

Modelling in Science Education and Learning Volume 6(3), No. 12, 2013. Instituto Universitario de Matemática Pura y Aplicada

Simulación numérica de una cerámica piezoeléctrica

Nuria González-Salido, Marcelino Ferri, Noé Jiménez, Francisco Camarena, Rubén Picó, Javier Redondo, Bernardino Roig

Universitat Politècnica de València

nugonsa@epsg.upv.es, mferri@fis.upv.es, nojigon@epsg.upv.es, fracafe@fis.upv.es, rpico@fis.upv.es, fredondo@fis.upv.es, broig@mat.upv.es

Abstract

En este trabajo se presenta un modelo matemático que describe el comportamiento dinámico de una cerámica piezoeléctrica comercial vibrando en modo espesor. Dicho modelo resuelve, mediante diferencias finitas, las ecuaciones piezoeléctricas que relacionan los fenómenos mecánicos y eléctricos que se producen en este tipo de materiales, y simula el comportamiento de algunas variables físicas puntuales -como campo eléctrico o velocidad de partícula- en el dominio de tiempo. Asimismo, se ha implementado un entorno gráfico en Matlab que permite realizar las simulaciones de forma sencilla y asequible a todos los usuarios. Esta interfaz contempla dos tipos de estudio: excitación de la cerámica en banda ancha y excitación a una sola frecuencia. Como valores de salida el programa facilita, una vez finalizada la simulación de las variables dependientes del tiempo, los distintos parámetros piezoeléctricos de la cerámica y su respuesta eléctrica en el dominio de la frecuencia (curvas de admitancia e impedancia). Los resultados obtenidos permiten, además de predecir los modos propios de vibración y la respuesta eléctrica, comprender el efecto de piezoelectricidad en la respuesta mecánica de un medio material.

In this paper, a mathematical model describing the dynamic behavior of a commercial piezoelectric ceramic, vibrating in thickness, is presented. This model solves, by finite differences, the piezoelectric equations which relate he mechanical and electrical phenomena produced in this kind of material. The behavior in time domain of some physical variables, as the electric field and particle velocity, is simulated too. In addition, we have implemented a GUI in Matlab that allows simple and affordable simulations for all users. The implemented interface provides two kind of study: Broadband and single frequency excitation. The output parameters, obtained after time domain simulation, are piezoelectric constants of the ceramic and the electric response in frequency domain, i.e. admittance and impedance curves. The results allow predicting vibration modes, electrical response and understanding the effect of piezoelectricity on the mechanical response.

Keywords: Piezoelectricidad, Diferencias finitas, ultrasonidos.

Piezoelectricity, finite differences, ultrasound

1 Introducción

La piezoelectricidad, nombre asignado por Hankel [1] al fenómeno descubierto por los hermanos Curie [2], es una propiedad que presentan ciertos materiales que al ser sometidos a esfuerzos mecánicos adquieren una polarización eléctrica en su masa, apareciendo una diferencia de potencial y cargas eléctricas en su superficie. De la misma forma, estos materiales se deforman bajo la acción de fuerzas internas al ser sometidos a un campo eléctrico.

En los materiales piezoeléctricos, las propiedades eléctricas y mecánicas están por tanto acopladas, por lo que en sus ecuaciones constitutivas deben estar presentes los parámetros mecánicos de esfuerzo σ y deformación s, y los parámetros eléctricos de campo eléctrico E y desplazamiento eléctrico D. La Ecuación 2 describe el primer efecto, conocido como efecto directo, que se muestra en la Figura 1 izquierda. Por su parte, la Ecuación 1 describe el efecto piezoeléctrico inverso, mostrado en la Figura 1 derecha.

$$s = K_D \sigma + gD \tag{1}$$

$$E = g\sigma + \beta_{\sigma}D \tag{2}$$

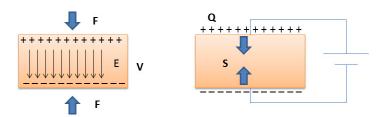


Figura 1: Efecto piezoeléctrico directo e inverso. En la figura de la izquierda se obtiene campo eléctrico a partir de fuerza, según Ecuación 2. En la figura derecha se obtiene contracción a partir de carga eléctrica, según Ecuación 1.

donde g es el coeficiente piezoeléctrico de voltaje, K_D representa la constante elástica de rigidez del material cuando el desplazamiento eléctrico es constante, y β_{σ} es la impermitividad del medio o inversa de la constante dieléctrica bajo esfuerzo mecánico constante.

La mayoría de estos materiales son cristales naturales, como el cuarzo, cuya unidad estructural no presenta simetría central de cargas eléctricas, o cerámicas sintéticas, como los titanatos zirconatos de plomo (PZT), que se emplean en la construcción de los transductores electroacústicos usados en distintas aplicaciones ultrasónicas.



Figura 2: Cerámicas con geometría de disco plano vibrando en modo espesor.

Las cerámicas más habituales tienen geometría de disco plano para favorecer la vibración en modo espesor, tal y como muestra la Figura 2. En este tipo de vibración, tanto la diferencia de potencial como la deformación se producen entre las dos caras planas del disco, y la cerámica resuena a una serie de frecuencias, Ecuación 3, que son múltiplos impares de la frecuencia fundamental f_0 , asociada a una longitud de onda equivalente a dos veces el espesor.

$$f_n = \frac{2n+1}{2b} \sqrt{\frac{K_D}{\rho}} \tag{3}$$

donde b es el espesor y ρ la densidad del material.

Para comprender mejor su comportamiento, la cerámica puede ser estudiada a través de su circuito eléctrico equivalente [3] mostrado en la Figura 3, que considera tanto los aspectos eléctricos como mecánicos. Este circuito se compone de un condensador C_s , correspondiente a la contribución puramente eléctrica de la cerámica, y de una parte mecánica formada por la asociación en serie de una resistencia R_R , que describe las pérdidas por radiación, una bobina L que representa la inercia de la cerámica para moverse, y un condensador C que representa la elasticidad del material. Las pérdidas en las resistencias R_0 y R_i son debidas al efecto Joule y a la fricción mecánica, respectivamente.

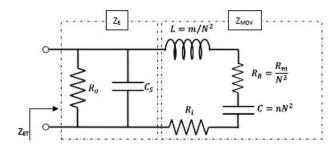


Figura 3: Circuito eléctrico-mecánico equivalente de la cerámica.

La admitancia eléctrica total Y_{ET} , suponiendo condiciones ideales donde R_0 tiende a infinito y R_i tiende a cero, viene dada por la Ecuación 4.

$$Y_{ET} = G_{ET} + jB_{ET} = \frac{1}{Z_{ET}} = j\omega C_s + \frac{1}{R_R + j(\omega L + \frac{1}{\omega C})}$$
 (4)

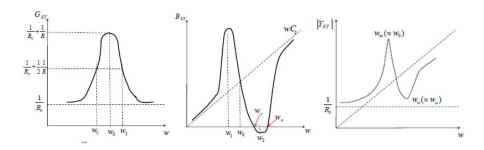


Figura 4: Respuesta en frecuencia de la cerámica. De izquierda a derecha: parte real de la admitancia, G_{E_T} , parte imaginaria de la admitancia B_{E_T} , valor absoluto de la admitancia $|Y_{E_T}|$.

@MSEL 133 ISSN 1988-3145

Representando la respuesta en frecuencia de la cerámica se obtiene una curva de resonancia típica, que proporciona, tal y como se muestra en la Figura 4, algunos de los parámetros más importantes que caracterizan el comportamiento de la cerámica. Entre ellos, es posible identificar la frecuencia de resonancia, que hace máxima la parte real de la admitancia G_{E_T} , o el factor de calidad Q, que determina el ancho de banda de la curva, y viene dado por la Ecuación 5

$$Q = \omega_0 / (\omega_2 - \omega_1) \tag{5}$$

siendo ω_1 y ω_2 las frecuencias angulares cuadrantales, representadas en la Figura 4. Otro parámetro importante en el estudio y caracterización de los materiales piezoeléctricos es el factor de acoplamiento electromecánico k. Este factor adimensional se define como la raíz cuadrada del cociente entre la energía que se obtiene en forma eléctrica (o mecánica) bajo condiciones ideales y la energía total almacenada de la fuente mecánica (o eléctrica). Este factor de acoplamiento da una medida de la capacidad del material para transducir la energía de una forma a otra, siendo la cerámica más eficiente cuanto mayor sea k. Se relaciona con las constantes piezoeléctricas a través de la Ecuación 6 [4]

$$k^2 = \frac{\frac{1}{2} \frac{e^2}{K_E} E^2}{\frac{1}{2} \epsilon_\sigma E^2} = \frac{e^2}{K_E \epsilon_\sigma} = \frac{e^2}{K_D \epsilon_s}$$
 (6)

donde e es la constante piezoeléctrica, K_E es la constante elástica de rigidez del material cuando el campo eléctrico es constante, ϵ_s es la permitividad del medio definida en condiciones de deformación constante y ϵ_{σ} la permitividad definida en condiciones de esfuerzo constante.

2 Programa de simulación

2.1 Modelo Numérico

En el presente apartado se exponen las ideas básicas en que se fundamenta la técnica numérica que se ha utilizado para obtener la simulación de la cerámica piezoeléctrica.

Las ecuaciones constitutivas –presentadas en las Ecuaciones 1 y 2– se acostumbran a expresar en cuatro formas canónicas. Para la simulación numérica resulta conveniente emplear el formato dado en las Ecuaciones 7 y 8.

$$\sigma = K_D s - h D \tag{7}$$

$$E = -hs + \beta_s D \tag{8}$$

donde h es un nuevo módulo piezoeléctrico y β_s es la impermitividad del medio o inversa de la constante dieléctrica bajo deformación unitaria constante.

En términos diferenciales el conjunto de Ecuaciones 7 y 8 se expresan como

$$d\sigma = K_D \frac{du}{dx} dt - h\Delta dD \tag{9}$$

$$dE = -h\frac{du}{dx}dt - \beta_S dD \tag{10}$$

$$du = -\frac{1}{\rho_0} \frac{d\sigma}{dx} dt \tag{11}$$

donde la Ecuación 11 es la ecuación del movimiento en forma diferencial, con ρ la densidad de la cerámica, u la velocidad y t el tiempo.

Las Ecuaciones 9–11 nos permiten, a partir de la introducción de una función $\phi(t)$ conocida, obtener el valor de todas las demás variables en pasos temporales crecientes; es decir, permiten seguir la dinámica instantánea del sistema. Para ello, se sustituyen los diferenciales por incrementos finitos (i paso temporal , j paso espacial) [5] del siguiente modo

$$\sigma_{j+1/2}^{i+1} = \sigma_{j+1/2}^{i} + \frac{K_D \Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^{i+1/2} - u_j^{i+1/2}) - h(D_{j+1/2}^{i+1} - D_{j+1/2}^{i})$$
 (12)

$$E_{j+1/2}^{i+1} = E_{j+1/2}^{i} + \frac{h\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^{i+1/2} - u_{j}^{i+1/2}) - \beta_S (D_{j+1/2}^{i+1} - D_{j+1/2}^{i})$$
(13)

$$u_j^{i+1/2} = u_j^{i-1/2} + \frac{\Delta t}{\rho_0 \Delta x} (\sigma_{j+1/2}^i - \sigma_{j-1/2}^i)$$
(14)

Resolviendo iterativamente las Ecuaciones 12-14 se obtiene el valor de las variables en el instante (i+1)-ésimo, habida cuenta de su valor previo (instante i) y de la excitación externa, dada en forma de variación del vector desplazamiento.

2.2 Entorno gráfico

La simulación ha sido implementada en MatLab, presentando un entorno gráfico semejante al que se muestra en la Figura 5.

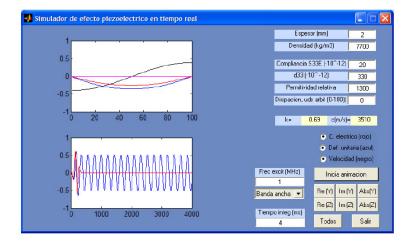


Figura 5: Panel del programa de simulación de una cerámica piezoeléctrica.

El programa tiene como valores de entrada: los parámetros conocidos de la cerámica (espesor, densidad ρ , compliancia S33E, modulo piezoeléctrico d33 y permitividad relativa $K_{33}^T = \frac{\epsilon_{\sigma}}{\epsilon_0}$, con $\epsilon_0 = 8.854 \mathrm{pF/m}$), la frecuencia de trabajo (límite máximo de frecuencia bajo estudio), el tiempo de integración (que permite aumentar la resolución de los gráficos) y dos opciones de excitación.

La opción banda ancha contiene un rango elevado de frecuencias en torno a la frecuencia central introducida, y permite obtener información de la respuesta eléctrica y mecánica en el dominio frecuencial y calcular parámetros como el factor de calidad. Por su parte, la opción un solo modo excita la cerámica a una única frecuencia y es útil para el estudio de la forma de onda que se propaga en la cerámica, si bien no es tan útil para la obtención de parámetros asociados a la respuesta del sistema en el dominio de la frecuencia. Como valores de salida el programa facilita la constante de acoplamiento electromecánico, la velocidad de propagación y la respuesta eléctrica (curvas de admitancia e impedancia en función de la frecuencia).

3 Resultados

El comportamiento del modelo se ha evaluado en numerosos casos, de los cuales se presenta -a continuación- una pequeña muestra a título ilustrativo para una cerámica PZ26 del catálogo de Ferroperm [6]. En la Tabla 1 se muestran los parámetros de la cerámica requeridos para la simulación.

Espesor $[mm]$	2
Densidad $[kg/m^3]$	7700
Compliancia $[10^{-12}m^2/N]$	20
Módulo piezoeléctrico $[10^{-12}C/N]$	330
Permitividad relativa	1300

Tabla 1: Parámetros de entrada de la cerámica PZ26.

3.1 Simulación en banda ancha

La simulación en banda ancha permite, mediante la excitación multimodo, conocer la respuesta eléctrica total de la cerámica piezoeléctrica y, por lo tanto, identificar sus frecuencias de resonancia f_n y factor de calidad Q. Para ello, se ha empleado una excitación de 5MHz con un tiempo de excitación de 10ms.

Respuesta eléctrica

Las curvas de impedancia, mostradas en la Figura 6, proporcionan el valor de las frecuencias de resonancia de la cerámica PZ26, que hacen máxima la parte real de la admitancia G_{E_T} . Para verificar los resultados obtenidos, en la Tabla 2 estas frecuencias se comparan con las frecuencias teóricas obtenidas según la Ecuación 3.

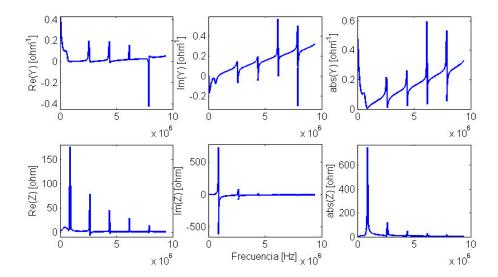


Figura 6: Respuesta en frecuencia de la cerámica PZ26. Fila superior: Curvas de admitancia (Parte real, imaginaria y módulo). Fila inferior: Curvas de impedancia (Parte real, imaginaria y módulo).

f(MHz)	Teórica (Ec. 3)	Simulada
$\mathbf{f_0}$	0.878	0.531
$\mathbf{f_1}$	2.63	2.58
$\mathbf{f_2}$	4.39	4.36
f_3	6.14	6.13

Tabla 2: Comparación de las frecuencias de resonancia obtenidas mediante la simulación y mediante la Ecuación

A partir de los datos de la Tabla 2, se observa la adecuada similitud de los resultados teóricos y los simulados en el entorno de la frecuencia de excitación, de 5MHz. La frecuencia fundamental, f_0 , de 0.87MHz, queda en el límite de la banda de frecuencias excitada por el modo de banda ancha, y por ello la diferencia entre los datos teóricos y simulados es mayor. Puede observarse que, lejos de las frecuencias propias asociadas al carácter piezoeléctrico de la cerámica, el sistema debe comportarse como un simple condensador, de modo que el valor absoluto de su admitancia debe aumentar linealmente en función de la frecuencia. Sin embargo se observa cómo, en la región de bajas frecuencias, la admitancia es inversamente proporcional a la frecuencia. Este es un claro síntoma de que esa zona de frecuencias no ha sido suficientemente excitada, y los resultados vendrán distorsionados por fuertes errores numéricos.

Efectos de la disipación en el factor de calidad

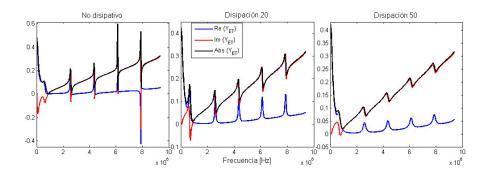


Figura 7: Efecto de la disipación en las curvas de admitancia.

La energía disipada por la cerámica al calentarse se traduce en perdidas de energía mecánica y, consecuentemente, de la energía eléctrica que activa el movimiento del sistema.

Como se observa en la Figura 7, y en los datos mostrados en la Tabla 3, al aumentar la disipación disminuyen los máximos de la admitancia eléctrica total y se distancian las frecuencias cuadrantales, aumentando el ancho de banda y disminuyendo el factor de calidad Q —obtenido según la Ecuación 5— por lo que la cerámica será menos efectiva a la frecuencia de resonancia.

	No disipativo		Disipaci	ón 20	Disipación 50		
	$f_c[MHz]$	Q	$f_c[MHz]$	Q	$f_c[MHz]$	Q	
f_0	0.57	2.96	0.67	6.9	0.67	3.14	
$\mathbf{f_1}$	2.58	49.28	2.58	26.70	2.58	13.35	
$\mathbf{f_2}$	4.35	120.97	4.35	45.05	4.35	22.55	

Tabla 3: Comparación frecuencias de resonancia obtenidas mediante la simulación y mediante la Ecuación 3.

Efecto módulo piezoeléctrico nulo

Una forma de validar el comportamiento del sistema es llevarlo al caso límite de introducir un módulo piezoeléctrico de valor nulo. En ese caso, la cerámica no se polariza, es decir, se elimina el efecto piezoeléctrico y por lo tanto no hay vibración. La cerámica se comporta como un condensador eléctrico típico.

Los resultados obtenidos, mostrados en la Figura 8, ilustran, en efecto, las curvas características de impedancia y admitancia de un sencillo condensador.

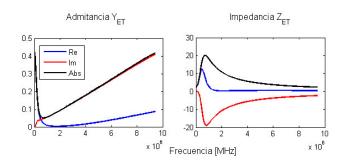


Figura 8: Curvas de impedancia y admitancia anulando el módulo piezoeléctrico.

3.2 Simulación de un solo modo

La simulación en un solo modo permite estudiar el comportamiento de la cerámica a la frecuencia de excitación. La frecuencia de resonancia mecánica es la que hace mínima la impedancia de movimiento y asegura máximos desplazamientos, por lo que la amplitud de oscilación será máxima. En verdad, la cerámica oscilará sólo a aquellas frecuencias próximas a estas frecuencias de resonancia, donde se producen máximos desplazamientos en los extremos de la cerámica y en sentido contrario (compresión y expansión). Este hecho se observa en la primera y tercera gráfica de la Figura 9 para las frecuencias 0.9MHz y 4.36MHz que son aproximadamente la $f_0 = 0.88MHz$ (correspondiente al modo de vibración $\lambda/2$) y la $f_2 = 4.39MHz(5\lambda/2)$, anteriormente calculadas en la sección 3.1. Por el contrario, cuando no se cumple la condición de resonancia y los extremos de la cerámica vibran en el mismo sentido, se obtiene que los desplazamientos son pequeños y la onda se atenúa rápidamente al finalizar la excitación, como en el caso de f = 3MHz.

En la Figura 9 se representa en rojo la función eléctrica de excitación, y en azul, la respuesta mecánica obtenida para un tiempo de integración de 4ms.

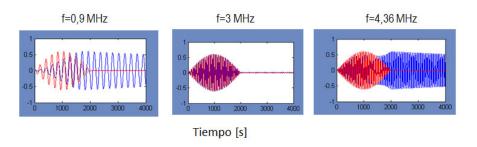


Figura 9: Amplitud de oscilación con la frecuencia.

Efecto de la disipación

La disipación en el caso de excitación a una frecuencia de resonancia (f = 2.58MHz) se traduce en una atenuación de la vibración (señal azul) tras finalizar la excitación, como se observa en la Figura 10.

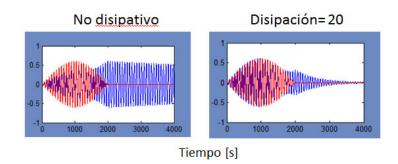


Figura 10: Variación de la amplitud de oscilación con la disipación.

3.3 Velocidad del sonido y factor de acoplamiento en la cerámica

El programa diseñado proporciona también el valor de la velocidad del sonido c y del factor de acoplamiento k^2 , obtenidos a partir de expresiones analíticas (Ecuaciones 15–18) cuyas variables son los datos de entrada, compliancia S33E, densidad ρ , constante dieléctrica ϵ_{σ} y módulo piezoeléctrico d33.

$$K_E = \frac{1}{S33E} \tag{15}$$

$$K_D = \frac{\epsilon_\sigma}{\epsilon_\sigma S33E - d33^2} \tag{16}$$

$$c = \sqrt{\frac{K_D}{\rho}} = \sqrt{\frac{\epsilon_{\sigma}}{\rho(\epsilon_{\sigma} S33E - d33^2)}}$$
 (17)

$$k^2 = 1 - \frac{K_E}{K_D} \tag{18}$$

A partir de la Ecuaciones 17 y 18, es factible demostrar matemáticamente la influencia de la variación de los parámetros de entrada en la velocidad y en el factor de acoplamiento. Los resultados obtenidos de la simulación se recogen en la Tabla 4.

Respecto a la velocidad del sonido en la cerámica, según la Ecuación 17, se obtiene que es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la densidad, como ocurre en cualquier material sólido, y guarda una relación indirecta con la compliancia que al aumentar, aumenta el denominador, y directa con el módulo piezoeléctrico d33, que al aumentar, disminuye el denominador.

Por su parte, para justificar la influencia en el factor de acoplamiento k^2 , es mejor remitirnos a la Ecuación 6, que puede reescribirse en función de la constante piezoeléctrica $e=K_Ed33$ como

$$k^{2} = \frac{d33^{2}K_{E}^{2}}{K_{E}\epsilon_{\sigma}} = \frac{d33^{2}K_{E}}{\epsilon_{\sigma}} = \frac{d33^{2}}{\epsilon_{\sigma}S33E}$$
 (19)

	nsidad		Compliancia			Compliancia Piezoelectricidad			
$\rho[{ m kg/m^3}]$	c[m/s]	k ²	${ m S33E}[10^{-12}{ m m}^2/{ m N}]$	c[m/s]	k ²	$ m d33[10^{-12}C/N]$	c[m/s]	k^2	
3850	4970	0.48	10	15710	0.94	165	2710	0.12	
7700	3510	0.48	20	3510	0.48	330	3510	0.48	
15400	2480	0.48	40	2060	0.31	400	4620	0.69	

Tabla 4: Dependencia de la velocidad y del factor de acoplamiento respecto a la variación de los parámetros de entrada ρ , S33E y d33.

El factor de acoplamiento k^2 es directamente proporcional al cuadrado de la piezoelectricidad e inversamente proporcional a la compliancia, lo que es lógico teniendo en cuenta que es una relación entre la energía que se transforma en producir campo eléctrico y la energía total (deformación más eléctrica). Cuanto mayor es d33, más eficiente será la cerámica, mientras que cuanto mayor sea S33E, más energía empleará en la deformación y menos se transformará en energía eléctrica.

4 Conclusiones

Como se ha comprobado en la sección 3, el modelo matemático desarrollado en diferencias finitas permite caracterizar el comportamiento de la cerámica piezoeléctrica.

Los resultados obtenidos muestran concordancia entre los resultados teóricos y numéricos. Es de especial interés el caso de la frecuencia de resonancia y del factor de calidad, que no se obtienen mediante expresiones analíticas a partir de los parámetros de entrada, como sí ocurre con el factor de acoplamiento o la velocidad del sonido. Sus valores se extraen de los resultados numéricos, en el dominio de la frecuencia, procedentes de la simulación efectuada en el dominio del tiempo. La buena adecuación de estos resultados numéricos al valor analítico esperado, mostrados en la sección 3.1, apunta en la dirección de un aceptable comportamiento del modelo.

La interfaz implementada constituye por lo tanto una buena herramienta didáctica que facilita la compresión de los distintos mecanismos que intervienen en la respuesta eléctrica y mecánica de una cerámica piezoeléctrica.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Universitat Politècnica de València bajo los proyectos PAID-06-10-002-295 y PAID-05-11-002-340

@MSEL 141 ISSN 1988-3145

Referencias

- [1] W. G. Hankel. Uber die aktinound piezoelektrischen eigenschaften des bergkrystalles und ihre beziehung zu den thermoelektrischen. Abh. Sächs, 12:457 (1881).
- [2] P. Curie, K. Curie. Développement, par pression, de l'électricité polaire dans les cristaux hémièdres à faces inclinées. Comptes Rendus, 91:294–295, (1880).
- [3] A. Arnau. Piezoelectric Transducers and Applications. Springer, 2004.
- [4] T. F. Hueter, R. H. Bolt. Sonics. John Wiley and Sons, Inc, New York, (1955).
- [5] M. Ferri, F. Camarena, J. Redondo, R. Picó, M. R. Avis. Explicit finite-difference time-domain scheme for the simulation of 1-3 piezoelectric effect axisymmetrical configurations. Wave Motion, 49(6):569–584, (2012).
- [6] Ferroperm Ltd., Hejreskovvej 18A, DK-3490 Kvistgard, Denmark. Ferrop- erm Piezoceramics. High Quality Components and materials for the electronic industry, (2003).

144 Referencias