



# INŽENÝRSKÁ MECHANIKA 2005

NÁRODNÍ KONFERENCE

s mezinárodní účastí

Svratka, Česká republika, 9. - 12. května 2005

---

## NUMERICAL SIMULATIONS OF COMPOSED STRUCTURES WITH PIEZOELEMENTS

J. Novák\*, A. Potěšil\*

**Summary:** *The aim of the paper is the application of the finite element method in modelling of the problems of piezoelectric and ferroelectric structures. Model is applied in modelling of spatial distributions of electric field in analysis of properties in piezoelectric transducer dutiny and after its polarisation*

### 1. Úvod

Vzhledem k výjimečným vlastnostem feroelektrických a piezoelektrických látek roste zájem o jejich využití v reálných aplikacích a stává se stále aktuálnějším další výzkum jejich vlastností. Z aplikací můžeme jmenovat například využití v oblasti paměťových médií, kdy při zvyšování kapacity velkou roli hraje jejich fyzická velikost, piezoelektrické měniče z piezoelektrických keramik užívané v řadě mechatronických systémů nebo laditelné obvodové prvky.

Praktické nasazení piezoelektrických měničů je omezeno technologickými možnostmi jejich výroby. Při polarizaci měničů, která je důležitá pro jejich funkci, může vlivem změn v strukturní mřížce docházet ke vzniku mechanických defektů.

Analýza všech uvedených jevů za použití prostředků současné výpočetní techniky a numerických metod je velmi efektivním nástrojem ke zlepšení parametrů piezoelektrických a feroelektrických prvků. Oblasti zkoumání těchto vlastností za pomoci modelů byla věnována pozornost již před několika desítkami let, jak je patrné např. z práce Link (1961). V této práci je publikován model popisující rozložení elektrického pole v okolí devadesátistupňové doménové stěny. Principem modelu je nahrazení domén a jejich rozhraní sítí vodičů s vodivostí rozdílnou ve dvou na sebe kolmých směrech.

Podobný model je uveden i v Omura et al. (1992), kde je ale již na základě energetických úvah popsán princip přepolarizace domén. V práci Nesterov et al. (2002) je uveden model pohybu doménových stěn v PZT keramikách ve slabém elektrickém poli. Tento je založen na popisu jevu obyčejnou diferenciální rovnicí - pohybovou rovnicí. Jsou též samozřejmě publikovány práce, viz Rep et al. (1999), ve kterých je feroelektrikum popsáno pomocí svého náhradního elektrického obvodu složeného z diskrétních R, L, C prvků.

---

\* Ing. Josef Novák, PhD., Doc. Ing. Antonín Potěšil, CSc.: Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií, Technická univerzita v Liberci, Hálkova 6, 461 16 Liberec, tel.: +420 485 353 470, fax: +420-485 353 112, e-mail: [josef.novak@vslib.cz](mailto:josef.novak@vslib.cz), [antonin.potesil@vslib.cz](mailto:antonin.potesil@vslib.cz).

S rozvojem možností výpočetní techniky byly v posledních letech publikovány modely, které již využívají metodu konečných diferencí, např. Ricinchi et al. (2003), či metodu konečných prvků, Steinkopff (1999), Kovalev et al. (1998). V těchto pracech je pro výpočet užito komerčního MKP systému ANSYS, který má implementovány základní moduly pro práci s piezoelektrickými strukturami. V naší práci ukážeme aplikaci, která je řešena vlastním softwarovým prostředkem na bázi metody konečných prvků.

## 2. Fyzikální popis

Pro jednoduchost zde pouze uvedeme základní rovnice popisující piezoelektrické kontinuum, nebudeme se zabývat odvozením slabého řešení problému a jeho diskretizací metodou konečných prvků. Matematicko-fyzikální popis piezoelektrického kontinua zahrnuje rovnici rovnováhy sil (1), Maxwellovu rovnici (Gaussův zákon) (2) a piezoelektrické stavové rovnice (3), (4):

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (2)$$

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} - e_{ijk} E_k, \quad (3)$$

$$D_k = e_{kij} S_{ij} + \varepsilon_{kj} E_j, \quad (4)$$

kde  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{c}$ ,  $\mathbf{e}$  a  $\boldsymbol{\varepsilon}$  jsou tenzory napětí, vektor elektrické indukce, tenzor deformace, vektor elektrického pole, tenzor elastických modulů, piezoelektrických koeficientů a permitivity. Piezoelektrické stavové rovnice popisují interakci mezi elastickými a elektrickými vlastnostmi systému.

Vzhledem k symetrii materiálových tenzorů je můžeme psát ve formě symetrických matic. Pro PZT keramiku mají následující tvar:

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}.$$

V těchto maticích jsou pouze některé prvky nezávislé. Vzhledem k anizotropii piezoelektrických materiálů, která je podmíněna i směrem jejich polarizace je zpravidla nutné provést transformaci materiálových tenzorů do požadovaného souřadného systému.

### 3. Piezoelektrické měniče

Piezoelektrické měniče jsou důležitými součástkami moderních elektrických a elektronických zařízení. Vyrábějí se z piezoelektrických keramik. Přesto, že je materiál měniče piezoelektrický, každé zrno materiálu je po vyrobení měniče polarizováno jiným směrem. Proto na měniči nelze pozorovat makroskopické piezoelektrické vlastnosti. Piezoelektrické vlastnosti získají měniče polarizací, při které dojde k jednotné orientaci zrn keramiky a tím i ke vzniku makroskopicky pozorovatelných piezoelektrických vlastností měniče.

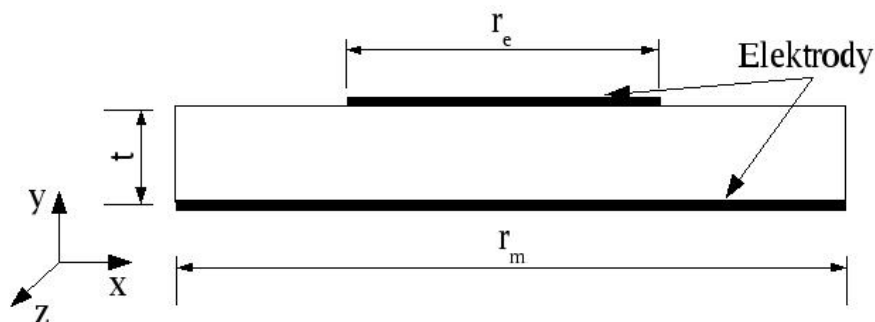
Piezoelektrické měniče se používají například jako elektroakustické měniče. Tyto měniče mají obvykle jednoduchý geometrický tvar, např. kvádr, válec. Na měniči jsou zpravidla z obou stran elektrody, které slouží jednak jako příklady elektrického napětí při vlastní činnosti měniče, jednak jako elektrody, kterými se přivádí elektrické napětí při polarizaci měniče.

V důsledku nehomogenního rozložení elektrického pole v piezoelektrických měničích dochází při jejich polarizaci vlivem změny strukturní mřížky materiálu ke vzniku elastických deformací a napětí. Tato elastická napětí vedou k mechanickým defektům v měniči.

Eliminace nejvýraznějších nehomogenit v rozložení elektrického pole při polarizaci povede k rovnoměrnosti polarizaci a k rovnoměrnějšímu rozložení elastických napětí, k menšímu riziku vzniku strukturních defektů. Jedná se především o potlačení složek elektrického pole v nežádoucích směrech polarizace měniče. Analýza rozložení elektrického pole v měniči při jeho polarizaci je prvním nutným krokem k modelu, který bude poskytovat údaje o elastických poměrech v měniči.

### 4. Zadání úlohy

Úkolem je analyzovat rozložení elektrického pole v piezoelektrickém měniči válcového tvaru. U tohoto měniče dolní elektroda pokrývá celou jeho podstavu, průměr horní elektrody je však menší než průměr měniče. Řez měničem je uveden na obr. 1.

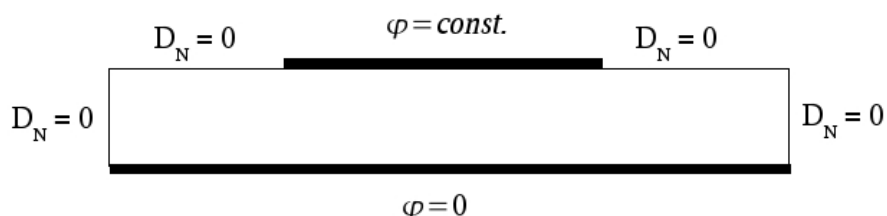


Obr. 1 – Řez analyzovaným měničem.  
Znázorněny jsou nejdůležitější rozměry a umístění elektrod.

Horní elektroda je umístěna symetricky k ose souměrnosti měniče. Před započítím polarizace má vzhledem k náhodné polarizaci jednotlivých zrn materiálu měnič téměř izotropní vlastnosti. Ty se polarizací změny na vlastnosti anizotropní. My budeme v našem modelu pro zjednodušení uvažovat vlastnosti izotropní i v průběhu polarizace.

## 5. Postup řešení

Za vyšetřovanou oblast považován pouze vlastní řez měničem, při zadání příslušných okrajových podmínek (OKP). Na elektrodách jsou zadány konstantní elektrické potenciály. Rozdíl potenciálů na elektrodách je roven  $E = 3$  kV. Na zbývajících částech hranice měniče jsou definovány homogenní Neumannovy okrajové podmínky. Jsou tedy definovány nulové složky vektoru elektrické indukce k hranici měniče. Uvedené OKP jsou znázorněny na obr. 2.



Obr. 2. Schéma zadání okrajových podmínek na hranici měniče.

Tento předpoklad o vlivu vnějšího okolí je z hlediska tvorby sítě konečných prvků a výpočetní náročnosti výhodný, protože v modelu je obsažena pouze oblast reprezentující samotný měnič. Díky tomu klesají nároky jak na kvalitu sítě konečných prvků tak, na vlastnosti užitého řešiče algebraických systémů. Uvedený postup může při nízkých permitivitách prostředí zkreslovat skutečný vliv okolí na rozložení elektrického pole. V našem případě je vzhledem k vysoké permitivitě měniče tento způsob postačující.

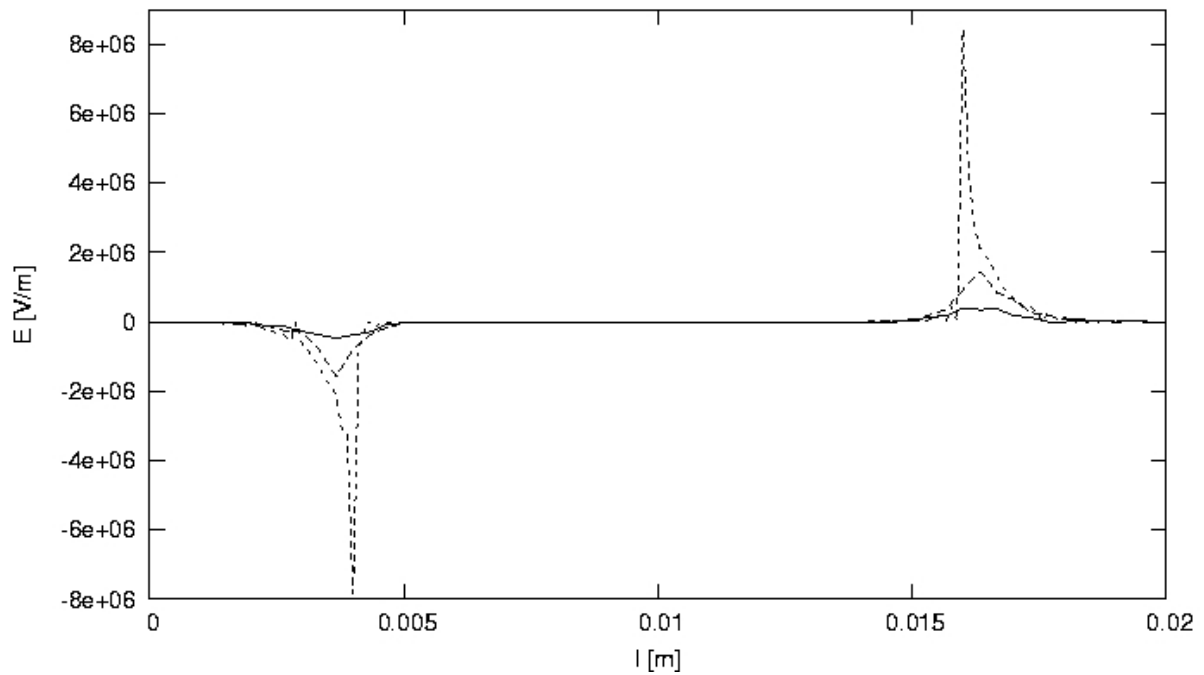
Dalším krokem k řešení je tvorba sítě konečných prvků. Pro dobrou aproximaci výsledků je nutné generovat jemnou síť v oblastech, kde se očekávají velké gradienty počítaných veličin. Velmi často se používá opakované tvorby sítě, která je založena na kontrolním výpočtu na hrubé síti. Tohoto postupu bylo užito i v případě, kdy byla zjmeněna oblast v okolí horní elektrody. Pro tvorbu byl užit volně šiřitelný generátor GMSH.

## 6. Výsledky a jejich diskuse

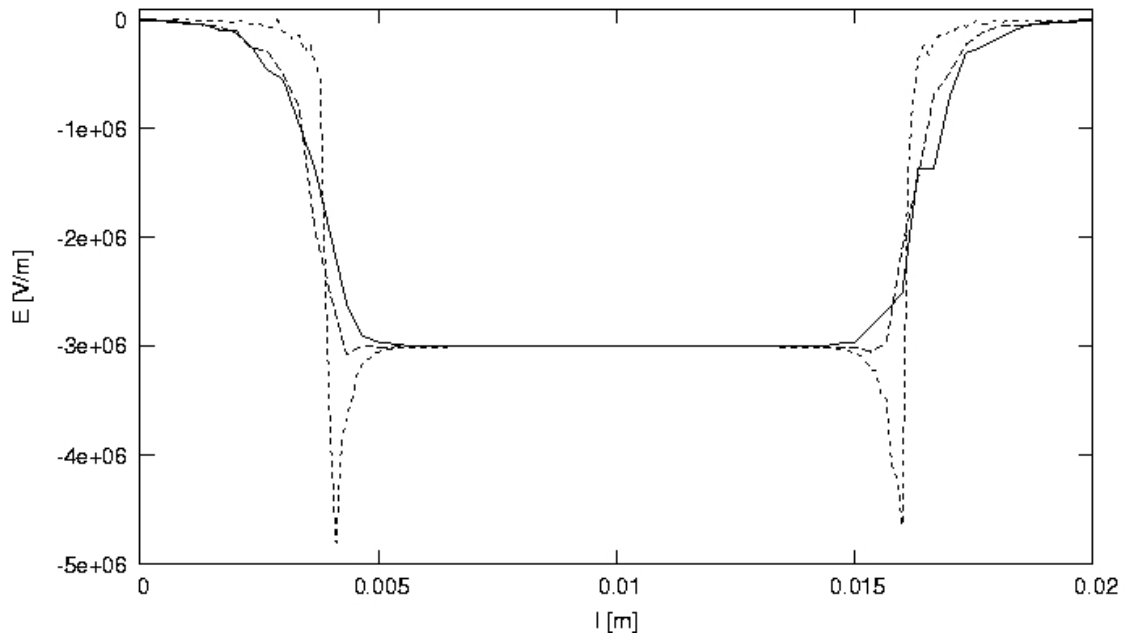
V grafu na obr. 3 je znázorněna složka elektrického pole  $E$  ve směru osy  $x$  v řezech vedených podél dolní elektrody, v polovině tloušťky měniče a podél horního okraje měniče.

Vzhledem k tomu, že elektrické pole je na každém konečném prvku počítáno v těžišti, nelze (vzhledem k tomu, že prvky jsou čtyřstěny), zobrazit pole přímo na elektrodách či okrajích měniče. Uvedené platí i pro graf na obrázku 4, kde je zobrazena složka pole ve směru osy  $y$ .

Z grafů je patrné, že u horního okraje v okolí hrany horní elektrody bude pravděpodobně docházet k polarizaci ve vodorovném směru, protože složka  $E_x$  má vyšší amplitudu než složka  $E_y$ . Zároveň je dodržena podmínka velikosti pole vyššího než koerzivní pole  $E_c$ . K polarizaci ve směru působení aplikovaného pole, ve směru svislém dojde v celé oblasti pod horní elektrodou a v blízkém okolí.



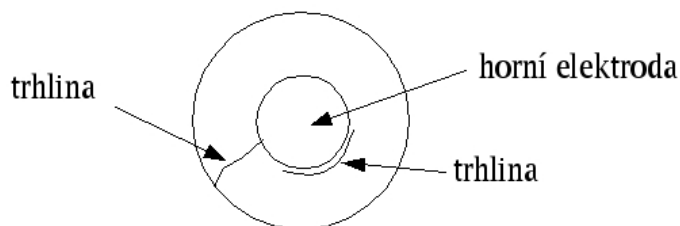
Obr. 3. Rozložení vodorovné složky elektrického pole. Plná čára podél dolní elektrody, tečkovaná v polovině tloušťky, dvojitě tečkovaná podél horního okraje měniče.



Obr. 4. Rozložení svislé složky elektrického pole. Plná čára podél dolní elektrody, tečkovaná v polovině tloušťky, dvojitě tečkovaná podél horního okraje měniče.

Z prezentovaných výsledků lze vyvodit závěr, že k největším mechanickým napětím a deformacím bude docházet v prstenci, který bude mít průměr zhruba stejný jako je průměr horní elektrody v celé tloušťce měniče. Napětí jsou způsobena jak polarizací ve vodorovném směru, tak nízkou polarizací ve svislém směru mimo oblast ležící pod horní elektrodou.

Tato napětí lze přirovnat k působení hydrostatického tlaku tekutiny na stěnu tlakové nádoby ve tvaru válce. I důsledky tohoto působení budou ekvivalentní. Dojde pravděpodobně k roztržení měniče, které je schématicky znázorněno na obr. 5.



Obr. 5. Schématické naznačení míst, ve kterých může dojít k mechanickým defektům v měniči.

Jde však o pouhý odhad důsledků nehomogenity elektrického pole. K podrobnější a přesnější analýze je nutné model doplnit o část, která bude popisovat mechanické vlastnosti uvažované struktury v důsledku působení elektrického pole.

## 7. Závěr

Na základě získaných výsledků můžeme provést návrh optimalizace umístění elektrod za účelem eliminace napětí, která způsobují praskání měničů při jejich výrobě. Kritériem by tedy byla minimalizace sumy napětí přes celou oblast měniče. Tento úkol ale již přesahuje rámec této práce a proto ho nebudeme v tuto chvíli diskutovat. Přesto však již prezentované výsledky jsou jistým vodítkem k návrhu nového konstrukčního uspořádání měniče.

Změna polarizace, resp. spontánní deformace je přímo ovlivněna elektrickým polem, které na materiál působí. Čím vyšším elektrickým polem na materiál působíme, tím více jeho zrn se přepolarizuje do směru působícího elektrického pole a bude indukováno větší elastické napětí. Tento jev svými důsledky připomíná jev piezoelektrický, tedy že na základě změny elektrické polarizace dojde ke změně elastického napětí. Vliv tohoto jevu na elastická napětí v materiálu je však o několik řádů vyšší, než u jevu piezoelektrického, jak je ukázáno např. v Kroupa (1988).

Uvedených faktů, tedy ekvivalence s jevem piezoelektrickým a kvantitativní převahy nad jevem piezoelektrickým, lze využít při konstrukci modelu, který bude lépe popisovat děje odehrávající se v piezoelektrickém měniči při jeho polarizaci.

## Literatura

- G.L. Link, Motion of c Domain Centers in BaTiO<sub>3</sub>, J. Appl. Phys. 32 (1961) 2566.a
- M. Omura, H. Adachi, Y. Ishibashi, Simulation of Polarization Reversals by a Two-Dimensional Lattice Model, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 31, pp. 3238-3240, September 1992.
- V.N. Nesterov, A.V. Shilnikov, The Computer Analyses of Dynamics of Domain Boundaries in Ferroelectrics - Ferroelastics, Ferroelectrics, Vol. 265, pp. 153-159, 2002.
- D.B.A. Rep, M.W.J. Prins, Equivalent-circuit modelling of ferroelectric switching devices, J. Appl. Phys., Vol. 85, pp. 7923-7930, 1999.

Ricinschi D., Ishibashi Y., Okuyama M., Electrostatic Model for the Dielectric Permittivity of Ferroelectric Films with 90° Domain Structures, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 42, pp. 6183 - 6187 (2003).

Th. Steinkopff, Micromechanical Modeling of Ferroelasticity and Ferroelectricity and Finite-Element Results for Nonlinear Piezoelectric Applications, *Ferroelectrics*, Vol. 222, pp. 126-129, 1999.

S. Kovalev, M. Sakai, Numerical Modeling of Electro-Elastic Field in Ferroelectric Crystal Containing 90° Twin Boundary, *Acta mater.*, Vol. 46, pp. 3015-3026, 1998.

F. Kroupa, K. Nejezchleb, I. Saxl, Anisotropy of Internal Stresses in Poled PZT Ceramics, *Ferroelectrics*, 1988, Vol. 88, pp. 123-137.