Titulo: Predicción de las propiedades efectivas piezoeléctricas de materiales microinhomogéneo.

Autores: Lic. Aymara Martínez Aragón[1]
Msc. Maria del Carmen Rivalta[2]
Dr. Reinaldo Rodríguez Ramos[3].

Institución: [1]Universidad de Matanzas y [2, 3]Universidad de La Habana.

Temática: Ecuaciones Diferenciales.

Resumen:

Se calculan las propiedades efectivas de materiales compuestos piezoeléctricos cuyas fases son una matriz homogénea con inclusiones uniformemente distribuidas en la matriz. Los componentes de estos materiales son considerados idealmente elásticos y exhiben propiedades piezoeléctricas. Se emplea una variante del esquema autoconsistente, un método de campo efectivo (MCE) para calcular las propiedades efectivas dieléctricas, piezoeléctricas y elásticas para este tipo de materiales. Primero se resuelve el problema para un medio homogéneo con una inclusión aislada. Se encuentra una solución en forma analítica cerrada para una inclusión elipsoidal y un campo externo constante. Esta solución es usada por el MCE para derivar el operador efectivo piezoeléctrico para compuestos que contienen inclusiones elipsoidales aleatoriamente distribuidas. Son obtenidas las formulas explicitas para las constantes piezoeléctricas de estos compuestos reforzados por inclusiones elipsoidales.

En años recientes la aplicación de los materiales piezoeléctricos a tenido un dramático incremento alimentado por sus múltiples usos en materiales compuestos y estructuras inteligentes. Además, estos materiales presentan nuevas propiedades producto como es el acoplamiento electroelástico el cual no esta presente en sus componentes. Son empleados en la construcción naval y aérea, en ultrasonidos médicos, sensores, hidrófonos y en estructuras ingenieriles entre otras.

1. Método autoconsistente.

Consideremos un material piezoeléctrico homogéneo. Las relaciones constitutivas de la piezoelectricidad para estos materiales son:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= c_{ijkl}\varepsilon_{kl} - e_{ijk}E_k \\ D_i &= e^t_{ikl}\varepsilon_{kl} + d_{ik}E_k \end{aligned} \qquad (1.1)$$

Donde σ es el tensor de tensión, ε es el tensor de deformación, E y D son los vectores del campo eléctrico y del desplazamiento eléctrico, c es el tensor

[1]amamrp@yahoo.com
[2]isabel@matcom.uh.cu
[3]rrr@matcom.uh.cu

modulo elástico, d es el tensor dieléctrico (permeabilidad) y e es el tensor piezoeléctrico que caracteriza el efecto de acoplamiento electroelástico.
Las relaciones anteriores se pueden escribir:

$$J = LF,\ J = \begin{Vmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{D} \end{Vmatrix},\ L = \begin{Vmatrix} \boldsymbol{c} & -\boldsymbol{e} \\ \boldsymbol{e}^t & \boldsymbol{d} \end{Vmatrix},\ F = \begin{Vmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{E} \end{Vmatrix} \qquad (1.2)$$

o

$$F = MJ,\ M = \begin{Vmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{g} \\ -\boldsymbol{g}^t & \boldsymbol{k} \end{Vmatrix}, \qquad (1.3)$$

donde $L = M^{-1}$ y S es el rendimiento para la constante del desplazamiento eléctrico, k denota la inversa del tensor de la permeabilidad para la constante de la tensión mecánica.
El MCE se basa en la solución del problema para una partícula por lo que tomemos un medio infinito piezoactivo con características piezoeléctricas L^0, contenida en una región cerrada V (la inclusión) con propiedades piezoeléctricas L. Ahora, tenemos que el sistema de ecuaciones de equilibrio elástico y eléctrico para la teoría del acoplamiento electroelásticos para un medio heterogéneo son:

$$\nabla\left[\mathbf{L(x)\nabla f(x)}\right] = \mathbf{0}, \quad \mathbf{f(x)} = \begin{Vmatrix} \mathbf{u_i(x)} \\ -\boldsymbol{\varphi}\mathbf{(x)} \end{Vmatrix} \qquad (1.4)$$

Aquí $u_i(x)$ es el vector de desplazamiento elástico para la posición x, $\boldsymbol{\varphi}\mathbf{(x)}$ es el potencial eléctrico y $\nabla_i = \dfrac{\partial}{\partial \mathbf{x_i}}$.
Para el presente problema se puede expresar el operador L(x) de la de forma:

$$L(x) = L^0 + L^1 V(x),\ L^1 = L - L^0 \qquad (1.5)$$

Donde V(x) es la función característica de la región V. Entonces el problema de hallar la solución $u_i(x)$ y $\boldsymbol{\varphi}\mathbf{(x)}$ se reduce al sistema de ecuaciones integrales, el cual es equivalente al sistema de ecuaciones diferenciales inicial (1.4):

$$F(x) = F^0(x) + \int_V \mathbf{P(x-x')L^1F(x')dx'}, \quad P(x) = DG(x)D, \quad D = \begin{Vmatrix} \mathbf{def} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{grad} \end{Vmatrix} \qquad (1.6)$$

Aquí $F^0(x)$ es el vector de los campos externos elásticos y eléctricos, el cual se supone en el medio fuera de la inclusión. Estos campos satisfacen las ecuaciones:

$$\nabla \mathbf{L^0F^0(x) = 0} \qquad (1.7)$$

Y se toman como las condiciones en el infinito. El operador G(x) en (1.6) comprende la función de Green del operador diferencial del acoplamiento electroelástico, el cual satisface la ecuación:

$$\nabla L^0 \nabla G(x) = \bar{I}\delta(x), \quad \bar{I} = \begin{Vmatrix} -\delta_{ij} & 0 \\ 0 & I \end{Vmatrix} \qquad (1.8)$$

Donde $\delta(x)$ es la función de Dirac.

Para $x \in V$ el sistema de ecuaciones (1.6) genera los campos $\varepsilon(x)$ y E(x) en la inclusión, por consiguiente los campos fuera de V son determinados unívocamente.

Tomemos la inclusión con forma elipsoidal con semiejes a_1, a_2 y a_3. Entonces el dominio V es definido por las relaciones $x_i(a^{-2})_{ij} x_j \leq 1$, $a_{ij} = a_i \delta_{ij}$ (no se suma con respecto a i). En este caso se puede ver que el operador integral con el núcleo P tiene las propiedades de conservatividad polinomial. En particular, tomemos los campos externos homogéneos en el dominio V (F^0 = cte) y tomemos el dominio con forma esférica de radio a y centrada en el origen. Si F = cte en V, el problema se reduce a la evaluación de una integral, la integral bajo el dominio V la cual es igual al área de intersección del plano $\xi \cdot \mathbf{x} = \mathbf{p}$ con la esfera V, que es $\pi^2(a^2 - p^2)$ si $|p| \leq a$ y 0 si $p > a$. Para $x \in V$, la segunda derivada de esta integral es igual a -2π y su parte derecha es una constante. Similares resultados podemos obtener para elipsoides, lo cual por una transformación de coordenadas $t_i = a_{ij}^{-1} x_j$ se lleva a la esfera unidad.

Entonces, para el campo externo $F^0(x)$ que es homogéneo en V, la ecuación integral (1.6) se transforma en una ecuación algebraica:

$$F = F^0 - P^0 L^1 F \qquad (1.9)$$

Resolviéndola para F podemos expresar los campos de deformación ε y eléctrico E en función de los campos externos ε^0 y E^0:

$$F = AF^0, \quad A = (I + P^0 L^1)^{-1}, \quad I = \begin{Vmatrix} I_{ijkl} & 0 \\ 0 & \delta_{ik} \end{Vmatrix}, \quad I_{ijkl} = \delta_{i(k}\delta_{i)j} \qquad (1.10)$$

2. Propiedades piezoeléctricas efectivas de un medio con un grupo de inclusiones aleatorias.

Ahora, examinando un medio piezoeléctrico infinito con propiedades L^0 que contiene un grupo de inclusiones homogéneas distribuidas aleatoriamente y que ocupan un sistema de regiones aisladas V_k con funciones características $V_k(x)$,

k = 1,2,…El sistema de ecuaciones para los campos de deformación $\varepsilon(x)$ y eléctrico E(x) en un medio con inhomogeneidades puede escribirse de forma similar a (1.6):

$$F(x) = F^0(x) + \int_V P(x - x')L^1(x')F(x')V(x')dx' \qquad (1.11)$$

Aquí V(x) denota la función característica de la región $V = \Sigma_k V_k$, ocupado por las inclusiones, $L^1(x)$ es una función que coincide con los valores constantes espaciales $L^1 = L^1(w_k)$ donde $x \in V_k$ (w_k es una parte del parámetro geométrico

que caracteriza la orientación del eje anisotrópico principal del k-ésimo elipsoide).
Para resolver el problema homogenizado y para desarrollar el sistema microscópico de las ecuaciones de acoplamiento electroelástico usamos que la inclusiones son tomadas como regiones aisladas en un medio homogéneo- la matriz del compuesto. La presencia de inclusiones alrededor tiene en cuenta por la introducción de un campo externo efectivo actuando sobre la inclusión. Teniendo en cuenta la forma tradicional del MCE el campo efectivo es tomado arbitrario y una técnica especial es usada para calcular estos momentos estadísticos.
Realizándose algunas operaciones se llega a que el campo promedio $\langle \mathbf{F(x)} \rangle$ para un punto arbitrario de un material compuesto puede expresarse por el momento de campo efectivo $T^*(x')$ de la siguiente forma:

$$\langle \mathbf{F(x)} \rangle = \mathbf{F}^0(\mathbf{x}) + \int \mathbf{P}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\mathbf{T}^*(\mathbf{x}')d\mathbf{x}' \qquad (1.12)$$

Luego se halla una expresión para el momento de campo efectivo obteniéndose la expresión:

$$\mathbf{T}^*(\mathbf{x}) = (\mathbf{I} - \langle \mathbf{L}^A(\mathbf{x})\mathbf{V}(\mathbf{x})\mathbf{P}_\omega^\phi(\mathbf{x})\rangle)^{-1}\overline{\mathbf{L}}^A\langle \mathbf{F(x)}\rangle \qquad (1.13)$$

Donde $\mathbf{L}^A = \mathbf{L}^1(\mathbf{x})\mathbf{A}(\mathbf{x})$, $\overline{\mathbf{L}}^A = \mathbf{n}_0\langle \upsilon \mathbf{L}^A(\mathbf{a},\omega)\rangle$ aquí n_0 es la concentración numérica de las inclusiones y υ es el volumen de una inclusión típica,

$$\mathbf{P}_\omega^\phi = -\int \mathbf{P}(\mathbf{x})(1-\Psi_\omega)d\mathbf{x}$$

Ψ_ω esta función caracteriza la densidad de inhomogeneidad distribuida alrededor de una inclusión típica de orientación ω.

3. Evaluación para inclusiones transversalmente isotropicas con forma esferoidal en una matriz isotrópica.

Vayamos ahora a la evaluación de la teoría general para inclusiones que pueden describirse como esferoides con semiejes $\mathbf{a_1 = a_2 = a}$ **y** $\mathbf{a_3}$ correspondiente al sistema de coordenadas rectangulares $\mathbf{(x_1, x_2, x_3)}$**.** Además, asumiendo que la matriz tiene propiedades isotrópicas con constantes de Lamé λ_0, μ_0 y coeficiente dieléctrico $\mathbf{d_0}$**.**
Tomando las inclusiones con simetría hexagonal 6mm con eje de simetría a lo largo del eje $\mathbf{x_3}$**.** Se calcula el operador **P**. Entonces los tensores **C, e** y **d** se descomponen de acuerdo a un tensor base especial:

$$\mathbf{C = kT^2 + 2m\,(T^1 - ½\,T^2) + l(T^3 + T^4) + 4\mu\,T^5 + nT^6,}$$
$$\mathbf{e = e_1U^1 + e_2U^2 + e_3U^3,\ \ d = d_1t^1 + d_2t^2} \qquad (1.14)$$

Aquí **k, m, l,** μ **, n** son cinco módulos elásticos independientes del medio transversalmente isotrópico, $\mathbf{e_1, e_2, e_3}$ son tres constantes piezoeléctricas, $\mathbf{d_1}$,

$\mathbf{d_2}$ son dos coeficientes dieléctricos. Los coeficientes de expansión en (1.14) se pueden expresar por vía de los componentes comunes de C, e y d de la siguiente manera:

$$\mathbf{k = ½ (C_{11} + C_{12}),\quad m = ½ (C_{11} - C_{12}),\quad l = C_{13},\quad \mu = C_{44},\quad n = C_{33},}$$
$$\mathbf{e_1 = e_{31},\quad e_2 = e_{15},\quad e_3 = e_{33},\quad d_1 = d_{33},\quad d_1 = d_{11} = d_{33}}$$

Luego se calculan las componentes de **A** y $\mathbf{L^A}$. Para simplificar asumamos que todas las inclusiones son homogéneamente e isotrópicamente distribuidas en la matriz y tienen idénticas propiedades piezoeléctricas, volumen υ, y radio aspecto a/a_3. Entonces solo resta promediar bajo la orientación aleatoria de las inclusiones en la parte derecha de la fórmula (1.13).
Tenemos que considerar dos casos límites.

3.1. Orientación aleatoria de las inclusiones.

La orientación de inclusiones esferoidales transversalmente isotropicas esta determinada unívocamente por la orientación del vector m. Si esta orientación es aleatoria entonces las bases $\mathbf{T^i}$, $\mathbf{U^j}$ y $\mathbf{t^k}$ son también aleatoria. En el caso de una distribución homogénea de la orientación de las inclusiones (estadísticamente isotrópico) los promedios de los tensores anteriores son calculados.
Podemos tomar la forma de la correlación hueco como un esferoide con un radio aspecto a/a_3 coincidiendo con la de la inclusión. Entonces tenemos que el operador $\mathbf{P^{\phi}_{\omega} = P^0}$. Luego promediando el operador $\mathbf{L^A}$ obtenemos a $\overline{\mathbf{L}}^{\mathbf{A}}$ con $\mathbf{c = n_0 \upsilon}$ como fracción volumétrica da las inclusiones.
El material compuesto es microscópicamente isotrópico y sus dos módulos elásticos efectivos (volumen $\mathbf{K^*}$ y cizalladura μ^*) y el coeficiente dieléctrico d^* son determinados por las expresiones:

$$\mathbf{K^* = K_0 + c\overline{K}_A(1 - 3cB_K)^{-1},\quad \mu^* = \mu_0 + c\overline{\mu}_A(1 - 2cB_\mu)^{-1},\quad d^* = d_0 + c\overline{d}_A(1 - cb)^{-1}}$$

Con $\mathbf{B_k = \frac{1}{9}\left[4(2P_1 + P_3)k_A + 2(2P_1 + 3P_3 + P_6)l_A + (2P_3 + P_6)n_A\right],}$

$$\mathbf{B_\mu = \frac{1}{15}\left[2(P_1 - P_3)k_A + 6P_2 m_A + (3P_3 - 2P_1 - P_6)l_A + 3P_5\mu_A(P_6 - P_3)n_A\right],}$$

$$\mathbf{b = \frac{1}{3}(p_1 d_1^A + 2p_2 d_2^A)}$$

Aquí $\mathbf{K_0 = \lambda_0 + \frac{2}{3}\mu_0}$ es el modulo elástico de la matriz y los términos que aparecen con subíndice **A** son las componentes de $\mathbf{L^A}$ y los que además tienen la barra son los componentes de $\overline{\mathbf{L}}^{\mathbf{A}}$.

<u>3.2. Inclusiones esferoidales orientadas unidireccionalmente.</u>

Consideremos un segundo caso especial donde las inclusiones esferoidales idénticas tienen posición aleatoria pero orientación idéntica (paralelas). En este caso la expresión general para las características efectivas electroelásticas del compuesto son:

$$L^* = L^0 + cL^1 [I + (1 - c) P^0 L^1]^{-1}$$

En concordancia con esta fórmula el compuesto exhibe simetría transversalmente isotropica microscópicamente y sus constantes piezoeléctricas son expresadas como:

$$\mathbf{L}^* = \begin{Vmatrix} \mathbf{C}^* & -\mathbf{e}^* \\ \mathbf{e}^{*t} & \mathbf{d}^* \end{Vmatrix},$$

Donde $\mathbf{C}^* = \mathbf{k}^*\mathbf{T}^2 + 2\mathbf{m}^*(\mathbf{T}^1 - \frac{1}{2}\mathbf{T}^2) + \mathbf{l}^*(\mathbf{T}^3 + \mathbf{T}^4) + 4\mu^*\mathbf{T}^5 + \mathbf{n}^*\mathbf{T}^6,$

$$\mathbf{e}^* = \mathbf{e}_1^*\mathbf{U}^1 + \mathbf{e}_2^*\mathbf{U}^2 + \mathbf{e}_3^*\mathbf{U}^3, \quad \mathbf{d}^* = \mathbf{d}_1^*\mathbf{t}^1 + \mathbf{d}_2^*\mathbf{t}2,$$

$$\mathbf{k}^* = \lambda_0 + \mu_0 + \mathbf{ck}_A(\mathbf{c}), \quad \mathbf{m}^* = \mu_0 + \mathbf{cm}_A(\mathbf{c}), \quad \mathbf{e}_i^* = \mathbf{ce}_i^A(\mathbf{c}) \ \ (\mathbf{i} = 1,2,3)$$

$$\mathbf{d}_i^* = \mathbf{d}_0 + \mathbf{cd}_i^A(\mathbf{c}), \ \ (\mathbf{i} = 1, 2).$$

Estas expresiones coinciden con las obtenidas por el método de Mori-Tanaka. Este método esta basado en la suposición de que cada inclusión esta sometida a un campo electroelástico externo constante e idéntico en la matriz. Este campo esta asumido como que coincide con el campo promedio en la matriz. Se puede ver que el método de Mori-Tanaka llega a resultados idénticos con los presentados por el MCE si aceptamos como supocisión adicional que la forma de la correlación hueco coincide con la forma de una inclusión típica. En particular podemos demostrar que bajo esta supocisión y para fibras continuas (radio aspecto $\gamma \to \mathbf{0}$) los presentes resultados coinciden con la predicción analítica de Chen (1994). En el caso general la forma de las inclusiones y la correlación hueco será diferente y los operadores **P** y $\mathbf{P}^{\phi}$ no son los mismos.

4. Conclusiones.

Hemos hallado la formula explicita de los coeficientes efectivos piezoeléctricos por la aplicación del MCE. Esta teoría es aplicable para compuestos donde las inclusiones anisotrópicas en una matriz isotrópica puede ser distribuida de acuerdo a cualquier orientación de la función de distribución. Soluciones analíticamente cerrada se han presentado para la aleatoriedad completa (distribución de la orientación uniforme) y distribución alineada dónde no ocurre ninguna variación de la orientación.
Se ha hecho una comparación de nuestros resultados con los obtenidos teóricamente por la aproximación de Mori-Tanaka. En esta aproximación aparece el MCE como un caso especial donde la forma de la correlación hueco es idéntica con la forma de las inclusiones alineadas.
Se está trabajando en la implementación de un software de este MCE para el cálculo de estos coeficientes efectivos.

Bibliografía

Benveniste, Y., 1992. The determination of the elastic and electric fields in a piezoelectric inhomogeneity. J. Appl. Phys. 72, 1086-1095.

Chen, T., 1994. Micromechanical estimates of the overall thermoelectroelastic moduli of multiphase fibrous composites. Int. J. Solid Struct. 31,3099-3111.

Kanaun, S. K., Levin, V. M., 1994. Effective field method in mechanics of matrix composite materials. In: Markov, K. Z. (Ed.), Advances in Mathematical Modelling of Composite Materials. World Scientific, pp. 1-58.