

Effet de Gradient Élastique, Piézoélectrique et Diélectrique sur la Propagation des Ondes Rayleigh

Y. Dammak^a, J.-H. Thomas^a et M.H. Ben Ghazlen^b

^aLaboratoire d'Acoustique de l'Université du Maine, UMR CNRS 6613, Avenue Olivier Messiaen, 72085
Le Mans, France

^blaboratoire de Physique des Matériaux, Faculté des Sciences, 802 3000 Sfax, Tunisie
yosra.dammek.etu@univ-lemans.fr

On étudie numériquement la propagation des ondes de surface de type Rayleigh dans un système constitué d'un film PZT-4D de type FGPM (functionally graded piezoelectric materials) déposé sur un substrat SiO₂ supposé homogène et isotrope. Le matériau piézoélectrique se polarise sous l'action des ondes Rayleigh, quand l'axe piézoélectrique se présente parallèle ou perpendiculaire à la direction de propagation. Le caractère FGPM impose que les propriétés du matériau varient graduellement avec l'épaisseur de film. L'approche numérique utilisée se base sur le système d'équations différentielles ordinaires (ODE) et la matrice raideur, elle analyse l'effet du gradient des propriétés électrique et mécanique sur les courbes de dispersion des modes Rayleigh. Le coefficient de couplage électromécanique, traduisant le caractère piézoactif des ondes Rayleigh est également analysé pour les trois premiers modes. Le taux maximal observé de conversion d'énergie s'élève à 13,5%.

1 Introduction

Plusieurs études ont été réalisées sur l'onde de surface transversale dans un semi-espace inhomogène ou dans des structures multicouches [1,2]. D'autres travaux concernent la propagation des ondes de Rayleigh dans des hétérostructures composées d'un film, dont les propriétés varient continûment le long de son épaisseur, déposé sur un substrat homogène isotrope [3].

Cao et al. [4] traitent les relations de dispersion de l'onde Rayleigh dans un demi-espace par la technique de perturbation. Des travaux [5] ont porté sur l'étude de la propagation de l'onde de Love dans un film piézoélectrique à gradient sur un substrat par la méthode de la matrice de raideur. Un travail semblable a été développé ici afin d'étudier les ondes de Rayleigh dans une structure analogue. L'approche porte essentiellement sur la méthode ODE basée sur le concept de vecteur d'état qui transforme le système ordinaire d'équations différentielles en une équation aux valeurs propres.

Le présent travail décrit le calcul théorique de la propagation des ondes Rayleigh dans un matériau piézoélectrique à gradient de propriétés (FGPM). L'inhomogénéité relative au gradient de propriétés est causée par le changement de la température en cours d'élaboration. La variation des caractéristiques mécaniques et électriques en épaisseur impose l'usage de la matrice de raideur (SMM) [6,7] et la technique ODE. L'approche numérique permet d'extraire l'effet du gradient des propriétés du film sur le coefficient de couplage électromécanique.

Le système étudié est l'hétéro-structure PZT-4D/SiO₂, figure 1(a), dont les détails d'élaboration ainsi que la description du profil des propriétés sont déjà publiés. Les résultats du présent travail sont susceptibles d'être utilisés dans le domaine des dispositifs à ondes de surface communément appelés SAW (Surface Acoustic wave).

2 Etude théorique

2.1 Problématique

Le système à étudier comprend une couche de Zirconate Titanate de Plomb (PZT-4D), supposée être de symétrie hexagonale et ayant une épaisseur notée $h=100\mu\text{m}$ accrue sur un substrat de SiO₂ considéré isotrope. Sachant que l'épaisseur du substrat est comparativement grande par rapport à celle du film la structure du dispositif SAW sera considérée comme un milieu semi-infini. Les équations relatives à la relation fondamentale de la dynamique et la loi de Hooke seront développées dans un système de coordonnées (x_1, x_2, x_3) avec (x_1, x_3) le plan sagittal. Le plan (x_1, x_2) représente la

surface libre pour $x_3=0$, la direction de guidage se confond avec l'axe x_1 . L'axe x_3 pointe vers le substrat.

Les modes Rayleigh sont piézoactifs pour deux configurations différentes, la configuration parallèle avec l'axe six du film PZT-4D parallèle à la direction de propagation x_1 et la configuration verticale où l'axe six se confond avec l'axe x_3 . Les propriétés mécaniques et électriques du film FGPM varient continûment avec l'épaisseur.

2.2 Equations différentielles ordinaires

En régime harmonique, la solution du système d'équations différentielles obtenue en combinant l'équation de mouvement et la loi de Hooke, se met sous la forme $\xi(x_3)\exp[i(k_1x_1-\omega t)]$, avec k_1 la composante invariante du vecteur d'onde suivant x_1 . ξ représente le vecteur d'état groupant six composantes mécaniques en l'occurrence le vecteur déplacement et le vecteur contrainte normale $u=[u_1, u_2, u_3]$ et $t_{i3}=[t_{13}, t_{23}, t_{33}]$ respectivement. Pour les matériaux piézoélectriques, deux composantes électriques interviennent également, à savoir le potentiel électrique ϕ et le déplacement électrique normal D_3 qui doivent satisfaire les conditions aux limites. Les huit composantes du vecteur d'état $\xi=[u, \phi, t_{i3}, D_3]^T$ pour un matériau à gradient fonctionnel vérifient l'équation de mouvement et les équations constitutives et elles s'écrivent sous la forme d'un système d'équations différentielles ordinaires en x_3 [6,8].

$$\frac{\partial \xi}{\partial x_3} = iA\xi. \quad (1)$$

Par A on désigne le tenseur fondamental acoustique [9,8]. Pour la configuration parallèle, l'onde de Rayleigh est polarisée dans le plan sagittal suivant les axes x_1 et x_3 . L'homogénéité du système le long de x_1 fait que les composantes $\{u_1, u_3, \phi\}$ sont parfaitement découplées de la composante transversale u_2 et le tenseur fondamental acoustique A devient de dimension (6×6) .

La résolution du système (1) impose la subdivision du film en une succession de couches minces supposées homogènes. Au niveau des surfaces limitant chacune des couches, on écrit la matrice raideur K reliant les déplacements généralisés en haut et en bas aux contraintes généralisées [6,7]. Par un raisonnement récursif basé sur la continuité de ξ , on obtient la matrice de raideur globale du film.

2.3 Implantation du gradient FGPM

La dépendance des constantes élastique, diélectrique et piézoélectrique de la céramique PZT-4D en fonction de la température de déposition et en même temps de l'épaisseur [10], est obtenue par la technique d'impédancemétrie de résonance. On fait la mesure de l'impédance de la céramique pour un intervalle de température compris entre

0°C et 100°C. Les relations polynomiales reliant les différentes caractéristiques à la température ont été déterminées dans [10] à partir des mesures expérimentales, le gradient, ne dépassant pas quelques pourcents, a rendu la concordance entre l'expérience et le calcul parfaite.

Tableau 1 Propriétés électrique et mécanique du film (PZT-4D) [10].

C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{55} (GPa)
138.99	77.68	78.55	124.03	30.58
e_{15} (C/m ²)	e_{13} (C/m ²)	e_{33} (C/m ²)	ϵ_{11} (C/Vm)	ϵ_{33} (C/Vm)
10.79	24.0631	51.5038	10.51×10^{-9}	10.94×10^{-9}

Tableau 2 Propriétés électrique et mécanique du substrat (SiO₂) [11].

C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	ϵ_{33} (C/Vm)	ρ (Kg/m ³)
78.5	16.1	33×10^{-12}	2200

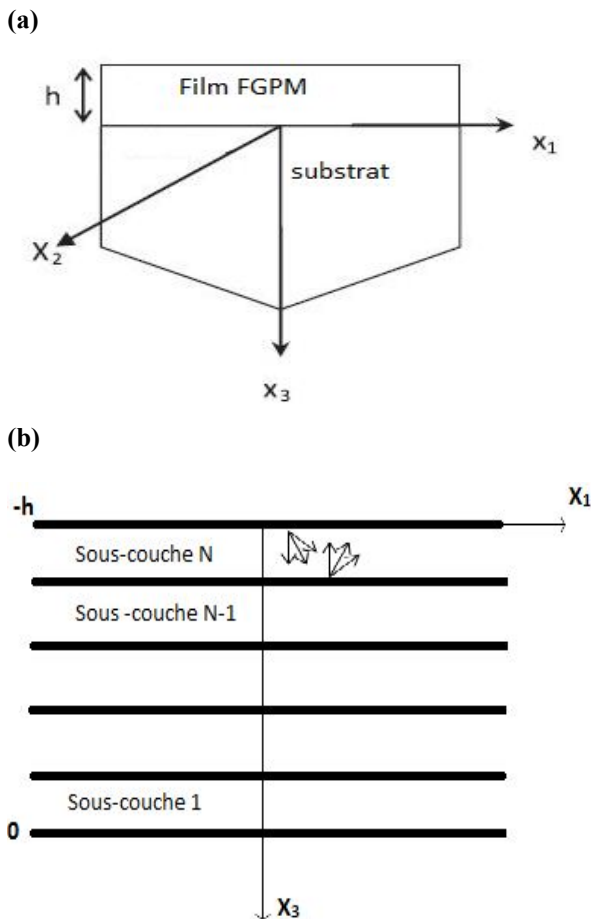


Figure 1 : (a) Hétérostructure film/Substrat PZT-4D/SiO₂. (b) Film FGPM subdivisé en N sous-couches.

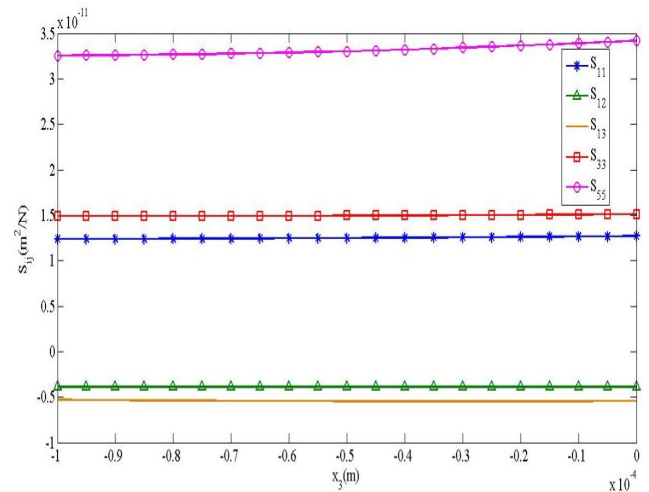


Figure 2 : Profil des constantes élastiques en fonction de l'épaisseur de film.

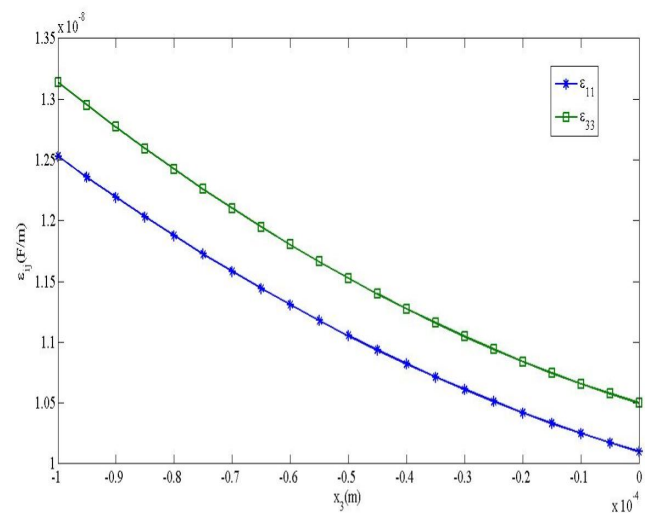


Figure 3 : Profil des constantes diélectriques en fonction de l'épaisseur du film.

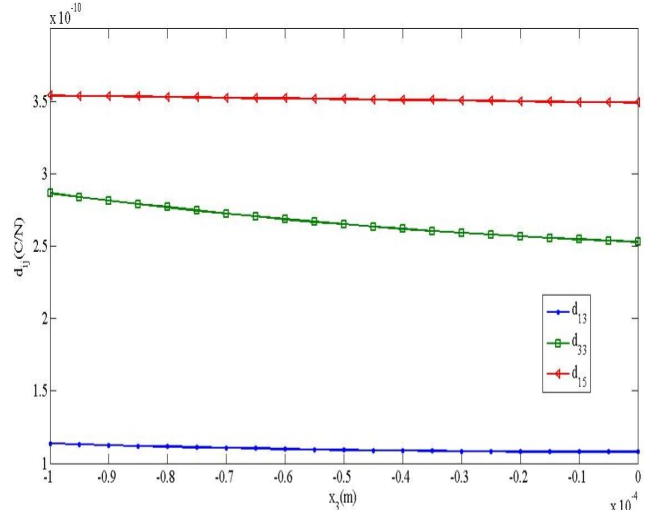


Figure 4 : Profil des constantes piézoélectriques en fonction de l'épaisseur du film.

La température de dépôt varie de manière linéaire avec l'épaisseur du film, la surface supérieure $x_3 = -h$ correspond à $T = 100^\circ\text{C}$, et la surface inférieure $x_3 = 0$ à $T = 0^\circ\text{C}$. Ainsi on obtient les profils des propriétés élastique, diélectrique et piézoélectrique en fonction de l'épaisseur (figures 2, 3, 4).

Le Tenseur Fondamental Acoustique est donné par Adler sous forme des sous matrices $\Gamma_{ik}(x_3)$ [12]. La densité ρ est quasiment constante, on a négligé dans le calcul sa variation en fonction de la température.

En admettant l'homogénéité du système le long de x_2 les blocs Γ_{ik} s'écrivent comme ci-dessous:

$$\Gamma_{ik} = \begin{bmatrix} c_{i1ik} & c_{i13k} & c_{ki1} \\ c_{3i1k} & c_{3i3k} & e_{k3i} \\ e_{i1k} & e_{i3k} & -\varepsilon_{ik} \end{bmatrix} \quad (\text{avec } i, k=1,3).$$

2.4 Conditions aux limites

Les ondes de surface dans un FGPM vérifient les conditions de continuité électrique et mécanique. Le système peut être polarisé soit en circuit ouvert soit en court-circuit. Au niveau de la surface libre les composantes t_{i3} du champ de contrainte sont nulles.

Le vecteur d'état comprend le vecteur contrainte généralisé T_j contenant le vecteur contrainte mécanique t_{i3} , la composante normale D_3 du déplacement électrique, le vecteur déplacement généralisé U_j contenant les composantes u_j du déplacement mécanique et le potentiel électrique ϕ . Pour les cas de court-circuit 'cc' et circuit ouvert 'co', on écrit respectivement :

$$t_{i3}=0 \quad (i=1, 3) \text{ et } \phi = 0 \quad (2)$$

$$t_{i3}=0 \quad (i=1, 3) \text{ et } \sigma = 0. \quad (3)$$

σ désignant la densité de charge électrique, peut être déduit à partir de la relation de continuité de D_3 [6, 9].

$$\sigma = D_3(-h^+) - D_3(-h^-) \quad (4)$$

A l'interface film/substrat ($x_3=0$), la contrainte et le déplacement généralisés (T_0, U_0) sont continus.

2.5 Matrice de raideur

La modélisation de la propagation d'onde dans des milieux inhomogènes, dont les propriétés élastique, piézoélectrique et diélectrique varient continûment avec l'épaisseur, utilise la discrétisation du milieu en N sous couches. Les sous-couches ont la même épaisseur et sont considérées homogènes. La résolution du problème passe par l'utilisation de la matrice générale de rigidité GSSM (General Stiffness Matrix Method) et d'équations différentielles ordinaires (ODE) [13]. Cette méthode, initialement développée par Wang et Rokhlin [8, 9,12] pour les matériaux élastiques anisotropes est ici étendue à un multicouche piézoélectrique.

La technique GSSM réduit le nombre des inconnues qui sont les amplitudes des ondes partielles dans le multicouche (figure 1 (b)), [6,8]. Par application de cette méthode récursive depuis la surface inférieure ($x_3=0$) du film jusqu'à la surface libre ($x_3=-h$), la matrice raideur globale reliant les contraintes et les déplacements du film est obtenue.

$$\begin{bmatrix} T_{-h} \\ T_0 \end{bmatrix} = K^N \begin{bmatrix} U_{-h} \\ U_0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

Pour simplifier le calcul, la matrice raideur K^N est subdivisée en 4 blocs $K_{11}^N, K_{12}^N, K_{21}^N$ et K_{22}^N , et la base de calcul est ramenée aux amplitudes des ondes partielles dans le substrat. Vue l'absence des ondes partielles retour dans le substrat le dimensionnement est ainsi réduit de moitié. Les

relations (6,7) résument ces propos. Par T_s et U_s on désigne la contrainte et le déplacement généralisés dans le substrat.

$$T_{-h} = (K_{12}^N - K_{11}^N (K_{21}^N)^{-1} K_{22}^N) U_s + K_{11}^N (K_{21}^N)^{-1} T_s \quad (6)$$

$$U_{-h} = (K_{21}^N)^{-1} (T_s - K_{22}^N U_s) \quad (7)$$

Par un développement simple [voir Eq. (8) et (9)], on introduit deux matrices M_{cc} et M_{co} relatives aux deux types de polarisation co et cc. Elles définissent dans la base $\{A_s\}$ un système d'équations linéaires et sans second membre. Par annulation du déterminant de chacune des matrices, on remonte au comportement dispersif du système c'est-à-dire le lien entre la fréquence et la vitesse de phase.

$$\begin{bmatrix} t_{i3} \\ \sigma \end{bmatrix} = M_{co} [A_s] \quad (8)$$

$$\begin{bmatrix} t_{i3} \\ \phi \end{bmatrix} = M_{cc} [A_s] \quad (9)$$

3 Résultats et discussion

Plusieurs travaux ont traité l'effet du gradient linéaire, exponentiel, gaussien, quadratique et autre. Dans le présent travail le gradient des propriétés est obtenu en appliquant un gradient de température pendant l'élaboration. L'intérêt est essentiellement porté sur l'influence de cette inhomogénéité sur les courbes de dispersion des ondes Rayleigh pour les polarisations court-circuit et circuit ouvert et aussi sur le coefficient de couplage électromécanique.

En raison de la différence entre les caractéristiques mécaniques de SiO_2 et PZT-4D, la vitesse de l'onde de surface de Rayleigh diminue quand la fréquence augmente. Pour les hautes fréquences, la vitesse des ondes Rayleigh dans le système se confond à la vitesse Rayleigh dans le substrat et pour les basses fréquences, elle correspond à la vitesse des ondes Rayleigh dans le film.

L'analyse numérique combinant les méthodes GSSM et ODE a permis de tracer les courbes de dispersion des ondes Rayleigh et en déduire la dépendance du coefficient de couplage électromécanique en fonction de la fréquence. Les caractéristiques physiques dépendantes de la température du film et du substrat présentées au dessus, ont été appliquées dans le tracé des courbes de dispersion.

3.1 Effet sur la vitesse de phase

Les vitesses de phase des ondes Rayleigh sont calculées pour l'hétéro-structure homogène là où le film a été déposé à la température ambiante. Ces résultats sont par la suite comparés au cas du film piézoélectrique à gradient. La gamme de fréquences explorée s'étend jusqu'à 50 MHz, ce qui correspond au produit nombre d'onde \times épaisseur $kh=15$. Les figures 5, 6, 7 et 8 présentent les trois premiers modes des ondes Rayleigh en polarisation cc et co pour les configurations parallèle et verticale. Il est à remarquer que les vitesses de phase dépendent davantage de la fréquence en dessous de $kh=5$. En basse fréquence, en présence d'une grande longueur d'onde de guidage λ , la vitesse Rayleigh est voisine de la vitesse Rayleigh dans le substrat. En haute fréquence, λ diminue et la vitesse Rayleigh s'approche de celle dans un milieu semi infini de PZT-4D.

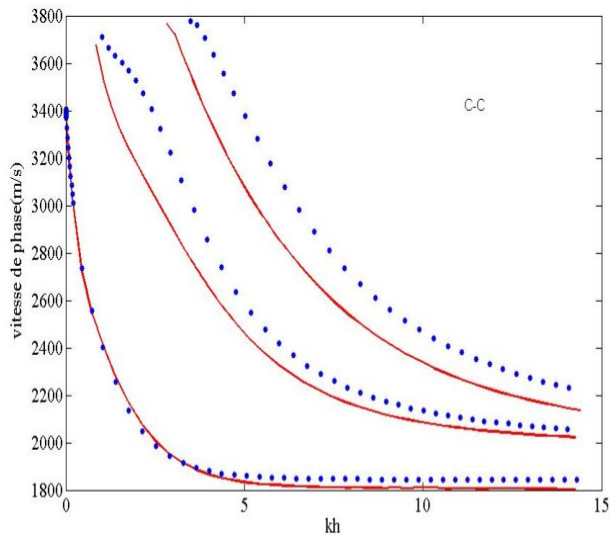


Figure 5 : vitesses de phase des trois premiers modes Rayleigh pour le cas homogène (pointillé) et le cas FGPM (continu), configuration parallèle en court-circuit.

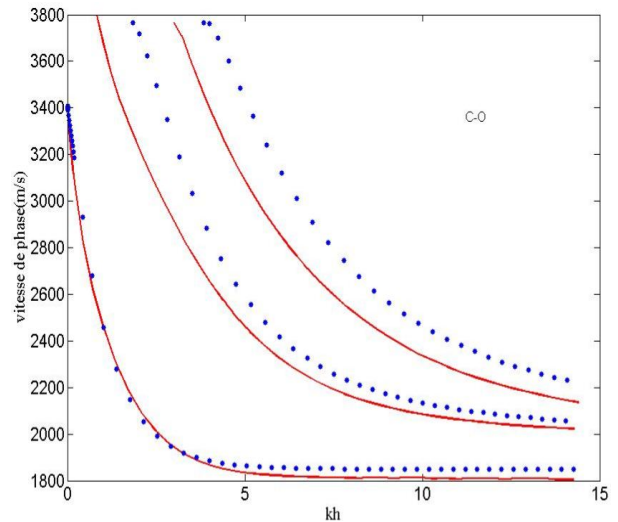


Figure 6 : vitesses de phase des trois premiers modes Rayleigh pour le cas homogène (pointillé), et le cas FGPM (continu), configuration parallèle en circuit ouvert.

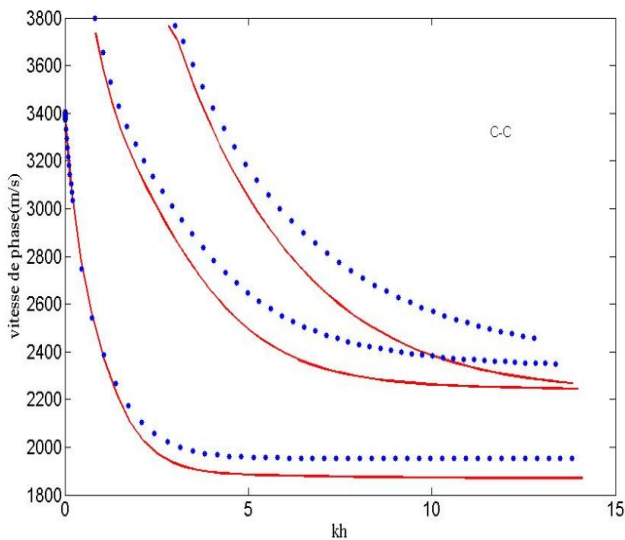


Figure 7 : vitesses de phase des trois premiers modes Rayleigh pour le cas homogène (pointillé) et le cas FGPM (continu), configuration perpendiculaire en court-circuit.

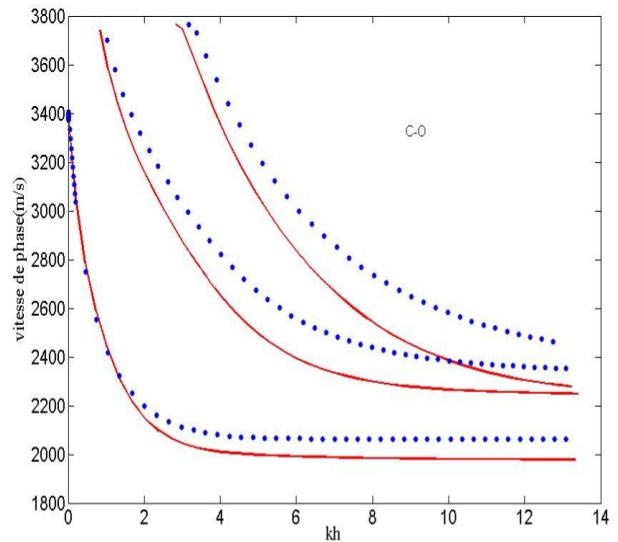


Figure 8 : vitesses de phase des trois premiers modes Rayleigh pour le cas homogène (pointillé), et le cas FGPM (continu), configuration perpendiculaire en circuit ouvert.

Les courbes de dispersion montrent un grand écart de vitesse dans le système homogène et la structure à gradient. Par conséquent, le profil des courbes de dispersion pour les trois premiers modes confirment que l'effet de gradient est important.

3.2 Effet sur le coefficient découplage électromécanique

L'autre paramètre significatif est le coefficient de couplage électromécanique, il joue un rôle important dans les dispositifs à ondes de surface. Il traduit le fait qu'un matériau piézoélectrique transforme en énergie mécanique superficielle, une fraction K de l'énergie qui lui est fournie sous forme électrique [14]. Ce coefficient exprime également l'impact de la piézoélectricité sur la vitesse des ondes élastiques. Plus ce coefficient est élevé, plus les caractéristiques de l'onde seront dépendantes des paramètres électriques du système. La présente investigation numérique a été effectuée en subdivisant le

film en N sous-couches traitée chacune comme une couche homogène. Les figures 8 et 9 présentent le facteur de couplage électromécanique des trois premiers modes Rayleigh, pour un système homogène et un système à gradient de propriétés, calculé par la méthode GSSM.

Pour le système homogène, l'écart entre les vitesses de phase pour les deux polarisations $V_{ph(cc)} - V_{ph(co)}$ diminue pour les modes supérieurs. Le coefficient de couplage électromécanique k^2 est défini comme suit :

$$k^2 = 2(V_{ph(co)} - V_{ph(cc)}) / V_{ph(co)} \quad (8)$$

$V_{ph(cc)}$ et $V_{ph(co)}$ sont les vitesses de phase respectivement pour les polarisations cc et co. k^2 varie de 0.135 pour le premier mode jusqu'à 0.075 pour le troisième mode, les maxima sont obtenus à des fréquences extrêmement différentes respectivement $f=2.5$ MHz, et $f=25$ MHz. Pour le mode fondamental, k^2 est très sensible à la fréquence en dessous de $kh=2$. Ailleurs le coefficient k^2 ne dépasse guère 0.02. Remarquons que l'effet du gradient par comparaison avec le cas homogène est important pour les propriétés sensibles à la température.

La variation relative de la vitesse Rayleigh $\Delta V/V$ en fonction de la fréquence est reportée (figure 11) pour les deux configurations parallèle et verticale dans les deux cas cc et co.

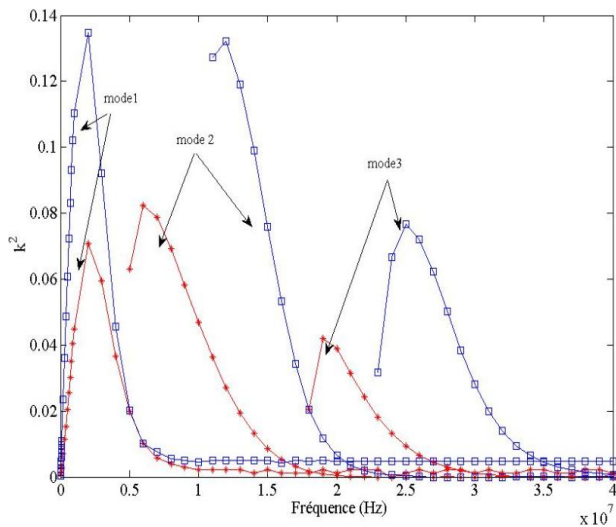


Figure 9: coefficient de couplage électromécanique pour le cas homogène (◻) et le cas FGPM (★) dans la configuration parallèle.

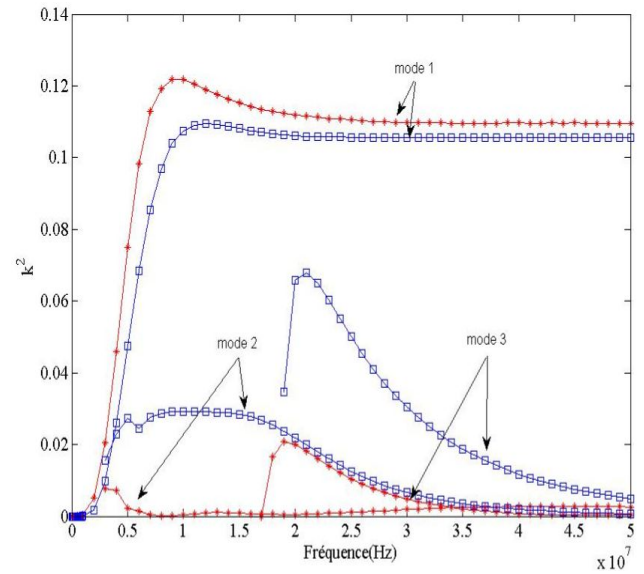


Figure 10: coefficient de couplage électromécanique pour le cas homogène (◻) et le cas FGPM (★) dans la configuration verticale.

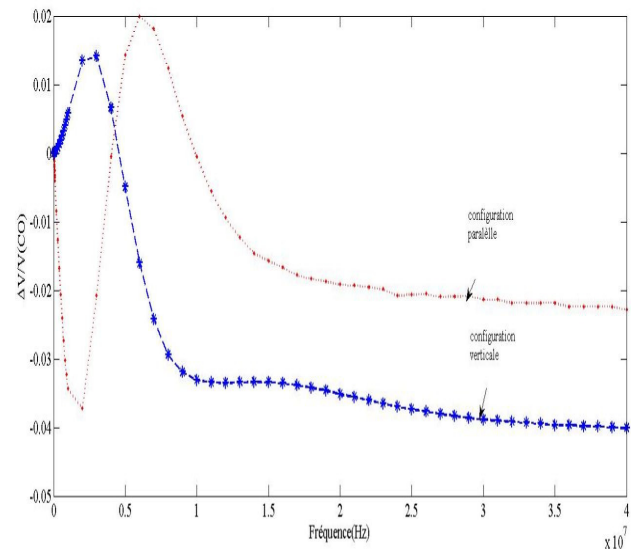


Figure 11 : Variation relative de la vitesse de phase $\Delta V/V$ dans le cas de circuit ouvert.

4 Conclusion

L'étude numérique combinant les méthodes GSSM et ODE a permis de tracer les diagrammes de dispersion relatifs à la propagation des ondes de surface de type Rayleigh dans l'hétérostructure PZT-4D/SiO₂. Les conditions aux limites mécanique et électrique sont formulées de manière simple avec un dimensionnement moitié dans une base définie par les amplitudes des ondes partielles dans le substrat. Le coefficient de couplage est plus élevé dans le cas où l'axe piézoélectrique est parallèle à la direction de guidage. L'effet du gradient est significatif pour les propriétés physiques sensibles à la température de dépôt.

Références

- [1] Z.H. Qian, F. Jin, T. Lu, K. Kishimoto, Transverse surface waves in functionally graded piezoelectric materials with exponential variation. *Smart Mater. Struct.* 17 (2008) 7.
- [2] B. Collet, M. Destrade, G.A. Maugin, Bleustein–Gulyaev waves in some functionally graded materials. *Eur. J. Mech. A/Solids* 25 (2006) 695.
- [3] I. Ben Salah, A. Ajeh, M.H. Ben Ghazlen, A theoretical study of the propagation of Rayleigh wave in functionally graded piezoelectric material (FGPM). *Ultrasonics* 52 (2012) 306–314.
- [4] X. Cao, F. Jin, Z. Wang, On dispersion relations of Rayleigh waves in a functionally graded piezoelectric material (FGPM) half-space. *Acta Mech.* 200(2008) 247-261.
- [5] I. Ben Salah, Y. Wali, M.H. Ben Ghazlen, Love waves in functionally graded piezoelectric materials by stiffness matrix method. *Ultrasonics* 51 (2011) 310–316.
- [6] S.I. Rokhlin, L. Wang, Modelling of wave propagation in layered piezoelectric media by a recursive asymptotic method. *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Contr.* 51(2004) 1060-1071.
- [7] S.I. Rokhlin, L. Wang, A compliance/stiffness matrix formulation of general Green's function and effective permittivity for piezoelectric multilayers, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. contr.* 51 (2004) 453-463.
- [8] S.I. Rokhlin, L. Wang, Stable recursive algorithm for elastic wave propagation in layered anisotropic media: stiffness matrix method, *J. Acoust. Soc. Am.* 112 (2002) 822-834.
- [9] S.I. Rokhlin, L. Wang, Ultrasonic waves in layered anisotropic media : characterization of multidirectional composites, *Int. J. Solids Struct.* 39 (2002) 5529-5545.
- [10] S. Sferri, G. Yang, H.D. Wiederick, B.K. Mukherjee, Temperature dependence of the dielectric, elastic, and piezoelectric material constants of Lead Zirconate Titanate ceramics, *Proceeding of the international conference on smart materials* 1999.
- [11] D. Royer, *Elastic Waves in Solids* tome 1, Propagation libre et guidé, Masson 1974.
- [12] E.L. Adler, Saw and pseudo-SAW properties using matrix methods. *IEEE Trans. Ultrasonic Ferroelect. Freq. Contr.*, 41, pp. 876-882, 1994.
- [13] E.L. Tan, Hybrid compliance-stiffness matrix method for stable analysis of elastic wave propagation in multilayered anisotropic media, *J. Acoust. Soc. Am.* 119 (1) 45-53, 2006.
- [14] K.A. Ingebrigtsen, Surface waves in piezoelectrics, *J. Appl. Phys.*, Vol. 40, pp.2681-2686, 1969.