

http://bhxb.buaa.edu.cn jbuua@buaa.edu.cn

DOI: 10.13700/j.bh.1001-5965.2022.0826

复合压电材料虚拟仿真实验软件的设计与开发

耿志挺*, 赵鉴侨

(清华大学 材料学院, 北京 100084)

摘 要: 复合压电材料是学习压电理论的优秀载体, 但是用于复合压电材料虚拟实验教学的仿真软件仍有待开发。基于此, 开发一款基于多孔碳酸钡和聚偏二氟乙烯 (BTO@PVDF) 复合压电材料模型的虚拟仿真实验教学软件, 帮助学生理解基础压电理论、探究复合材料的压电响应特点。该软件整合材料设计、制备、表征的完整流程, 设计多项可调参数、多层次展示结果, 使学生更灵活地去自主实现复合压电材料综合性虚拟仿真, 完成基于复合压电材料的虚拟实验。该软件添加了视频讲解、互动问答、知识点提示等互动, 提高教学趣味性的同时, 可培养学生独立思考的能力。

关键词: 压电材料; 复合材料; 虚拟实验; 计算机仿真; 有限元仿真

中图分类号: G434

文献标志码: A

文章编号: 1001-5965(2024)11-3377-05

压电材料已经被广泛应用于医学检测、声纳装置、微纳结构加工与表征等领域。其中, 有机-无机复合压电材料既保留了有机材料的柔韧性, 又具有优良的压电性能, 成为可穿戴电子设备中的关键材料, 在能量收集、健康监测、疾病治疗等领域应用前景广阔^[1-2]。

复合压电材料也是学习压电理论的优秀载体, 可以将其设计为教学实验, 按照设计参数、制备薄膜、高压极化、表征的实验步骤, 由学生改变复合薄膜的成分和制备工艺, 探究复合压电材料的性能变化规律。

但是, 以传统方式开展这一教学实验存在问题。例如, 实验流程较长, 学生制备的样品数量有限, 难以全面探究压电性能的影响因素及其变化规律; 压电材料的极化处理需要用到直流高电压, 有一定的安全隐患; 制备复合薄膜的成品率较低, 作为教学实验偏难等。

因此, 本文利用虚拟仿真技术, 设计并开发了一款碳酸钡和聚偏二氟乙烯 (barium titanium oxide@

polyvinylidene difluoride, BTO@PVDF) 复合压电材料实验教学软件。本文软件注重有限元计算的严谨性、虚拟仿真实验的真实性、教学的活泼性三者的结合。仿真实验过程中, 多孔材料和复合材料的建模、仿真计算参数等条件与文献 [3-7] 中的数据、实验数据相印证, 具有研究价值。

本文软件既保留了仿真模拟的优势: 计算快捷、参数易调、相比于传统实验节省人力物力, 又添加了丰富的人机互动、图片视频讲解和实际操作场景的视频, 增添实验的真实性, 达到更好的教学效果。此外, 新冠疫情也让远程教学的价值逐渐凸显, 但其广度和深度都有待开发^[8-9]。本文软件可以提供线上教学渠道, 拓展压电材料实验教学场景, 助力技术与教学的融合^[10]。

1 仿真模型和结果

先利用 COMSOL 建立 BTO@PVDF 复合压电材料薄膜模型并进行有限元计算。利用代码生成含有随机分布球型气孔的钛酸钡 (barium titanium

收稿日期: 2022-10-04; 录用日期: 2022-12-09; 网络出版时间: 2023-05-29 19:05

网络出版地址: link.cnki.net/urlid/11.2625.V.20230529.1042.002

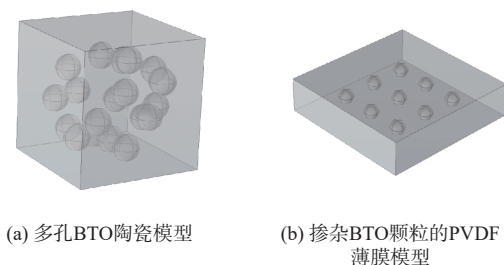
基金项目: 清华大学本科教学改革项目 (ZY01-02)

*通信作者. E-mail: qhgzt@tsinghua.edu.cn

引用格式: 耿志挺, 赵鉴侨. 复合压电材料虚拟仿真实验软件的设计与开发 [J]. 北京航空航天大学学报, 2024, 50 (11): 3377-3381.

GENG Z T, ZHAO J Q. Design and development of virtual simulation experiment software of composite piezoelectric materials [J]. Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2024, 50 (11): 3377-3381 (in Chinese).

oxide, BTO)颗粒模型,模拟多孔陶瓷材料。生成亚微米球形 BTO 颗粒掺杂的聚偏二氟乙烯 (polyvinylidene difluoride, PVDF) 薄膜模型,模拟复合薄膜材料。二者的模型如图 1 所示,模型的几何参数均可通过本文软件进行调节。



(a) 多孔BTO陶瓷模型 (b) 掺杂BTO颗粒的PVDF薄膜模型

图1 压电材料的有限元仿真模型

Fig. 1 Finite element simulation model of piezoelectric materials

仿真计算结果之一如图 2 所示,随 BTO 质量分数的增加, BTO@PVDF 复合薄膜的压电常数 d_{33} 略有上升, g_{33} 大幅下降,符合文献 [6-7] 的规律。通过改变不同成分和工艺参数,得到了丰富的结果,并写入教学软件中。

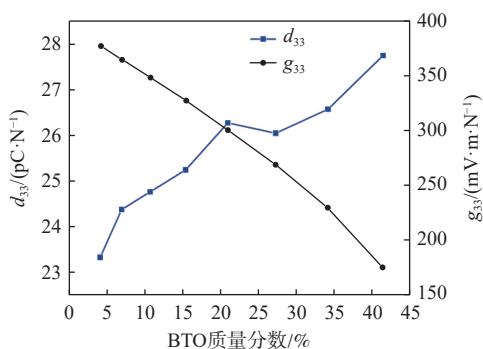


图2 压电常数 d_{33} 和 g_{33} 与 BTO 质量分数的关系

Fig. 2 Relationship between piezoelectric constants d_{33} and g_{33} and BTO mass fraction

2 软件技术路线

2.1 开发工具和接口

基于第 1 节有限元计算结果,使用 COMSOL 的 APP 模块进行二次开发。利用图形化接口实现软件教学部分与 COMSOL 压电耦合模块的参数传递和结果反馈,设计出图形化、可交互的虚拟仿真实验教学软件。

使用的接口包括 COMSOL 的 APP 模块中的按钮和窗口。其中,功能按钮控制页面显示和切换,通过特殊设计还可以实现选择、判断等功能;接口按钮链接到 COMSOL 的几何模型和压电耦合模块,调节材料、成分和工艺参数,并控制范围;参数置 0 或置 1,可以启用或关闭不同的加载、物理场边界条件等。窗口链接到 COMSOL 的数据集和结

果,用于计算结果的调用和显示。

2.2 本文软件内容

本文软件分为课前预习、仿真实验、课后总结 3 个部分。

预习部分介绍压电材料的基础理论,图文并茂地讲解正、逆压电材料的概念和压电方程等基本原理。本文软件还设计了互动问答,学生需要正确回答预习问题后,才可以开始实验。

实验部分共包括 BTO 颗粒、PVDF 薄膜、BTO@PVDF 复合薄膜 3 个项目。每项实验都设计了材料参数、几何参数、极化情况、测量方法、提交计算 5 个步骤。与真实实验中设计、制备、表征、分析处理的流程相符。

先在材料参数步骤,了解所选材料的密度、介电矩阵、压电应变矩阵和柔度矩阵。操作页面如图 3 所示,页面左侧是导航栏,可以快速跳转;上端是实验 5 个步骤的流程树,显示实验进度。



图3 所选材料的主要参数界面

Fig. 3 Interface of main parameters of selected materials

确定材料参数后,选择模型几何参数。学生可以根据模型原理图的提示,在给定范围内任意调整模型参数,如薄膜尺寸、掺杂含量(BTO 颗粒的粒径、数量)、掺杂均匀程度(不同制备方法、团聚程度)等,较全面地模拟材料的制备过程。选定后可以查看模型,如图 4 所示。

建立模型后,调整极化工艺。学生先学习极化

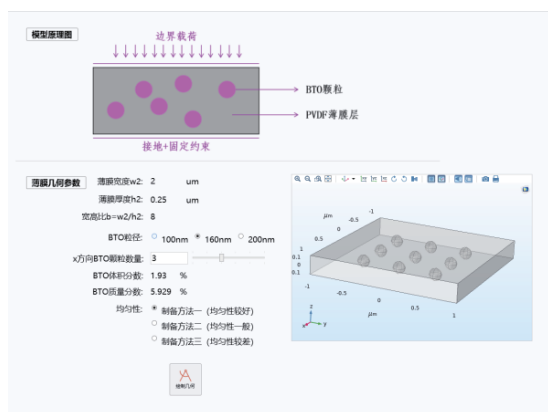


图4 设置几何参数与掺杂界面

Fig. 4 Interface of setting geometric parameters and doping

的基本理论,再根据需要调整极化情况,例如,是否极化、极化角度等。学生可以绘制极化坐标系,从而对极化方向有更直观的认识。

确定极化工艺后,选择表征方法。对应于传感器器件和驱动器件 2 种应用场合,可以分别利用正、逆压电效应测试材料的压电系数。本文软件先讲解 2 种测量方法的原理和装置示意图,再由学生选择合适的测量方法和载荷大小。

选定测量方法后,可以查看所有已选定的参数,确认后点击提交计算,软件后台利用 COMSOL 压电耦合模块进行有限元计算。等待计算完成即可查看仿真计算结果。提交计算界面如图 5 所示。



图 5 查看已选参数并提交计算界面

Fig. 5 Interface of view selected parameters and submit calculation

计算结束后,从多角度查看并分析结果。在动态结果部分,学生可以分别查看载荷输入过程中应力、电场和位移云图的变化动画,以及对应的变化曲线,并利用输出和输入之间高度的线性关系,计算压电系数,如图 6 所示。在静态云图部分,既可以查看整体的结果,也可以选择薄膜基体与掺杂颗粒分别显示,更加直观地展示 2 部分各自的贡献。

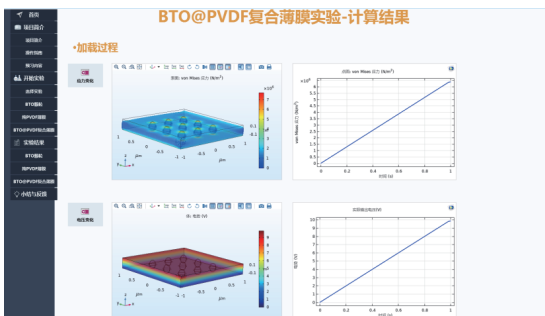


图 6 应力、电场、位移云图的变化动画及变化曲线界面

Fig. 6 Interface of animations and curves of stress, electric field and displacement cloud atlas

此外,本文软件还提供了 BTO@PVDF 与相同尺寸的纯 PVDF 薄膜压电过程的对比分析,定量展示复合材料压电性能的提升,并提供相关解释,引导学生思考压电性能变化的原因,帮助学生复合材料的压电响应特点有更深入的认识。

结果分析完成后,学生还可以返回任意实验步骤,修改参数重复实验。通过对比分析,探究不同掺杂情况、极化工艺等参数对压电性能的影响规律。在此基础上再进行参数的优化迭代,直至获得最优的设计成果。最后,所有实验参数和仿真结果可以通过文件形式导出,供学生课后自主学习、撰写实验报告。

3 本文软件特色

本文软件基于 BTO@PVDF 这一复合压电材料设计了一系列虚拟仿真实验,整合了无机、有机与复合 3 种材料,涵盖了材料设计、制备、表征、分析处理的完整流程。实验内容由浅入深、由基础到综合,符合学习规律;实验流程简明清晰、主次分明,侧重强化学生对压电材料领域知识的理解、运用和实践能力的培养^[11]。

本文软件注重虚拟仿真实验的综合性和真实性。相比于传统的 PVDF 仿真、压电驱动器件仿真等教学实验^[12-14],本文软件的教学内容更深入,学生自由度更高。除基本模型参数以外,本文软件还针对复合材料设计了掺杂浓度、均匀性等参数;针对传感器器件和驱动器件 2 种应用领域,设计了正、逆压电效应 2 种测试方法,使学生更灵活地去自主实现不同材料组成、不同制备工艺、不同应用场景的复合压电材料实验,完成基于有限元方法的 BTO@PVDF 复合压电材料综合性虚拟仿真实验。丰富的内容提高了仿真实验的真实性,也培养了学生从多尺度、多场角度考虑问题的科学习惯,契合国内外虚拟仿真技术发展趋势^[15-17]。

本文软件通过多种途径优化教学效果。仿真实验开发面临的主要困难是,COMSOL 的 APP 模块功能有限,无法满足教学的活泼性。为此,本文软件采用叠放按钮、指令控制显示条件等技术方法,实现了选择、判断等功能,增强教学的互动性。本文软件添加了极化坐标图、压电性能对比分析图、薄膜与掺杂颗粒独立显示云图等多种图表,更加直观,使学生对复合材料的压电响应特点有更深刻的理解。在实验流程中,提供知识点提示和视频讲解,并且添加了人机互动问答,提高教学趣味性和参与感的同时,启发学生思考,培养学生独立思考的能力^[18]。

4 结论

1) 本文介绍了基于 BTO@PVDF 的复合压电材料仿真实验教学软件的开发过程、内容和特色。软件整合了虚拟仿真、多媒体、人机交互、可视化

等功能,将虚拟仿真技术运用到复合压电材料教学实验中,优化了专业实验课程体系与教学内容。

2) 学生可以通过本文软件的学习,更好地理解压电材料的基础知识,掌握传统无机、传统有机和有机-无机复合压电材料的区别与联系,探究尺寸、极化工艺、应用场景等条件对压电性能的影响规律,了解复合压电材料在柔性电子器件领域的应用。

3) 本文软件通过多种方式提高仿真实验的自由度、交互性和真实性,培养学生的科学素养、实践能力和独立思考能力。

参考文献 (References)

[1] 刘洋,汪尧进. 柔性压电材料及器件应用[J]. 硅酸盐学报, 2022, 50(3): 625-641.
LIU Y, WANG Y J. Flexible piezoelectric materials and device application[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2022, 50(3): 625-641(in Chinese).

[2] JEONG C K, BAEK C, KINGON A I, et al. Lead-free perovskite nanowire-employed piezopolymer for highly efficient flexible nanocomposite energy harvester[J]. Small, 2018, 14(19): 1704022.

[3] 朱嘉林,王丽坤,张福学. 0-3型压电复合材料的硬球无规堆积模型[J]. 压电与声光, 2000, 22(4): 273-276.
ZHU J L, WANG L K, ZHANG F X. A model of hard sphere haphazard packing about the 0-3 piezocomposite for transducer and its effective poling electric field[J]. Piezoelectrics & Acoustooptics, 2000, 22(4): 273-276(in Chinese).

[4] LEWIS T J. Interfaces are the dominant feature of dielectrics at the nanometric level[J]. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, 2004, 11(5): 739-753.

[5] LIU Y, YANG T N, ZHANG B, et al. Structural insight in the interfacial effect in ferroelectric polymer nanocomposites[J]. Advanced Materials, 2020, 32(49): e2005431.

[6] 王树彬,韩杰才,杜善义. 压电陶瓷/聚合物复合材料的制备工艺及其性能研究进展[J]. 功能材料, 1999, 30(2): 2-6.
WANG S B, HAN J C, DU S Y. Research progress on preparation technology and properties of piezoelectric ceramic/polymer composites[J]. Journal of Functional Materials, 1999, 30(2): 2-6(in Chinese).

[7] 苏晓晓. BTO/PVDF 柔性压电复合薄膜的制备及其发电机理研究[D]. 太原: 太原理工大学, 2020.
SU X X. Research on the preparation of BTO/PVDF flexible piezoelectric composite film and its generating mechanism[D]. Taiyuan: Taiyuan University of Technology, 2020(in Chinese).

[8] 逯行,朱陶,徐晶晶,等. 高校虚拟仿真实验教学的基本问题与趋势[J]. 现代教育技术, 2021, 31(12): 61-68.
LU H, ZHU T, XU J J, et al. Basic problems and trends of virtual simulation experiment teaching in colleges and universities[J]. Modern Educational Technology, 2021, 31(12): 61-68(in Chinese).

[9] 王建华,段建东,姬军鹏,等. 新工科背景下虚拟仿真实验研究与实践[J]. 中国教育信息化, 2021(22): 33-37.
WANG J H, DUAN J D, JI J P, et al. Research and practice of virtual simulation experiment under the background of new engineering[J]. The Chinese Journal of ICT in Education, 2021(22): 33-37(in

Chinese).

[10] 张宁,赵毅强,兰旭博,等. “新工科”背景下关于虚拟仿真实验的几点思考和建议[J]. 实验技术与管理, 2020, 37(3): 185-188.
ZHANG N, ZHAO Y Q, LAN K B, et al. Some thoughts and suggestions on virtual simulation experiment under background of “New engineering” [J]. Experimental Technology and Management, 2020, 37(3): 185-188(in Chinese).

[11] 卢艳丽,董文强,王永欣,等. 材料类专业虚拟仿真实验教学中心的建设与实践[J]. 实验室研究与探索, 2018, 37(11): 153-157.
LU Y L, DONG W Q, WANG Y X, et al. Exploration and practice of the virtual simulation experimental teaching center for material professional construction[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2018, 37(11): 153-157(in Chinese).

[12] 崔勇,王秋生,富立,等. 基于有限元的 PVDF 微执行器虚拟仿真实验探索[J]. 电气电子教学学报, 2019, 41(6): 122-125.
CUI Y, WANG Q S, FU L, et al. Virtual simulation experiment design of PVDF micro-actuator based on finite element method[J]. Journal of Electrical & Electronic Education, 2019, 41(6): 122-125(in Chinese).

[13] 崔勇,富立,刘颖异,等. 多物理场虚拟仿真的现代检测技术实验课程探索[J]. 实验室研究与探索, 2019, 38(9): 221-223.
CUI Y, FU L, LIU Y Y, et al. Research on the experimental course of modern measurement technology based on multiple physical field's virtual simulation[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2019, 38(9): 221-223(in Chinese).

[14] 张冬至,童俊,任旭虎,等. 压电喷墨驱动器结构优化与仿真分析[J]. 实验室研究与探索, 2013, 32(3): 87-91.
ZHANG D Z, TONG J, REN X H, et al. Structure optimization and computer simulation of the piezoelectric ink-jet[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2013, 32(3): 87-91(in Chinese).

[15] 王晓敏,高志强,闫晋文. 国内高校材料学科虚拟仿真实验教学的发展探究[J]. 中国大学教学, 2021(3): 78-85.
WANG X M, GAO Z Q, YAN J W. Research on the development of virtual simulation experiment teaching of materials subject in domestic universities[J]. China University Teaching, 2021(3): 78-85(in Chinese).

[16] 王卫国,胡今鸿,刘宏. 国外高校虚拟仿真实验教学现状与发展[J]. 实验室研究与探索, 2015, 34(5): 214-219.
WANG W G, HU J H, LIU H. Current situation and development of virtual simulation experimental teaching of overseas universities[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2015, 34(5): 214-219(in Chinese).

[17] 熊宏齐. 虚拟仿真实验教学助推理论教学与实验教学的融合改革与创新[J]. 实验技术与管理, 2020, 37(5): 1-4.
XIONG H Q. Promotion of reform and innovation on integration of theory teaching and experimental teaching by virtual simulation experiment teaching[J]. Experimental Technology and Management, 2020, 37(5): 1-4(in Chinese).

[18] 田元,周晓蕾,宁国勤,等. 虚拟仿真实验教学对学生学习效果的影响研究: 基于 35 项实验和准实验研究的元分析[J]. 现代教育技术, 2021, 31(8): 42-49.
TIAN Y, ZHOU X L, NING G Q, et al. Research on influence of virtual simulation experiment teaching on students' learning effect—A meta-analysis based on 35 experiments and quasi-experimental studies[J]. Modern Educational Technology, 2021, 31(8): 42-49(in Chinese).

Design and development of virtual simulation experiment software of composite piezoelectric materials

GENG Zhiting^{*}, ZHAO Jianqiao

(School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Composite piezoelectric materials are excellent carriers for learning piezoelectric theory, but simulation software for virtual experimental teaching of composite piezoelectric materials still needs to be developed. A software based on barium titanium oxide@polyvinylidene difluoride (BTO@PVDF) virtual simulation experiment teaching software of composite piezoelectric materials is developed. Students can investigate the properties of composites' piezoelectric response and get an understanding of basic piezoelectric theory by using the software to simulate flexible piezoelectric materials using models of porous and composite materials. With the help of the software, which integrates the entire process of material design, preparation, and characterization, creates multiple adjustable parameters, and presents the results at different levels, students can more independently and with great flexibility realize a more realistic virtual simulation of composite piezoelectric materials. The software adds video explanations, interactive questions and answers, knowledge tips and other interactions to improve the liveliness of teaching and cultivate students' ability to think independently.

Keywords: piezoelectric materials; compound materials; virtual experiment; computer simulation; finite element simulation