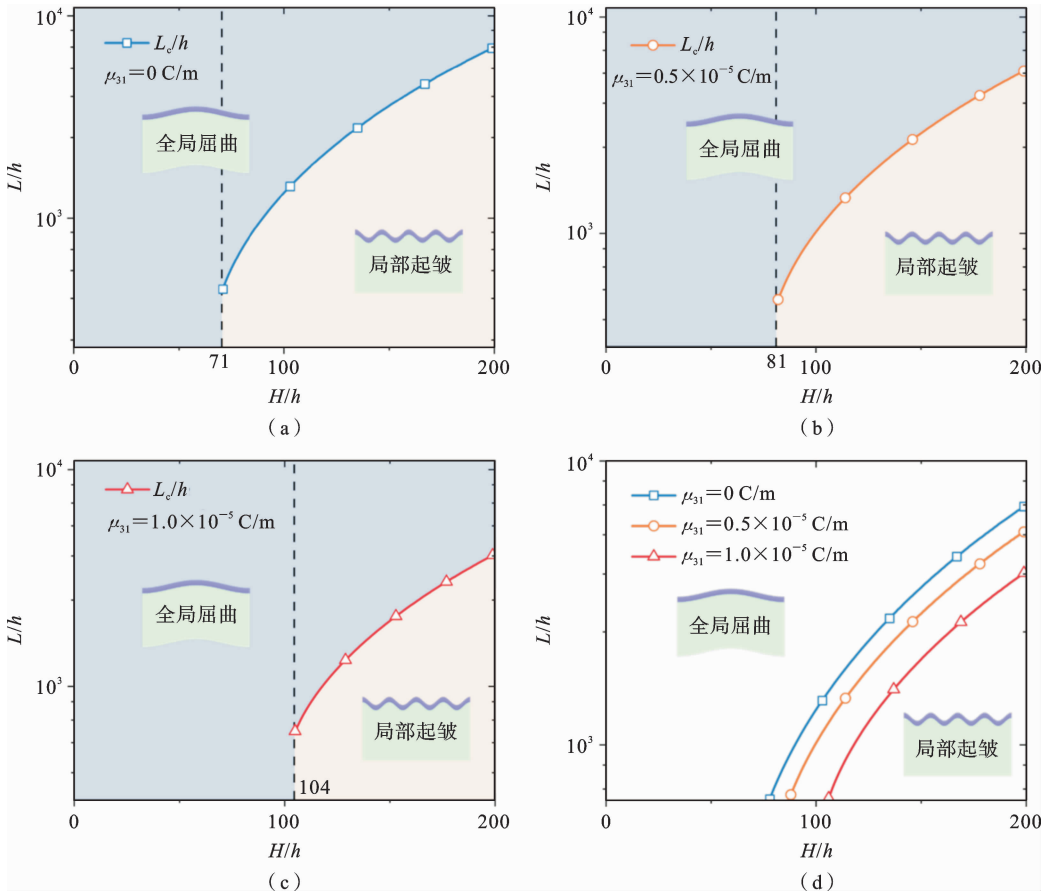


图4 薄膜-基底结构整体屈曲与局部起皱之间的转换关系. (a)、(b)、(c)分别为薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$, $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$, $1.0 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ 时的相图, (d)从整体上反映了挠曲电效应强弱对两种失稳模式转换的影响

Fig. 4 Transformation relationship between global buckling and local wrinkling of film-substrate structures. (a), (b) and (c) are the phase diagrams of thin film with flexoelectric coefficient $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$, $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$, $1.0 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ respectively, and (d) as a whole reflects the influence of the strength of flexoelectricity on the conversion of the two instability modes

从图2与图3的分析中可以得到,薄膜挠曲电系数、结构长度与基底/薄膜厚度比都会影响薄膜/基底结构的屈曲失稳模式,为了进一步明确整体屈曲和局部起皱,并深入理解临界长度 L_c 与薄膜挠曲电系数 μ_{31} 和基底/薄膜厚度比 H/h 之间的关系,在图4中给出了整体屈曲和局部起皱之间的转换关系.

图4(a)中,薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$,从这个图中可以清楚地观察到,当基底/薄膜厚度比 $H/h < 71$ (数值计算得到) 时,结构的屈曲状态是整体屈曲. 当这个比值大于71时(即增加了基底的厚度),结构的屈曲状态由结构的长度 L 决定,当 $L > L_c$ 时(即在图中蓝色方框曲线上方蓝色区域),结构屈曲

状态是整体屈曲;当 $L < L_c$ 时(即在图中黄色区域),结构屈曲状态是局部起皱. 如图4(a)所示,基底越厚,临界长度 L_c 的值越大,这意味着要形成整体屈曲状态,结构应该越长. 在图4(b)和图4(c)中,薄膜挠曲电系数 μ_{31} 分别为 $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ 和 $1.0 \times 10^{-5} \text{ C/m}$,随薄膜挠曲电系数增大,产生两种失稳模式的临界厚度比增大,临界长度变化趋势与图4(a)相同. 从图4(d)中可以直观地看到,随着薄膜挠曲电效应增强与基底厚度减小,临界长度 L_c 的值越小,结构越容易发生全局屈曲.

2.2 屈曲失稳特性分析

在图5(a)中,薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$,结构长度 $L/h = 1000$,从图中可以清楚地观察到,当基

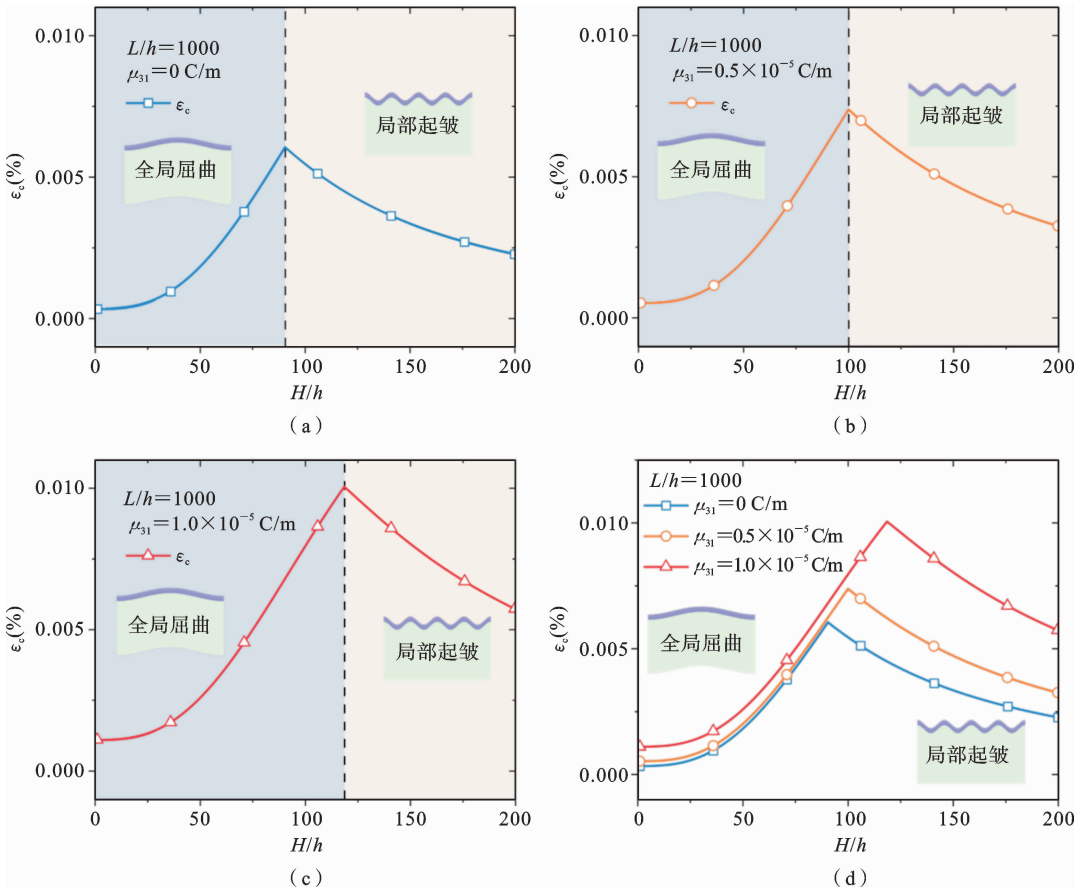


图 5 不同挠曲电系数下基底/薄膜厚度比与失稳临界应变的关系. (a)、(b)、(c)分别为薄膜挠曲电系数 $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$, $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$, $1.0 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ 时的关系图, (d)从整体上反映了挠曲电效应强弱对失稳临界应变的影响

Fig. 5 Relationship between the substrate/film thickness ratio and the critical strain of instability at different flexoelectric coefficient. (a), (b) and (c) are the relationship graphs of thin film with flexoelectric coefficient $\mu_{31} = 0 \text{ C/m}$, $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$, $1.0 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ respectively, (d) as a whole, the influence of the flexoelectricity on the critical strain of instability is reflected

底、薄膜厚度比 $H/h < 71$ 时与, 结构的屈曲模式是整体屈曲, 失稳的临界应变随厚度比增大而增大. 当这个比值大于 71 时, 结构的屈曲模式是局部起皱, 失稳的临界应变随厚度比增大而减小. 在图 5(b) 和图 5(c) 中, 薄膜挠曲电系数 μ_{31} 分别为 $0.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$ 和 $1.0 \times 10^{-5} \text{ C/m}$, 随薄膜挠曲电系数增大, 两种失稳模式的临界厚度比增大, 临界应变变化趋势与图 5(a) 相同. 从图 5(d) 中可以直观地看到, 随薄膜挠曲电效应增强, 结构发生失稳的临界应变增大, 且对局部起皱阶段的影响更突出.

上述研究表明, 挠曲电效应的存在可以提高结构的拉伸性能. 为了理解这种拉伸性的基本机制, 我们研究了当受到不同的压缩应变时的振幅和最大应

变. 起皱膜中的最大应变可以表示为^[15]:

$$\epsilon_{\max} = -\epsilon_{\text{pre}} + \frac{1}{4}A^2k^2 + \frac{h}{2}Ak^2 \cos(kx) \quad (35)$$

为了进一步研究挠曲电效应对局部起皱失稳模式的影响, 图 6 描绘了不同挠曲电系数条件下, 预应变与局部起皱振幅与最大应变之间的关系, 以直观地说明薄膜/基底结构可拉伸性的改善. 从图 6(a) 可以看出, 薄膜挠曲电效应越弱, 结构发生局部起皱的临界应变就越小. 同时, 振幅随预应变的增大而增大. 然而当薄膜挠曲电效应较强时, 结构在预应变小的时候振幅较小, 预应变大的时候振幅较大. 从图 6(b) 可以看出, 薄膜中挠曲电效应越强时, 薄膜中最大应变越小, 再次说明了挠曲电效应的存在可以提

高结构的拉伸性能.

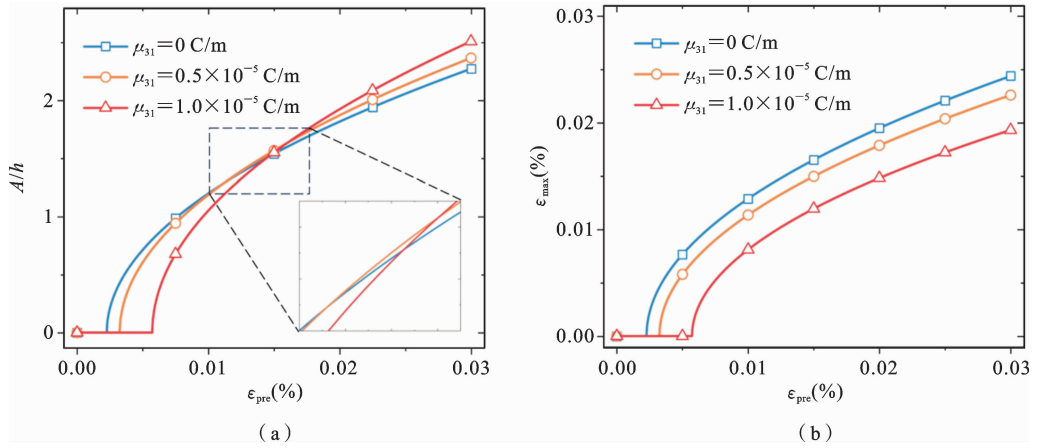


图 6 在不同挠曲电系数下(a)局部起皱振幅、(b)最大应变与预应变之间的关系。(a)中放大图显示了振幅的变化细节
 Fig.6 The relationship between (a) local wrinkling amplitude and (b) maximum strain and prestrain under different flexoelectric coefficients. In (a), the enlarged image shows the amplitude variation

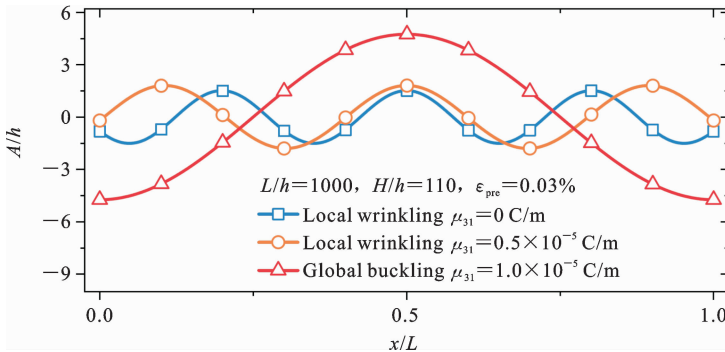


图 7 不同挠曲电系数下,失稳模式以及振幅的对比
 Fig.7 Comparison of instability modes and amplitudes with different flexoelectric coefficient

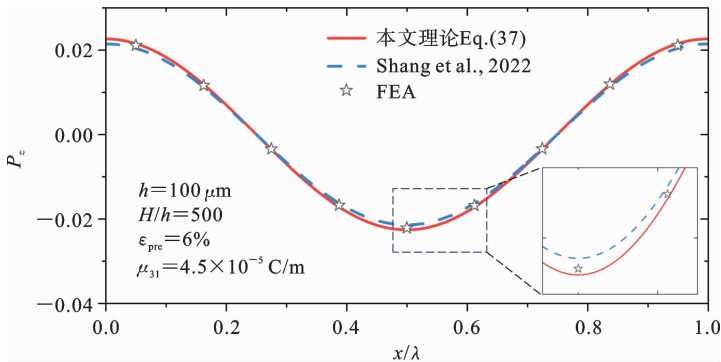


图 8 挠曲电极化在褶皱薄膜上的分布
 Fig.8 The distribution of flexoelectric polarization on the local wrinkling film

图 7 给出了在结构长度 $L/h=1000$ 、基底/薄膜厚度比 $H/h=110$ 和结构预应变 $\epsilon_{pre} = 0.03\%$ 时不

同挠曲电系数薄膜的褶皱轮廓图.从图中可以看到,对于局部起皱失稳模式,薄膜挠曲电效应较强时,褶

皱更稀疏,同时褶皱振幅更大,与图 6(a)结论相符.当薄膜挠曲电效应增强到一定程度时,结构失稳模式从局部起皱转变为全局屈曲,此时,结构振幅是局部失稳模式的两倍多.在基于褶皱的微电子机械设计过程中需要注意采用合适的参数来避免结构发生不合适的失稳模式.

2.3 挠曲电极化分析

为了评估屈曲薄膜中挠曲电效应的大小,首先推导得到屈曲薄膜应变梯度为:

$$\epsilon_{xx,z} = -\frac{\epsilon_{\text{pre}}}{h} + \frac{1}{4h}A^2k^2 + \frac{1}{2}Ak^2\cos(kx) \quad (36)$$

由应变梯度引起的挠曲电极化表达式为:

$$P_z = \mu_{31}\epsilon_{xx,z} = \frac{\mu_{31}}{h} \left[-\epsilon_{\text{pre}} + \frac{1}{4}A^2k^2 + \frac{1}{2}Ak^2h\cos(kx) \right] \quad (37)$$

图 8 展示了由失稳褶皱诱导的挠曲电极化在不同位置的分布情况,给出了挠曲电极化强度的验证对比图.计算采用文献[15]中的参数,设置薄膜厚度 $h=100 \mu\text{m}$,厚度比 $H/h=500$,预压缩应变 $\epsilon_{\text{pre}}=6\%$ 以及挠曲电系数 $\mu_{31}=4.5 \times 10^{-5} \text{ C/m}$,可以看到本文局部起皱模式下理论预测结果与 Shang 等人的半无限大基底模型结果基本一致,且本文结果与有限元分析获得的结果具有更好的一致性.挠曲电极化可以通过压缩应变连续调节,褶皱薄膜中挠曲电效应的可控性对材料极性的产生与控制有着重要意义.

6 总结

总之,我们提出了一个理论模型来研究具有挠曲电效应的褶皱薄膜-自由支撑有限厚基底结构屈曲的理论模型.通过对结构总能量的分析,研究了挠曲电效应对薄膜-基底结构发生屈曲演化的影响,并对全局屈曲和局部起皱两种屈曲模式进行了区分.此外,我们还讨论了不同模式下的临界应变、褶皱形态与可拉伸性,得到了以下一些结论:

(1) 薄膜中挠曲电效应越强,结构越细长,越容易发生全局屈曲.挠曲电效应的存在会增大结构的刚度,改善结构的可拉伸性.

(2) 薄膜中挠曲电效应越强,结构发生失稳所

需的临界应变越大,且对局部起皱失稳模式的影响更突出.

(3) 薄膜中挠曲电效应越强时,局部失稳模式的振幅越大,薄膜中最大应变越小,再次说明了挠曲电效应的存在可以提高结构的拉伸性能.

(4) 对于局部起皱失稳模式,薄膜挠曲电效应较强时,褶皱更稀疏,同时褶皱振幅更大.当薄膜挠曲电效应增强到一定程度时,结构失稳模式将从局部起皱转变为全局屈曲.

(5) 挠曲电极化可以通过压缩应变连续调节,褶皱薄膜中挠曲电效应的可控性对材料极性的产生与控制有着重要意义.

我们期待对考虑挠曲电效应褶皱薄膜的屈曲模式进行讨论将有助于在微纳尺度上设计多功能的基于褶皱的设备,如传感器、能量采集器和柔性电子设备.

参考文献

- [1] Zhuang X, Nguyen B H, Nanthakumar S S, Tran T Q, Alajlan N, Rabczuk T. Computational modeling of flexoelectricity—a review[J]. *Energies*, 2020, 13(6): 1326.
- [2] 梁旭, 尚红星, 邓谦, 胡淑玲, 申胜平. 固体电介质中的挠曲电效应[J]. *固体力学学报*, 2021, 42(1): 1-32. (Liang X, Shang H X, Deng Q, Hu S L, Shen S P. Flexoelectric effect in solid dielectrics[J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2021, 42(1): 1-32. (in Chinese))
- [3] 张海波, 王传民, 马伟刚, 高华昀, 周鑫翊, 刘凯, 吴天琼, 姜胜林, 刘洋, 闫春泽, 郭新, 谭划. 挠曲电效应及其应用研究进展[J]. *硅酸盐学报*, 2023, 51(3): 812-830. (Zhang H B, Wang C M, Ma W G, Gao H Y, Zhou X Y, Liu K, Wu T Q, Jiang S L, Liu Y, Yan C Z, Guo X, Tan H. Recent development on flexoelectric effect and its application[J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2023, 51(3): 812-830. (in Chinese))
- [4] Xie B Y, Wang H F, Zhu X Y, Lu M H, Wang Z D, Chen Y F. Photonics meets topology[J]. *Optics Express*, 2018, 26(19): 24531-24550.
- [5] 陈允彬. 挠曲电微型智能器件的力电耦合特性与非

- 线性行为研究[D]. 华中科技大学, 2023. (Chen Y B. Investigation of Electromechanical Coupling Properties and Nonlinear Behaviors of Flexoelectricity-based Miniature Smart Devices [D], Huazhong University of Science and Technology, 2023. (in Chinese))
- [6] 黄怀纬, 黄海博. 微纳挠曲电结构力电耦合响应的数值模拟方法[J]. 华南理工大学学报(自然科学版), 2024, 52(1): 147-156. (Huang H W, Huang H B. Numerical simulation of electromechanical coupling response of nano flexoelectric structures[J]. Journal of South China University of Technology (Natural Science Edition), 2024, 52(1): 147-156. (in Chinese))
- [7] 陈春林, 李肇奇, 梁旭, 胡淑玲, 申胜平. 悬臂梁挠曲电俘能器的力电耦合模型及性能分析[J]. 固体力学学报, 2020, 41(2): 159-169. (Chen C L, Li Z Q, Liang X, Hu S L, Shen S P. Electromechanical coupling model and performance analysis of the unimorph cantilever beam-based flexoelectric energy harvester [J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2020, 41(2): 159-169. (in Chinese))
- [8] Grasinger M, Mozaffari K, Sharma P. Flexoelectricity in soft elastomers and the molecular mechanisms underpinning the design and emergence of giant flexoelectricity[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2021, 118(21): e2102477118.
- [9] Lawn B R, Marshall D B. Brittle solids: from physics and chemistry to materials applications[J]. Annual Review of Materials Research, 2022, 52(Volume 52, 2022): 441-471.
- [10] Cai S, Lun Y, Ji D, Lv P, Han L, Guo C, Zang Y, Gao S, Wei Y, Gu M, Zhang C, Gu Z, Wang X, Addiego C, Fang D, Nie Y, Hong J, Wang P, Pan X. Enhanced polarization and abnormal flexural deformation in bent freestanding perovskite oxides[J]. Nature Communications, 2022, 13(1): 5116.
- [11] 马润玉, 郝一涵, 田新鹏, 邓谦. 基于多尺度模型解释固体中的挠曲电效应[J]. 固体力学学报, 2022, 43(4): 477-484. (Ma R Y, Hao Y H, Tian X P, Deng Q. Interpretation of the flexoelectric effect in solids based on multi-scale model[J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2022, 43(4): 477-484. (in Chinese))
- [12] 徐凡, 杨易凡, 汪婷. 曲面薄膜结构褶皱失稳力学[J]. 力学进展, 2021, 51(2): 342-363. (Xu F, Yang Y F, Wang T. Curvature-affected instabilities in membranes and surfaces: A review[J]. Advances in Mechanics, 2021, 51(2): 342-363. (in Chinese))
- [13] 汪玉, 邱雷, 黄永安. 面向飞行器结构健康监测智能蒙皮的柔性传感器网络综述[J]. 航空制造技术, 2020, 63(15): 60-69+80. (Wang Y, Qiu L, Huang Y A. Review of flexible sensor networks for structural health monitoring of aircraft smart skin[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2020, 63(15): 60-69+80. (in Chinese))
- [14] 尹周平, 黄永安, 陈蓉, 吴志刚, 吴豪, 段永青. 柔性电子制造关键技术与应用[J]. 中国基础科学, 2020, 22(5): 21-34. (Yin Z P, Huang Y A, Chen R, Wu Z G, Duan Y Q. Key technologies and applications of flexible electronic manufacturing[J]. China Basic Science, 2020, 22(5): 21-34. (in Chinese))
- [15] Shang H, Liang X, Deng F, Hu S, Shen S. Flexoelectricity in wrinkled thin films [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2022, 234: 107685.
- [16] 王宙恒, 陈颖, 郑坤炜, 李海成, 马寅皓, 冯雪. 柔性电子技术中的半导体材料性能调控概述[J]. 物理学报, 2021, 70(16): 173-187. (Wang Z H, Chen Y, Zheng K W, Li H C, Ma Y J, Feng X. Review on property regulation of semiconducting materials in flexible electronics [J]. Acta Physica Sinica, 2021, 70(16): 173-187. (in Chinese))
- [17] Wang T, Long J, Xu S, Zhang X, Wang X, Zhong X, Tan C, Lun Y, Hong J. Size-dependent buckling in freestanding films driven by flexoelectricity[J]. International Journal of Solids and Structures, 2023, 283: 112491.
- [18] Shang H, Dong H, Wu Y, Deng F, Liang X, Hu S, Shen S. Mechanical control of polar patterns in wrinkled thin films via flexoelectricity[J]. Physical Review Letters, 2024, 132(11): 116201.
- [19] Zhang Y, Wang S, Li X, Fan J A, Xu S, Song Y M, Choi K J, Yeo W H, Lee W, Nazaar S N, Lu B, Yin L, Hwang K C, Rogers J A, Huang Y. Experimental and theoretical studies of serpentine microstructures bonded to prestrained elastomers for stretchable e-

- lectronics[J]. *Advanced Functional Materials*, 2014, 24(14): 2028-2037.
- [20] Patidar D, Pal V K. Deformation behaviour of interconnect encapsulated on functionally graded stretchable substrates[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2023, 257: 108539.
- [21] Li H, Cai S, Zhang Y, Hwang K C, Ma Y, Feng X. Local wrinkling versus global buckling of stiff film bonded to finite-thick substrate[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2019, 29: 100453.
- [22] Bi H, Wang B, Su C, Zhang B, Ouyang H, Huang Y, Deng Z. Buckling behaviour of a stiff thin film on a finite-thickness bi-layer substrate[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2021, 219-220: 177-187.
- [23] Wang S, Song J, Kim D H, Huang Y, Rogers J A. Local versus global buckling of thin films on elastic substrates[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 93(2): 023126.
- [24] Liang X, Hu S, Shen S. Size-dependent buckling and vibration behaviors of piezoelectric nanostructures due to flexoelectricity[J]. *Smart Materials and Structures*, 2015, 24(10): 105012.
- [25] Wang S, Su H, Yi M, Shao L H. Strain gradient finite element formulation of flexoelectricity in ferroelectric material based on phase-field method[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2024, 37(4): 570-579.
- [26] Yudin P V, Tagantsev A K. Fundamentals of flexoelectricity in solids[J]. *Nanotechnology*, 2013, 24(43): 432001.
- [27] Bi H, Wang B, Ouyang H, Deng Z, Zhang B. Nonlinear dynamic instability of wrinkled film-substrate structure under axial load[J]. *Nonlinear Dynamics*, 2021, 106(4): 2807-2827.

Research on Buckling Behavior in Thin-Film-and-Finite-Thickness-Substrate Structures Considering Flexoelectric Effects

Chenyu Wang^{1,2} Bo Wang^{1,2} Bohan Zhang^{1,2} Yongan Huang³ Huajiang Ouyang⁴

(¹Department of Engineering Mechanics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an, 710072)

(²Research Development Institute of Northwestern Polytechnical University in Shenzhen, Shenzhen, 518063)

(³State Key Laboratory of Digital Manufacturing Equipment and Technology,

Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074)

(⁴School of Mechanical Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu, 610031)

Abstract Large-area and tunable strain gradients arise from inhomogeneous deformation in wrinkled thin films, making them promising for flexoelectric applications. Consequently, the structure and buckling modes of these films have garnered significant attention. In this paper, an electromechanical coupling model is developed to study the buckling behavior of thin-film-and-finite-thickness-substrate structures with flexoelectric effects. First, the influence of flexoelectric effects on the buckling evolution of thin-film-substrate structures is assessed using the minimum energy method. Two buckling modes, i. e. , global buckling and local wrinkling, are distinguished by changing structural parameters and the flexoelectric coefficient. Results show that stronger flexoelectric effects lead to slenderer films and an increased likelihood of global buckling. Additionally, a stronger flexoelectric effect raises the critical strain required for buckling and significantly impacts local wrinkling mode. In local wrinkling, as the amplitude increases, the maximum strain in thin films decreases; sparser wrinkles with greater amplitude occur with a more pronounced flexoelectric effect. When the flexoelectric effect reaches a certain threshold, the buckling mode of the thin film shifts from local wrinkling to global buckling. The flexoelectric effect enhances structural stiffness and stretchability. Moreover, flexoelectric polarization can be continuously adjusted with compressive strain, highlighting its controllability in wrinkled thin films for generating and managing material polarity. These findings will aid in the design and application of micro and nanoscale electromechanical devices.

Key words flexoelectric effect, finite-thickness substrate, film-substrate structure, buckling mode