

# CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C.

## **POSGRADO**

## Efecto magnetoeléctrico en materiales compuestos

Tesis que como requisito para obtener el grado de Maestro en Ciencias de Materiales presenta:

Ing. Nestor Omar Uribe Chavira

#### Asesor:

Dr. José Andrés Matutes Aquino

#### Coasesor:

Dra. María Cristina Grijalva Castillo

Chihuahua, Chih., México a 2 de jul. de 2018



Agradezco primeramente a Dios por permitirme terminar esta etapa en mi vida.

A mi familia que siempre me ha apoyado en todo ámbito que decido emprender.

Agradezco a mi asesor de tesis, el Dr. José Andrés Matutes y mi coasesora Dra. María Cristina Grijalva Castillo, que guiaron y compartieron conocimientos con su servidor de manera paciente y profesional, a lo largo del desarrollo de la tesis.

Agradezco a mis revisores Dra. Hilda Esperanza Esparza Ponce, Dr. Luis Edmundo Fuentes Cobas, por sus comentarios y enseñanza a lo largo del desarrollo de la tesis. Quiero agradecer también al Dr. Sión Federico Olive Méndez y el Dr. Alejandro Faudoa Arzate, que se sumaron como revisores al examen de grado.

Agradezco a M.C Carlos Roberto Santillán Rodríguez, M.C. Renee Joselin Saénz Hernández y M.C Álvaro Iván Arteaga Duran por su apoyo y colaboración.

Quiero agradecer a los doctores y doctora, Dr. Guillermo Manuel Herrera Pérez, Dr. Alberto Díaz Díaz, Dr. José Alberto Duarte Moller y Dra. Lorena Álvarez Contreras, por su enseñanza no solo académica sino personal, en las materias que impartían.

Un agradecimiento especial al Dr. Alberto Díaz Díaz por compartir sus conocimientos en el área de la simulación con su servidor.

Por último, pero no menos importante, quiero agradecer a CIMAV y su personal por su trabajo y esfuerzo, así como a CONACYT por brindarme el apoyo económico necesario para finalizar esta etapa.



## **Dedicatoria**

Dedico esta tesis a mis padres María Antonina Chavira Pacheco y Luis Humberto Uribe Ruano, y mis hermanos y hermanas, Luis Humberto Uribe Chavira, Helia Monserrat Uribe Chavira, Gustavo Alejandro Uribe Chavira, Jesús Salvador Uribe Chavira y Andrea Elizabeth Chavira Mora, ya que siempre con amor, ya sea en palabra o esfuerzo me han apoyado incondicionalmente.

Es intrigante, como a pesar de ser personas con tantas diferencias y tan tercas, nos podamos mantenernos unidos.

Además, dedico este trabajo de manera especial a mi abuela María Concepción Ruano Méndez, que en paz descanse, pues al saber que estudiaría una maestría, se alegró mucho, me expresó su apoyo y brindó sus oraciones mientras Dios se lo permitió.

## Índice

Dedicatoria         iii           Resumen	Agradecimientos	ii
Abstract       2         Introducción       3         Antecedentes       4         Propiedades físicas       4         Tensores       4         Efecto piezoeléctrico       5         Efecto magnetostríctivo       8         Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica       16         Justificación       20         Objetivos       20         Objetivos General       20         Objetivos específicos       20         Hipótesis       21         Métodos       21         Efecto piezoeléctrico       21         Simulación piezoeléctrico inverso       23         Efecto piezoeléctrico directo       26         Efecto pagnetostricción consaturando en la dirección [100]       30         Magnetostricción saturando en la dirección [111]       33         Simulación del efecto magnetoeléctrico       35         Factor de acoplamiento       36         Fractor de acoplamiento       36         Frecuencia de resonancia mecánica       37         Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas       38	Dedicatoria	iii
Introducción         3           Antecedentes         4           Propiedades físicas         4           Tensores         4           Efecto piezoeléctrico         5           Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica         16           Justificación         20           Objetivos         20           Objetivos General         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrica         22           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción         30           Magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Resumen	1
Antecedentes       4         Propiedades físicas       4         Tensores       4         Efecto piezoeléctrico       5         Efecto magnetoeléctrico       13         Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica       16         Justificación       20         Objetivos       20         Objetivo General       20         Objetivos específicos       20         Hipótesis       21         Métodos       21         Efecto piezoeléctrico       21         Simulación piezoeléctrica       22         Efecto piezoeléctrico directo       26         Efecto magnetostricción inverso       23         Efecto magnetostricción       30         Magnetostricción saturando en la dirección [100]       30         Magnetostricción saturando en la dirección [111]       33         Simulación del efecto magnetoeléctrico       35         Factor de acoplamiento       36         Frecuencia de resonancia mecánica       37         Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas       38	Abstract	2
Propiedades físicas         4           Tensores         4           Efecto piezoeléctrico         5           Efecto magnetostrictivo         8           Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica         16           Justificación         20           Objetivos         20           Objetivos General         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrico inverso         23           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción         30           Magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Introducción	3
Tensores         4           Efecto piezoeléctrico         5           Efecto magnetostrictivo         8           Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica         16           Justificación         20           Objetivos         20           Objetivo General         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrica         22           Efecto piezoeléctrico inverso         23           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Antecedentes	4
Efecto piezoeléctrico         5           Efecto magnetostrictivo         8           Efecto magnetoeléctrico         13           Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica         16           Justificación         20           Objetivos         20           Objetivo General.         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrica         22           Efecto piezoeléctrico inverso         23           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Propiedades físicas	4
Efecto magnetostrictivo         8           Efecto magnetoeléctrico         13           Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica         16           Justificación         20           Objetivos         20           Objetivo General         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrico inverso         23           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Tensores	4
Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica	Efecto piezoeléctrico	5
Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica       16         Justificación       20         Objetivos       20         Objetivo General       20         Objetivos específicos       20         Hipótesis       21         Métodos       21         Efecto piezoeléctrico       21         Simulación piezoeléctrica       22         Efecto piezoeléctrico inverso       23         Efecto piezoeléctrico directo       26         Efecto magnetostrictivo       28         Simulación magnetostricción       30         Magnetostricción saturando en la dirección [100]       30         Magnetostricción saturando en la dirección [111]       33         Simulación del efecto magnetoeléctrico       35         Factor de acoplamiento       36         Frecuencia de resonancia mecánica       37         Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas       38	Efecto magnetostrictivo	8
Justificación         20           Objetivos         20           Objetivo General         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrica         22           Efecto piezoeléctrico inverso         23           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción         30           Magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Efecto magnetoeléctrico	13
Objetivos         20           Objetivo General         20           Objetivos específicos         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico         21           Simulación piezoeléctrica         22           Efecto piezoeléctrico inverso         23           Efecto piezoeléctrico directo         26           Efecto magnetostrictivo         28           Simulación magnetostricción         30           Magnetostricción saturando en la dirección [100]         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111]         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico         35           Factor de acoplamiento         36           Frecuencia de resonancia mecánica         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas         38	Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica	16
Objetivo General.         20           Objetivos específicos.         20           Hipótesis         21           Métodos         21           Efecto piezoeléctrico.         21           Simulación piezoeléctrica         22           Efecto piezoeléctrico inverso.         23           Efecto piezoeléctrico directo.         26           Efecto magnetostrictivo.         28           Simulación magnetostricción.         30           Magnetostricción saturando en la dirección [100].         30           Magnetostricción saturando en la dirección [111].         33           Simulación del efecto magnetoeléctrico.         35           Factor de acoplamiento.         36           Frecuencia de resonancia mecánica.         37           Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas.         38	Justificación	20
Objetivos específicos       20         Hipótesis       21         Métodos       21         Efecto piezoeléctrico       21         Simulación piezoeléctrica       22         Efecto piezoeléctrico inverso       23         Efecto piezoeléctrico directo       26         Efecto magnetostrictivo       28         Simulación magnetostricción       30         Magnetostricción saturando en la dirección [100]       30         Magnetostricción saturando en la dirección [111]       33         Simulación del efecto magnetoeléctrico       35         Factor de acoplamiento       36         Frecuencia de resonancia mecánica       37         Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas       38	Objetivos	20
Hipótesis       21         Métodos       21         Efecto piezoeléctrico       21         Simulación piezoeléctrica       22         Efecto piezoeléctrico inverso       23         Efecto piezoeléctrico directo       26         Efecto magnetostrictivo       28         Simulación magnetostricción       30         Magnetostricción saturando en la dirección [100]       30         Magnetostricción saturando en la dirección [111]       33         Simulación del efecto magnetoeléctrico       35         Factor de acoplamiento       36         Frecuencia de resonancia mecánica       37         Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas       38	Objetivo General	20
Métodos21Efecto piezoeléctrico21Simulación piezoeléctrica22Efecto piezoeléctrico inverso23Efecto piezoeléctrico directo26Efecto magnetostrictivo28Simulación magnetostricción30Magnetostricción saturando en la dirección [100]30Magnetostricción saturando en la dirección [111]33Simulación del efecto magnetoeléctrico35Factor de acoplamiento36Frecuencia de resonancia mecánica37Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas38	Objetivos específicos	20
Efecto piezoeléctrico21Simulación piezoeléctrica22Efecto piezoeléctrico inverso23Efecto piezoeléctrico directo26Efecto magnetostrictivo28Simulación magnetostricción30Magnetostricción saturando en la dirección [100]30Magnetostricción saturando en la dirección [111]33Simulación del efecto magnetoeléctrico35Factor de acoplamiento36Frecuencia de resonancia mecánica37Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas38	Hipótesis	21
Simulación piezoeléctrica	Métodos	21
Efecto piezoeléctrico inverso23Efecto piezoeléctrico directo26Efecto magnetostrictivo28Simulación magnetostricción30Magnetostricción saturando en la dirección [100]30Magnetostricción saturando en la dirección [111]33Simulación del efecto magnetoeléctrico35Factor de acoplamiento36Frecuencia de resonancia mecánica37Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas38	Efecto piezoeléctrico	21
Efecto piezoeléctrico directo	Simulación piezoeléctrica	22
Efecto magnetostrictivo28Simulación magnetostricción30Magnetostricción saturando en la dirección [100]30Magnetostricción saturando en la dirección [111]33Simulación del efecto magnetoeléctrico35Factor de acoplamiento36Frecuencia de resonancia mecánica37Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas38	Efecto piezoeléctrico inverso	23
Simulación magnetostricción	Efecto piezoeléctrico directo	26
Magnetostricción saturando en la dirección [100]	Efecto magnetostrictivo	28
Magnetostricción saturando en la dirección [111]	Simulación magnetostricción	30
Simulación del efecto magnetoeléctrico	Magnetostricción saturando en la dirección [100]	30
Factor de acoplamiento	Magnetostricción saturando en la dirección [111]	33
Frecuencia de resonancia mecánica	Simulación del efecto magnetoeléctrico	35
Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas38	Factor de acoplamiento	36
	Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas	38
Resultados41	Resultados	41

Piezoeléctrico	41
Magnetostrictivo	41
Efecto magnetoeléctrico	42
Conclusiones	
Bibliografía	
Bibliografia	43
Tabla de ilustraciones	
llustración 1 Piezoelectricidad, (a) efecto directo, (b) efecto inverso, (c) efecto cortante	5
Ilustración 2 Estructura de perovskita (a) centrosimétrica T>Tc, (b) no-centrosimétrica T <tc.< td=""><td></td></tc.<>	
Ilustración 3 Estructura del PZT	
Ilustración 4 Mecanismo de magnetostricción	9
Ilustración 5 Dominios magnéticos en un monocristal de hierro. El campo magnético es	
aplicado en la dirección [010]	10
Illustración 6 Magnetización de un material magnetostrictivo (a) esfuerzo cero, (b) esfuerzo	
aplicado, (c) movimiento en las paredes de dominio debido al esfuerzo, (d) un solo dominio e	
presente por la magnetización debido al esfuerzo	10
Ilustración 7 Algunos tipos de conectividades en sistemas bifásicos: a) Conectividad 0-0, b) Conectividad 0-3, c) Conectividad 1-1, y d) Conectividad 1-3	1 /
llustración 8 Vibración longitudinal de un elemento de una barra no uniforme	
Ilustración 9 Orientación del compósito	
Ilustración 10 Cubo de 5x5x5(mm)	
Ilustración 11 Campo eléctrico aplicado en Z	
llustración 12 Matriz de coeficientes piezoeléctricos strain-charge	
Ilustración 13 Desplazamiento en la dirección X (mm)	
Ilustración 14 Desplazamiento en la dirección Y (mm)	25
Ilustración 15 Desplazamiento en la dirección Z (mm)	25
Ilustración 16 Cubo de 5x5x5(mm)	
Ilustración 17 Desplazamiento aplicado en Z	
Ilustración 18 Matriz de coeficientes piezoeléctricos stress-charge	
Ilustración 19 Polarización en dirección Z (C/m2)	
Ilustración 20 Cubo de 5x5x5(mm)	
Ilustración 21 Campo magnético aplicado en [100]	
Ilustración 22 Desplazamiento en la dirección X (nm)	
Illustración 23 Desplazamiento en la dirección Y (nm)	
Illustración 24 Desplazamiento en la dirección Z (nm)	
Ilustración 25 Cubo de 5x5x5(mm)Ilustración 26 Campo magnético aplicado en [111]	
llustración 27 Desplazamiento en la dirección [111] (nm)	
Ilustración 28 Deformación por esfuerzo cortante	
Ilustración 29 (1) Piezoeléctrico, (2) Piezomagnetico, V=0.6, espesor 1 mm, L=7.3mm	
Ilustración 30 Frecuencia de resonancia mecánica	

Ilustración 31 Resonancia electromecánica modo L-T	39
Ilustración 32 Efecto ME de literatura [7]: los puntos son datos experimentales y la	a línea es por
ecuación analítica	40
Ilustración 33 Efecto ME por elemento finito	40

## Resumen

Se analizaron las ecuaciones constitutivas del efecto piezoeléctrico, magnetostrictivo, piezomagnetico, interacciones magneto-electro-elasto-dinámicas del efecto magnetoeléctrico bajo efectos de resonancia electromecánica y las vibraciones en mecánica del medio continuo, para esto se recurrió al estudio de análisis tensorial y mecánica del medio continuo.

Los efectos eléctricos y magnéticos por separado están directamente relacionados con la estructura del cristal el cual presenta anisotropía, depende del grupo puntual. En el caso del efecto magnetoeléctrico depende del grupo puntual magnético, que también presenta anisotropía.

El análisis tensorial se usa en estos casos porque que es una herramienta que puede describir la anisotropía de un medio en una manera compacta, intuitiva e independiente del cambio de sistema coordenado.

El tema de estudio en este ámbito fue los tensores en el espacio euclideo, con cambios de sistema coordenados por rotación y reflexiones que son las mismas operaciones de simetría presentes en el grupo puntual de un cristal.

En el área de mecánica del medio continuo fue necesario el entendimiento del tensor de esfuerzo hidrostático, debido al cambio de forma y no de volumen que presentan los materiales magnetostrictivos y el enfoque que se da a este tensor en el caso del análisis por elemento finito.

Además, las ecuaciones elasto-dinámicas que describen las vibraciones en un medio continuo fueron necesarias para describir condiciones de resonancia mecánica. Estas ecuaciones se adaptaron a la configuración de un compósito magnetoeléctrico para describir el efecto magnetoeléctrico en condiciones de resonancia electromecánica.

Se simularon por elemento finito los efectos magnetostrictivo y piezoeléctrico por separado con una configuración idealizada, removiendo términos de fricción y aplicando campos eléctricos y magnéticos uniformes, se comparó con las ecuaciones constitutivas presentadas en la literatura mostrando resultados acertados.

Posteriormente se acoplaron los modelos por separado mediante un acoplamiento mecánico para el cual se formuló una constante K para la transferencia de deformación entre los subsistemas magnético y eléctrico, esto con el fin de poder simular compósitos magnetoeléctricos más acordes a los experimentales, Se simulo el compósito bajo condiciones de resonancia electromecánica y se comparó las ecuaciones constitutivas del efecto magnetoeléctrico que a su vez están comparadas con datos experimentales en la literatura. Mostrando concordancia en los resultados de la simulación, las ecuaciones constitutivas y los datos experimentales.

## **Abstract**

The constitutive equations of the piezoelectric effect, magnetostrictive effect, piezoemagnetic effect, magneto-electro-elasto-dynamic interactions of the magnetoelectric (ME) effect under the effects of electromechanical resonance, and the mechanical vibrations of a continuous medium was studied using tensor analysis and continuous medium mechanics.

The electric and the magnetic effect on their own are directly related with crystal structure and its anisotropy that depends on the point group. In the case of the ME effect it depends on the magnetic point group which its own anisotropy.

Tensor analysis it is used in this topic because it is a tool that can describe the anisotropy of a medium in a compact, intuitive and independent way of the change of coordinate systems.

The topic of study on tensor analysis was tensor in Euclidean space, coordinate transformation of mirrors and rotations, which are present in the crystallographic point group.

In the topic of continuous medium mechanics, it is necessary the understanding of the hydrostatic stress tensor, due to the change of shape and not volume observed in the magnetostrictive materials, and the focus of this tensor in the finite element analysis.

The elasto-dynamic equations of the vibrations in a continuous medium were necessary to describe conditions of mechanical resonance. These equations were adapted to the configuration of a ME composite to be able to study ME effect under electromechanical resonance.

The magnetostrictive effect and piezoelectric effect were simulated individually by finite element analysis with no losses to compare with constitutive equations of each system, showing good results in both systems.

Later the two models were coupled with a thin layer that represents the mechanical coupling in the composite, for which a constant k was formulated to measure if needed the percent of strain transferred from one system to the other, this due to the necessity of simulations similar to an experiment. The composite was simulated under electromechanical resonance conditions and the results were compared with the constitutive equations of the ME effect and the experimental data present in the literature.

Showing agreement between finite element results, constitutive equations and experimental data.

## Introducción

El concepto de magnetoelectricidad está presente desde los años 1950, propuesto por Landau, Lifshitz y Dzyaloshinskii. Al final de los años 50 Astrov en Rusia y Rado en USA lo volvieron una realidad con el Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. El efecto magnetoeléctrico (ME) ha sido materia de estudio por 50 años debido al interesante intercambio minúsculo entre subsistemas polares y magnéticos.

Al final del siglo XX varios grupos empezaron a descubrir magnetoelectricidad de orden mayor en compósitos ME, esto gracias al avance en la ciencia e ingeniería de materiales que está fuertemente ligada a los materiales compuestos, las interacciones de magnetización-polarización de gran orden tienen potenciales aplicaciones ingenieriles.

El efecto ME es una propiedad extrínseca que no existe en las fases por separado, la ventaja de la estructura bicapa o multicapa respecto a los compuestos de una sola fase, es que la magnitud de su coeficiente ME ( $\alpha^{EH}$ ), es órdenes de magnitud mayor que el correspondiente en los sistemas monofásicos más recientes.

La acción de la fase magnetostrictiva sobre la fase piezoeléctrica o vice versa se da por la unión elástica, la selección apropiada de las fases puede derivar en voltajes ME con aplicaciones ingenieriles en un amplio rango de frecuencias incluyendo electromecánicas, magneto-acústicas y de resonancia ferromagnética.

Al aplicar un campo magnético DC a un compósito fijo en uno de sus extremos, la fase magnetoestrictiva se contrae, y por medio de la unión elástica, la fase piezoeléctrica se contrae de manera proporcional generando un voltaje. Si se aplica un campo magnético AC, el compósito comenzará a oscilar, a una frecuencia del campo magnético aplicado; si la frecuencia de oscilación del campo magnético aplicado se acerca a la frecuencia de resonancia electromecánica de la fase piezoeléctrica, se producirá el efecto de resonancia en el compósito y la magnitud del efecto magneto eléctrico será órdenes de magnitud mayor (alrededor de 10 veces) en comparación con una oscilación no resonante [1].

### **Antecedentes**

## Propiedades físicas

Una propiedad física es la relación que existe entre dos cantidades medibles. Por ejemplo, la elasticidad en los materiales es una propiedad estándar de equilibrio que relaciona el esfuerzo que es la variable dependiente y la deformación unitaria que es la variable independiente, estas dos variables y la propiedad física de la elasticidad constituyen la ley de Hooke.

En el caso de la piezoelectricidad y la magnetostricción, las propiedades dependen de la estructura cristalina del material, es decir son propiedades anisotrópicas. En el caso de un material policristalino con una orientación preferencial (textura), se tiene que tomar en cuenta cómo afecta a la anisotropía del material.

#### Tensores

La variable dependiente y la independiente, así como la propiedad física pueden ser representadas con tensores, los tensores son objetos matemáticos que se transforman de manera particular cuando los vectores bases (sistema coordenado) cambian, los vectores base son los que describen y cuantifican las variables y propiedades físicas del material. Cualquier cambio en las variables o la propiedad física, implica un cambio en los vectores base. Esto hace que los tensores sean especialmente útiles a la hora de describir fenómenos físicos en un material anisotrópico.

Los tensores son definidos por la manera en la que se transforman de un sistema coordenado a otro, se manejaran tensores polares y axiales. Un tensor axial se invierte, si se invierte la regla de la mano derecha (mano izquierda), por el otro lado un tensor polar permanece igual si la regla de la mano derecha se invierte.

Sus reglas de transformación son diferentes.

Para un tensor polar de rango n:

$$T'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn} \dots T_{lmn}$$

Para un tensor axial de rango n:

$$T'_{ijk} = |a|a_{il}a_{jm}a_{kn} \dots T_{lmn}$$

Donde |a| es el determinante de la matriz de cosenos directores  $|a| = \pm 1$ , su valor depende de si la regla de la mano derecha cambia o no durante la transformación de los ejes base. Para operaciones de simetría que involucran espejos y centros de inversión |a| = -1, en el caso de la rotación el valor es positivo [2], [3].

## Efecto piezoeléctrico

La piezoelectricidad fue descubierta por Jacques Curie y Pierre Curie a inicios de 1880, por analogía en cargas inducidas por temperatura, ellos observaron cargas eléctricas bajo presión mecánica en algunos materiales como el cuarzo, topas, azúcar de caña y sal de Rochelle, en ese entonces era claro que la simetría jugaba un papel importante en el efecto piezoeléctrico ya que solo ciertos cortes del cristal y mayormente en materiales piroeléctricos mostraban esta característica. Los Curie no pudieron predecir un efecto piezoeléctrico inverso que es la deformación del material bajo los efectos de un campo eléctrico, pero esto fue deducido matemáticamente de principios termodinámicos fundamentales por Lippmann en 1881. Los hermanos Curie confirmaron inmediatamente el efecto inverso en su publicación (Curie and Curie 1881).

Desde entonces el termino piezoelectricidad es comúnmente usado para describir la habilidad de ciertos materiales para desarrollar un desplazamiento eléctrico D que es directamente proporcional al esfuerzo mecánico aplicado  $\sigma$ .

Dicho esto la carga eléctrica presente invierte su dirección dependiendo si el esfuerzo es de tensión o compresión, y basado en la termodinámica todos los materiales piezoeléctricos tienen un efecto inverso, donde la deformación S invierte su dirección al invertir el campo eléctrico aplicado.

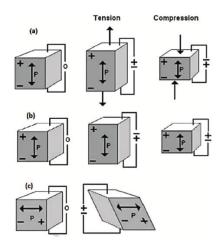


Ilustración 1 Piezoelectricidad, (a) efecto directo, (b) efecto inverso, (c) efecto cortante

La polarización espontanea en medios no lineares homogéneos se atribuye al desplazamiento relativo espontaneo de átomos uno respecto de otro por debajo de cierta temperatura, creando momentos dipolares permanentes. La densidad de esos momentos dipolares se denomina polarización, que es un vector. Es el parámetro más fundamental del cual dependen las propiedades intrínsecas dieléctricas, piroeléctricas, ferroeléctricas y piezoeléctricas.

La mayoría de los materiales ferroeléctricos de interés tienen una estructura de perovskita. Algunos ejemplos típicos  $BaTiO_3(BTO)$ ,  $PbTiO_3(PTO)$ ,  $(Ba,Sr)TiO_3$  (BST) y  $Pb(Zr,Ti)O_3$  (PZT).

En la ilustración 2 (a), se muestra la estructura de la perovskita por arriba de la temperatura de transformación, donde los octaedros  ${\rm Ti}O_6$  están unidos en un arreglo cubico formando una

estructura no polar m3m altamente simétrico. El 6-fold en el centro del octaedro está lleno con  $Ti^{4+}$  (u otro metal de transición). Y el 12-fold en los espacios intersticiales entre los octaedros se encuentra el  $Pb^{2+}$ .

La polarización espontanea del PTO surge del desplazamiento espontaneo de los iones  $Ti^{4+}$  y el  $O^{2-}$  respecto a los iones  $Pb^{2+}$ , creando una estructura no-centrosimétrica. La ilustración 2 (b) muestra el cambio de posición en la fase tetragonal, dando como resultado una polarización a lo largo de [001] de la celda unitaria.

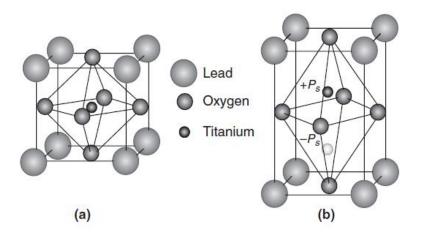


Ilustración 2 Estructura de perovskita (a) centrosimétrica T>Tc, (b) no-centrosimétrica T<Tc

La polarización está acompañada por una deformación espontanea a lo largo de la dirección de polarización esto debido a la deformación de la celda unitaria, por esta razón la piezoelectricidad depende de la simetría del cristal.

Como la piezoelectricidad es una relación lineal entre los tensores de primer rango (D o E) y los tensores de segundo rango ( $\sigma$  o S), el coeficiente que acopla estas dos propiedades físicas debe ser un tensor de rango tres  $d_{ijk}$ .

Basados en la definición del efecto piezoeléctrico, todas las componentes del efecto piezoeléctrico deben desaparecer en cristales que son centrosimétricos.

En las 21 clases de cristales no-centrosimétricos restantes existe la piezoelectricidad con la excepción del cubico clase 432, donde las cargas piezoeléctricas a lo largo de (111) se cancelan unas con otras [4].

Parameter	Quartz	BaTiO <sub>3</sub>	PbTiO <sub>3</sub> : Sm	PZT 5H	LF4T	PZN-8%PT [001]	PZN-8%PT [111]
Symmetry	32	4mm	4mm	3 <i>m</i> /4 <i>mm</i>	mm2/4mm	3m/4mm	3m/4mm
$d_{33}(pC/N)$	2.3	190	65	593	410	2500	84
$d_{31}(pC/N)$	0.09	0.38	0	-274	-154	-1400	-20
$\varepsilon_{33}^T/\varepsilon_0$	5	1700	175	3400	2300	7000	1000
$T_{\rm c}(^{\circ}{\rm C})$		120	355	193	253	160	160

Tabla 1 Algunas propiedades físicas y simetría de materiales con mayor efecto piezoeléctrico

En el desarrollo de la tesis se trabajará con datos del PZT con grupo puntual 4mm, esto debido a que es el piezoeléctrico que más se utiliza actualmente por lo que hay mayor número de datos experimentales, sus coeficientes piezoeléctricos son muy buenos lo que los hace ideales para una aplicación de compósitos magnetoeléctricos.

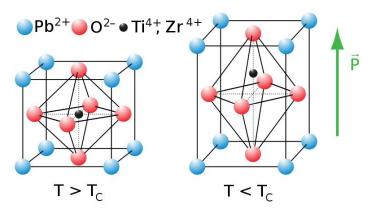


Ilustración 3 Estructura del PZT

Es el acoplamiento lineal entre el esfuerzo mecánico y la polarización eléctrica de un material. Si se aplica un esfuerzo mecánico al material, éste se polariza, esto es conocido como efecto piezoeléctrico directo. Si se aplica una polarización por medio de un campo eléctrico al material, éste se deforma, esto es conocido como efecto piezoeléctrico inverso.

Como la polarización es un tensor polar de primer rango y el esfuerzo es un tensor polar de segundo rango, la propiedad física que acopla estas dos variables es un tensor de tercer rango.

$$P_j = d_{jkl} X_{kl}$$

Aplicando una transformación a la polarización

$$P'_{i} = a_{ij}P_{i} = a_{ij}d_{ikl}X_{kl}$$

Transformando el tensor de esfuerzos

$$P'_{i} = a_{ij}d_{jkl}a_{mk}a_{nl}X_{kl} = d'_{imn}X'_{mn}$$

El producto entre tensores es conmutativo por lo que la piezoelectricidad se transforma como un tensor polar.

$$d'_{imn} = a_{ij} a_{mk} a_{nl} d_{jkl}$$

Como es un tensor de tercer orden el coeficiente piezoeléctrico tiene 27 términos y debido a la simetría del tensor de esfuerzos los términos del coeficiente piezoeléctrico se reducen a 18.

Reacomodando el tensor de esfuerzos y el tensor de coeficientes, tomando en cuenta la convención de los ejes x = 1, y = 2, z = 3. Además los términos independientes del tensor de esfuerzos toman el siguiente arreglo;  $X_{11} = X_1$ ,  $X_{22} = X_2$ ,  $X_{33} = X_3$ ,  $X_{23} = X_4$ ,  $X_{13} = X_5$ ,  $X_{23} = X_6$ .

Se obtiene para el efecto directo:

$$\begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \\ X_6 \end{pmatrix}$$

Y para el efecto inverso.

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \\ X_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{21} & d_{31} \\ d_{12} & d_{22} & d_{32} \\ d_{13} & d_{23} & d_{33} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} \\ d_{15} & d_{25} & d_{35} \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix}$$

Los valores de la matriz de coeficientes piezoeléctricos dependen del grupo puntual del material. Aplicando la transformación descrita por el grupo puntual, en la matriz, y tomando en cuenta la ley de Neumann, se obtienen los términos necesarios para describir la piezoelectricidad en el cristal [5].

Los coeficientes piezoeléctricos se leen de la siguiente manera para las ecuaciones mostradas:

Para el efecto inverso.

 $d_{31}$ : Indica el esfuerzo en la dirección 1 cuando existe un campo eléctrico dentro del material en la dirección 3.

Para el efecto directo.

 $d_{31}$ : Indica una polarización en la dirección 3 cuando existe un esfuerzo en la dirección 1.

## Efecto magnetostrictivo

La magnetostricción descubierta por James Prescott Joule en 1842, que demostró que una barra de hierro incrementaba su longitud cuando era magnetizada a lo largo por un campo magnético débil. El cambio fraccional en su longitud  $\Delta l/l$  (deformación unitaria). La única diferencia con la deformación unitaria  $\varepsilon$  debido al esfuerzo es el símbolo. En magnetostricción se usa  $\lambda$ .

El valor de  $\lambda$  obtenido cuando se llega a la magnetización de saturación es llamado magnetostricción de saturación  $\lambda_s$ .

La magnetostricción longitudinal usualmente llamada magnetostricción de Joule no es el único efecto magnetostrictivo, hay otros que inducen torque o pandeo, que al final son solo casos especiales de la magnetostricción de joule.

La magnetostricción ocurre en todas las sustancias puras. Sin embargo, incluso en sustancias con un magnetismo fuerte, el efecto es usualmente pequeño:  $\lambda_s$  está en el orden de  $10^{-5}$ . Para que esa deformación sea más intuitiva se puede poner en función del esfuerzo. Para un acero

con módulo de Young  $30 \times 10^6$ , esta deformación es consecuencia de un esfuerzo de 2 Mpa según la ley de Hooke. La deformación por magnetostricción puede ser comparada a la expansión térmica.

El valor de la magnetostricción  $\lambda_s$  puede ser positivo, negativo. Su valor depende de la magnetización y por consecuencia del campo magnético aplicado.

La magnetostricción se en primera instancia por el acoplamiento spin-orbita, el cual es también responsable por la anisotropía del cristal. En la ilustración 4 se muestra esto de manera burda. Los puntos negros representan núcleos atómicos y las flechas su momento magnético, los óvalos representan la nube electrónica perteneciente a cada átomo. La fila de átomos arriba es un estado paramagnético, T>Tc, en la segunda fila de arriba abajo cuando la temperatura T<Tc la magnetización espontanea alinea los momentos en determinada dirección determinada por la anisotropía cristalina, en la tercera fila si se aplica un campo magnético, los momentos magnéticos tienden a orientarse en la dirección del campo. Estos cambios en la orientación de los momentos magnéticos provoca un desplazamiento Δl.

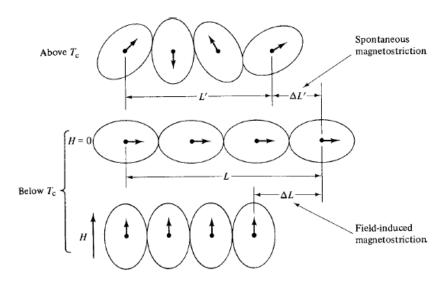


Ilustración 4 Mecanismo de magnetostricción

La dirección de magnetización en T<Tc en campo cero, que determina la anisotropía cristalina es la dirección de fácil magnetización del cristal, esta dirección está determinada por la energía potencial de los momentos magnéticos en los átomos, las direcciones donde hay menor energía son las direcciones de fácil magnetización.

Los momentos magnéticos alineados cuando T<Tc en una dirección forman un dominio magnético. Existen varios dominios magnéticos en un cristal, cada uno en direcciones distintas. Por ejemplo, en un cristal cubico los dominios magnéticos se acomodan de tal manera que la magnetización total es cero, al aplicar un campo magnético, los dominios que están magnetizados en la dirección del campo tienden a crecer, los momentos magnéticos en los otros dominios tienden a rotar en la dirección del campo y por consecuencia estos dominios se hacen más pequeños, en este proceso las paredes de dominio se mueven.

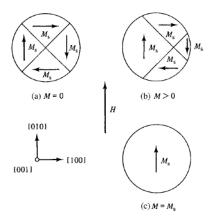


Ilustración 5 Dominios magnéticos en un monocristal de hierro. El campo magnético es aplicado en la dirección [010]

Esta rotación en los momentos magnéticos es lo que deforma el material, es importante mencionar que las rotaciones de 180° no generan deformación, ya que la magnetostricción implica un cambio de forma y no de volumen. La mayor deformación se logra con rotaciones de 90°.

De igual manera si se aplica un esfuerzo al material este se magnetizará, a este efecto inverso se le llama efecto Villari.

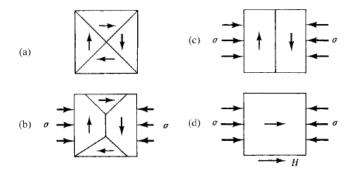


Ilustración 6 Magnetización de un material magnetostrictivo (a) esfuerzo cero, (b) esfuerzo aplicado, (c) movimiento en las paredes de dominio debido al esfuerzo, (d) un solo dominio está presente por la magnetización debido al esfuerzo

La magnetostricción puede separarse en dos tipos dependiendo de la relación matemática con el campo magnético. La que se presenta más comúnmente en los materiales es una relación no lineal con el campo magnético y se le denomina magnetostricción. La otra que tiene una relación lineal con el campo magnético, se le llama piezomagnetismo, al igual que la piezoelectricidad depende de la simetría del cristal.

En el caso de la magnetostricción no lineal, la relación más común es que la deformación es directamente proporcional al cuadrado del campo magnético aplicado, las constantes de proporcionalidad para el efecto no lineal son constantes de magnetización en los ejes de fácil magnetización del cristal.

La magnetostricción se presenta generalmente en dos estructuras, cubica y hexagonal, los materiales magnetostrictivos naturales, como el níquel, cobalto y hierro tienen una estructura cubica y las tierras raras que presentan magnetostricción tienen estructura hexagonal.

Algunos ejemplos de magnetostrictivos con grupo puntual m3m son  $CoFe_2O_4$ ,  $NiFe_2O_4$ ,  $MnFe_2O_4$ , FeGa, FeAl,  $MgFe_2O_4$  [6].

Para el desarrollo de la tesis se utilizarán compuestos con estructura cubica ya que son los más utilizados y en consecuencia hay más datos experimentales, en particular se usarán datos de la ferrita de níquel  $NiFe_2O_4$  (NFO) para el efecto magnetoeléctrico y ferrita de cobalto  $CoFe_2O_4$  para las ecuaciones analíticas del efecto magnetostrictivo.

Es el acoplamiento entre la deformación unitaria del material y el cuadrado de la magnetización. Al aplicar un campo magnético al material este se deformará, esto es conocido como efecto Joule. Si por el contrario se aplica una deformación al material, este sufrirá una magnetización, y es conocido como efecto Villari.

La magnetización es un tensor axial de primer rango, y la deformación unitaria es un tensor polar de segundo rango. Por lo tanto, los coeficientes magnetostrictivos es un tensor de cuarto rango.

$$x_{ij} = N_{ijkl}I_kI_l$$

La transformación de la deformación es:

$$x'_{ij} = a_{ik}a_{jl}x_{kl} = a_{ik}a_{jl}N_{klmn}I_{m}I_{n}$$

$$x'_{ij} = a_{ik}a_{jl}N_{klmn}(\pm|a|a_{om}I_{o})(\pm|a|a_{pn}I_{p})$$

$$x'_{ij} = N'_{ijop}I'_{o}I'_{p}$$

Como  $(\pm |a|)^2 = 1$ , la naturaleza axial de la magnetización se cancela. Por lo cual el tensor de coeficientes es un tensor polar.

$$N'_{ijop} = a_{ik}a_{jl}a_{om}a_{pn}N_{klmn}$$

La forma matricial contraída se expresa de la siguiente manera.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} & N_{13} & N_{14} & N_{15} & N_{16} \\ N_{21} & N_{22} & N_{23} & N_{24} & N_{25} & N_{26} \\ N_{31} & N_{32} & N_{33} & N_{34} & N_{35} & N_{36} \\ N_{41} & N_{42} & N_{43} & N_{44} & N_{45} & N_{46} \\ N_{51} & N_{52} & N_{53} & N_{54} & N_{55} & N_{56} \\ N_{61} & N_{62} & N_{63} & N_{64} & N_{65} & N_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1^2 \\ I_2^2 \\ I_3^2 \\ I_2I_3 \\ I_3I_1 \\ I_1I_2 \end{pmatrix}$$

Donde la contracción de índices es  $N_{mn} = N_{ijkl}$ 

Al igual que en la piezoelectricidad, estos coeficientes varían dependiendo de la simetría del cristal. La magnetostricción no lineal es muy común en cristales con simetría m3m. Por esta razón se analizará esa estructura.

Así como la magnetización llega a un nivel de saturación en el material, de igual manera la deformación se satura. La deformación en los materiales magnetostrictivos se debe a la rotación de los momentos magnéticos. Esto quiere decir que el material sufre un cambio de forma, pero no de volumen.

Los efectos de rotación en la magnetización se pueden expresar por el producto de los cosenos directores de la magnetización y la magnetización resultante (Magnetización de saturación).

$$I_1 = \alpha_1 I_S$$
,  $I_2 = \alpha_2 I_S$ ,  $I_3 = \alpha_3 I_S$ 

Y la dirección en la que la deformación es medida se especificada por los cosenos directores  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  y  $\beta_3$ . Esta deformación X' está relacionada con la deformación en los ejes del cristal por:

$$X' = \beta_i \beta_i x_{ii}$$

La matriz de magnetostricción para el grupo m3m es.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} & N_{12} & 0 & 0 & 0 \\ N_{12} & N_{11} & N_{12} & 0 & 0 & 0 \\ N_{12} & N_{11} & N_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & N_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_3^2 I_s^2 \\ \alpha_3^2 I_s^2 \\ \alpha_2 \alpha_3 I_s^2 \\ \alpha_3 \alpha_1 I_s^2 \\ \alpha_1 \alpha_2 I_s^2 \end{pmatrix}$$

Al resolver la matriz y sustituir las deformaciones en la ecuación para la dirección en la que se mide X', se obtiene una ecuación de deformación total, la volumétrica más la de forma.

$$x_s = X' = h_0 + h_1(\alpha_1^2\beta_1^2 + \alpha_2^2\beta_2^2 + \alpha_3^2\beta_3^2) + h_2(\alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2 + \alpha_1\alpha_3\beta_1\beta_3 + \alpha_2\alpha_3\beta_2\beta_3)$$

Donde

$$h_0 = N_{12}I_s^2$$

$$h_1 = (N_{11} - N_{12})I_s^2$$

$$h_2 = N_{44}I_s^2$$

Para remover la deformación volumétrica que es la de magnetización cero (el material a temperatura ambiente). Se considera la magnetización en los ejes de fácil magnetización igualmente distribuidos para que la magnetización sea cero. Los ejes de fácil magnetización son las direcciones en las que los dipolos magnéticos tienden a orientarse naturalmente, esto debido a que en ese eje en particular existe menor energía de anisotropía. Por estas razones los ejes de fácil magnetización dependen de la simetría del cristal. Para el caso cubico los ejes de fácil magnetización son [100] y [111].

Sustituyendo los valores iniciales para los dominios igualmente repartidos en estas direcciones, 6 dominios para la [100] y ocho para [111]. Se obtiene que la deformación en magnetización cero siempre es la misma.

$$x_s(0) = h_0 + \frac{h_1}{3}$$

Por lo que el cambio de forma es.

$$x_s - x_s(0) = h_1 \left( \alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3} \right) + h_2 (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_1 \alpha_3 \beta_1 \beta_3 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3)$$

Los términos  $h_1$  y  $h_2$  son remplazados con los coeficientes  $\frac{3}{2}\lambda_{100}$  y  $3\lambda_{111}$ , estos términos se obtienen resolviendo la ecuación para los casos particulares donde se magnetiza en las

direcciones [100] y [111] y se mide la deformación en las mismas direcciones de una muestra del material isotrópico.

La deformación medida en cualquier dirección  $\beta_{ij}$  cuando se satura con campo magnético en las direcciones de fácil magnetización [100] y [111], se define como [5].

$$\lambda = \frac{3}{2}\lambda_{100} \left(\alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2 - \frac{1}{3}\right) + 3\lambda_{111} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_1 \alpha_3 \beta_1 \beta_3 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3)$$

## Efecto magnetoeléctrico

La magnetoelectricidad en un sentido amplio, significa la interacción entre subsistemas eléctricos y magnéticos.

El efecto magnetoeléctrico en solidos fue predicho teóricamente en un principio por Landau y Lifshitz en (1980), calculado por Dzyaloshinskii en  $Cr_2O_3$  en 1960, y observado experimentalmente por Astrov y Folen en 1961

La clasificación de materiales magnetoeléctricos se ha llevado a cabo para varios grupos magnéticos puntuales (Asher 1969), y la simetría de propiedades magnetoeléctricas determinadas por la aplicación del principio de Newmann (Santoro y Newnham 1966).

La transmisión de onda electromagnética en un medio ME ha sido estudiado (Opechovski 1975; O'Dell 1970).

De la década de 1950 al presente, se han estudiado muchos monocristales ME dé una fase, (Smolenskii and Chupis 1982; Schmid 1993; Bichurin 1997; Bichurin 2002; Fiebig 2004; Rivera 2009; Wang 2009). La mayoría de estos materiales tienen efecto ME solo a temperaturas considerablemente por debajo de 300 K.

Esto es debido a que los materiales tienen una baja temperatura de Neel o un bajo punto de Curie. Incluso a bajas temperaturas, el cristal ME dé una sola fase tiene coeficientes ME muy bajos, haciéndolos impotentes para una aplicación práctica.

Afortunadamente los materiales compuestos con fases de ferrita y piezoeléctricos tienen simultáneamente polarización y magnetización elevada a temperaturas arriba de la temperatura ambiente, ofreciendo a la fecha la única opción practica para la aplicación del efecto ME. En los compósitos el efecto ME depende de las interacciones magneto-elasto-electro-dinámico [7].

Los compósitos fueron preparados por primera vez por Van den Boomgard y sus compañeros de trabajo. Usaron una solidificación unidireccional de un compósito eutéctico en el sistema quinario Fe-Co-Ti-Ba-O, este proceso promueve la formación de películas alternadas de espinel magnético y perovskita piezoeléctrica, El proceso de solidificación requiere un control cuidadoso de la composición [1].

El primer efecto ME gigante fue reportado por Srinivasan en un compósito bicapa de PZT, y NFO, las capas eran delgadas (14-200 nm), en el caso de multicapas el efecto magnetoeléctrico es mayor (Srinivasan 2002, Zhai 2008).

Los compósitos ofrecen oportunidades para la ingeniería que no están disponibles para las fases por separado. Algunas aplicaciones como sensores de campo magnético, Sensores de corriente, cosechador de energía, spintrónica y muchas más.

Un compósito puede entrar en resonancia cuando está sujeto a un campo eléctrico o magnético oscilante, dependiendo del rango de frecuencias del campo, el compósito puede entrar en resonancia electromecánica, magnetoacústica y ferromagnética.

La resonancia electromecánica se da cuando la frecuencia del campo es igual a la frecuencia natural del compuesto electromecánico, es decir la frecuencia mecánica natural del sistema más la contribución de la fase piezoeléctrica.

La resonancia magnetoacústica se da cuando la frecuencia de onda del spin es igual a la frecuencia de excitación de una onda acústica.

La resonancia ferromagnética se da cuando la frecuencia del campo magnético aplicado perpendicular a la precesión es igual a la frecuencia de precesión del vector magnetización [8].

Este trabajo se enfocará en la resonancia electromecánica en compuestos bicapa.

El efecto magnetoeléctrico depende mucho del tipo de conectividad entre las fases. Cada fase en el compósito puede estar conectada en 0, 1, 2 y 3 dimensiones. Para el caso de compósitos de dos fases existen 10 posibles conectividades: 0-0, 1-0, 2-0, 3-0, 1-1, 1-2, 1-3, 2-2, 3-2 y 3-3. Para el caso general de n fases el número de conectividades está dado por (n+3)!/3! n! [8], La geometría que se usara en este caso en particular será 2-2.

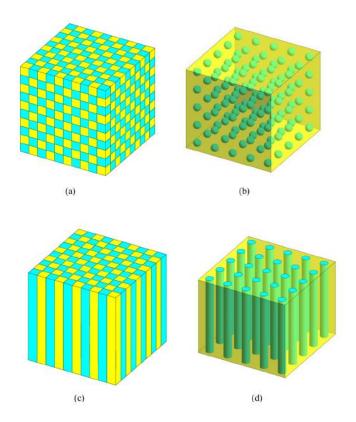


Ilustración 7 Algunos tipos de conectividades en sistemas bifásicos: a) Conectividad 0-0, b) Conectividad 0-3, c) Conectividad 1-1, y d) Conectividad 1-3

Las ecuaciones constitutivas generales del efecto magnetoeléctrico (efecto ME) son funciones lineales que en forma tensorial se representan como:

$$P_i = \alpha_{ij}H_i$$
 (1.1)

$$M_i = \frac{\alpha_{ij}}{\mu_0} E_j \quad (1.2)$$

Donde  $P_i$  es la polarización,  $M_i$  es la magnetización,  $E_j$  es el campo eléctrico,  $H_j$  es el campo magnético,  $\alpha_{ij}$  es el tensor de susceptibilidad magnetoeléctrica o coeficiente magnetoeléctrico y  $\mu_0$  la permeabilidad del vacío [7].

Cuando un campo eléctrico o magnético uniforme es aplicado sobre el compósito, el cambio en la densidad de energía interna de Gibbs, puede ser expresado como (Landau and Lifshitz 1980) [7].

$$dF = -P_i dE_i - \mu_0 M_i dH_i$$
 (1.3)

Lo cual representa los cambios en la energía interna debido al campo aplicado, tomando en cuenta una temperatura constante T, además de solo aplicar un campo a la vez, se pueden deducir las siguientes relaciones [7].

$$P_i = -\left(\delta F/dE_i\right)_{HT} \tag{1.4}$$

$$\mu_0 M_i = -\left(\delta F/_{dH_i}\right)_{E.T} (1.5)$$

Suponiendo que las susceptibilidades magnética ( $\chi^M$ ) y eléctrica ( $\chi^E$ ), son independientes de sus respectivos campos H y E, se obtiene una expresión lineal para un sistema con dieléctrico y magnético los cuales tienen un intercambio magnetoeléctrico (ME) [7].

$$F = -\frac{1}{2}\chi_{ij}^{E}E_{i}E_{j} - \frac{1}{2}\chi_{ij}^{M}H_{i}H_{j} - \alpha_{ij}E_{i}H_{j} \quad (1.6)$$

El primer término del lado derecho, es la energía almacenada debido al campo eléctrico, el segundo término es la energía almacenada debido al campo magnético y el tercer término es el acoplamiento bilineal entre los subsistemas magnético y eléctrico al aplicar campos eléctrico y magnético a la vez. Entonces se pueden obtener expresiones para la polarización y magnetización al aplicar ambos campos a la vez [7].

$$P_i = \chi_{ij}^E E_j + \alpha_{ij} H_j \quad (1.7)$$

$$M_i = \chi_{ij}^M H_j + \frac{\alpha_{ij}}{\mu_0} E_j$$
 (1.8)

La susceptibilidad ME o coeficiente ME, es un tensor axial de segundo rango, que involucra el intercambio entre los tensores de primer rango  $E_j$  y  $H_j$ . A diferencia de los tensores de permitividad y permeabilidad que son polares. Esto es importante ya que los valores del coeficiente ME dependen del grupo puntual magnético en lugar del cristalográfico [7].

## Efecto magnetoeléctrico en la región de resonancia electromecánica

La resonancia magnetoeléctrica (MER), se logra cuando el campo aplicado oscilante tiene la misma frecuencia que la frecuencia natural del compósito. Es importante destacar que la frecuencia natural del compósito no es la misma que la frecuencia mecánica del compósito. La frecuencia mecánica natural solo depende del componente inercial (masa o densidad) y del componente elástico (módulo de Young o constantes elásticas).

Por otro lado, la frecuencia natural del compósito, es la frecuencia mecánica alterada por las interacciones electroestáticas de la fase piezoeléctrica, ya que esta se comporta como un capacitor al deformarse y esto contribuye o perjudica a la frecuencia mecánica. La frecuencia del compósito depende del componente inercial, componente elástico y el componente electroestático que sería el coeficiente piezoeléctrico [9].

En el caso de un compósito en forma de barra que oscila longitudinalmente la ecuación elastodinámica que describe el movimiento, se deduce por mecánica del medio continuo.

Aplicando la segunda ley de Newton a una sección de una barra no uniforme.

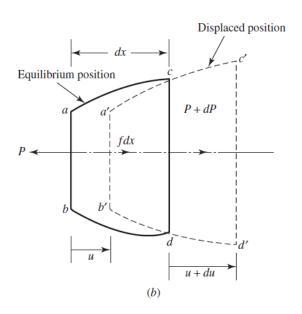


Ilustración 8 Vibración longitudinal de un elemento de una barra no uniforme

Considerando una barra elástica de longitud l con una sección transversal que varía A(x), las fuerzas internas actuando sobre el elemento de longitud dx mostrado en la ilustración 8 son P y P+dP, el desplazamiento de la sección transversal es representado por u.

Teniendo en cuenta esto, la deformación unitaria  $\varepsilon = \delta u/\delta x$ , que es el cambio en la longitud del elemento respecto a la longitud original de este [10].

Por lo tanto la fuerza interna *P* puede describirse de la forma.

$$P = \sigma A(x) = EA(x) \frac{\delta u}{\delta x} \quad (1.9)$$

Donde  $\sigma$  es el esfuerzo en la sección transversal, y E es el módulo de Young, tomando en cuenta una fuerza externa por unidad de longitud f(x,t), las fuerzas totales actuando en el elemento son:

$$(P+dP) - P + f dx = dP + f dx \quad (2.0)$$

La segunda ley de Newton  $\sum F = ma$  obtenemos

$$dP + f dx = \rho A(x) dx \frac{\delta^2 u}{\delta t^2}$$
 (2.1)

Donde  $\rho$  es la densidad, usando la expresión  $dP = \frac{\delta P}{\delta x} dx$  y sustituyendo (1.9) en ella obtenemos la nueva expresión para la segunda ley:

$$\frac{\delta}{\delta x} \left[ EA(x) \frac{\delta u(x,t)}{\delta x} \right] + f(x,t) = \rho(x) A(x) \frac{\delta^2 u}{\delta t^2}(x,t) \quad (2.2)$$

Reduciendo.

$$EA(x)\frac{\delta^2 u}{\delta x^2}(x,t) + f(x,t) = \rho(x)A(x)\frac{\delta^2 u}{\delta t^2}(x,t) \quad (2.3)$$

Esta es la ecuación constitutiva para la vibración de una barra de sección variable [10].

En el compósito no habrá fuerzas externas, la sección transversal es constante así como la densidad, por lo que A se puede ir de la ecuación.

$$\therefore E \frac{\delta^2 u}{\delta x^2} = \rho \frac{\delta^2 u}{\delta t^2} \quad (2.4)$$

Un compósito bicapa con fase piezoeléctrica y piezomagnetica, tiene un componente elástico diferente para cada fase, por lo que si se desea aplicar la ecuación (2.4) es necesario separar el componente elástico de esta ecuación dependiendo de la fracción volumétrica de cada una.

Definiendo la fracción volumétrica del piezoeléctrico como V y la fracción del piezomagnetico como, (1-V), el desplazamiento del piezoeléctrico como  $u_p$  y el del piezomagnetico como  $u_m$ , además de una densidad total definida como  $\bar{\rho} = V \rho_p + (1-V) \rho_m$  donde  $\rho_p$  y  $\rho_m$  son las densidades de la fase eléctrica y magnética respectivamente y los módulos de Young de cada fase serian  $E^p$ y  $E^m$ 

$$\therefore \bar{\rho} \frac{\delta^2 u}{\delta t^2} = \left[ V E^p \frac{\delta^2 u_p}{\delta x^2} + (1 - V) E^m \frac{\delta^2 u_m}{\delta x^2} \right] \quad (2.5)$$

En las fases del compósito además se está considerando una anisotropía, por lo que el módulo de Young será un tensor de rigidez o elasticidad.  $C^p_{ijkl}$  el eléctrico y  $C^m_{ijkl}$  para el magnético.

La ecuación (2.5) se puede rescribir de la siguiente manera en notación tensorial.

$$\bar{\rho} \frac{\delta^2 u_i}{\delta t^2} = \left\{ V C_{ijkl}^p \frac{\delta}{\delta x_i} \left[ \frac{\delta u_k^p}{\delta x_l} \right] + (1 - V) C_{ijkl}^m \frac{\delta}{\delta x_i} \left[ \frac{\delta u_k^m}{\delta x_l} \right] \right\} \quad (2.6)$$

Recordando que  $\varepsilon = \frac{\delta u}{\delta x}$  en forma tensorial.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\delta u_i}{\delta x_i} \quad (2.7)$$

Por ley de Hooke sabemos que la deformación unitaria por la constante elástica es igual al esfuerzo, usando (2.7).

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$
 (2.8)

Obtenemos la ecuación final aplicando (2.8) en (2.6).

$$\bar{\rho} \frac{\delta^2 u_i}{\delta t^2} = V \frac{\delta \tau_{ij}^p}{\delta x_i} + (1 - V) \frac{\delta \tau_{ij}^m}{\delta x_i} \quad (2.9)$$

Esta ecuación que describe la oscilación del compósito, es la presentada por Bichurin en [7].

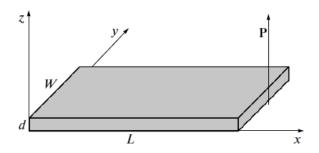


Ilustración 9 Orientación del compósito

Tomando en cuenta solo la oscilación longitudinal.

 $\bar{
ho} \, rac{\delta^2 u_x}{\delta t^2} = V \, rac{\delta au_{11}^p}{\delta x} + (1-V) \, rac{\delta au_{11}^m}{\delta x} \,$  (3.0) Las expresiones de la deformación unitaria  $S_1^p, S_1^m$  de la capa eléctrica y magnética respectivamente así como el desplazamiento eléctrico  $D_3^p$  en dirección perpendicular a la placa son, aplicando campo magnético a lo largo de la placa.

$$S_1^p = s_{11}^p \tau_{11}^p + d_{31}^p E_3$$
 (3.1)

$$S_1^m = s_{11}^m \tau_{11}^m + q_{11}^m H_1$$
 (3.2)

$$D_3^p = \varepsilon_{33}^p E_3 + d_{31}^p \tau_{11}^p \quad (3.3)$$

Donde  $s_{11}^p$  es la complianza del piezoeléctrico en la dirección 1 (x),  $d_{31}^p$  es el coeficiente piezoeléctrico que nos indica la deformación en la dirección 1 cuando se aplica un campo en la dirección 3 ( $E_3$ ), de igual manera  $s_{11}^m$  es la complianza del piezomagnetico,  $q_{11}^m$  es el coeficiente piezomagnetico y  $H_1$  el campo magnético en las direcciones indicadas.

Obteniendo los esfuerzos  $\tau_{11}^p$  y  $\tau_{11}^m$  de (3.1) y (3.2) y sustituyendo en (3.0), se obtiene una solución para la ecuación, asumiendo movimiento armónico.

$$u_x = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$
 (3.4)

Donde:

$$k = \omega \sqrt{\bar{\rho} \left[ \frac{V}{s_{11}^p} + \frac{1 - V}{s_{11}^m} \right]^{-1}}$$

 $\omega$  es la frecuencia angular y las constantes A y B, se determinan a partir de las condiciones de frontera para una barra que está libre en ambos extremos, la deformación unitaria y el esfuerzo son cero en ambos extremos de la barra.

En x = 0 y x = L

$$\frac{\delta u_x}{\delta x} = 0$$

$$V\tau_{11}^p + (1 - V)\tau_{11}^m = 0 \quad (3.5)$$

El efecto magnetoeléctrico es determinado usando condición de circuito abierto.

$$\int_0^L D_3^p dx = 0 \quad (3.6)$$

Substituyendo (3.3) en (3.6) con las condiciones aportadas por (3.4) y (3.5) se obtiene.

$$\alpha_{31} = \frac{2d_{31}^{p} q_{11}^{m} s_{11}^{p} V(1 - V) \tan(kL/2)}{s_{1} \left(d_{31}^{p^{2}} - s_{11}^{p} \varepsilon_{33}^{p}\right) kL - 2d_{31}^{p^{2}} V s_{11}^{m} \tan(kL/2)}$$
(3.7)

Donde  $s_1 = V s_{11}^m + (1 - V) s_{11}^p$ 

Este modelo como tal, no tiene incluido un amortiguamiento, el cual nos modifica la frecuencia de resonancia y el pico de resonancia, por lo que se usara una frecuencia compleja  $\omega \left(1+\frac{i}{Q}\right)$  donde Q es el factor de calidad determinado experimentalmente como [11].

$$Q = \frac{fancho}{fr}$$

fancho es el ancho del pico de resonancia a la altura  $1/\sqrt{2}$  del pico de resonancia y fr es la frecuencia de resonancia. El factor de calidad está relacionado con el factor de perdida estructural  $\eta$  y el factor de amortiguamiento  $\zeta$  por las siguientes expresiones [12].

$$Q = \frac{1}{\eta} = \frac{1}{2\zeta}$$

## **Justificación**

La necesidad de desarrollar nuevos sensores con un mayor efecto magnetoeléctrico requiere de diseños optimizados de materiales compuestos magnetoeléctricos en forma de bicapas y multicapas.

## **Objetivos**

Objetivo General

El objetivo general de la tesis consiste en la simulación, de materiales compuestos magnetoeléctricos en forma de bicapas y multicapas utilizando una combinación de materiales magnetostrictivos y piezoeléctricos.

Objetivos específicos

Los objetivos específicos son:

- Simulación de materiales compuestos magnetoeléctricos en forma de bicapas y multicapas. Como materiales piezoeléctricos se considerarán al titanato de bario BiTiO<sub>3</sub>, los titanatos de plomo-zirconia (Pb, Zr) O<sub>3</sub> (PZT) y como materiales magnetostrictivos se considerarán la ferrita de cobalto CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> y las aleaciones basadas en Fe-Ga.
- Comparar la simulación con los modelos analíticos que consideran las ecuaciones constitutivas piezoeléctricas y magnetostrictivas y las ecuaciones Físico-Matemáticas de la electro-magneto-elastodinámica que gobiernan los fenómenos físicos involucrados. Las simulaciones numéricas se implementarán por el Método de Elementos Finitos.

## **Hipótesis**

Es posible simular materiales compuestos magnetoeléctricos en forma de bicapas y multicapas, ya que los resultados de la simulación son útiles para predecir, analizar y tomar decisiones con una buena reproducibilidad y geometría optimizada, antes de la fabricación del material.

## **Métodos**

## Efecto piezoeléctrico

El software utiliza ecuaciones constitutivas en dos modalidades distintas.

Stress Charge, que es el efecto piezoeléctrico considerando un esfuerzo constante más la contribución elástica del material, esta puede ser propia del sistema por esfuerzos internos, debido a un factor externo o ambas.

Stress Charge

$$T = c_E S - e^T E$$

$$P = eS + \varepsilon_S E$$

Donde:

*T* es el vector de esfuerzo. E es el vector campo eléctrico.  $c_E$  es la matriz de elasticidad P es el vector de polarización. S es la matriz de deformación unitaria. P es el vector de polarización. P es el vector de polarización.

 $e^T$  es la traspuesta de la matriz de  $\varepsilon_S$  es la matriz de permitividad eléctrica.

coeficientes piezoeléctricos.

Strain Charge, es el efecto piezoeléctrico considerando una deformación constante más la contribución elástica del material, esta puede ser propia del sistema por esfuerzos internos, debido a un factor externo o ambas. Es importante mencionar que la información de la mayoría de los materiales aparece en esta forma.

Strain Charge

$$S = s_E T + d^T E$$

$$P = dT + \varepsilon_T E$$

Donde:

*T* es el vector de esfuerzo.

E es el vector campo eléctrico.

 $s_E$  es la matriz de complianzas. P es el vector de polarización. S es la matriz de deformación unitaria. d es la matriz de coeficientes piezoeléctricos.  $d^T$  es la traspuesta de la matriz de  $\varepsilon_T$  es la matriz de permitividad eléctrica. coeficientes piezoeléctricos.

Para pasar de una modalidad a otra el software hace las siguientes conversiones.

Strain-Charge to Stress-Charge

$$c_E = s_E^{-1}$$

$$e = ds_E^{-1}$$

$$\varepsilon_S = \varepsilon_0 \varepsilon_{rS} = \varepsilon_0 \varepsilon_{rT} - ds_E^{-1} d^T$$

Es importante mencionar que los coeficientes piezoeléctricos cambian dependiendo de la modalidad y sus unidades son distintas. A continuación, se anexa una tabla para identificar fácilmente como trabajan los coeficientes en cada modalidad [13], [14].

Piezoeléctrico				
Strain-Charge	Stress-Charge			
Directo				
$d = {}^{P}/_{T}$	$d = {}^{P}/{}_{S}$			
Inverso				
d = S/E	d = T/E			

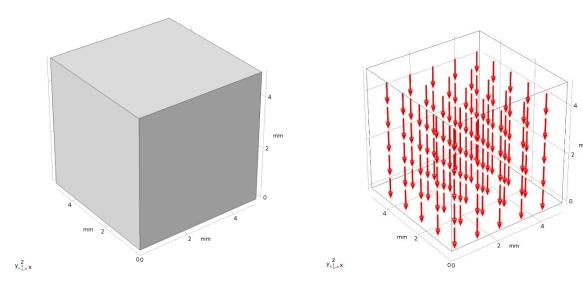
Tabla 2 Coeficiente piezoeléctrico en las diferentes modalidades

## Simulación piezoeléctrica

Después de entender cómo trabajan las ecuaciones que usa el software y las ecuaciones analíticas. Es necesario comparar resultados, el análisis por elemento finito es un método numérico que resuelve sistemas de ecuaciones diferenciales para cada sección de un mallado, y el otro es el método analítico directo.

Es importante tomar consideraciones en la simulación, ya que una ecuación analítica es idealizada y no considera como afecta los alrededores del sistema ni el efecto de las contribuciones elásticas propias del sistema en el efecto piezoeléctrico o magnetostrictivo.

## Efecto piezoeléctrico inverso



*Ilustración 10 Cubo de 5x5x5(mm)* 

Ilustración 11 Campo eléctrico aplicado en Z

- El análisis se hiso en un cubo de 5 mm de lado aplicando el material de la librería, PZT 5A
- 2. Se aplicó un potencial de V=100V en la cara XY superior en el módulo de electrostática.
- 3. En la cara XY inferior se aplicó la condición de Ground, V = 0
- 4. Como condición de frontera en el módulo de solid mechanics se definen rodillos en 3 de las 6 caras de un cubo, con el fin de que 3 caras se deformen libremente sin fricción, cada una perpendicular a uno de los ejes coordenados.
- 5. La diferencia de potencial resulta en un campo eléctrico  $E=20000 \frac{N}{c}$
- 6. Se escogió un estudio estacionario para minimizar el tiempo de cálculo.
- 7. Se utilizará el modelo strain-charge, y la matriz de coeficientes es la siguiente.

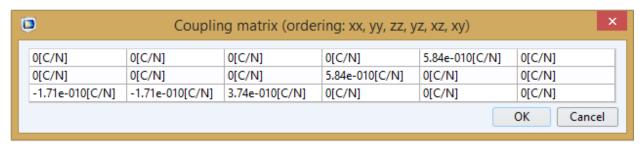


Ilustración 12 Matriz de coeficientes piezoeléctricos strain-charge

Las consideraciones para el efecto inverso son las siguientes:

- El voltaje se definió de manera que el campo eléctrico está en dirección negativa del eje Z.
- En el módulo de electrostática es necesario poner una condición de potencial cero (ground) además de la condición default de Zero Charge.

## Desplazamientos usando la ecuación analítica

$$X = E_3 * d_{31} = -20,000 * -1.71E - 10 * 5 = 1.71E - 5 mm$$

$$Y = E_3 * d_{32} = -20,000 * -1.71E - 10 * 5 = 1.71E - 5 mm$$

$$Z = E_3 * d_{33} = -20,000 * 3.74E - 10 * 5 = -3.74E - 5 mm$$

## Desplazamientos por elemento finito

X = 1.71E - 5 mm

Y = 1.71E - 5 mm

Z = -3.74 E - 5 mm

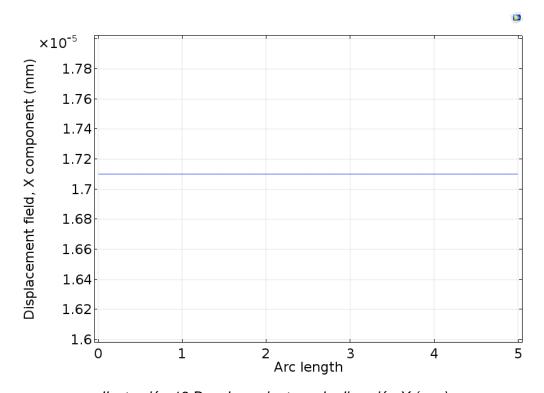


Ilustración 13 Desplazamiento en la dirección X (mm)

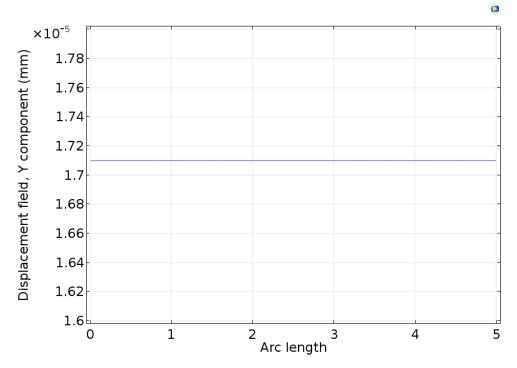


Ilustración 14 Desplazamiento en la dirección Y (mm)

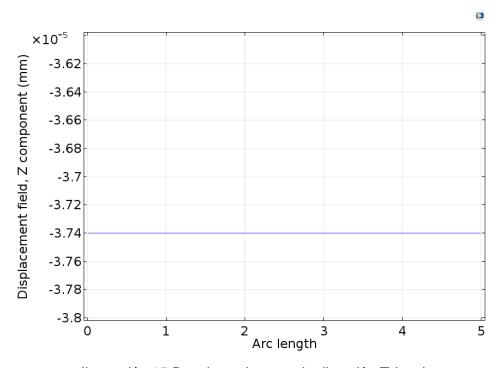
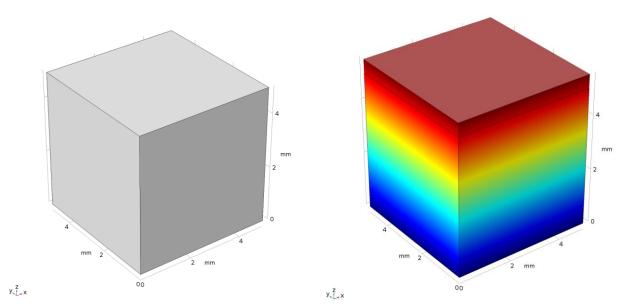


Ilustración 15 Desplazamiento en la dirección Z (mm)

## Efecto piezoeléctrico directo



*Ilustración 16 Cubo de 5x5x5(mm)* 

Ilustración 17 Desplazamiento aplicado en Z

- El análisis se hiso en un cubo de 5 mm de lado aplicando el material de la librería, PZT 5A
- 2. En la cara XY inferior se aplicó la condición de Ground, V=0
- 3. Como condición de frontera mecánica se definen rodillos en 5 de las 6 caras de un cubo, con el fin de obtener la deformación solo en la dirección Z, esto con el fin de simplificar el cálculo analítico.
- 4. Se aplicó un desplazamiento de 1E-8m~(10nm) en la dirección Z
- 5. Se escogió un estudio estacionario para minimizar el tiempo de cálculo.
- 6. Se utilizará el modelo stress-charge para simplificar el cálculo analítico, y la matriz de coeficientes es la siguiente.

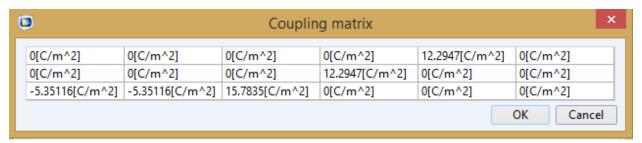


Ilustración 18 Matriz de coeficientes piezoeléctricos stress-charge

Consideraciones para el efecto inverso.

- En el módulo de electrostática es necesario poner una condición de potencial cero (ground) además de la condición default de Zero Charge.
- Al definir un desplazamiento en Z forzosamente tiene que existir desplazamientos en X y Y, si el desplazamiento se restringe habrá esfuerzos internos en el material que afectaran la polarización, por esta razón hay que medir la polarización solo del efecto piezoeléctrico y no de la ecuación constitutiva completa.

## Polarización usando ecuación analítica

$$P_z = X_3 * d_{33} = \frac{Z}{0.005} * d_{33} = \frac{10E - 8}{0.005} * 15.7835 = 3.1567E - 5 \frac{C}{m^2}$$

### Polarización por elemento finito

$$P_z = 3.15669E - 5\frac{C}{m^2}$$

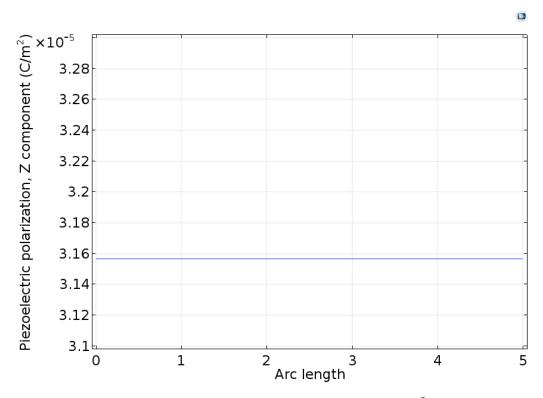


Ilustración 19 Polarización en dirección  $Z(C/m^2)$ 

## Efecto magnetostrictivo

El software usa la siguiente expresión para definir el tensor de deformaciones:

$$\varepsilon_{me} = \frac{3}{2} \frac{1}{M_s^2} \left[ \lambda_{100} dev(M \otimes M) + (\lambda_{111} - \lambda_{100}) \sum_{i \neq j} M_i M_j (e_i \otimes e_j) \right]$$

#### Donde:

 $M_{s}$  es la magnetización de saturación.

 $dev(M \otimes M)$  es el Tensor deviatoric del producto tensorial (tensor de orden 2 y rango 1) del tensor magnetización de primer rango con el mismo. El deviatoric tensor es el tensor que describe el cambio de forma.

En mecánica del medio continuo, el tensor de esfuerzos puede separarse en dos tensores, el tensor hidrostático y el tensor de deviatoric, y representan el esfuerzo debido a la presión sobre el material en su estado natural, y a esfuerzos externos aplicados respectivamente. Por lo cual también representan la deformación en su estado natural (volumen) y la deformación debido a un esfuerzo externo aplicado (forma).

El tensor hidrostático se define como como el promedio del esfuerzo total en los ejes principales. Es  $\frac{1}{3}$  de la traza del tensor.

El tensor deviatoric se define como el tensor de esfuerzo total menos el tensor hidrostático. Una característica de este tensor es que su traza es igual a cero.

Al obtener el deviatoric de un tensor de magnetización en las componentes del tensor de deformación, le estamos restando el tensor hidrostático de magnetización que es lo mismo que retirar la magnetización cero, como se hace en el desarrollo de la ecuación analítica. Y es por eso que se le resta el  $\frac{1}{3}$  del tensor hidrostático, esto visto desde el punto de vista de la mecánica del medio continuo.

 $\sum_{i \neq j} M_i M_j (e_i \otimes e_j)$  es el tensor especificando que solo se suma cuando los índices son distintos, el producto tensorial de los términos del deviatoric de magnetización por los términos del producto tensorial de los vectores base (basis dyad) en la misma dirección. Esto es para que la magnetización que no está en los ejes principales sea medida correctamente, cuando los vectores base se transforman los términos que no están en la diagonal dependen de un nuevo vector base que está en función de,  $e_i e_j$ .

Tomando en cuenta lo anterior, y definiendo la deformación en cualquier dirección  $\beta_i$  como:

$$\lambda = \sum_{i,j} \beta_i \beta_j \varepsilon_{ij}$$

La ecuación queda de la siguiente manera.

$$\lambda = \frac{3}{2} \frac{\lambda_{100}}{M_S^2} \left[ M_1^2 \left( \beta_1^2 - \frac{1}{3} \right) + M_2^2 \left( \beta_2^2 - \frac{1}{3} \right) + M_3^2 \left( \beta_3^2 - \frac{1}{3} \right) \right] + 3 \frac{\lambda_{111}}{M_S^2} (M_1 M_2 \beta_1 \beta_2 + M_1 M_3 \beta_1 \beta_3 + M_2 M_3 \beta_2 \beta_3)$$

Esta ecuación se comporta de la misma manera que la analítica vista con anterioridad cuando  $|M| \to M_S$ 

Para la magnetización el software utiliza por default la siguiente ecuación.

$$M = M_s L(|H_{eff}|) \frac{H_{eff}}{|H_{eff}|}$$

Donde L, es la función de Langevin que simula la magnetización. Aunque presenta problemas cuando se acerca a la saturación, se pueden agregar datos experimentales para la curva o escoger otros modelos.

El campo magnético efectivo  $H_{eff}$  se define con la ecuación:

$$H_{eff} = H + \frac{3}{\mu_0 M_s^2} \left[ \lambda_{100} S_{ed} + (\lambda_{111} - \lambda_{100}) \sum_{i \neq j} S_{ed} (e_i \otimes e_j) \right] M$$

Donde *H* es el campo magnético aplicado y el segundo término representa la contribución del esfuerzo mecánico al campo magnético aplicado.

El tensor de deviatoric del esfuerzo está relacionado con la deformación elástica de la siguiente manera [15], [16].

$$S_{ed} = dev(c_H \varepsilon)$$

## Simulación magnetostricción

## Magnetostricción saturando en la dirección [100]

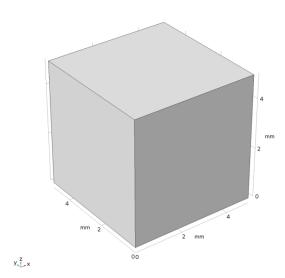


Ilustración 20 Cubo de 5x5x5(mm)

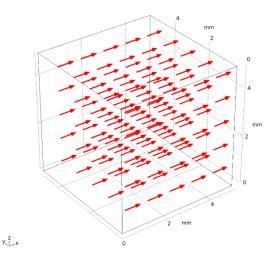


Ilustración 21 Campo magnético aplicado en [100]

- 1. El análisis se hiso en un cubo de 5 mm de lado aplicando un material personalizado con datos experimentales de la ferrita de cobalto.
- Como condición de frontera en el módulo de solid mechanics se definen rodillos en 3 de las 6 caras de un cubo, con el fin de que 3 caras se deformen libremente sin fricción, cada una perpendicular a uno de los ejes coordenados.
- 3. Se aplicó un campo magnético  $H = 2040.5 \frac{A}{m}$  en la dirección [100]
- 4.  $\lambda_{100} = -251E 6$
- 5.  $\lambda_{111} = 40.9E 6$
- 6.  $\chi_m = 200$
- 7.  $M_s = 408100 \frac{A}{m}$

### Consideraciones para la saturación en la dirección [100]

- La definición de las constantes lambda 100 y 111 es la siguiente: la deformación unitaria del cristal, cuando este se satura en esa dirección.
- Para poder definir un campo magnético uniforme, se deben seleccionar todas las caras del cubo.

- La ecuación del análisis por elemento finito se comporta igual que la analítica cuando el material es saturado. Por esta razón se aplica un campo magnético que al multiplicarlo por la susceptibilidad magnética nos de la magnetización de saturación.
- En multiphysics, en el tipo de acoplamiento, se selecciona "Efecto Joule", para que no tome en cuenta las contribuciones de esfuerzos propios del sistema en la ecuación.
- En el apartado de Solid Mechanics, en el material magnetostrictivo, se selecciona cubico no lineal como el modelo de magnetostricción.
- En el apartado de Solid Mechanics, en el material magnetostrictivo, en la parte de magnetización, se selecciona un modelo lineal, esto para para asegurarnos de que se alcance la magnetización de saturación.
- En esta configuración, se hace un estudio estacionario.

### Desplazamientos usando la ecuación analítica

Magnetizando en [100],  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = 0$ ,  $\alpha_3 = 0$ 

Si se mide la deformación unitaria en la dirección X,  $\beta_1=1$ ,  $\beta_2=0$ ,  $\beta_3=0$ 

$$\lambda = \lambda_{100} :: X = -251.7E - 6 * 5 * 1E6 = -1258.5 nm$$

Si se mide la deformación unitaria en la dirección Y,  $\beta_1=0$ ,  $\beta_2=1$ ,  $\beta_3=0$ 

$$\lambda = -\frac{1}{2}\lambda_{100} : X = -0.5 * -251.7E - 6 * 5 * 1E6 = 629.25nm$$

Si se mide la deformación unitaria en la dirección Y,  $\beta_1=0$ ,  $\beta_2=0$ ,  $\beta_3=1$ 

$$\lambda = -\frac{1}{2}\lambda_{100} : X = -0.5 * -251.7E - 6 * 5 * 1E6 = 629.25nm$$

#### Desplazamientos por elemento finito

X = -1258.5 nm

Y = 629.25 nm

Z = 629.25 nm

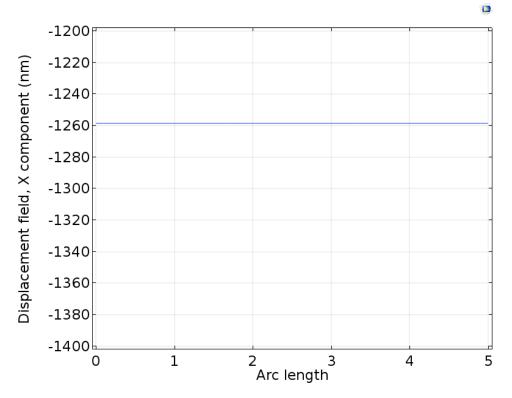


Ilustración 22 Desplazamiento en la dirección X (nm)

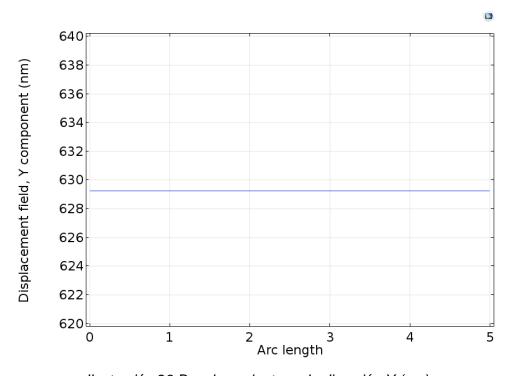


Ilustración 23 Desplazamiento en la dirección Y (nm)

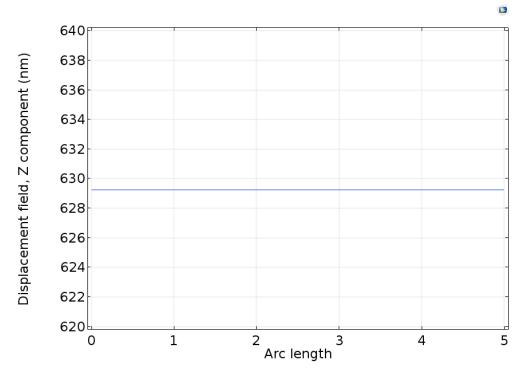
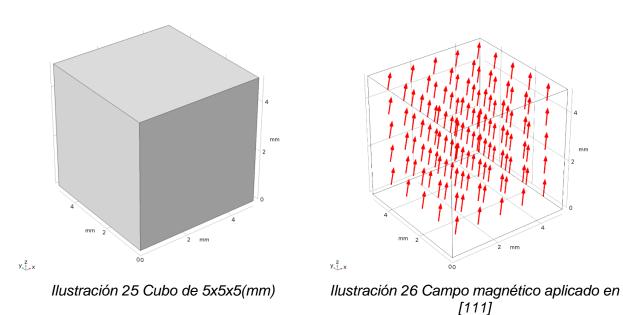


Ilustración 24 Desplazamiento en la dirección Z (nm)

# Magnetostricción saturando en la dirección [111]



- 1. El análisis se hiso en un cubo de 5 mm de lado aplicando un material personalizado con datos experimentales de la ferrita de cobalto.
- 2. Como condición de frontera en el módulo de solid mechanics se fijó el punto en el origen del cubo, esto con el fin de dejarlo deformarse libremente en la dirección [111].
- 3. Se aplicó un campo magnético  $H = 1178.08 \frac{A}{m}$  en la direcciones [100], [010] y [001]
- 4.  $\lambda_{100} = -251E 6$
- 5.  $\lambda_{111} = 40.9E 6$
- 6.  $\chi_m = 200$
- 7.  $M_s = 408100 \frac{A}{m}$
- 8. En esta configuración, el estudio estacionario no convergió, por lo que se hizo un estudio en el tiempo con paso estricto de 0 a 1 segundos con paso de 0.1s.

Consideraciones para la saturación en la dirección [111]

- La definición de las constantes lambda 100 y 111 es la siguiente: la deformación unitaria del cristal, cuando este se satura en esa dirección.
- Para poder definir un campo magnético uniforme, se deben seleccionar todas las caras del cubo.
- La ecuación del análisis por elemento finito se comporta igual que la analítica cuando el material es saturado. Por esta razón se aplica un campo magnético que al multiplicarlo por la susceptibilidad magnética nos de la magnetización de saturación.
- En multiphysics, en el tipo de acoplamiento, se selecciona "Efecto Joule", para que no tome en cuenta las contribuciones de esfuerzos propios del sistema en la ecuación.
- En el apartado de Solid Mechanics, en el material magnetostrictivo, se selecciona cubico no lineal como el modelo de magnetostricción.
- En el apartado de Solid Mechanics, en el material magnetostrictivo, en la parte de magnetización, se selecciona un modelo lineal, esto para para asegurarnos de que se alcance la magnetización de saturación.

#### Desplazamiento por ecuación analítica

Cuando se magnetiza en [111] , 
$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \frac{1}{\sqrt[3]{3}}$$

$$\lambda = \lambda_{111} : Desplazamiento en [111] = 40.9E - 6 * \sqrt[2]{75} * 1E6 = 354.204390 nm$$

#### Desplazamiento por elemento finito

Desplazamiento en [111] = 
$$\sqrt[2]{x^2 + y^2 + z^2}$$
 = **354.203** nm

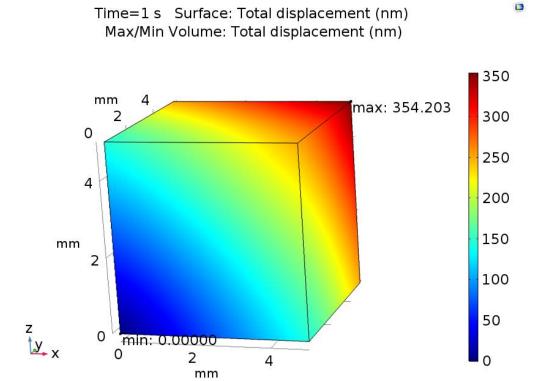


Ilustración 27 Desplazamiento en la dirección [111] (nm)

## Simulación del efecto magnetoeléctrico

El software de análisis por elemento finito no incluye las ecuaciones constitutivas para el efecto electromagnético en compósitos, por lo que se acoplaran mecánicamente los 2 modelos por separado (piezoeléctrico y magnetostrictivo o piezomagnetico).

Hay que tener ciertas consideraciones a la hora de simular esto, si es que se quiere lograr una aproximación a las ecuaciones analíticas que se comparan con datos experimentales en la literatura.

#### Consideraciones:

- I. El análisis se hará en un modelo 2D para poder ignorar una dimensión, y las contribuciones de esta no afecten el resultado, se trabajará en X y Z.
- II. Como se explicó previamente, las ecuaciones analíticas presentadas en la literatura consideran las contribuciones eléctricas y magnéticas en el eje Z despreciable, tomando en cuenta la consideración anterior. Por esta razón en los coeficientes piezoeléctricos y piezomagneticos solo se consideraran las contribuciones en el eje X.
- III. En el caso de las constantes elásticas o de complianza, de igual manera solo son considerados los factores en X, en el software no podemos hacer esto, pero podemos considerar un modelo isotrópico en las constantes elásticas, esto nos aproximara bastante a los resultados de las ecuaciones.

- IV. El factor de amortiguamiento se pide como  $\eta$  en el análisis por elemento finito.
- V. Ya que la oscilación es libre en X, las únicas condiciones de frontera mecánicas que se deben agregar son rodillos en la parte superior e inferior del compósito.
- VI. La unión mecánica entre las fases se considera ideal en las ecuaciones, por lo que de igual manera se simular.

#### Factor de acoplamiento

En el contexto de esta última consideración, es posible obtener un parámetro K, que nos indique la cantidad de deformación transmitida de una fase a la otra por medio de la interfaz.

El esfuerzo cortante en una pequeña película de material que une las fases está definido por:

$$\tau_c = \gamma G$$
 (3.8)

Donde G es el módulo de elasticidad cortante y  $\gamma$  es el ángulo formado por la deformación como se muestra en la ilustración 28 donde  $\gamma = x/y$ .

Donde el desplazamiento x nos indica que tanto de la deformación es transmitida de un extremo a otro, cuando este desplazamiento tiende a cero, la unión es ideal y cuando incrementa, las pérdidas son mayores. El espesor de la película d es la altura en el elemento de la ilustración 28.

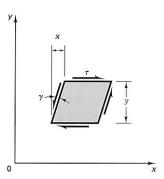


Ilustración 28 Deformación por esfuerzo cortante

Reescribiendo (3.8) con la definición de  $\gamma$ .

$$\tau_c = \frac{G}{d} \Delta x \quad (3.9)$$

La relación  $\frac{G}{d}$  es la constante elástica por unidad de área para la deformación cortante.

Siendo K = 1 un acoplamiento ideal donde  $\Delta x$  es cero porque el esfuerzo es cero, y K = 0 el acoplamiento cuando  $\Delta x$  es máximo, es decir cuando se llega al esfuerzo cortante de fluencia.

$$K = 1 - \frac{\Delta x}{\Delta x_{max}} \quad (4.0)$$

Usando (4.0) para poner K en función del esfuerzo de cedencia y del modulo G.

$$K = 1 - \frac{G\Delta x}{d\tau_{flu}} \quad (4.1)$$

La ecuación (4.1) nos muestra que para lograr una K con valor cercano a uno es necesario un módulo de cortante alto al mismo tiempo que un espesor mínimo en la película.

Una unión mecánica con módulo de cortante de entre 5 y 10 Gpa es suficiente para trasmitir la mayoría de la deformación [17].

Frecuencia de resonancia mecánica.

La frecuencia de resonancia mecánica siguiendo el modelo de Bichuri [7], se puede obtener a partir de la solución que presento (3.4), esto con el fin de comparar su modelo en un contexto puramente mecánico inicialmente; la parte piezoeléctrica y magnetostrictiva ya fueron comparadas anteriormente.

De (3.4) tomando en cuenta  $\frac{\delta u_x}{\delta x}=0$  en los extremos del compósito. Se obtiene para una solución no trivial que la frecuencia de resonancia mecánica está dada por:

$$f_{mec} = \frac{n}{2L\sqrt{\bar{\rho}\left[\frac{V}{s_{11}^p} + \frac{1 - V}{s_{11}^m}\right]^{-1}}}$$
(4.2)

Donde n es un numero entero.

Validación del elemento finito en el software con las ecuaciones analíticas

Los datos que se utilizarán serán para el NFO  $s_{11}^m = 6.5\mathrm{e} - 12~m^2/_N$ ,  $q_{11}^m = -680e - 12~N/_A$ ,  $q_{31}^m = 70e - 12~N/_A$ ,  $q_{12}^m = 125e - 12~N/_A$ , y para el PZT  $s_{11}^m = 15.3e - 12~m^2/_N$ ,  $d_{31}^p = -1.75e - 12~m/_V$ ,  $\frac{\varepsilon_{33}^p}{\varepsilon_0} = 1750$ , las densidades  $\rho_m = 3300~\frac{kg}{m^3}$ ,  $\rho_p = 6900~\frac{kg}{m^3}$ , el factor de perdida Q = 150 [7].

#### Modelo:

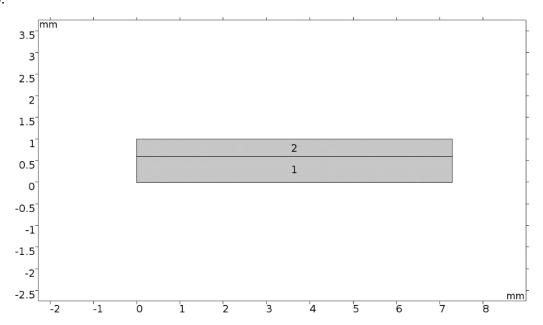


Ilustración 29 (1) Piezoeléctrico, (2) Piezomagnetico, V=0.6, espesor 1 mm, L=7.3mm

- Frecuencia de resonancia mecánica obtenida por (4.0)

$$f_{mec} = 293424.19 Hz$$

- Frecuencia de resonancia mecánica obtenida por elemento finito (ilustración 30); la parte superior es la fase magnética y la inferior la eléctrica.

Eigenfrequency=290.48+0.96825i kHz



Ilustración 30 Frecuencia de resonancia mecánica

$$f_{mec} = 290481.61 \, Hz$$

La diferencia en las frecuencias mecánicas de la formulación analítica y de la simulación puede ser debido a las contribuciones elásticas del eje Z en la simulación.

- Frecuencia de resonancia electromecánica por (3.7)

$$f_{emec} = 300\ 100\ Hz$$

- Frecuencia de resonancia electromecánica por elemento finito (ilustración 31); la parte superior es la fase magnética y la inferior la eléctrica.

Eigenfrequency=300.51+0.93604i kHz



Ilustración 31 Resonancia electromecánica modo L-T.

$$f_{emec} = 300511.457 \, Hz$$

- El efecto magnetoeléctrico en configuración L-T (datos de la literatura).

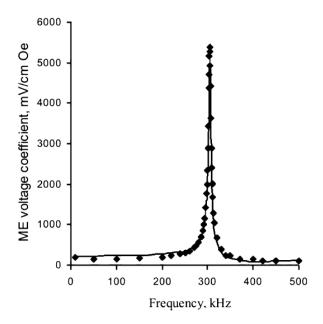


Ilustración 32 Efecto ME de literatura [7]: los puntos son datos experimentales y la línea es por ecuación analítica

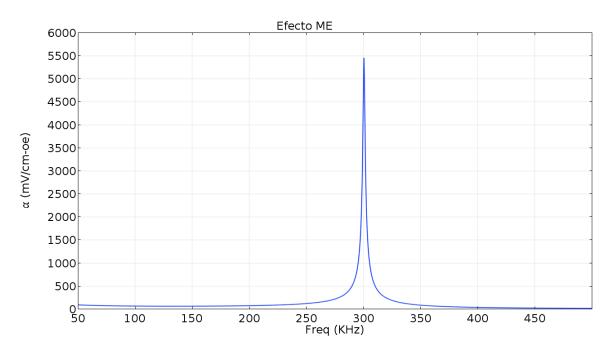


Ilustración 33 Efecto ME por elemento finito

### Resultados

### Piezoeléctrico

En el efecto piezoeléctrico los resultados son muy similares, esto es en primera instancia por la configuración en las condiciones de frontera de este modelo. Se pueden configurar en un amplio rango desde lo ideal hasta lo aproximado a la realidad.

Efecto.	Parámetro.	Ecuación analítica.	Simulación.
Directo.	Р	$3.1567E - 5 \frac{C}{m^2}$	$3.15669E - 5 \frac{C}{m^2}$
Inverso.	x	1.71E – 5 mm	1.71E – 5 mm
	У	1.71E – 5 mm	1.71E – 5 mm
	Z	-3.74E - 5 mm	-3.74 E - 5 mm

Tabla 3 Resultados del efecto piezoeléctrico

## Magnetostrictivo

En el efecto piezoeléctrico los resultados son igualmente similares con excepción de la magnetización sobre la diagonal, en este modo de magnetización hubo concentración de esfuerzos en la esquina donde se encuentra el origen de los ejes coordenados debido a que tomo como punto fijo, esto altero un poco los resultados de ese modo de magnetización. De igual manera las configuraciones en las condiciones de frontera jugaron un papel importante en los resultados.

Magnetización.	Parámetro.	Ecuación analítica.	Simulación.
[111]	$\sqrt[2]{x^2+y^2+z^2}$	354.204390 nm	354.203 nm
[100]	x	−1258.5 nm	-1258.5 nm
	у	629.25nm	629.25nm
	Z	629.25nm	629.25nm

### Efecto magnetoeléctrico

En el efecto ME los resultados varían un poco, esto debido varios factores: la ecuación analítica reduce un modelo en 2 dimensiones a una sola dimensión dividida en dos fracciones volumétricas con propiedades distintas. Por otro lado, en la simulación no es posible dividir el espesor de una línea en fracciones volumétricas por lo que se simulo en 2D. Otro factor a considerar es el factor de pérdida o amortiguamiento del sistema en condiciones de resonancia, El factor de perdida afecta la oscilación en todas las dimensiones, por lo que el factor para la oscilación en una dimensión no es el mismo para oscilaciones en dos dimensiones, aunque las contribuciones sean pequeñas, afectaran el resultado.

Se decidió simular el modo L-T a diferencia del T-T porque su coeficiente magnetoeléctrico es de aproximadamente un orden de magnitud mayor, esto debido al campo desmagnetizaste en el modo T-T, el propósito del efecto magnetoeléctrico es llevarlo a una aplicación como un sensor de campo magnético, y entre mayor sea el efecto es más fácil implementar una aplicación.

Modo.	Parámetro.	Ecuación analítica.	Simulación.
L-T	f <sub>mec</sub>	293424.19 Hz	290481.61 Hz
	f <sub>emec</sub>	300 000 Hz	300511.457 Hz
	α	$5400 \frac{\text{mV}}{\text{cm Oe}}$	$5458 \frac{\text{mV}}{\text{cm Oe}}$

Tabla 5 Resultados del efecto electromagnético

# **Conclusiones**

El análisis por elemento finito muestra ser confiable. tomando las consideraciones necesarias, los resultados pueden idealizarse como las ecuaciones analíticas o pueden aproximarse a un experimento y comparar con resultados experimentales, las ecuaciones analíticas que concuerdan con datos experimentales en la ilustración 32, muestran un efecto ME de 5400 mV/cm-oe a una frecuencia de 300 KHz, la simulación muestra 5458.7 mV/cm-oe a una frecuencia de 300.511 KHz ilustración 33. Entre más datos experimentales se tengan para una simulación es mejor. El problema en común que comparten las ecuaciones analíticas y la simulación en este tipo de análisis es el factor de amortiguamiento, ya que hay discrepancias en la literatura sobre como calcularlo analíticamente, y es justamente este factor de perdida el que nos modifica el ancho y la intensidad del pico.

Teniendo los datos experimentales necesarios, se puede simular un compósito con el fin de optimizar la geometría antes de la fabricación.

# Bibliografía

- [1] D. V. Mirza I. Bichurin, Magnetoelectricity in composites., Taylor & Francis Group, 2012.
- [2] I. S. Sokolnikoff, Tensor Analysis: Theory and Applications., 1951.
- [3] P. Grinfeld, Introduction to Tensor Analysis and the Calculus of Moving Surfaces., Springer, 2013.
- [4] E. K. A. Ahmad Safari, Piezoelectric and Acoustic Materials for Transducer Applications., Springer, 2008.
- [5] R. E. Newnham, Properties of materials, Anisotropy, Symmetry, Structure, 2005.
- [6] C. G. B. D. Cullity, Introduction to Magnetic Materials., Wiley, 2009.
- [7] V. P. Mirza Bichurin, Modeling of Magneoelectric Effects in Composites., Springer, 2014.
- [8] K. Buschow, "Magetoelectricity.," in *Handbook of Magnetic Materials vol 19*, Elsevier, 2011, pp. 130-224.
- [9] M. V. R.S. Dahiya, «Appendix A Fundamentals of piezoelectricity,» de *Robotic Tactile Sensing.*, Springer, 2013.
- [10] S. S. Rao, Vibration of Continuous Systems, John Wiley & Sons, 2007.
- [11] D. Kajfez, «Q factor measurements, analog and digital 1,» 2015.
- [12] E. L. M. P. Monica Carfagni, «The loss factor as measure of mechanical damping.».
- [13] J. Yang, An introduction to the Theory of Piezoelectricity, 2005.
- [14] I. C. Jayan Sirohi, Fundamental Understanding of Piezoelectric Strain Sensors, 2000.
- [15] S. P. Helmut Krohnuller, Handbook of Magnetism and advanced magnetic materials 1, 2007.
- [16] G. Engdahl, Handbook of Giant Magnetostrictive Materials, 2000.
- [17] J. H. E Freeman, «Improving the magnetoelectric performance of Metglas/PZT laminates by annealing in a magnetic field.,» 2017.
- [18] S. P. N. X. S. Gopalan Srinivasan, Composite Magnetoelectric Materials, Structure and Applications, 2015.