



Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 7359

Finite-Elemente- Implementierung konstitutiver nichtlinearer Stoffgesetze für piezokeramische Werkstoffe

B. Laskewitz

Institut für Materialforschung

Oktober 2007

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7359

Finite-Elemente-Implementierung konstitutiver
nichtlinearer Stoffgesetze für piezokeramische
Werkstoffe

Bernd Laskewitz

Institut für Materialforschung

von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2007

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-073593

**Finite-Elemente-Implementierung
konstitutiver nichtlinearer Stoffgesetze
für
piezokeramische Werkstoffe**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

von der Fakultät für Maschinenbau der

Universität Karlsruhe (TH)

genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Ing. Bernd Laskewitz

aus Heilbronn

Tag der mündlichen Prüfung:

19. September 2007

Hauptreferent:

Priv.-Doz. Dr.-Ing. habil. M. Kamlah

Korreferent:

Prof. Dr. rer. nat. O. Kraft

Kurzfassung

Finite-Elemente-Implementierung konstitutiver nichtlinearer Stoffgesetze für piezokeramische Werkstoffe

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Finite-Elemente-Implementierung von konstitutiven Stoffgesetzen für piezokeramische Werkstoffe. Hierzu werden zunächst experimentelle Untersuchungen an piezokeramischen Werkstoffen vorgestellt, die zur Verifizierung der Stoffgesetze und deren Finite-Elemente-Implementierungen dienen. Dabei wurde insbesondere das Verhalten unter mehrachsiger Belastung untersucht.

Das phänomenologische Stoffgesetz, das mit einem spezialisierten Radial-Return-Mapping-Algorithmus in das Open Source- Finite-Elemente-Programm PSU implementiert wurde, konnte auf jeweils eine algebraische Gleichung zurückgeführt werden, was die Berechnungszeit von Problemen im Gegensatz zur vorangegangenen Implementierung mit schwerfälligen Integrationsalgorithmen der Differenzialgleichungen deutlich reduzierte. Es werden neben Berechnungen, um das prinzipielle Verhalten des Stoffgesetzes und dessen Implementierung zu zeigen, praxisnahe Beispiele vorgestellt, welche die Leistungsfähigkeit des Modells und der Implementierung demonstrieren.

Das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz wurde ebenfalls mit einem Radial-Return-Mapping-Algorithmus auf der Basis des impliziten Eulerverfahrens implementiert. Hierbei musste allerdings ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden, was mit dem diskretisierten Newtonverfahren gelang. Aufgrund gelegentlicher Konvergenzschwierigkeiten werden verschiedene Verfahren vorgestellt, die in der Implementierung Eingang fanden, um die Konvergenz der lokalen Newtoniteration zu verbessern. Nach der Demonstration des prinzipiellen Modellverhaltens an ausgewählten, einfachen Beispielen, wird abschließend ein Berechnungsbeispiel eines unendlich ausgedehnten Zylinders vorgestellt und mit Ergebnissen der Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes verglichen. Es zeigte sich im globalen Verhalten eine gute Übereinstimmung der beiden Stoffgesetze. Im lokalen Bereich sind erwartungsgemäß Unterschiede zu beobachten, da das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz näher an den mikroskopischen Umklappprozessen in piezokeramischen Werkstoffen als das phänomenologische Stoffgesetz ist.

Abstract

Finite Element Implementation of Constitutive Nonlinear Material Models for Piezoceramic Materials

The objective of the thesis is the finite element implementation of constitutive material models for piezoceramic materials. First, experimental investigations of piezoceramic materials are presented to verify the material models and their finite element implementation. Especially, the behaviour under multi-axial, electro-mechanical loadings was investigated. The phenomenological material model, which was implemented by means of a specialized radial return mapping algorithm into the open source finite element program PSU, was reduced to one algebraic equation for each case. This led to a vast reduction of computation time of simulations in opposite to the previous implementation by means of complex integration algorithms for the differential equations.

Apart from simulations of the principal behaviour of the material model and its implementation, practical simulation examples are presented, which demonstrate the performance of the model and the implementation.

The microscopically motivated material model was also implemented by means of a radial return mapping algorithm on the basis of the backward Euler method. For this, a set of nonlinear equations has to be solved which was successfully done by the discrete Newton method. Because of occasional convergence difficulties, several methods are presented, which were used in the implementation to improve the convergence of the local Newton iteration.

After demonstration of the principal behaviour of the model by some simple examples, a simulation example of a cylinder with an infinite length is presented and compared to the results of the implementation of the phenomenological material model. For the global behaviour a good agreement of the two material models is shown. In local areas differences were investigated since the microscopically motivated material model is closer to the microscopic switching processes compared to the phenomenological material model.

Inhaltsverzeichnis

NOTATIONEN UND OPERATOREN.....	iii
1 EINFÜHRUNG UND MOTIVATION.....	1
2 GRUNDLAGEN DER PIEZOELEKTRIZITÄT UND FERROELEKTRIZITÄT	5
2.1 ELEKTROSTATISCHE GRUNDLAGEN UND BEGRIFFE.....	5
2.2 EFFEKTE BEI FERROELEKTRIKA	8
2.3 DOMÄNEN IN FERROELEKTRIKA UND DEREN UMKLAPPVORGÄNGE.....	11
2.4 MAKROSKOPISCHES VERHALTEN DER FERROELEKTRIKA UNTER ELEKTRO-MECHANISCHER BEANSPRUCHUNG.....	17
3 EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNGEN AN PIEZOKERAMISCHEN WERKSTOFFEN.....	26
3.1 WISSENSSTAND ZUM VERHALTEN UNTER MEHRACHSIGER ELEKTRO-MECHANISCHER BELASTUNG.....	27
3.2 KOAXIALE ELEKTROMECHANISCHE BEANSPRUCHUNGEN.....	29
3.2.1 Auslegung der Versuchskörpergeometrie	29
3.2.2 Versuchsaufbau für die elektromechanischen Experimente	32
3.2.3 Versuchsergebnisse für einachsige, rein elektrische Belastungen.....	36
3.2.4 Versuchsergebnisse für koaxiale, nichtproportionale elektromechanische Belastungen.....	37
3.2.5 Versuchsergebnisse für koaxiale, proportionale elektromechanische Belastungen.....	39
3.2.6 Versuchsergebnisse für mehrachsige, nichtproportionale elektrische Belastungen.....	44
4 WISSENSSTAND ZU KONSTITUTIVEN STOFFGESETZEN PIEZOKERAMISCHER WERKSTOFFE	47
4.1 PHÄNOMENOLOGISCHE KONSTITUTIVE STOFFGESETZE	47
4.2 MIKROMECHANISCHE KONSTITUTIVE STOFFGESETZE.....	49
5 PHÄNOMENOLOGISCHES STOFFGESETZ UND DESSEN FINITE-ELEMENTE-IMPLEMENTIERUNG.....	51
5.1 ELEKTROMECHANISCHE FELDTHEORIE	51
5.2 KONSTITUTIVE MODELLIERUNG PIEZOKERAMISCHER WERKSTOFFE	53
5.3 FINITE-ELEMENTE-IMPLEMENTIERUNG	59
5.4 VERIFIZIERUNG DER FINITE-ELEMENTE-IMPLEMENTIERUNG.....	65

5.4.1	<i>Vergleich experimenteller Daten mit Berechnungsergebnissen</i>	65
5.4.2	<i>Rotation des irreversiblen Polarisationsvektors</i>	68
5.5	SIMULATIONSBEISPIEL: STAPELAKTOR.....	69
5.6	FOLGERUNGEN AUS DER VERIFIZIERUNG.....	77
5.7	ANWENDUNGSBEISPIEL: UNTERSUCHUNG DES NICHTLINEAREN VERHALTENS PIEZOKERAMISCHER ZYLINDER.....	78
5.7.1	<i>Linear dielektrische Kreisringplatte</i>	79
5.7.2	<i>Untersuchungen an piezokeramischen Hohlzylindern</i>	82
5.7.3	<i>Folgerungen</i>	98
5.8	ANWENDUNGSBEISPIEL: RISSWACHSTUM IN DER BRUCHMECHANIK.....	98
6	MIKROSKOPISCH MOTIViertes STOFFGESETZ UND DESSEN FINITE- ELEMENTE-IMPLEMENTIERUNG	104
6.1	THERMODYNAMISCHER RAHMEN.....	104
6.2	FORMULIERUNG DES MIKROSKOPISCH MOTIVierten STOFFGESETZES.....	110
6.2.1	<i>Eindimensionale Betrachtungsweise</i>	111
6.2.2	<i>Dreidimensionale Fortsetzung und Erweiterung des Stoffgesetzes</i>	117
6.2.3	<i>Dreidimensionale Formulierung der Evolutionsgleichungen</i>	119
6.3	FINITE-ELEMENTE-IMPLEMENTIERUNG.....	124
6.3.1	<i>Darstellung der vektoriellen inneren Variablen in generalisierten Koordinaten</i>	124
6.3.2	<i>Integrationsverfahren in der Finite-Elemente-Implementierung</i>	127
6.3.3	<i>Vorgehensweise bei der Implementierung des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes</i>	135
6.3.4	<i>Konsistente Tangentenmoduli</i>	144
6.3.5	<i>Verfahren zur Konvergenzverbesserung und Berechnungsbeschleunigung</i>	145
6.4	VERIFIZIERUNG DER IMPLEMENTIERUNG DES MIKROSKOPISCH MOTIVierten STOFFGESETZES.....	158
6.4.1	<i>Vergleich experimenteller Daten mit Berechnungsergebnissen</i>	158
6.4.2	<i>Berechnungsergebnisse des typischen Verhaltens piezokeramischer Werkstoffe</i>	162
6.5	ANWENDUNGSBEISPIEL: UNENDLICH AUSGEDEHNTER ZYLINDER.....	169
7	VERGLEICHENDE BETRACHTUNG BEIDER STOFFGESETZE UND DEREN FINITE-ELEMENTE-IMPLEMENTIERUNGEN	178
8	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	181
9	LITERATURVERZEICHNIS	184

Notationen und Operatoren

Vektoren (Tensoren erster Stufe) werden mit kursiven Buchstaben und einem Pfeil gekennzeichnet. Tensoren zweiter Stufe werden kursiv und fett gedruckt. Tensoren dritter Stufe werden zusätzlich mit einem senkrechten Strich versehen und Tensoren vierter Stufe sind durch kalligraphische Buchstaben gekennzeichnet. Werden tensorielle Größen mit ihren Komponenten dargestellt, so liegt diesen ein kartesisches Koordinatensystem mit den Einheitsbasisvektoren \vec{e}_1 , \vec{e}_2 und \vec{e}_3 zu Grunde. Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention. Rechenregeln für Tensoren können Betten [95] entnommen werden.

Lateinische Buchstaben

$\vec{0}$	Nullvektor
$\mathbb{1}$	Einheitstensor zweiter Stufe
a	Risslänge
A	Faktor in der Energiebarrierefunktion F^G
$b(\beta)$	Zusatzterm für die Energiebarrierefunktion
c^e	nicht-negativer Materialparameter in der Umklappfunktion f^e
c^m	nicht-negativer Materialparameter in der Umklappfunktion f^m
c^β	nicht-negativer Materialparameter in ϕ^β
c^γ	nicht-negativer Materialparameter in ϕ^γ
\mathbb{C}	Elastizitätstensor vierter Stufe
$d\mathbf{l}$	Piezoelektrizitätstensor dritter Stufe
d^{\parallel}	Piezomodul parallel zur Polungsrichtung
d^{\perp}	Piezomodul rechtwinklig zur Polungsrichtung
$d^=$	Piezomodul bei Scherung zur Polungsrichtung
\vec{D}	dielektrischer Verschiebungsvektor
∂G :	Begrenzung des Bereiches G
\vec{E}	elektrischer Feldvektor
E_0	kritisches elektrisches Feld
E_3^B	kinematisches Verfestigungsfeld
E^c	Koerzitivfeldstärke
E^{sat}	Sättigungsfeldstärke
\vec{e}_i	Einheitsbasisvektor
e_i^β	Richtung der ODF im Raum
e_i^γ	Richtung der irreversiblen Polarisation für mikros. mot. Stoffgesetz
\vec{e}^{P^i}	Richtung der irreversiblen Polarisation für phäno. Stoffgesetz
ϵps	Maschinengenauigkeit des verwendeten Computers und Compilers
f	konvexe Umklappfunktion

f^e	elektrisches Fließkriterium
f^m	mechanisches Fließkriterium
\vec{F}	Coulomb-Kraft
F^G	Energiebarrierefunktion
F^α	implizite Eulerfunktion
g	Gibbsche freie Energie
$g(\gamma)$	Zusatzterm für die Energiebarrierefunktion
G	zulässiger Bereich für β und γ
h	Störgröße für den Differenzenquotienten
h^e	elektrisches Sättigungskriterium
h^m	mechanisches Sättigungskriterium
$\mathbf{J}(\mathbf{x})$	Jakobi-Matrix
k^*	Konditionierung der elektroelastischen Steifigkeitsmatrix
$K_i^{(1)}$	Spannungsintensitätsfaktor
$ \vec{l} $	Abstand zweier Ladungen
m	positiver Materialparameter in \hat{P}^{sat}
m_{max}	maximale Schrittzahl für das gedämpfte Newtonverfahren
\mathbf{M}	Materialmatrix
n	nicht-negativer Materialparameter in \hat{T}^c
N	Exponent in der Energiebarrierefunktion F^G
$\rho(\theta)$	transversal isotrope Orientierungsverteilungsfunktion
\bar{p}	elektrisches Dipolmoment
\vec{P}	Polarisationsvektor
\vec{P}^i	irreversibler Polarisationsvektor
\vec{P}^r	reversibler Polarisationsvektor
P^{sat}	Sättigungspolarisation bzw. remanente Polarisation
\hat{P}^{sat}	Funktion der Sättigungspolarisation
P^{spon}	Spontane Polarisation der Einheitszelle
P^δ	remanente Restpolarisation
$q^{(1)}$	innere Variablen im mikros. mot. Stoffgesetz
Q	elektrische Ladung
Q_{Probe}	elektrische Probeladung
r	Radius
r_i	Innenradius
r_o	Außenradius
S	Entropie eines Körpers
\mathbf{S}	Verzerrungstensor zweiter Stufe
\mathbf{S}^i	irreversibler Verzerrungstensor zweiter Stufe
\mathbf{S}^{ie}	elektrisch induzierter Verzerrungstensor zweiter Stufe
\mathbf{S}^{im}	mechanisch induzierter Verzerrungstensor zweiter Stufe
\mathbf{S}^r	reversibler Verzerrungstensor zweiter Stufe

S^{sat}	Sättigungsdehnung bzw. remanente Dehnung
S^{spon}	spontane Dehnung der Einheitszelle
$()_t$	Zeitpunkt oder Inkrement in der FEM
T	Temperatur
\mathbf{T}	Spannungstensor zweiter Stufe
\hat{T}^c	Funktion der Koerzitivspannung
$U(t)$	elektrische Spannung
U	innere Energie
\bar{u}	Verschiebungsvektor
Y	Elastizitätsmodul

Griechische Buchstaben

α	Laufvariable
α^e, α^m	skalare Parameter für das phänomenologische Modell
β	Anteil der c-Achsen in den Kegeln
β^e, β^m	skalare Parameter für das phänomenologische Modell
β^{ref}	Referenzwert für β
γ	relative makroskopische Polarisation
$\gamma^{max, \parallel}(\beta)$	maximale relative Polarisation in Richtung der Längsachse der Kegel
$\gamma^{max, \perp}(\beta)$	maximale relative Polarisation rechtwinklig zur Längsachse der Kegel
δ_{ij}	Kronecker-Delta
$\Delta \bar{P}_f^i$	Korrektor für die irreversible Polarisation des phäno. Stoffgesetzes
$\Delta \bar{P}_h^i$	Korrektor für die irreversible Polarisation des phäno. Stoffgesetzes
$\Delta \mathbf{S}_f^{im}$	Korrektoren für die irreversible Dehnung des phäno. Stoffgesetzes
$\Delta \mathbf{S}_h^{im}$	Korrektoren für die irreversible Dehnung des phäno. Stoffgesetzes
ε	Permittivität
ε_0	dielektrische Feldkonstante
ς	innere Dissipation eines Systems
θ	Breitenwinkel der Einheitskugel
θ^e	Öffnungswinkel des Kegels im mikr. Mot. Stoffgesetz
κ	Suszeptibilitätstensor zweiter Stufe
λ	plastischer Multiplikator
λ_f^e	Proportionalitätsfaktor in f^e
λ_h^e	Proportionalitätsfaktor in h^e
λ_f^m	Proportionalitätsfaktor in f^m
λ_h^m	Proportionalitätsfaktor in h^m
Λ^0	Parameter der Viskosität des Materials
ν	Querdehnzahl
ρ	Dichte des Körpers

σ^c	Koerzitivspannung
σ^{sat}	maximale Spannung
$\varphi(t)$	elektrisches Potenzial
φ	Meridianwinkel der Einheitskugel
ϕ^β	thermodynamisch konjugierte Kraft für β
ϕ^γ	thermodynamisch konjugierte Kraft für γ
$\vec{\phi}^{\bar{e}^\beta}$	thermodynamisch konjugierte Kraft für \bar{e}^β
$\vec{\phi}^{\bar{e}^\gamma}$	thermodynamisch konjugierte Kraft für \bar{e}^γ
$\phi^{\beta,0}$	kritischer Zustand in der konvexen Umklappfunktion f für ϕ^β
$\phi^{\gamma,0}$	kritischer Zustand in der konvexen Umklappfunktion f für ϕ^γ
$\phi^{\bar{e}^\beta,0}$	kritischer Zustand in der konvexen Umklappfunktion f für $\vec{\phi}^{\bar{e}^\beta,\perp}$
$\phi^{\bar{e}^\gamma,0}$	kritischer Zustand in der konvexen Umklappfunktion f für $\vec{\phi}^{\bar{e}^\gamma,\perp}$
ψ	Helmholtzsche freie Energie

Indizes

$^0 ()$	Startwert für die Newtoniteration
$()^i$	irreversibler Anteil
$()_i$	Vektor
$()_{ij}$	Tensor zweiter Stufe
$()_{ijk}$	Tensor dritter Stufe
$()_{ijkl}$	Tensor vierter Stufe
$()^{(k)}$	k-ter Iterationsschritt
$^n ()$	Größe zum Zeitpunkt n
$^{n+1} ()$	Größe zum Zeitpunkt n+1
$()^r$	reversibler Anteil
$()^{tr}$	elastischer Prädiktor

Operatoren

$\dot{ }$	Zeitableitung bzw. Evolutionsgleichung
$()^{-1}$	Inverse
$()^\perp$	Projektion eines Vektors
$()^{dev}$	Deviator

$()^T$	Transponierte
$\langle \rangle$	McAuley-Klammern
$cond()$	Konditionszahl einer Matrix
$div()$	Divergenz
$grad()$	Gradient
$rot()$	Rotation
$\nabla()$	Laplace-Operator
$\Delta()$	Zuwachs oder Differenz

1 Einführung und Motivation

Der piezoelektrische Effekt beschreibt einen linearen Zusammenhang zwischen einerseits der Dehnung und der Polarisierung und andererseits dem elektrischen Feld und der mechanischen Spannung. Dieser Effekt wurde bereits am Ende des 19. Jahrhunderts von Pierre und Jacques Curie [1] an Seignettesalz, Quarz und anderen Materialien beschrieben. Das Seignettesalz (auch Rochellesalz genannt), das im 17. Jahrhundert von Pierre de la Seignette, einem Apotheker, entdeckt wurde [2], war auch das erste Kristall, welches als ferroelektrisch bekannt wurde [3]. Als Ferroelektrizität werden in Analogie zum Ferromagnetismus die Hystereseigenschaften unter einem elektrischen Feld eines Werkstoffes bezeichnet. Die Ferroelastizität bezeichnet die Hystereseigenschaften unter einer mechanischen Spannung (Näheres siehe Kapitel 2).

Erstmals wurde der piezoelektrische Effekt in Bariumtitanat ab den vierziger Jahren des 20. Jahrhunderts technisch ausgenutzt [1], nachdem in den USA, Japan und der Sowjetunion unabhängig voneinander die ferroelektrischen Eigenschaften dieses Werkstoffes entdeckt wurden. Zu den ersten Anwendungen zählten Kondensatoren mit kleinen Abmessungen und Piezoelemente für die Elektroakustik.

Im Laufe der fünfziger Jahre des 20. Jahrhunderts wurde ein ausgeprägter piezoelektrischer Effekt in Blei-Zirkonat-Titanat-Keramiken (PZT) entdeckt. Jaffe et al. [4] führten Untersuchungen zu den ferro- und piezoelektrischen Eigenschaften dieses Werkstoffes durch. Mit diesen Untersuchungen konnte die Breite der Anwendungen mit piezokeramischen Werkstoffen ausgeweitet werden und die Bedeutung dieser nahm stetig bis in die heutige Zeit zu.

Piezokeramische Werkstoffe finden heutzutage eine breite Anwendung in verschiedensten technischen Bereichen. Sie werden bspw. in Ultraschallgeräten zur Erzeugung des Schalles eingesetzt. Genauso finden sie Anwendung in Lautsprechern wie z.B. in nahezu jedem Mobiltelefon. Hierbei wird unter Ausnutzung der Längenänderung des Werkstoffes unter einem elektrischen Feld eine Membran angeregt, die letztendlich hörbare Schallwellen von sich gibt. Durch die außerordentlich schnellen Reaktionszeiten piezokeramischer Werkstoffe ergeben sich deutliche Vorteile gegenüber anderer Verfahren, was sie auch interessant für den Einsatz als Aktoren für Dieseleinspritzventile macht. Im Gegensatz zu den

üblichen elektromagnetischen Ventilen, die längere Reaktionszeiten besitzen, kann der Kraftstoff effizienter in den Zylinder gespritzt werden, was zu einer Verminderung des Kraftstoffverbrauches führt.

Die vorgenannten Beispiele sind nur exemplarisch für die breite Anwendungspalette piezokeramischer Werkstoffe. Auch im Bereich der Mikrosystemtechnik wird ihr Einsatz immer häufiger, da neben den schnellen Reaktionszeiten auch eine sehr präzise Positionierung von Bauteilen möglich ist.

Obwohl die piezokeramischen Werkstoffe eine weitreichende Entwicklung erfahren haben und deren Zusammensetzungen Gegenstand ständiger Optimierungen sind, um den piezoelektrischen Effekt noch besser ausnutzen zu können, geht man von einem vereinfachten linearen Zusammenhang für das elektromechanische Verhalten aus, was mit der Zunahme von immer komplexer werdenden Anwendungen zunehmend zu Schwierigkeiten führt. Die elektromechanischen Felder in diesen Bauteilen werden nicht immer quantitativ richtig erfasst und so kommt es zu Ausfällen oder nicht einwandfrei funktionierenden Lösungen, da nichtlineare Effekte des Werkstoffverhaltens bei komplexen Geometrien und Belastungen an Einfluss gewinnen. Hier stoßen die auf kommerzieller Ebene verfügbaren Finite-Elemente-Werkzeuge, die das lineare Verhalten dieser Werkstoffe simulieren können an ihre Grenzen bzw. ist es mit ihnen nicht möglich, Effekte wie mechanische Depolarisation oder eine nicht vollständige Polarisierung der Bauteile zu erfassen.

Im Hinblick auf die Zuverlässigkeit und des Großsignalhystereseverhaltens bei der Polung ist die Betrachtung des nichtlinearen Verhaltens im Bereich der Ferroelektrizität und -elastizität aber unabdingbar. Es existieren zwar mittlerweile auch Arbeiten, die das nichtlineare Verhalten von Ferroelektrika in zum Teil selbstgeschriebenen Finite-Elemente-Programmen implementierten. Die meisten sind aber zu unkomfortabel oder zu rechenzeitintensiv, als dass sie für eine kommerzielle Nutzung in Frage kommen könnten. Hervorzuheben sei aber an dieser Stelle die Arbeit von Böhle [5] und Kamlah und Böhle [6], da sie in einem frei zugänglichen Finite-Elemente-Programm mit dem Namen PSU [7] der Universität Stuttgart ein phänomenologisches Materialmodell implementierten, was ebenso in Böhle [5] beschrieben ist, aber seinen Ursprung in Kamlah [8] hat und zusammenfassend in Kamlah [9] zu finden ist.

Mit dieser Implementierung war es erstmals möglich, größere Strukturen zu berechnen, wenn auch die Art und Weise der Implementierung durch schwerfällige Integrationsalgo-

rithmen der Differenzialgleichungen des phänomenologischen Modells wenig effektiv war.

Wie schon zuvor erwähnt wurde, beschäftigten sich auch andere Forscher in der Vergangenheit mit der Implementierung von Stoffgesetzen für piezokeramische Werkstoffe. Allerdings erscheint keine Arbeit im Moment geeignet, größere Strukturen in einer vertretbaren Zeit berechnen zu können, da sie meist auf selbst entwickelten Finite-Elemente-Programmen beruhen, die meist den Nachteil haben, dass sie unkomfortabel sind (Vernetzung u. ä.) und somit für potentielle Anwender in der Forschung und Industrie wenig geeignet erscheinen. Näheres hierzu findet sich in Kapitel 4.

Ein Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigt sich mit einer verbesserten Implementierungsmethode auf der Basis eines Radial-Return-Mapping-Algorithmus für das phänomenologische Modell von Kamlah [9], was zu einer deutlich schnelleren Rechenzeit im Vergleich zur Implementierungsmethodik von Böhle [5] führt und damit auch für sehr große Strukturen mit mehreren tausend Elementen anwendbar ist. Im Einzelnen wird das Modell nochmals beschrieben, die „neue“ Implementierung vorgestellt und schließlich anhand komplexer Simulationsbeispiele die Möglichkeiten und Grenzen des Modells und der vorliegenden Implementierung aufgezeigt. Hierzu wurden auch eigenen Experimente an piezokeramischen Werkstoffen durchgeführt und auf die Ergebnisse anderer Autoren zurückgegriffen, um das Modell und dessen Implementierung zu verifizieren. Die Ergebnisse dieser Versuche und die Zusammenfassung anderer Arbeiten finden sich in Kapitel 3.

Obwohl die Implementierung des phänomenologischen Modells in der vorliegenden Form zwar äußerst effizient ist, so hat das Modell selbst gewisse Nachteile, da es in einer multilinearen Form die nichtlinearen Zusammenhänge des Werkstoffverhaltens beschreibt. Dadurch entstehen Nachteile im Bereich der Betrachtung des Verlaufs des Polungsprozesses. Deswegen wurde ein weiteres mikromechanisch motiviertes Stoffgesetz implementiert, das seine Ursprünge in der Arbeit von Kamlah und Jiang [10, 11] hat, wo das Modell in einer eindimensionalen Form aufgestellt und in Kamlah und Wang [12, 13] auf die dreidimensionale Formulierung erweitert wurde. Das Modell kann mit einer mikromechanischen Betrachtungsweise der Domänenumklappprozesse aufwarten und so deutlich präziser das Werkstoffverhalten im Großsignalbereich beschreiben. In der vorliegenden Arbeit wird dieses Modell und dessen Implementierung, die komplexer ist als die des phänomenologischen, multilinearen Modells, ebenfalls vorgestellt und anhand von Simulationsbei-

spielen insbesondere die Qualität der Polungsberechnung aufgezeigt. Im Gegensatz zum multilinearen Modell ist durch die Komplexität des Modells und dessen Implementierung die Rechenzeit zwar länger, aber es können deutlich realistischere Aussagen bezüglich des Polungsverhaltens gemacht werden, die zu einem besseren Verständnis des Verhaltens von Bauteilen aus Ferroelektrika führen und auf einer soliden physikalischen Grundlage stehen.

2 Grundlagen der Piezoelektrizität und Ferroelektrizität

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den Grundlagen der Piezoelektrizität und dem ferroelektrischen Materialverhalten, die für die Motivation der Entwicklung der beiden hier betrachteten Stoffgesetze wichtig sind. Im Rahmen dieser Arbeit kann nur eine zusammenfassende Darstellung des komplexen Themengebietes angeboten werden. Der interessierte Leser findet in Gerthsen und Meschede [14] und Ruschmeyer et al. [15] ausführlichere Informationen zu diesem Thema.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass die folgenden Abschnitte in Analogie zu Böhle [5] entstanden sind, da er aus Sicht des Autors eine hervorragende Zusammenstellung der Grundlagen der Piezoelektrizität und Ferroelektrizität ausgearbeitet hat.

2.1 Elektrostatische Grundlagen und Begriffe

Das elektrische Feld \vec{E} ist die maßgebende Größe, durch deren Einfluss in piezokeramischen Werkstoffen eine Polarisierung auftreten kann.

Ein elektrisches Feld tritt zwischen zwei Teilchen auf, von denen eines positiv und das andere negativ geladen ist. Die Wechselwirkung, die im Ruhezustand vorhanden ist, wird als Coulomb-Kraft \vec{F} bezeichnet. Die Coulomb-Kraft ist die Kraft, die zwischen einer Ladung und einer sehr kleinen Probeladung Q_{Probe} wirkt. Das elektrische Feld ist wie folgt definiert:

$$\vec{E} = \frac{\vec{F}}{Q_{\text{Probe}}} . \quad (2.1)$$

Wenn zwei Ladungen in einem Abstand $|\vec{l}|$ vom Betrag her die gleiche Ladung Q aber unterschiedliche Vorzeichen besitzen, so bezeichnet

$$\vec{p} = Q \cdot \vec{l} \quad (2.2)$$

das elektrische Dipolmoment.

Betrachtet man nun das Kontinuum anstatt der diskreten Darstellung in (2.2) so ergibt sich:

$$\vec{p} = \int_V \vec{P} dV. \quad (2.3)$$

Das elektrische Dipolmoment ergibt sich dabei als Integral über die Dichte des elektrischen Dipolmomentes \vec{P} im Volumen V , auch als dielektrische Polarisation bezeichnet.

Piezokeramische Werkstoffe gehören zu den so genannten Dielektrika. Als Dielektrikum wird ein Isolator oder Nichtleiter bezeichnet. In einem Dielektrikum kann kein stationärer Strom von Ladungsträgern fließen. In kristallinen Werkstoffen, wie es Piezokeramiken sind, können polare Einheitszellen vorhanden sein, die eine dielektrische Polarisation bewirken. Einheitszellen bestehen aus positiv und negativ geladenen Ionen. Dadurch existieren in einer Einheitszelle Ladungsschwerpunkte, die, wenn sie nicht aufeinander liegen, eine spontane Polarisation P^{spont} bewirken, wenn keine äußere Einwirkung vorhanden ist. Diese spontane Polarisation kann durch einen Vektor dargestellt werden. Dieser Vektor befindet sich entlang der polaren Achse innerhalb der Einheitszelle, die durch die Verbindungslinie zwischen den Ladungsschwerpunkten beschrieben werden kann. Der Polarisationsvektor zeigt vom negativen zum positiven Ladungsschwerpunkt.

Der Begriff Ferroelektrika bezeichnet ebenfalls piezokeramische Werkstoffe, aber mit diesem Begriff wird auch der mikroskopische Aufbau des Polykristalls betrachtet. Ein Polykristall ist aus Körnern aufgebaut, die bei einem Ferroelektrikum aus Domänen bestehen. Domänen sind Bereiche, in denen die Orientierungen der Gitterstruktur (Ausrichtung der spontanen Polarisation) des Kristalls gleich sind. Die durch die spontane Polarisation hervorgerufene Anisotropie des Werkstoffes kann durch elektrische Felder oder mechanischen Spannungen beeinflusst werden. Diese äußeren Belastungen können zu so genannten Domänenumklappprozessen führen, die verantwortlich für das nichtlineare Materialverhalten piezokeramischer Werkstoffe sind.

Anhand des Bariumtitanats mit der chemischen Struktur (BaTiO_3), einem Perowskit (allgemeine Struktur ABO_3), sollen im Folgenden die Mechanismen innerhalb einer Einheitszelle erläutert werden. In Abbildung 2.1 ist eine typische Einheitszelle des Werkstoffes dargestellt.

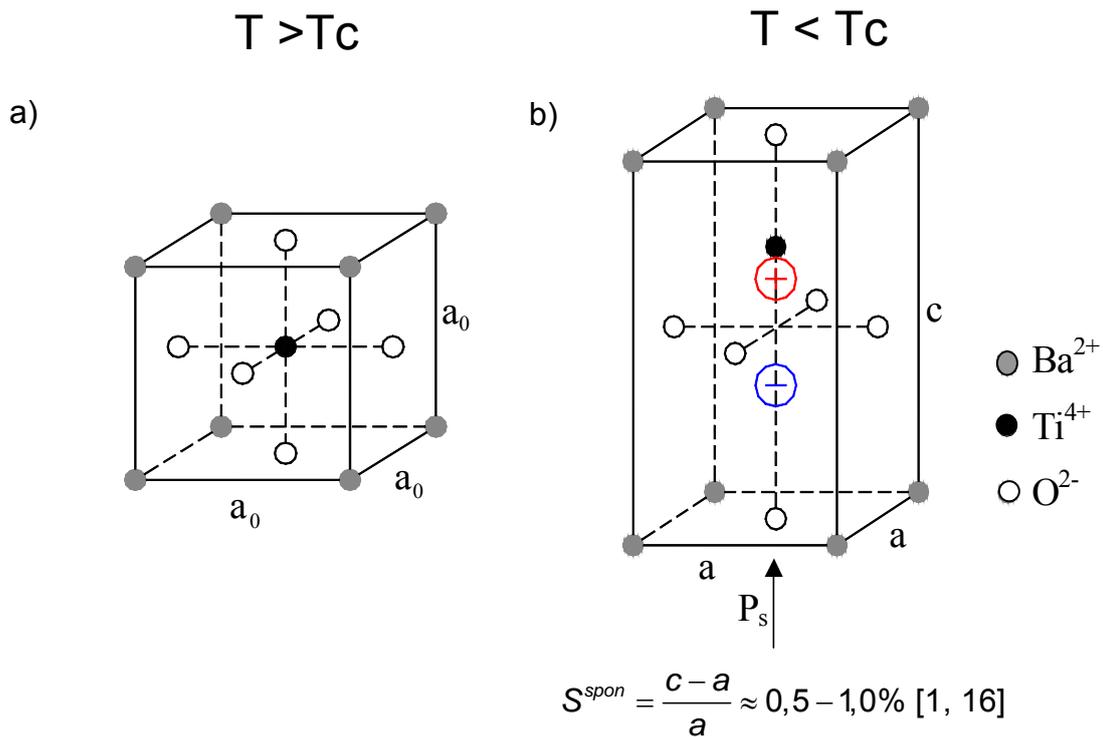


Abbildung 2.1: *Einheitszelle von Bariumtitanat (BaTiO₃)*
 a) oberhalb der Curietemperatur T_c mit kubischer Perowskitstruktur
 b) unterhalb der Curietemperatur T_c mit tetragonaler Struktur

In Bariumtitanat sind zwei Phasenzustände möglich. Einerseits handelt es sich dabei um die paraelektrische Phase, in der die Einheitszelle eine kubische Form annimmt, die unipolar ist. Andererseits existiert eine ferroelektrische Phase mit polarer, tetragonaler Struktur der Einheitszelle. Der Phasenübergang findet bei der so genannten Curietemperatur T_c statt, unterhalb derer die ferroelektrische Phase vorliegt.

Bei einer kubischen Einheitszelle, die oberhalb der Curietemperatur vorhanden ist, liegen die Ladungsschwerpunkte aufeinander. Deswegen besitzt die Einheitszelle in dieser Phase weder eine spontane Polarisation noch piezoelektrische Eigenschaften. Der bei allen Dielektrika vorhandene Effekt der Elektrostriktion, der lediglich dann zu beobachten ist, ist so gering, dass dessen Wirkung i. d. R. zu vernachlässigen ist und keine technische Relevanz besitzt.

Bei Unterschreiten der Curietemperatur liegt die ferroelektrische Phase mit tetragonaler Struktur vor. Diese Form kommt durch eine Verschiebung des Titanions in Richtung eines der flächenzentrierten Sauerstoffionen zustande (siehe Abbildung 2.1 b)). Die kubische Form verändert sich zur tetragonalen Struktur, in der die Ladungsschwerpunkte der Ein-

heitszelle sich trennen und nicht mehr aufeinander liegen. So entsteht eine spontane Polarisation und durch die Formänderung wird eine spontane Verzerrung (spontane Dehnung) der Einheitszelle bewirkt. Die Trennung der Ladungsschwerpunkte verursachen den piezoelektrischen und elektrostriktiven Effekt der polaren Kristallstruktur.

Einheitszellen mit gleicher Ausrichtung der spontanen Dehnung bzw. Polarisation ordnen sich in Bereiche, den so genannten Domänen, an, aus denen dann schließlich der Polykristall zusammengesetzt ist. Im Polykristall bei gleicher Ausrichtung aller Domänen in eine Richtung nennt man die akkumulierten spontanen Größen, die auch ohne äußere elektrische oder mechanische Belastung bestehen bleiben, auch remanente Polarisation P^{sat} und remanente Dehnung S^{sat} . Die remanente Polarisation P^{sat} bzw. Dehnung S^{sat} werden auch als Sättigungspolarisation bzw. Sättigungsdehnung bezeichnet.

Dennoch muss zur technischen Nutzung der Polykristall zunächst „gepolt“ werden, da nach dem Abkühlen die große Anzahl der Einheitszellen im Kristall in unterschiedliche Richtungen zeigen, da die Wahrscheinlichkeit der Verschiebung des Titanions in die möglichen sechs Raumrichtungen (vgl. Abbildung 2.1) gleich groß ist und somit makroskopisch keine Polarisation zu beobachten ist. Man bezeichnet den Werkstoff nach dem Herstellungsprozess durch Sintern auch als „thermisch depolarisiert“. Zur technischen Ausnutzung des Piezoeffekts wird je nach späterem Anwendungszweck die Keramik unter einem genügend großen elektrischen Feld gepolt, so dass die Einheitszellen möglichst in Polungsrichtung zeigen. Erst dann kann die ferroelektrische Keramik entsprechend ihrer Verwendung eingesetzt werden.

2.2 Effekte bei Ferroelektrika

Im Folgenden werden das Verhalten und die unterschiedlichen Effekte, die bei Ferroelektrika zu beobachten sind, zusammengefasst. Jaffe et al. [1] und Feldtkeller [16, 17] bieten eine weit ausführlichere Darstellung als die vorliegende, da hier die Effekte entsprechend ihrer Bedeutung für die thermodynamische Modellierung in dieser Arbeit betrachtet werden und deswegen nicht den Anspruch der umfassenden Diskussion besitzen.

Elektrostriktion

Wie schon im vorigen Kapitel erwähnt wurde, genießt der elektrostriktive Effekt bei Ferroelektrika, der oberhalb wie auch unterhalb der Curietemperatur auftritt, keine technische Relevanz, da die dabei erzeugte Dehnung und Polarisierung zu gering sind, um sie auszunutzen. Elektrostriktion ist ein Phänomen, der allen Dielektrika gemein ist. Durch ein angelegtes elektrisches Feld werden die Ladungsschwerpunkte in geringem Maße gegeneinander verschoben und es kann eine Dehnung und Polarisierung der Einheitszelle beobachtet werden. Dabei steht die durch diesen Effekt induzierte Dehnung in einer Abhängigkeit höherer Ordnung (quadratisch) proportional zum elektrischen Feld, unabhängig von dessen Vorzeichen. Die Polarisierung kann in der Regel in einer linearen Abhängigkeit zum elektrischen Feld gesehen werden, wobei Hao et al. [18] gezeigt haben, dass bei genügend großen elektrischen Feldern die Polarisierung wie auch die Dehnung gegen einen Sättigungswert streben. Bei Wegnahme des elektrischen Feldes bewegen sich die Ladungsschwerpunkte wieder aufeinander zu und die induzierte Polarisierung und Dehnung verschwinden. Der Effekt der Elektrostriktion ist damit reversibel.

Bei Fehlen eines äußeren elektrischen Feldes vermag es eine mechanische Belastung nicht, die Ladungsschwerpunkte gegeneinander zu verschieben und es sind keine Effekte außer den üblichen linear elastischen Verformungen zu beobachten (vorausgesetzt man bewegt sich mit der mechanischen Belastung im linearen Bereich des Werkstoffes). Dagegen kann eine mechanische Belastung bei einem angelegten elektrischen Feld (wenn der Effekt der Elektrostriktion bereits eingesetzt hat) die Polarisierung wie auch die Dehnung je nach Richtung der Belastung verstärken oder schwächen.

Piezoelektrizität

Der piezoelektrische Effekt kann in allen kristallinen Werkstoffen beobachtet werden, deren Einheitszellen polare Achsen (u. U. mehr als eine) und kein Symmetriezentrum besitzen. Diese Bedingung liegt bei piezokeramischen Werkstoffen im Allgemeinen unterhalb der Curietemperatur vor. Der piezoelektrische Effekt bezeichnet den linearen, reversiblen Zusammenhang der elektrischen und mechanischen Größen.

Beim piezoelektrischen Effekt, dessen Ursachen im vorangegangenen Kapitel erläutert wurde, kann man zwischen zwei verschiedenen Wirkungen unterscheiden:

Zum einen sei der *direkte piezoelektrische Effekt* genannt, bei dem eine mechanische Belastung zu einer Verformung der Einheitszelle und somit zu einer Verschiebung der Ladungsschwerpunkte führt. Dabei wird eine zur mechanischen Belastung proportionale Änderung der Polarisation bewirkt. Durch diesen Effekt werden elektrische Ladungen auf den Oberflächen in Belastungsrichtung frei. Diese hohen elektrischen Spannungen können technisch genutzt werden. Die bekanntesten Anwendungen dürften Feuerzeuge sein, bei denen über eine gespannte Feder und einem Bolzen ein gepolter piezokeramischer Werkstoff eine kurze, dynamische Belastung erfährt. Die freigesetzten Ladungen werden mittels eines Funken zur Entzündung des Gases genutzt. Ähnliche Bauweisen finden sich ebenfalls in Kontaktzündern von Bomben.

Zum anderen existiert der *inverse piezoelektrische Effekt*. Hier führt ein äußeres elektrisches Feld zu einer Verschiebung der Ladungsschwerpunkte der Einheitszelle und so zu einer dem elektrischen Feld proportionalen Längen- und Polarisationsänderung derselben. Zeigt der Vektor des elektrischen Feldes in die gleiche Richtung wie die Polarisation, so lässt sich eine Verlängerung der Einheitszelle beobachten. Analog führt ein Vektor des elektrischen Feldes in entgegengesetzte Richtung zur Polarisation zu einer Verkürzung. Anwendungsbeispiele hierfür sind Aktoren, die zur Positionierung von Bauteilen verwendet werden oder Lautsprecher, wie eingangs bereits erwähnt wurde.

An dieser Stelle sei nochmals erwähnt, dass der piezoelektrische Effekt am Polykristall nur dann beobachtet werden kann, wenn dieser zuvor „gepolt“ wurde. Durch die gleichmäßige Ausrichtung der Einheitszellen in jede Richtung nach Unterschreiten der Curie-temperatur würde ein elektrisches Feld, das an einem ungepolten Polykristall angelegt würde, zwar zu Längen- und Polarisationsänderungen der einzelnen Einheitszellen führen, allerdings würden sich diese über den Polykristall hinweg aufheben und makroskopisch wäre kein Effekt zu beobachten. Erst die Ausrichtung der Einheitszellen in eine Richtung nach Polung würde zu einem spürbaren Effekt führen. Dazu wird später noch in dieser Arbeit näher eingegangen.

Ferroelektrizität

Unter dem ferroelektrischen Effekt versteht man die durch ein elektrisches Feld induzierte bleibende Änderung von Polarisation und Dehnung. Die Ursache hierfür ist die bevorzugte Anordnung von Einheitszellen mit gleicher Ausrichtung ihrer Polarisationsvektoren in

so genannten Domänen. Die Ausrichtung dieser Domänen kann bleibend unter dem Einfluss eines hinreichend starken elektrischen Feldes in dessen Richtung ausgerichtet werden. Bei diesem „Polungsprozess“ kann man deutlich nichtlineares Materialverhalten am Polykristall feststellen. Dabei durchlaufen Polarisierung und Dehnung jeweils eine Hysterese und man kann Kennwerte wie die remanente Polarisierung und die remanente Dehnung bestimmen, also Größen, die auch nach Wegnahme des elektrischen Feldes bestehen bleiben. Hierauf wird noch gleich in dieser Arbeit eingegangen werden. Dieses so genannte „Polen“ stellt die Grundvoraussetzung am piezokeramischen Polykristall dar, um die vorgenannten piezoelektrischen Effekte technisch nutzen zu können.

Ferroelastizität

Bei der Ferroelastizität vermag es eine hinreichend starke mechanische Belastung, die Ausrichtung der in Domänen zusammengefassten Einheitszellen zu ändern und so zu einer deutlich nichtlinearen Änderung der Dehnung des Polykristalls führen. Hierbei wird ebenfalls durch wechselnde mechanische Beanspruchung eine Hysterese im Spannungs-Dehnungsraum beschrieben, die aber im Gegensatz zu Ferroelektrizität auch bei einem ungepolten Polykristall mit gleichmäßiger Ausrichtung der Domänen in jede Richtung, d.h. dass sich die Vektoren der spontanen Polarisierung der Einheitszellen im Mittel aufheben, auftreten kann.

Der nächste Abschnitt befasst sich ausführlicher mit den Phänomenen der Ferroelektrizität und Ferroelastizität.

2.3 Domänen in Ferroelektrika und deren Umklappvorgänge

Domänen innerhalb eines ferroelektrischen Polykristalls kennzeichnen Bereiche, in denen die Vektoren der spontanen Polarisierung in eine Richtung zeigen. Sie sind begrenzt durch Domänenwände, die sie von den anderen Domänen mit anderer Ausrichtung der Polarisierungsvektoren im Polykristall abgrenzen. Je nach räumlicher Kristallstruktur ergeben sich unterschiedliche Möglichkeiten der Anordnung der Domänenwände zueinander. Im Fall des Bariumtitanat mit einer tetragonalen Kristallstruktur und den daraus folgenden sechs möglichen, verschiedenen Raumrichtungen der Orientierung der Einheitszellen können

sich nur 90°- und 180°-Anordnungen der Domänenwände zueinander finden (Smolenskij und Krajnik [19]). Bei 90°-Anordnungen stehen die Polarisationsvektoren der angrenzenden Domänen rechtwinklig zueinander, wohin gegen bei einer 180°-Anordnung die Polarisationsvektoren der Domänen in entgegengesetzte Richtungen zeigen. Bei einer rhombohedrischen Struktur mit seinen acht unterschiedlichen Möglichkeiten der räumlichen Anordnung der Einheitszellen existieren dagegen geometriebedingt 180°, 71°, 109°-Domänenwände (Härtling [20]).

Für die Ursache der Domänenbildung in Ferroelektrika geht man heutzutage davon aus, dass eine Aufspaltung von einigen großen Domänen in kleinere Bereiche mit gleicher Anordnung der spontanen Polarisationsvektoren die Energie des elektrischen Feldes der einzelnen Domäne erniedrigt, da dessen räumliche Ausdehnung durch diesen Prozess verringert wird (Tichý und Gautschi [21], Sonin und Strukow [22]).

Da alle Einheitszellen in einer Domäne sich gleich verhalten, liegt es nahe, dass unter dem Einfluss von elektrischen Feldern und/oder mechanischen Spannungen, die eine Ausrichtung einer Einheitszelle verändern können (siehe weiter oben), ganze Domänen mikroskopischen Ausrichtungsprozessen, den Umklappvorgängen, unterliegen können, wenn die entsprechenden Belastungsgrößen groß genug sind, um diese Vorgänge auszulösen. Im Folgenden werden diese Umklappvorgänge am Beispiel des Bariumtitanats erläutert, da durch dessen einfache, tetragonale Kristallstruktur die Vorgänge anschaulich präsentiert werden können.

Umklappvorgänge aufgrund elektrischer Felder

Zunächst soll die Wirkung eines hinreichend großen elektrischen Feldes an einer tetragonalen Einheitszelle gezeigt werden. In Abbildung 2.2 ist eine Einheitszelle schematisch mit der Ausrichtung des spontanen Polarisationsvektors dargestellt.

In Abbildung 2.2 a) ist das elektrische Feld entgegen der Richtung des spontanen Polarisationsvektors gerichtet. Ist das Feld stärker als die Koerzitivfeldstärke E^c , so verschiebt sich das Titanion in Richtung des elektrischen Feldes und findet auf der anderen Seite der Symmetrieebene der Einheitszelle wieder einen Gleichgewichtszustand. Dadurch zeigt der Polarisationsvektor in die entgegengesetzte Richtung wie zuvor und man spricht von einem 180°-Umklappen. Das bedeutet, dass sich die Polarisation der Einheitszelle irreversi-

bel ändert, allerdings geht dieser Umklappvorgang ohne Änderung der Dehnung der Einheitszelle einher.

In Abbildung 2.2 b) liegt das elektrische Feld rechtwinklig zur Achse des Polarisationsvektors an der Einheitszelle an. Wiederum kommt es zu einem Umklappen durch Verschiebung des Titanions in Richtung des elektrischen Feldes, wenn dieses groß genug ist, d.h., wenn es die Koerzitivfeldstärke erreicht. Diese Art des Umklappvorganges nennt man entsprechend dem Winkel, den der Polarisationsvektor mit seiner Achse der ursprünglichen Ausrichtung einschließt, 90°-Umklappen. Hierbei ändert sich nicht nur die Polarisation irreversibel, sondern ebenso die Verzerrung der Einheitszelle, wie es in Abbildung 2.2 b) deutlich erkennbar ist.

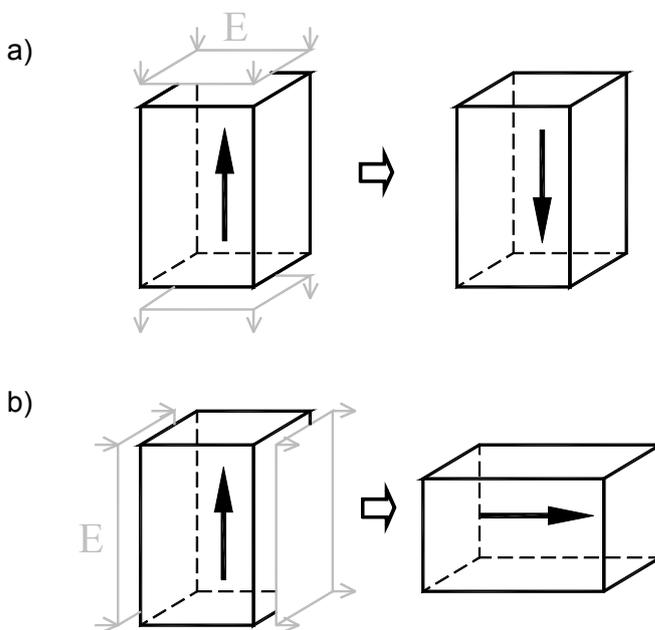


Abbildung 2.2: *Umklappen einer Einheitszelle von Bariumtitanat (BaTiO_3) unter Belastung eines elektrischen Feldes*
a) *parallel zur spontanen Polarisationsachse, aber in entgegengesetzte Richtung*
b) *rechtwinklig zur spontanen Polarisationsachse*

Umklappvorgänge aufgrund mechanischer Spannungen

Wie schon eingangs erwähnt wurde, können auch mechanische Spannungen ab einer Grenze, die man die Koerzitivspannung σ^c nennt, zu Umklappvorgängen der Einheitszelle führen. In Abbildung 2.3 sind diese wieder am Beispiel des Bariumtitanats dargestellt.

Hierbei sind mehr Möglichkeiten der neuen Ausrichtung der Einheitszelle als bei den elektrisch induzierten Umklappvorgängen gegeben.

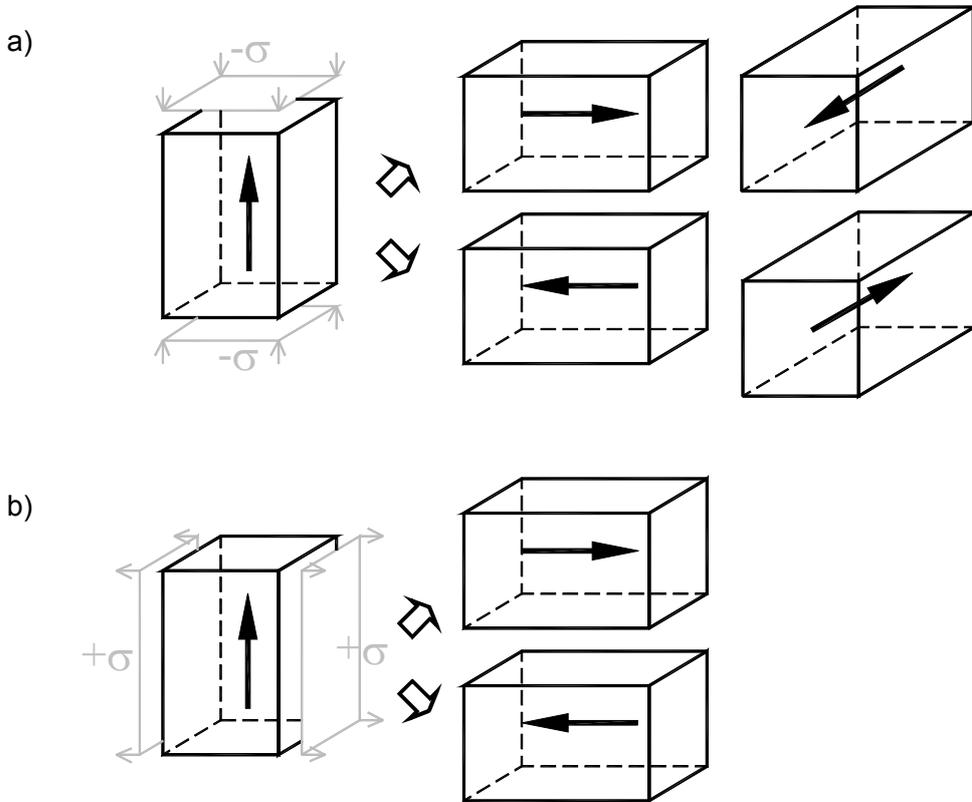


Abbildung 2.3: *Umklappen einer Einheitszelle von Bariumtitanat (BaTiO_3) unter Belastung einer mechanischen Spannung*
a) parallel zur spontanen Polarisationsachse (Druckbelastung)
b) rechtwinklig zur spontanen Polarisationsachse (Zugbelastung)

In Abbildung 2.3 a) ist aber schon eine erste Einschränkung der Umklappvorgänge, bezogen auf die Art der mechanischen Belastung, angedeutet. Nur Druckbelastungen können in diesem Fall zu einem Umklappen der Einheitszelle führen. Hierbei sind entsprechend der Raumrichtungen vier verschiedene Möglichkeiten der Verschiebung des Titanions möglich, die mit einer irreversiblen Änderung der Polarisationsachse wie auch der Verzerrung der Einheitszelle einhergehen. Hierbei sind die Richtungen gleichberechtigt und es kann nicht vorhergesagt werden, in welche Richtung die Einheitszelle umklappt. Zugbelastungen würden in diesem Fall lediglich den direkten piezoelektrischen Effekt (vgl. Abschnitt 2.2) bewirken.

In Abbildung 2.3 b) bewirkt eine rechtwinklig zur Polarisationsachse aufgebrachte mechanische Zugbelastung ein Umklappen in die Achse der Zugbelastung, die ebenfalls mit

einer irreversiblen Polarisations- und Verzerrungsänderung einhergeht. Die zwei Möglichkeiten sind ebenfalls gleichberechtigt. Eine Druckbelastung in die gleiche Richtung wie in Abbildung 2.3 b) würde, wie im vorangegangenen Abschnitt erläutert wurde, zum direkten piezoelektrischen Effekt aber zu keinem Umklappvorgang führen.

Wie durch dieses Beispiel an Bariumtitanat deutlich geworden ist, kann bei einer tetragonalen Kristallstruktur eine mechanische Spannung nur zu 90°-Umklappvorgängen führen. Betrachtet man nun das Polykristall mit einer Vielzahl von Domänen, so sei noch angemerkt, dass mechanische Spannungen nicht zu einer makroskopisch beobachtbaren Polarisation führen können, sondern lediglich, wie die Abbildung ebenso verdeutlichen soll, eine Verminderung der Polarisation bei einem vorgepolten Körper auf makroskopischer Ebene bewirken können. Diesen Effekt bezeichnet man als mechanische Depolarisation, worauf später in dieser Arbeit noch näher eingegangen wird. Selbst bei einer Zugbelastung mögen zwar die Achsen der Polarisation aller Domänen des Polykristalls in die gleiche Richtung gerichtet sein, aber durch die zwei statistisch gleichberechtigte Möglichkeiten des Umklappens mit entgegengesetzt gerichteten Polarisationsvektoren wird keine makroskopische Polarisation induziert. Vielmehr kommt es selbst bei einer Zugbelastung zu einer Verminderung der Polarisation.

Veranschaulichung des Polungsprozesses

Betrachtet man nun wieder ein Polykristall (hier Bariumtitanat) wie in Abbildung 2.4 dargestellt, so kann man den Polungsprozess veranschaulichen, der nach dem Sintern der Piezokeramik nötig ist, um eine makroskopisch beobachtbare Polarisation zu erzeugen.

Abbildung 2.4 a) zeigt die Verteilung der Domänen des thermisch depolarisierten Polykristalls, der makroskopisch isotrope Materialeigenschaften aufweist. Hier sind schematisch die Korngrenzen und die Domänen mit ihren spontanen Polarisationsvektoren dargestellt. Aufgrund der tetragonalen Struktur von Bariumtitanat sind lediglich 90°- und 180°-Domänenwände vorhanden. Deutlich ist zu erkennen, dass über den Polykristall hinweg makroskopisch keine Polarisation zu beobachten ist. Wird nun, wie in Abbildung 2.4 b) gezeigt, ein elektrisches Feld am Polykristall angelegt, das oberhalb der Koerzitivfeldstärke liegt, so vereinigen sich die Domänen innerhalb der Körner durch 90°- und 180°-Umklappvorgänge und richten sich in Richtung des elektrischen Feldes aus. Lediglich mechanische Zwängungen an den Korngrenzen verhindern eine vollständige Ausrichtung

der Domänen in diese Richtung. Während des Vorganges kommt es zu einer Verzerrung des Polykristalls, hier eine Verlängerung in Richtung des elektrischen Feldes und zu einer Verkürzung rechtwinklig dazu. Nach Wegnahme des elektrischen Feldes in Abbildung 2.4 c) verbleibt eine remanente Dehnung und der Polykristall weist eine makroskopisch beobachtbare, remanente Polarisation auf. Nun ist die Piezokeramik technisch nutzbar, d.h. sie besitzt piezoelektrische Eigenschaften.

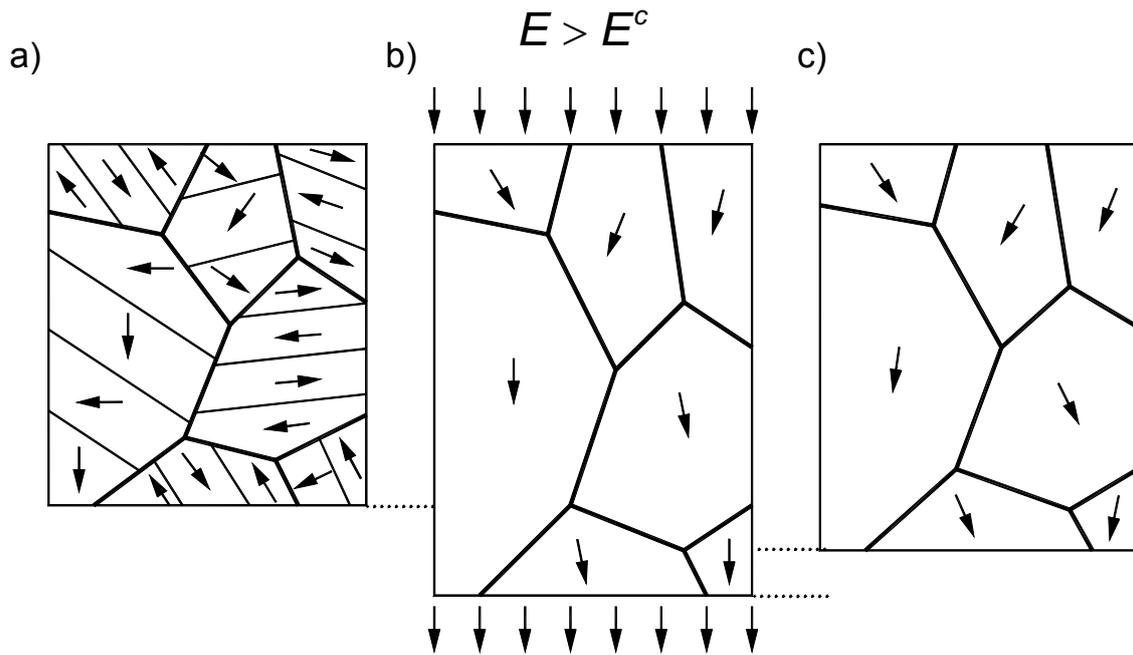


Abbildung 2.4: Umklappvorgänge eines Polykristalls bei einem Polungsprozess am Beispiel des Bariumtitanats:

- makroskopisch ungepolarer Zustand nach Sinterung
- Ausrichtung der Domänen bei Anlegung eines hinreichend starken elektrischen Feldes (makroskopisch beobachtbare Polarisation und Verzerrung)
- Remanente Dehnung und remanente Polarisation nach Wegnahme des elektrischen Feldes

Es sei noch angemerkt, dass unter der Annahme einer vollständigen Ausrichtung der Domänen in Richtung des elektrischen Feldes die remanente Polarisation P^{sat} den Wert der spontanen Polarisation P^{spon} der Einheitszelle annehmen würde, was aber im Polykristall durch die zuvor beschriebenen mechanischen Zwängungen (das Kristallgitter ist im Allgemeinen auch nicht vollständig parallel zum elektrischen Feld) in der Regel nicht stattfinden könnte, womit gilt:

$$P^{sat} \leq P^{spon} \quad (2.4)$$

Selbiges trifft auch auf die remanente Dehnung S^{sat} und die spontane Dehnung der Einheitszelle S^{spon} zu:

$$S^{sat} \leq S^{spon}. \quad (2.5)$$

2.4 Makroskopisches Verhalten der Ferroelektrika unter elektro-mechanischer Beanspruchung

Im Folgenden wird auf das makroskopische Verhalten von Ferroelektrika unter einer elektrischen oder mechanischen Belastung eingegangen. Zur Vereinfachung wird wiederum die Kristall- und Domänenstruktur des Bariumtitanats zur Veranschaulichung herangezogen. Generell sind aber die folgenden Abschnitte auch auf andere piezokeramische Werkstoffe anwendbar, da das dargestellte qualitative, makroskopische Verhalten allen Ferroelektrika gemein ist. Lediglich die Art des Umklappens (90° , 71° usw.) hängt von der Kristallstruktur des einzelnen Werkstoffes ab. Dieses beeinflusst aber nicht das grundsätzliche Verhalten.

Im Einzelnen werden die dielektrische Hysterese, die Schmetterlingshysterese, die ferroelastische Hysterese und das mechanische Depolarisationsverhalten ausführlich diskutiert und in Zusammenhang mit den Domänenprozessen – dem Umklappverhalten – gestellt. Dazu sind in den folgenden Diagrammen zu jedem Zustand repräsentativ Domänen dargestellt, um diese Prozesse zu verdeutlichen.

Dielektrische Hysterese

Die dielektrische Hysterese zeigt das ferroelektrische Verhalten piezokeramischer Werkstoffe unter einer elektrischen Belastung. In Abbildung 2.5 ist eine solche dielektrische Hysterese abgebildet. Dabei ist auf der vertikalen Achse die Polarisation und auf der horizontalen Achse das elektrische Feld aufgetragen.

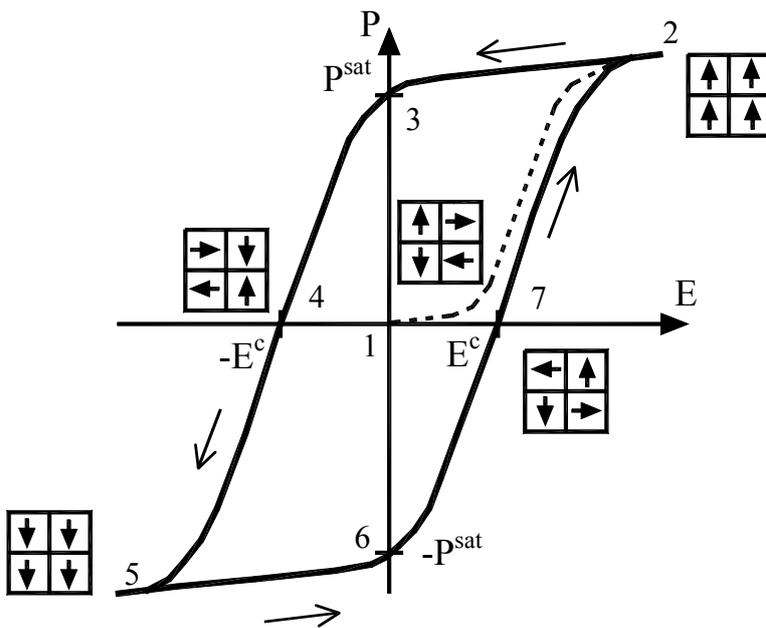


Abbildung 2.5: *Typische dielektrische Hysterese eines piezokeramischen Werkstoffes ausgehend vom ungepolten Zustand (gestrichelte Linie). Repräsentativ sind vier Domänen und deren Ausrichtung eingezeichnet, um das Umklappverhalten zu verdeutlichen*

Im Startpunkt 1, dem unbelasteten, thermisch depolarisierten Ausgangszustand, besitzen die Domänen, wie an den vier repräsentativen, in die Abbildung eingezeichneten Domänen gezeigt, keine Vorzugsrichtung und es ist makroskopisch keine Polarisation zu beobachten. Dieser Zustand hält mit steigendem elektrischen Feld bis zum Erreichen der Koerzitivfeldstärke E^c an und es sind lediglich lineare dielektrische Effekte zu beobachten, die mit einer leichten, aber reversiblen Steigerung der Polarisation einhergehen (Anmerkung: Die erste Belastung des thermisch depolarisierten Werkstoffes (hier mit einer gestrichelten Linie gekennzeichnet) wird als Neukurve bezeichnet). Das hier vorhandene elektrische Feld ist nicht in der Lage die Umklappvorgänge auszulösen. Mit dem Erreichen der Koerzitivfeldstärke beginnen die Domänen in Richtung des elektrischen Feldes umzuklappen, was eine drastische Steigerung der Polarisation des Polykristalls zur Folge hat. Diese Zunahme der Polarisation ist irreversibel und ausgeprägt nichtlinear. Mit weiterer Steigerung des elektrischen Feldes sind ab einem gewissen Zeitpunkt nahezu alle Domänen in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet (siehe repräsentatives Bild der Domänen im Diagramm) und die Sättigungspolarisation P^{sat} stellt sich ein. In diesem Zustand in Punkt 2 im Diagramm stellt sich dann ein lineares, rein piezoelektrisches Verhalten des Werkstoffes ein, das auch bei Entlastung wie die Domänenorientierung weitge-

hend erhalten bleibt. Dies ist auch der Bereich, in der die meisten piezokeramischen Bauteile ihren Einsatzzweck finden. Die geringfügigen Nichtlinearitäten, die im Verlauf zu beobachten sind, sind durch mikroskopische Veränderungen der Domänenstruktur bedingt und werden in der Praxis regelungstechnisch erfasst und eliminiert.

Bei vollständiger Entlastung verbleibt die remanente Polarisation oder auch Sättigungspolarisation in Punkt 3. Bei fortgesetzter Belastung in die entgegengesetzte Richtung setzen wiederum Domänenprozesse ein, die zu einer Verminderung der Polarisation führen und schließlich beim Erreichen der Koerzitivfeldstärke zu einer völligen Depolarisation des Polykristalls führen (Punkt 4). Wird die Belastung nun weiter fortgesetzt, beginnen die Domänen in die entgegengesetzte Richtung umzuklappen und der Polykristall geht beim Erreichen der Sättigungspolarisation in das zuvor beschriebene lineare piezoelektrische Verhalten in Punkt 5 über, das bis Punkt 6, dem vollständig entlasteten Zustand, anhält. Die Sättigungspolarisation mit umgekehrten Vorzeichen bleibt auch an diesem Punkt erhalten und mit einer erneuten Belastung in die anfängliche Richtung klappen die Domänen wieder in die Richtung des elektrischen Feldes um und man erhält eine geschlossene Hysterese.

Schmetterlingshysterese

Die Schmetterlingshysterese bezeichnet das Verhalten der Dehnung eines piezokeramischen Werkstoffes unter einem wechselseitigen elektrischen Feld. In Abbildung 2.6 ist eine derartige Hysterese dargestellt. Wie auch zuvor bei der dielektrischen Hysterese wird von einem ungepolten Ausgangszustand in Punkt 1 ausgegangen und das Domänenverhalten ist an vier repräsentativen Domänen skizziert.

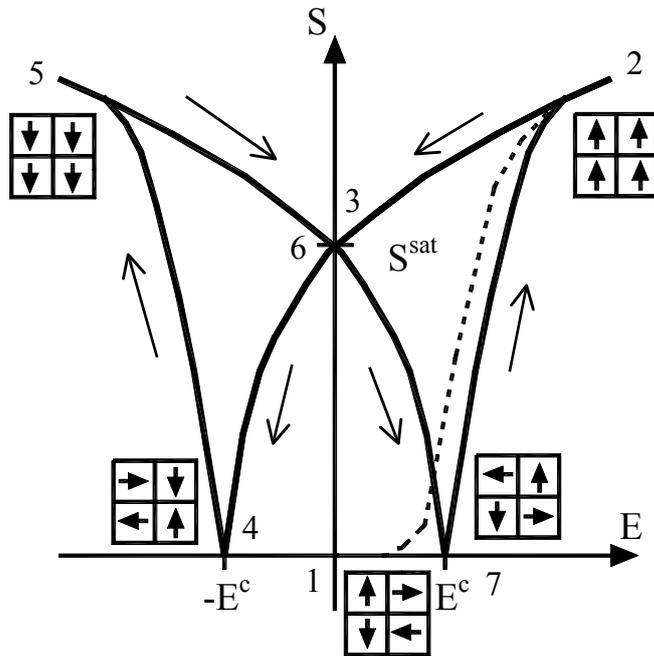


Abbildung 2.6: *Typische Schmetterlingshysterese eines piezokeramischen Werkstoffes ausgehend vom ungeladenen Zustand (gestrichelte Linie). Repräsentativ sind vier Domänen und deren Ausrichtung eingezeichnet, um das Umklappverhalten zu verdeutlichen*

Wie bei der dielektrischen Hysterese ist bei einer beginnenden Belastung durch ein elektrisches Feld dieses nicht in der Lage, bis zum Erreichen der Koerzitivfeldstärke E^c Umklappvorgänge in der Piezokeramik auszulösen. Aus diesem Grund und dem Fehlen der makroskopischen Piezoelektrizität (man befindet sich im linear dielektrischen Bereich) kann keine Dehnung im Polykristall induziert werden, was an der horizontalen, gestrichelten Neukurve zu erkennen ist. Mit weiterer Steigerung des elektrischen Feldes beginnen die Domänen ab Erreichen der Koerzitivfeldstärke in Richtung des Feldes umzuklappen und es kommt zu einer schlagartigen, ausgeprägt nichtlinearen Steigerung der Dehnung (Verlängerung) des Polykristalls, die in Punkt 2 in einen Sättigungsbereich hineinläuft. Hier sind alle Domänen in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet und linear piezoelektrisches Verhalten ist zu beobachten, welches wie bei der dielektrischen Hysterese bei der Entlastung bis Punkt 3 das Verhalten der Piezokeramik prägt. Den Wert der Dehnung, der in der Piezokeramik irreversibel oder remanent verbleibt, nennt man die Sättigungsdehnung S^{sat} . Die schwachen Nichtlinearitäten im Kurvenverlauf sind wiederum auf mikroskopische Ausrichtungsprozesse zurückzuführen und können in der praktischen Anwendung regelungstechnisch erfasst werden. Dieser lineare Bereich wird auch dem inversen piezoelektrischen Prozess zugeordnet. Wird nun ein elektrisches Feld in Gegen-

richtung aufgebracht, so ist eine elektrische Depolarisation beim Erreichen der Koerzitivfeldstärke in Punkt 4 zu beobachten, an dem die Dehnung wieder auf ihren ursprünglichen Wert im ungepolten Zustand zurückgegangen ist. Man beachte hierbei die Ausrichtung der repräsentativen Domänen im Diagramm.

Bei einer weiteren Steigerung des elektrischen Feldes über die Koerzitivfeldstärke hinaus, klappen die Domänen wiederum in Richtung des elektrischen Feldes um und es ist eine erneute Dehnungszunahme bis Punkt 5 analog zur vorhergehenden, entgegengesetzt gerichteten Belastung zu beobachten. Wiederum erfährt die Piezokeramik einen Sättigungszustand, da alle Domänen in Richtung des Feldes ausgerichtet sind und es sind die linear piezoelektrischen Effekte zu beobachten. Bei einer Entlastung bis Punkt 6 bleibt dieses lineare Verhalten erhalten und erst mit einer erneuten Belastung in die anfängliche Richtung kommt es zu einer elektrischen Depolarisation der Keramik, bis in Punkt 7 beim Erreichen der Koerzitivfeldstärke der Polykristall wieder völlig depolarisiert ist. Eine fortgesetzte Belastung oberhalb der Koerzitivfeldstärke verbunden mit erneuten Domänenumklappvorgängen schließt die Hysterese.

Rechtwinklig zur Belastungsrichtung kann man an der Piezokeramik negative Querdehnungen beobachten, die in ihren Verläufen ebenfalls einer Schmetterlingshysterese entsprechen.

Ferroelastische Hysterese

Nach dem in den beiden vorangegangenen Abschnitten das Verhalten von Ferroelektrika unter elektrischer Belastung beschrieben wurde, befassen sich die folgenden beiden Abschnitte mit dem Verhalten von Ferroelektrika unter mechanischer Belastung.

In Abbildung 2.7 ist das Spannungs-Dehnungs-Diagramm einer ungepolten Probe (isotroper Materialzustand) dargestellt. Wiederum zeigen vier repräsentative Domänen, die in das Diagramm eingezeichnet sind, den Ausrichtungszustand der Domänen im Polykristall.

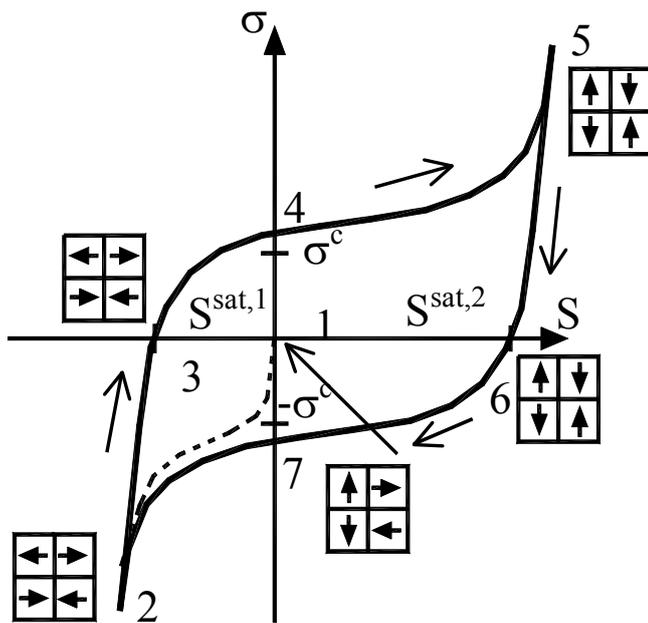


Abbildung 2.7: *Typische ferroelastische Hysterese eines piezokeramischen Werkstoffes ausgehend vom ungepolten Zustand (gestrichelte Linie). Repräsentativ sind vier Domänen und deren Ausrichtung eingezeichnet, um das Umklappverhalten zu verdeutlichen*

Zunächst wird ausgehend von Punkt 1 eine Druckbelastung auf die Piezokeramik aufgebracht. Anfänglich ist lediglich lineares, reversibles Materialverhalten zu beobachten, da die Spannungen zu klein sind, um Umklappvorgänge im Polykristall auszulösen. Erst beim Erreichen der Koerzitivspannung σ^c setzt ein 90° -Umklappen der Domänen rechtwinklig zur Belastungsrichtung ein. Es ist eine nichtlineare Abnahme der Dehnung, die in eine Sättigung in Punkt 2 hineinläuft, an dem alle Domänen in der Piezokeramik umgeklappt sind, zu beobachten. Bei weiterer Steigerung der Belastung über diesen Punkt hinaus stellt sich lineares Materialverhalten ein, welches auch bei Entlastung erhalten bleibt. Die Gesamtdéhnung setzt sich in diesem Bereich aus dem irreversiblen und dem linearen, reversiblen Anteil zusammen. Makroskopisch ist aufgrund der Gleichverteilung der Domänenausrichtung keine Polarisierung zu beobachten. Den Wert der irreversiblen Déhnung, der nach Entlastung im Polykristall in Punkt 3 verbleibt, ist wie bei der Schmetterlingshysterese die Sättigungsdéhnung oder die remanente Déhnung S^{sat} . Schwache Nichtlinearitäten im Kurvenverlauf sind wiederum auf mikroskopische Ausrichtungsprozesse der Domänen zurückzuführen, die in der Praxis regelungstechnisch eliminiert werden.

Wird nun im weiteren Verlauf eine Zugbelastung aufgebracht, so beginnen die Domänen ab Erreichen der Koerzitivspannung über Punkt 4 hinweg in deren Richtung umzuklap-

pen. Dabei handelt es sich wiederum um 90° -Umklappvorgänge. Der Verlauf ist stark nichtlinear und findet seine Sättigung in Punkt 5, in dem alle Domänen parallel zur Achse der Zugbelastung orientiert sind. Da die Umklapprichtungen gleichberechtigt sind, ist makroskopisch wieder keine Polarisation zu beobachten. Im Sättigungszustand bei weiterer Steigerung der Belastung und anschließender Entlastung folgt die Kurve einem nahezu linearen Verlauf bis in Punkt 6 die Sättigungsdehnung remanent in der Piezokeramik verbleibt. Deutlich ist im Diagramm abzulesen, dass sich die hier in vertikale Richtung gemessenen Sättigungsdehnungen im Druck- und Zugbereich stark voneinander unterscheiden. Kamlah [8] bot hierfür eine plausible Erklärung mittels einer einfachen Überlegung an: Betrachtet man drei repräsentativen Domänen, die in die jeweilige Raumrichtung orientiert sind, was dem ungepolten Ausgangszustand entspricht und werden diese durch eine Druckspannung belastet, so klappt eine dieser Domänen um 90° in die Ebene der anderen beiden um. Wird dagegen aus diesem ungepolten Ausgangszustand heraus eine Zugbelastung aufgebracht, klappen zwei Domänen um 90° in die Richtung derjenigen Domäne um, die bereits in Richtung der Belastung ausgerichtet ist. Aus diesem Vergleich wird deutlich, dass bei einer Zugbelastung das Reservoir an umklappbaren Domänen doppelt so groß ist wie bei einer Druckbelastung, was das Phänomen unterschiedlicher Sättigungsdehnungen für die beiden Belastungsrichtungen erklärt.

Vergleicht man nun die ferroelastische Hysterese mit der Schmetterlingshysterese, wird deutlich, dass die Sättigungsdehnung im Diagramm der ferroelastischen Hysterese in Punkt 5 der Sättigungsdehnung der Schmetterlingshysterese entspricht, da durch das aufgebrachte elektrische Feld ebenso zwei der drei Domänen sich in den zuvor erläuterten Überlegungen in Richtung des elektrischen Feldes ausrichten und so aus dem gleichen Reservoir für die Umklappvorgänge geschöpft wird wie bei der ferroelastischen Hysterese unter Zugbelastung.

Mechanisches Depolarisationsverhalten

Zum Abschluss der Diskussion des makroskopischen Materialverhaltens der Ferroelektrika wird das mechanische Depolarisationsverhalten betrachtet. Hierzu ist in Abbildung 2.8 das Verhalten einer anfänglich voll gepolten Piezokeramik unter einer mechanischen Druckbelastung skizziert. Wiederum repräsentieren vier eingezeichnete Domänen die Domänenstruktur des Polykristalls.

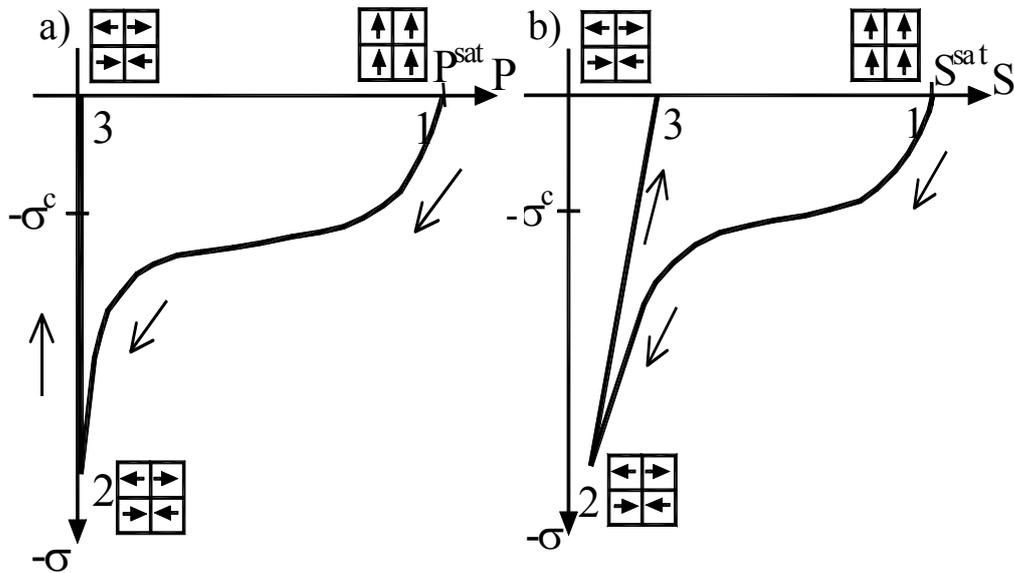


Abbildung 2.8: *Typisches mechanisches Depolarisationsverhalten eines piezokeramischen Werkstoffes ausgehend vom gepolten Zustand. Repräsentativ sind vier Domänen und deren Ausrichtung eingezeichnet, um das Umklappverhalten zu verdeutlichen*

In Abbildung 2.8 a) ist die Druckspannung über der Polarisation und in Abbildung 2.8 b) ist die Druckspannung über der Dehnung aufgetragen.

Ausgehend von Punkt 1 in Abbildung 2.8 a), in dem alle Domänen durch eine vorhergehende elektrische Vorbelastung ausgerichtet wurden und die Sättigungspolarisation P^{sat} erreicht wurde und was dem Betriebsfall eines piezokeramischen Bauteils entspricht, wird eine Druckbelastung entgegen der Polarisationsrichtung aufgebracht. Anfänglich kann diese bei kleinen Werten keine Umklappvorgänge der Domänen auslösen, womit ein beinahe linear piezoelektrisches Verhalten des isotropen Polykristalls zu beobachten ist. Der Ausrichtungszustand der Domänen bleibt zunächst erhalten. Erst mit Erreichen der Koerzitivspannung σ^c beginnen die Domänen rechtwinklig zur Belastung umzuklappen und ein ausgeprägtes, nichtlineares Verhalten der Piezokeramik setzt ein. Dieses 90° -Umklappen führt zu einer deutlich sichtbaren Reduktion der Polarisation wie auch der Dehnung. Ab einem gewissen Punkt, wenn alle Domänen rechtwinklig zur Belastungsrichtung umgeklappt sind, folgen die Kurven wieder nahezu linearem Verhalten. Da aber die Polarisation vollständig abgebaut wurde (vgl. Punkt 2, Abbildung 2.8 a)) ist die piezoelektrische Koppelung zwischen Polarisation und Spannung nicht mehr vorhanden, wes-

wegen die Steigung der Kurve eine andere ist wie zu Anfang der Belastung. Nach Entlastung bleibt der Polykristall mechanisch depolarisiert (man beachte die repräsentativen Domänen in Punkt 3) und erst eine erneute elektrische Belastung oberhalb der Koerzitivfeldstärke vermag eine remanente Polarisation hervorzurufen.

Die Kurve in Abbildung 2.8 b), in der die Druckspannung über der Dehnung aufgetragen ist, zeigt ein ähnliches Aussehen wie das Spannung-Polarisations-Diagramm. Mit der Belastungssteigerung vom Startpunkt 1 ausgehend, an dem durch eine vorangegangene elektrische Belastung die Domänen vollständig in Feldrichtung ausgerichtet wurden und die Sättigungsdehnung S^{sat} erreicht wurde, kommt es nach einem anfänglich nahezu linearen Verlauf ab Erreichen der Koerzitivspannung zu einer drastischen, ausgeprägt nichtlinearen Reduktion der Dehnung bis in Punkt 2 alle Domänen rechtwinklig zur Belastungsrichtung umgeklappt sind. Bei Entlastung folgt die Kurve einem linear elastischen von der Polarisation entkoppelten Verlauf bis zur vollständigen Entlastung in Punkt 3.

Nach diesem Überblick über das typische Verhalten piezokeramischer Werkstoffe, wird im folgenden Kapitel auf eigene Experimente und die anderer Autoren eingegangen, die letztendlich als Grundlage für die Verifizierung der in dieser Arbeit beschriebenen Stoffgesetze für piezokeramische Werkstoffe dienen. Dabei kommt den Untersuchungen des Verhaltens unter mehrachsiger, elektromechanischer Beanspruchung besondere Beachtung zu, da das Verständnis auf diesem Gebiet unabdingbar für die Postulierung der dreidimensionalen, konstitutiven Stoffgesetze in dieser Arbeit ist.

3 Experimentelle Untersuchungen an piezokeramischen Werkstoffen

Bisher sind die meisten verfügbaren experimentellen Untersuchungen beschränkt auf einachsige oder koaxiale Belastungen (vgl. hierzu [23 – 30]). Mit einachsiger Belastung ist eine elektrische *oder* mechanische Belastung in lediglich eine Richtung gemeint, wogegen bei einer koaxialer Belastung eine kombinierte, elektromechanische Belastung, d.h. eine elektrische *und* eine mechanische Belastung gleichzeitig oder zeitversetzt im gleichen Experiment auf den Versuchskörper aufgebracht wird. Eine eingehende Beschreibung dieser Arbeiten findet an dieser Stelle nicht statt, da im nächsten Unterkapitel eigene Untersuchungen hierzu auf der Grundlage von Zhou [23] vorgestellt werden.

Anzumerken ist an dieser Stelle, dass als Werkstoff für die meisten Untersuchungen der in der heutigen Zeit am häufigsten eingesetzte piezokeramische Werkstoff verwendet wurde. Dabei handelt es sich um die so genannte PZT-Keramik (Blei-Zirkonat-Titanat), deren chemische Formel $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$ lautet. Zum ersten Mal wurde PZT als ferroelektrisches Material im Jahr 1952 genannt. Shirane et al. [31] führten dessen Phasendiagramm im gleichen Jahr ein. In Abbildung 3.1 ist das Phasendiagramm von $PbTiO_3$, zu finden z.B. bei Reszat [32] nach Jaffe et al. [1] und Noheda et al. [33], dargestellt.

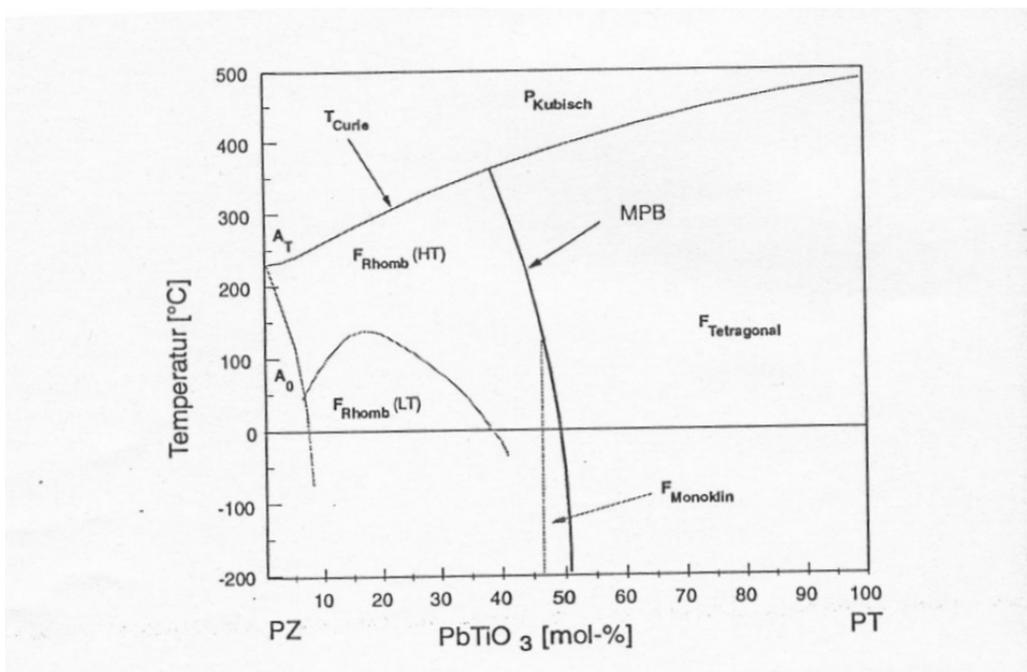


Abbildung 3.1: Phasendiagramm von $PbTiO_3$, zu finden z.B. bei Reszat [32] nach Jaffe et al. [1] und Noheda et al. [33]

Oberhalb der Curietemperatur, die im Diagramm mit T_{Curie} gekennzeichnet ist, besitzt das PZT die paraelektrische, kubische Kristallstruktur, die keine piezoelektrischen Eigenschaften aufweist. Unterhalb der Linie findet man die ferroelektrischen Phasen, die von der morphotropen Phasengrenze MPB (morphotropic phase boundary) in einen titanreichen, tetragonalen und einem zirkoniumreichen, rhomboedrischen Teil aufgetrennt werden. Bei Raumtemperatur findet dieser Phasenübergang etwa bei einem Zr/Ti-Verhältnis von 52/48 statt. Erst in neuerer Zeit konnte man an der morphotropen Phasengrenze eine weitere, die so genannte monokline Phase, nachweisen. Bei einem Zr/Ti-Verhältnis von 100/0 bis 94/6 findet man die antiferroelektrische, orthorhombische Kristallstruktur (Jaffe et al. [1]), die keinen piezoelektrischen Effekt besitzt, da durch parallel in die jeweils entgegen gesetzte Richtung angeordnete Domänen keine remanente Polarisation auftritt.

3.1 Wissensstand zum Verhalten unter mehrachsiger elektro-mechanischer Belastung

Im Folgenden werden exemplarisch bedeutsame Untersuchungen zum mehrachsigen Verhalten piezokeramischer Werkstoffe vorgestellt, da die in dieser Arbeit besprochenen konstitutiven Stoffgesetze und deren Finite-Elemente-Implementierungen mehrdimensionaler Natur sind, um zu verdeutlichen, welche Leistungsfähigkeit die Stoffgesetze erbringen müssen, um der Komplexität des Werkstoffverhaltens Rechnung zu tragen. Es soll hierbei lediglich ein Überblick gegeben werden, da in den folgenden Unterkapiteln näher auf die für diese Arbeit am relevantesten Untersuchungen von Zhou et al. [34, 35] eingegangen wird, die sich mit dem Verhalten piezokeramischer Werkstoffe unter einer koaxialen Belastung befassen und in denen das Umklappverhalten im Raum der zwei Belastungsgrößen anhand einer Domänenumklappfläche ähnlich einer Fließfläche in der Plastizität beschrieben wurde. Wie schon im letzten Kapitel erwähnt wurde, sind die mehrachsigen experimentellen Untersuchungen unter elektromechanischer Belastung essenziell für die Aufstellung der später in dieser Arbeit beschriebenen dreidimensionalen Stoffgesetze für piezokeramische Werkstoffe, da hierbei ein sehr gutes Verständnis des mehrdimensionalen Verhaltens vonnöten ist.

Fett et al. [36] haben bspw. das Spannungs- Dehnungs-Verhalten eines Weich-PZT unter Zug- und Druckbelastung und einem transversalen elektrischen Feldes untersucht. Hierzu

wurden ungepolte und gepolte Proben untersucht. Achutan und Sun [37] untersuchten das Verhalten von PZT unter einer mechanischen Spannung und einem elektrischen Feld. Die Versuchskörper wurden durch ein zyklisches elektrisches Feld und mechanischen Spannungen ausgehend von verschiedenen residualen Polungszuständen (parallel und transversal zu den aufgebrachten Lasten) belastet. Des Weiteren haben Achutan und Sun [38] verfügbare experimentelle Ergebnisse mit existierenden Domänenenumklappkriterien verglichen und herausgefunden, dass die Voraussagen nicht mit den experimentell ermittelten Daten vereinbar waren. Deswegen schlugen sie ein neues Domänenenumklappkriterium auf der Basis einer inneren Energiedichteverteilung für kombinierte mechanische und elektrische Belastungen vor.

Weitergehend untersuchten Fett et al. [39] die Schubverzerrung von PZT-Keramiken von dünnwandigen Zylindern bei proportionalen, biaxialen Torsionsexperimenten. Die Experimente waren rein mechanisch und das Drucker-Prager-Fließkriterium wurde für PZT unter mechanischer Belastung vorgeschlagen. Chen und Lynch [40] untersuchten die mechanische Antwort von röhrenförmigen Versuchskörpern aus PZT-Keramik unter axialer, mechanischer Belastung und innerer und äußerer Druckbelastung. Aus den Versuchen erhielten sie die mechanische Fließfläche ohne Berücksichtigung von elektrischen Belastungen.

Huber und Fleck [41] untersuchten die elektrische Umklappfläche (analog zur Fließfläche in der Plastizität) einer ferroelektrischen Keramik unter einer multiaxialen elektrischen Belastung, in dem sie ein elektrisches Feld unter verschiedenen Winkeln zur Polungsrichtung auf die vorgepolten und zurechtgeschnittenen Versuchskörper aufbrachten. In ihrer Studie berücksichtigten sie keine mechanische Belastung. Shieh et al. [42] führten Polarisations-Rotations- und koaxiale, proportionale, elektromechanische Experimente an Bariumtitanat, Weich- und Hart-PZT durch. Da in ihren Versuchen keine Dehnungen gemessen wurden, wurden die Umklappflächen im biaxialen elektrischen Feldraum (E_3, E_1) und im Raum des elektrischen Feldes und der mechanischen Spannung (σ_3, E_3) lediglich mittels der initialen Polarisationsänderung aufgestellt. Diese Vorgehensweise ist aber außerstande den gesamten Zustand und die Vorgänge im Polykristall exakt zu beschreiben. Zum Beispiel im Fall einer rein mechanischen Belastung ist es nicht möglich, einen numerischen Wert für die Domänenenumklappfläche aus solchen Daten zu erhalten, da die Koerzitivspannung scheinbar unendlich groß und damit die Fläche geöffnet ist.

Zhou et al. [34, 35] haben in ihren Experimente zusätzlich die Dehnung gemessen. Auf diese Weise war es ihnen möglich, die initialen Domänenumklappflächen im biaxialen Spannungs- und elektrischem Feldraum auf der Grundlage einer Versatzmethode zu bestimmen. Beim Vergleich der so gewonnenen, zwei verschiedenen Arten von Domänenumklappflächen (bestimmt aus Polarisations- oder Dehnungsänderungen), ist festzustellen, dass sich die verschiedenen Domänenumklappflächen gut ergänzen. In den folgenden Abschnitten wird noch näher auf diese Arbeiten von Zhou et al. [34, 35] eingegangen werden.

Aus dieser kurzen Zusammenfassung der bedeutsamsten Arbeiten zu experimentellen Untersuchungen kann schnell abgeleitet werden, dass heutzutage das mehrachsige Verhalten piezokeramischer Werkstoffe weiterer Untersuchungen bedarf. Die zuvor beschriebenen Arbeiten sind fundamentale Schritte zu einem besseren Verständnis des mehrachsigen Verhaltens unter elektromechanischer Beanspruchung, aber es existieren immer noch beträchtliche Wissenslücken insbesondere im dreidimensionalen Raum.

3.2 Koaxiale elektromechanische Beanspruchungen

Koaxiale elektromechanische Experimente sind mehrachsige Versuche im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes. Die nachfolgenden vorgestellten experimentellen Ergebnisse dienen zur Verifikation des phänomenologischen und mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes, welche später in dieser Arbeit vorgestellt werden. Des Weiteren werden sie herangezogen, um die Finite-Elemente-Implementierungen der zuvor genannten Stoffgesetze zu überprüfen.

3.2.1 Auslegung der Versuchskörpergeometrie

In den Experimenten wurde das Verhältnis der Höhe und Breite der Versuchskörper (der Schlankheitsgrad λ) zu 3:1 gewählt, um homogene Spannungsverteilungen innerhalb der Versuchskörper zu gewährleisten. Bedingt durch die behinderte Querdehnung im Bereich der Lasteinleitungen (Reibung an den Belastungsplatten) während des Aufbringens einer Druckspannung, kann kein gleichförmiger Spannungszustand in Versuchskörpern mit geringeren Schlankheitsgraden erzielt werden. Einfache dreidimensionale, lineare Finite-Elemente-Berechnungen mit verschiedenen Schlankheitsgraden zeigen einen signifikanten

Einfluss des Schlankheitsgrades auf die Gleichförmigkeit der Spannungsverteilung. In Abbildung 3.2 ist exemplarisch die Ansicht der dreidimensionalen Finite-Elemente-Modelle mit ihren Randbedingungen und der aufgetragenen Belastung skizziert. Die Materialeigenschaften der Modelle entsprachen einer im Handel üblichen gepolten Weich-PZT-Keramik, die auch für die in dieser Arbeit diskutierten Versuche verwendet wurde (Näheres dazu weiter unten in diesem Kapitel).

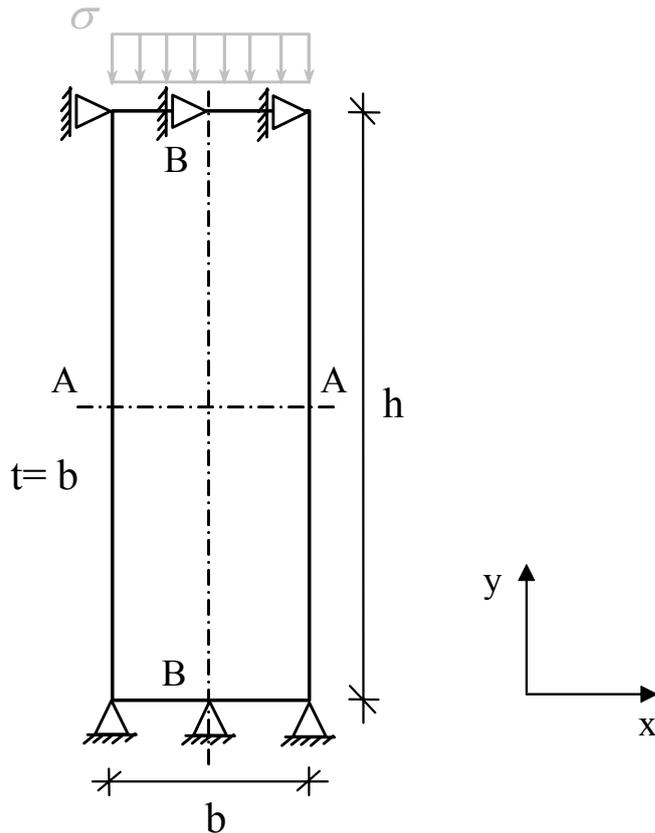


Abbildung 3.2: Modell für die Finite-Elemente-Berechnungen, um den Einfluss verschiedener Schlankheitsgrade auf die Spannungsverteilungen zu untersuchen

Das aufgetragene elektrische Potenzial φ an der Ober- und Unterseite betrug 0 V, was einem Kurzschluss des Versuchskörpers entspricht, um elektrische Einflüsse auf die rein mechanischen Belastungen auszuschließen (vgl. direkten piezoelektrischen Effekt). Die Anzahl der Elemente der Modelle variierte je nach Schlankheitsgrad. Die Kantenlänge der kubischen Elemente betrug 2,5 mm. Dadurch waren 20 Elemente über die Breite des Modells vorhanden, um eine hinreichende Genauigkeit der Rechnungen zu erzielen. Die un-

tersuchten Schlankheitsgrade λ waren 1:2, 1:1, 2:1 und 3:1. Die aufgebrachte Druckspannung betrug 100 MPa.

Die Ergebnisse in Schnitt A – A (vgl. Abbildung 3.2) sind in Abbildung 3.3 dargestellt. Im abgebildeten Diagramm ist die mechanische Spannung in vertikaler Richtung entlang einer horizontalen Linie durch die Mitte des Modells über deren Breite aufgetragen.

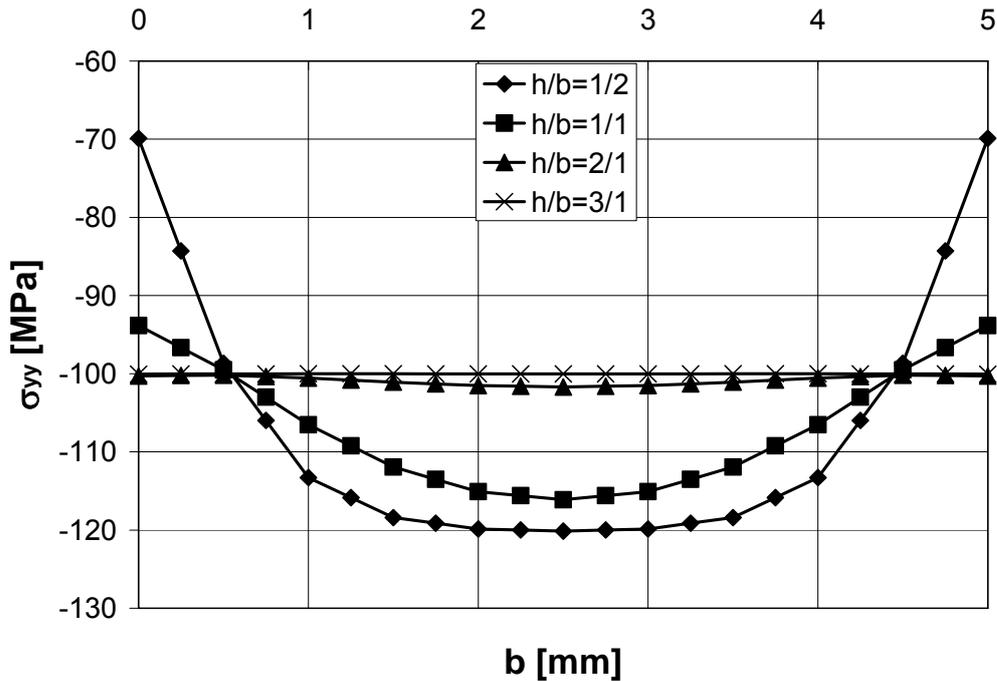


Abbildung 3.3: Ergebnisse der Finite-Elemente-Berechnungen zur Ermittlung der Verteilung der mechanischen Spannungen in vertikaler Richtung für verschiedene Schlankheitsgrade in der Mitte des Modells (Schnitt A – A)

Die Ergebnisse zeigen, dass mit steigendem Schlankheitsgrad die Spannungsverteilungen homogener werden. Im Fall eines Schlankheitsgrades von 1:1 (Würfel) beträgt der maximale Unterschied der berechneten Spannungen im Vergleich zur mittleren Druckspannung von -100 MPa mehr als 20 MPa. Das ist ungefähr 20 % der mittleren Druckspannung. Der berechnete Unterschied ist im Fall eines Schlankheitsgrades von 3:1 vernachlässigbar und die Spannung ist dort homogen.

Abbildung 3.4 zeigt die Spannungsverteilung in die Koordinatenrichtungen entlang der Längsachse des Modells (Schnitt B - B) für einen Schlankheitsgrad $h/b = 3/1$. Wie erwartet liegt in der Nähe der Lasteinleitung bzw. Auflagerungen ein mehrachsiger Spannungszustand vor, der zur Mitte des Modells hin abklingt.

In der Mitte des Modells liegt dann über einen hinreichend großen Bereich hinweg der für die Experimente gewünschte einachsige Spannungszustand vor.

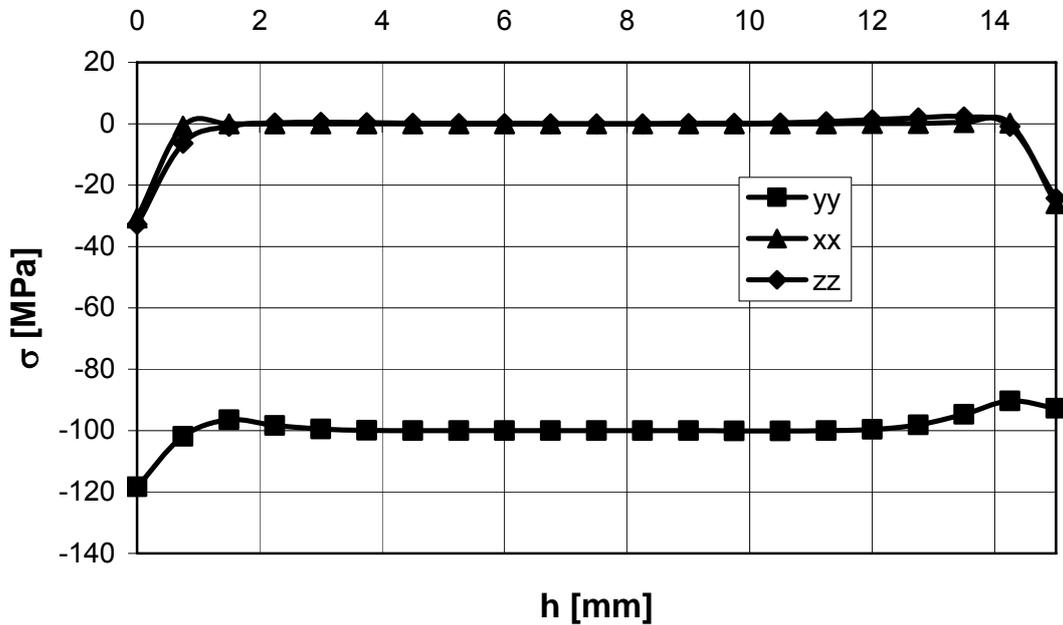


Abbildung 3.4: Ergebnisse der Finite-Elemente-Berechnungen zur Ermittlung der Verteilung der mechanischen Spannungen für einen Schlankheitsgrad $h/b = 3/1$ entlang der Längsachse des Modells (Schnitt B – B)

Aufgrund dieser Erkenntnisse wurde für die Versuchskörper in den Experimenten ein Schlankheitsgrad von 3:1 gewählt. Betrachtet man die maximalen Abmessungen der zur Dehnungsmessung verwendeten Dehnungsmessstreifen von ungefähr 3,2 mm in der Höhe auf 2,5 mm in der Breite und die verwendete Versuchskörpergeometrie von $5 \times 5 \times 15 \text{ mm}^3$, kann davon ausgegangen werden, dass die Dehnungsmessstreifen auf ein Gebiet des Versuchskörpers geklebt werden, wo die Verteilung der Spannungen und Dehnungen homogen ist.

3.2.2 Versuchsaufbau für die elektromechanischen Experimente

Die Einrichtungen, die für die Großsignalexperimente verwendet wurden, wurden von der piezokeramischen Forschungsgruppe am Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Institut für Materialforschung II, entwickelt. Eine Beschreibung des Versuchsstandes und der Vorgehensweise bei Experimenten kann der Arbeit von Zhou [23] entnommen werden. Im Folgenden werden die für diese Arbeit wichtigen Punkte beschrieben.

Abbildung 3.5 a) zeigt den Aufbau für einachsige, rein elektrische und Abbildung 3.5 b) für koaxiale, elektromechanische Experimente. Im letztgenannten Versuchsstand können ebenso rein mechanische Experimente durchgeführt werden.

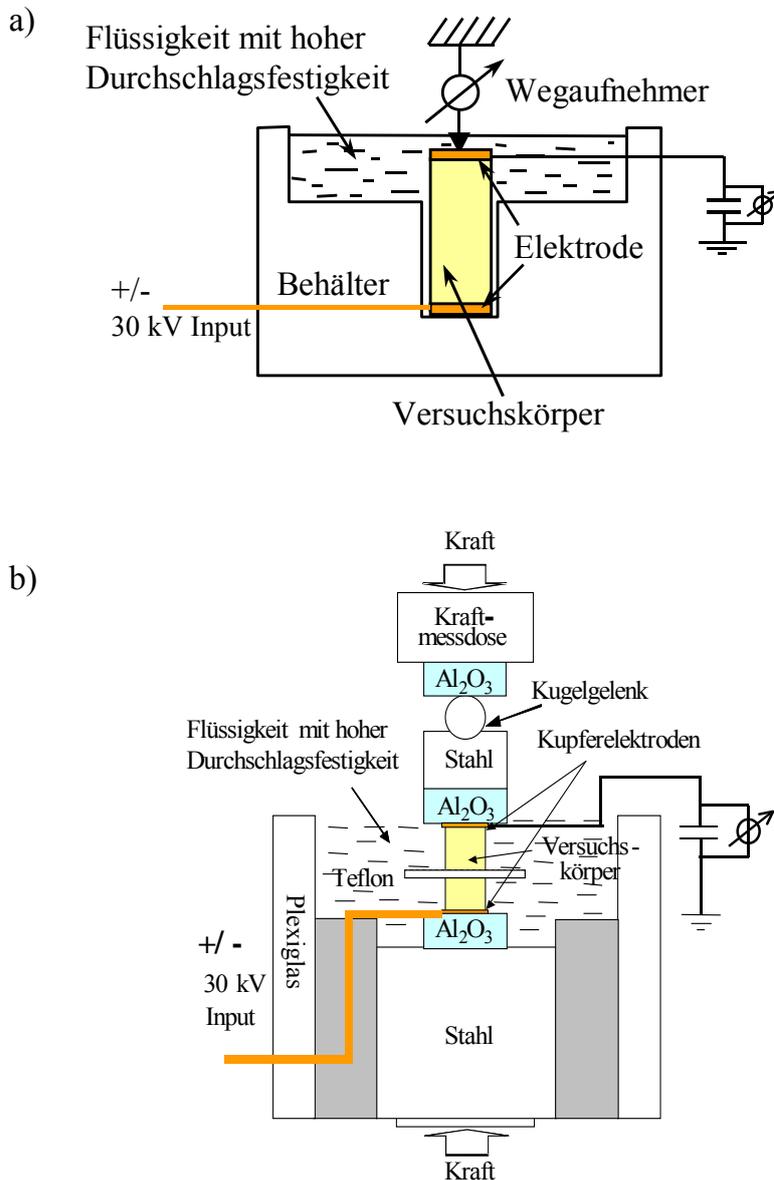


Abbildung 3.5: Versuchsaufbau zur Untersuchung des Materialverhaltens piezokeramischer Werkstoffe für
 a) Einachsige, rein elektrische Experimente
 b) koaxiale elektromechanische oder einachsige, rein mechanische Experimente

Die Länge der Versuchskörper von 15 mm, die sich bei den verwendeten Versuchskörpergeometrien aus den Finite-Elemente-Berechnungen aus Abschnitt 3.2.1 ergibt, ist auch

die in der Praxis der Versuchsdurchführung maximale Länge, weil die aufzubringenden elektrischen Spannungen umso höher sein müssen, je länger der Versuchskörper ist, um vollständiges Polen im Experiment zu gewährleisten. Höhere elektrische Spannungen erhöhen die Gefahr eines elektrischen Durchschlags. Mit einem elektrischen Durchschlag ist gemeint, dass aufgrund unterschiedlicher Kapazitäten der Dehnungsmessstreifen und des piezokeramischen Versuchskörpers ein Lichtbogen entlang und innerhalb des Versuchskörpers über die Dehnungsmessstreifen entstehen kann, der zu einer Zerstörung des Versuchskörpers oder einer misslungenen Messung führen kann. Im beschriebenen Versuchsaufbau beträgt die aufgebrachte elektrische Spannung 30 kV, mit der ein durchschnittliches elektrisches Feld von 2 kV/mm im Versuchskörper erreicht werden kann, was beim verwendeten Werkstoff ungefähr der zweifachen Koerzitivfeldstärke entspricht. Die Größe des Feldes reicht aus, um das Hystereseverhalten von Piezokeramiken zu untersuchen. Diese Lösung ist ein Kompromiss zwischen der Gefahr des Durchschlags, der Notwendigkeit vollständiger Polarisation, homogener Verteilungen der mechanischen Spannungen und der Größe der verwendeten Dehnungsmessstreifen.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die sorgfältige Präparation der Versuchskörper, um den elektrischen Durchschlag zu verhindern. Die Versuchskörper sind an ihren Oberflächen durch eine durch Klebung aufgebrachten KAPTON[®]-Folie geschützt. Zusätzlich agiert ein Teflon-Streifen als Schild zwischen den beiden Elektroden (vgl. Abbildung 3.5). Als weiterer Schutz gegen Durchschlagen sind die Versuchskörper in einem Bad einer dielektrischen Flüssigkeit eingetaucht.

Zur Versuchsdurchführung wird die Hochspannung mittels jeweils einer Elektrode an den Enden des Versuchskörpers aufgebracht. Mit der Hilfe eines Kondensators im Stromkreis wird die Polarisation mit der Sawyer-Tower-Methode gemessen. In den rein elektrischen Experimenten wird die Dehnung des Versuchskörpers mittels eines induktiven Wegnehmers bestimmt. Im Fall der elektromechanischen Belastungen kommen stattdessen Dehnungsmessstreifen, die auf den vier Seiten der Versuchskörper aufgeklebt werden, zum Einsatz. Jeweils zwei gegenüberliegende Dehnungsmessstreifen messen die Längs- bzw. die Querdehnung. Zur Verdeutlichung der soeben beschriebenen Sachverhalte sei auf Abbildung 3.5 und das Foto des Versuchsaufbaus in Abbildung 3.6 verwiesen. In der Fotografie kennzeichnet der Pfeil den Versuchskörper.

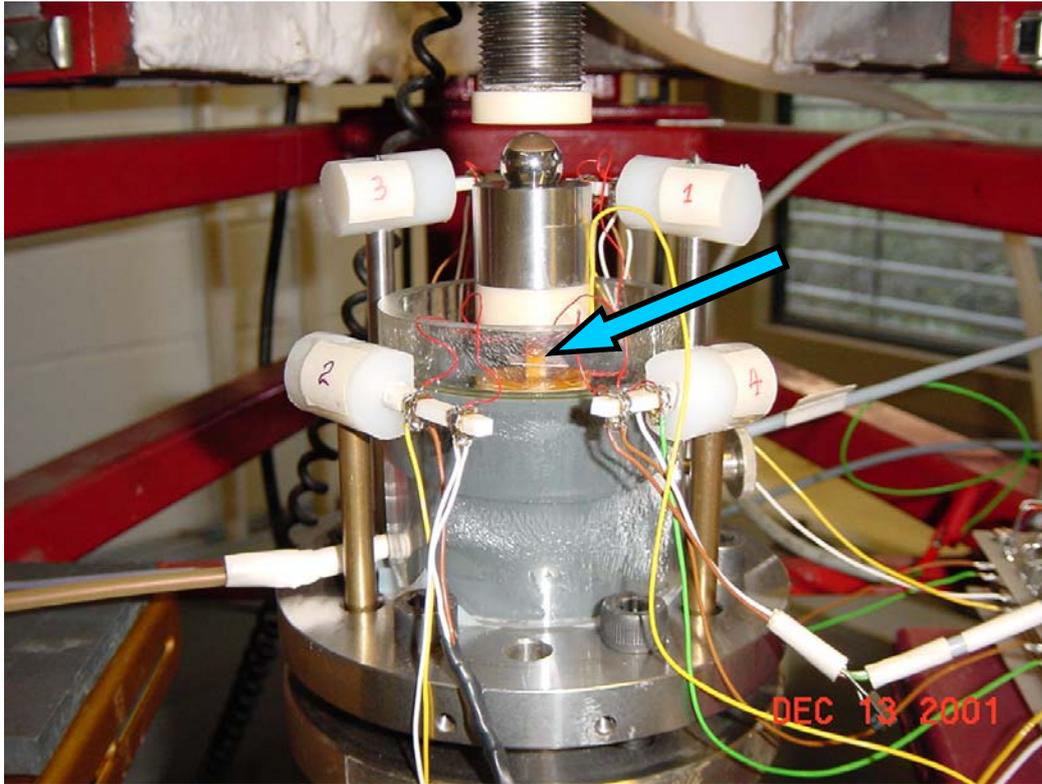


Abbildung 3.6: *Aufbau der Versuche für koaxiale elektromechanische Belastungen (der Pfeil kennzeichnet den Versuchskörper, vgl. auch Abbildung 3.5)*

An dieser Stelle sei die Komplexität der Versuchsdurchführung betont. Im Speziellen ist es schwierig, Biegeeffekte während einer Druckbelastung zu vermeiden. Dabei kommt besonders zum Tragen, dass kleinste Abweichungen der Geometrien im Herstellungsprozess der piezokeramischen Versuchskörper beträchtliche Auswirkungen auf die Spannungsverteilung innerhalb der Versuchskörper haben. Der Grund hierfür sind Imperfektionen in der vertikalen Ausrichtung der Versuchskörper bei Versuchsdurchführung. Die Arbeiten von Zhou [23] seien an dieser Stelle besonders hervorgehoben, da er maßgeblich dafür verantwortlich zeichnet, eine geeignete Prozedur zur zuverlässigen, wiederholbaren Versuchsdurchführung entwickelt zu haben. Bei dieser Methode wird der Versuchskörper augenscheinlich in vertikale Ausrichtung im Versuchsstand gebracht. Während sehr kleine Drucklasten auf den Versuchskörper aufgebracht werden, werden die Messwerte der vier aufgeklebten Dehnungsmessstreifen beobachtet. Sind diese unterschiedlich, so wird der Versuchskörper entlastet und seine Position angepasst. Diese Prozedur wird dann so lange wiederholt, bis die je zwei gegenüberliegenden Dehnungsmessstreifen gleiche Ableisungen aufweisen. Danach kann das Experiment durchgeführt werden. Mit Hilfe dieser

Prozedur kann gewährleistet werden, dass der Einfluss von Imperfektionen auf die Spannungsverteilung im Versuchskörper minimiert wird.

3.2.3 Versuchsergebnisse für einachsige, rein elektrische Belastungen

Während der einachsigen, rein elektrischen Experimente wurden die Versuchskörper durch ein zyklisches elektrisches Feld vollständig gepolt. Die Art der Versuchsdurchführung ist eine Standardmethode zur Ermittlung von Materialeigenschaften piezokeramischer Werkstoffe unter Großsignalbeanspruchungen. Die Versuchskörper bestanden aus PIC 151, einem Weich-PZT, des Herstellers PI Ceramic aus Lederhose, Thüringen. Die Versuchsergebnisse sind in Abbildung 3.7 dargestellt. Die dielektrische Hysterese, bei der die dielektrische Verschiebung D über dem elektrischen Feld E aufgetragen ist, ist in Abbildung 3.7 a) dargestellt. Abbildung 3.7 b) zeigt die Schmetterlingshysterese, bei der die Dehnung S über dem elektrischen Feld E aufgetragen ist.

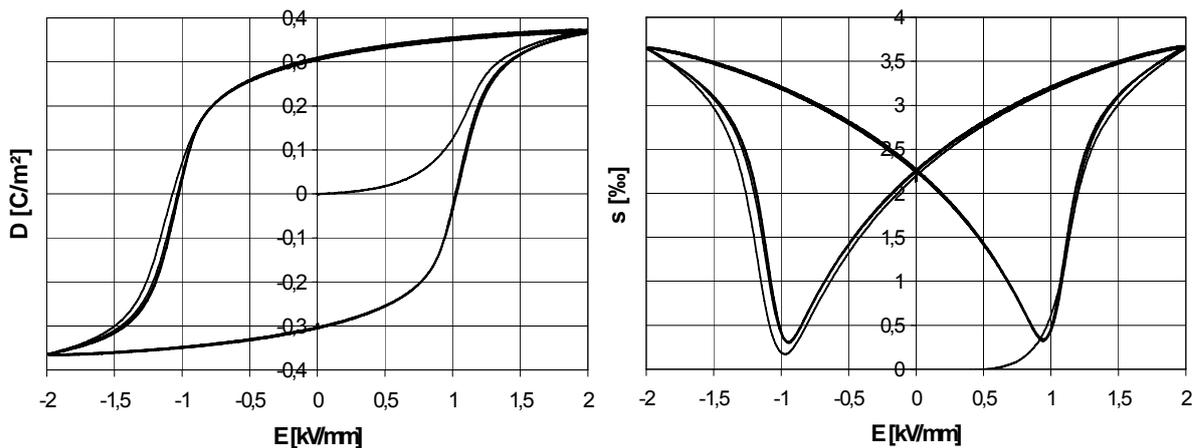


Abbildung 3.7: Experimentelle Ergebnisse der einachsigen, rein elektrischen Versuche:
a) Dielektrische Hysterese
b) Schmetterlingshysterese

Einige der experimentellen Ergebnisse sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt. Werte, die aus diesen Experimenten nicht abgeleitet werden konnten, sind aus Zhou et al. [35] entnommen worden. Im Einzelnen handelt es sich dabei um die Koerzitivspannung σ^c und die maximale Spannung σ^{sat} .

Tabelle 3.1: Experimentelle Ergebnisse für PIC 151, einem Weich-PZT; die in der vorliegenden Untersuchung nicht ableitbaren Werte (Koerzitivspannung und maximale Spannung) wurden Zhou et al. [35] entnommen

Material	Koerzitivfeldstärke E^c (kV/mm)	Remanente Polarisation P^{sat} (C/m ²)	Sättigungsfeldstärke E^{sat} (kV/mm)	Koerzitivspannung σ^c (MPa)	Remanente Dehnung S^{sat} (‰)	Maximale Spannung σ^{sat} (MPa)
PIC151 Weich-PZT	1,0	0,32	2,0	-43,5	-2,25	-300

3.2.4 Versuchsergebnisse für koaxiale, nichtproportionale elektromechanische Belastungen

Um das Verhalten piezokeramischer Werkstoffe im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes zu untersuchen, wurden koaxiale, nichtproportionale elektromechanische Experimente an der selben Piezokeramik, dem PIC 151, einem Weich-PZT der Firma PI Ceramic (Materialeigenschaften, siehe Tabelle 3.1), durchgeführt. Dabei wurde der Versuchsaufbau für koaxiale Belastungen aus Kapitel 3.2.1 und die Probengeometrien wie bei den rein elektrischen Versuchen verwendet.

Abbildung 3.8 zeigt die komplexe Belastungsgeschichte der koaxialen, elektromechanischen Versuche. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen dienen zur Verifizierung der elektromechanischen Kopplung der konstitutiven Stoffgesetze, die später in dieser Arbeit beschrieben werden.

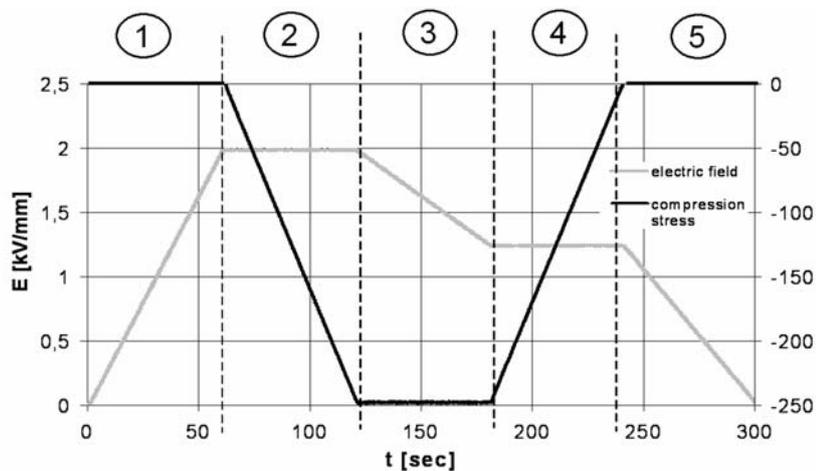


Abbildung 3.8: Belastungsgeschichte der koaxialen, nichtproportionalen elektromechanischen Experimente

In der ersten Phase des Experiments wurde der Versuchskörper unter einem elektrischen Feld von 2 kV/mm vollständig gepolt. In der zweiten Phase wurde das elektrische Feld auf diesen Wert gehalten und zusätzlich eine Druckspannung von bis zu -250 MPa aufgebracht. In der dritten Phase wurde die mechanische Spannung konstant gehalten und das elektrische Feld heruntergefahren, aber nicht vollständig entlastet. In der vierten Phase wird der Versuchskörper von der Druckspannung vollständig entlastet und das elektrische Feld auf der vorhergehenden Stufe konstant gehalten. In der fünften Phase des Experiments wird das elektrische Feld ebenfalls entlastet. Um die nichtproportionale Natur des Experiments zu verdeutlichen, sind die Belastungen in Abbildung 3.9 im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes dargestellt.

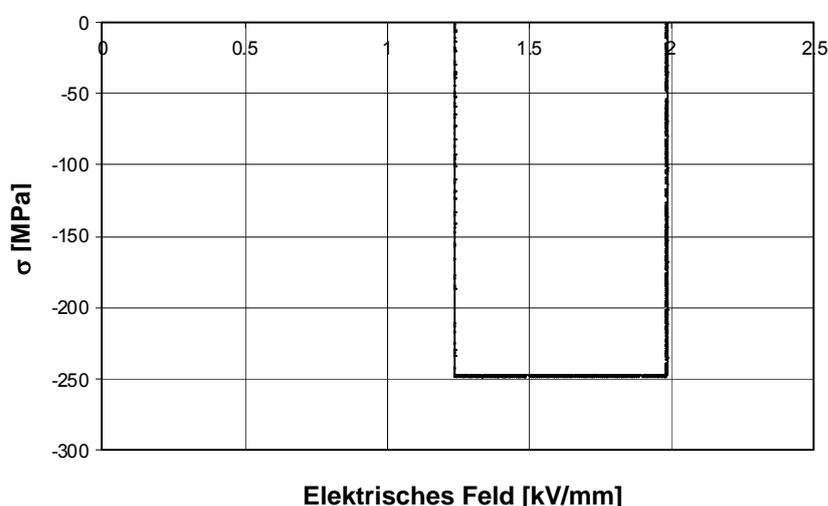


Abbildung 3.9: *Belastungen der coaxialen, nichtproportionalen elektromechanischen Experimente im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes*

Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen sind in Abbildung 3.10 dargestellt, wobei in Abbildung 3.10 a) die dielektrische Verschiebung über dem elektrischen Feld und in Abbildung 3.10 b) die Dehnung über dem elektrischen Feld dargestellt ist.

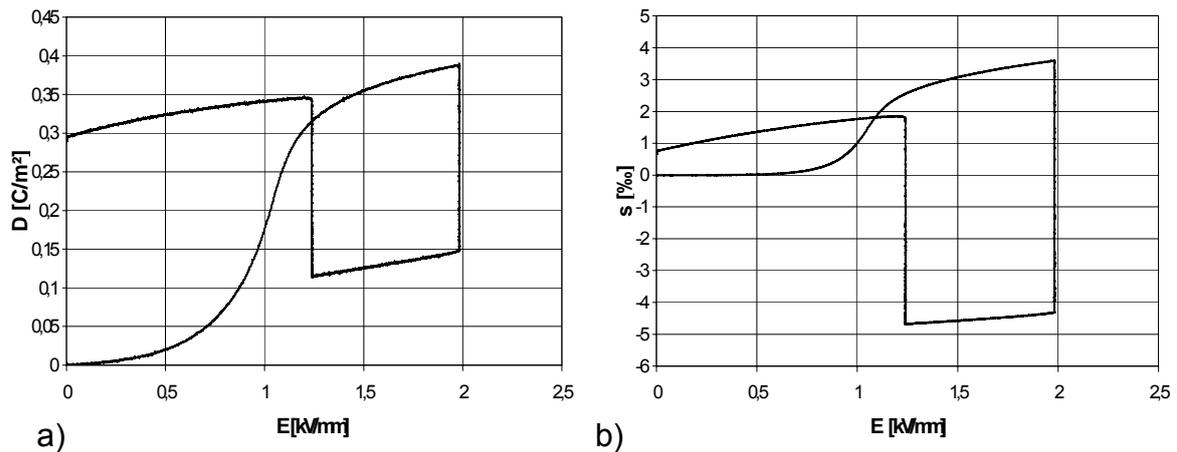


Abbildung 3.10: Ergebnisse der koaxialen, nichtproportionalen elektromechanischen Experimente

Vergleicht man die vorliegenden Ergebnisse mit denen der einachsigen, rein elektrischen Belastung, so stimmen die Kurvenverläufe soweit überein, bis zum ersten Mal das maximale elektrische Feld erreicht wird. Ab diesem Zeitpunkt sind beinahe alle Domänen in der Piezokeramik in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet und das Materialverhalten ist nahezu linear piezoelektrisch. Danach bewirkt die aufgebrachte Druckspannung eine mechanische Depolarisation und eine Reduzierung der Dehnung, die auf 90° -Domänenumklappvorgänge zurückzuführen sind. Die nachfolgende Verminderung des elektrischen Feldes führt zu einer weiteren Reduzierung der Polarisierung und Dehnung. Die Ursachen hierfür sind Domänenumklappvorgänge und der inverse piezoelektrische Effekt. Die Entlastung der mechanischen Spannung bewirkt eine Zunahme der Polarisierung und Dehnung, da die Domänen durch das vorhandene elektrische Feld wiederum in dessen Richtung umklappen. Während zum Schluss des Experiments auch das elektrische Feld zurückgefahren wird, ist eine Ähnlichkeit des Entlastungspfades im Vergleich zu Abbildung 3.7 zu erkennen.

3.2.5 Versuchsergebnisse für koaxiale, proportionale elektromechanische Belastungen

Der in Kapitel 3.2.1 beschriebene Versuchsaufbau für koaxiale Belastungen wurde auch von Zhou et al. [34, 35] verwendet, um das Domänenumklappkriterium für PZT-Keramiken unter koaxialen, proportionalen elektromechanischen Belastungen zu untersuchen. Die verwendete PZT-Keramik war wieder das PIC 151, der Weich-PZT der Firma PI Ceramic. Die Materialeigenschaften können der Tabelle 3.1 entnommen werden.

In den Experimenten wurde das Verhältnis von mechanischer Spannung zum elektrischen Feld variiert. Das Ziel dieser Untersuchungen war, eine elektromechanische Fließfläche zu etablieren. Die experimentellen Ergebnisse sind zudem gut geeignet zur Kalibrierung der später in dieser Arbeit beschriebenen konstitutiven Stoffgesetze und deren Finite-Elemente-Implementierungen, die das Großsignalverhalten piezokeramischer Werkstoffe erfassen sollen.

Abbildung 3.11 zeigt die Belastungspfade, wobei das elektrische Feld und die koaxiale Druckspannung in Richtung von radialen, geraden Linien aufgebracht wurden. Der Winkel θ beschreibt das Verhältnis der mechanischen Spannung zum elektrischen Feld.

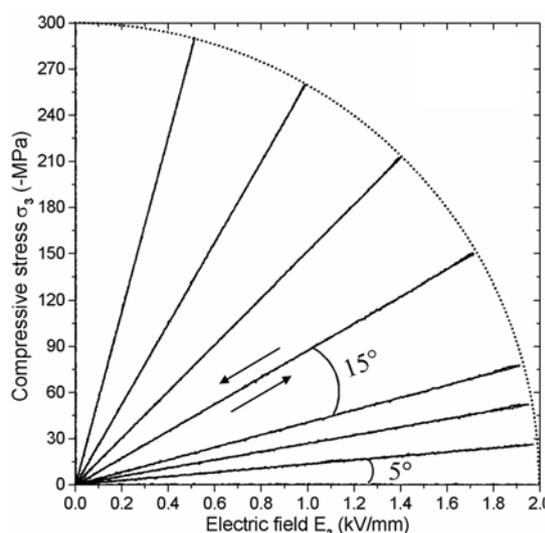


Abbildung 3.11: *Belastungspfade der koaxialen, proportionalen elektromechanischen Experimente nach Zhou et al. [34, 35]*

Während der Experimente wurden die Polarisierungen und Dehnungen gemessen. Auf der Grundlage einer Versatzmethode wurde die Initiierung des Domänenumklappens im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes bestimmt. Diese Art der Auswertung führt zu einer Domänenumklappfläche.

Das Schema der verwendeten Versatzmethode ist in Abbildung 3.12 erläutert, wo eine Spannungs-Dehnungs-Kurve eines koaxialen Experiments dargestellt ist.

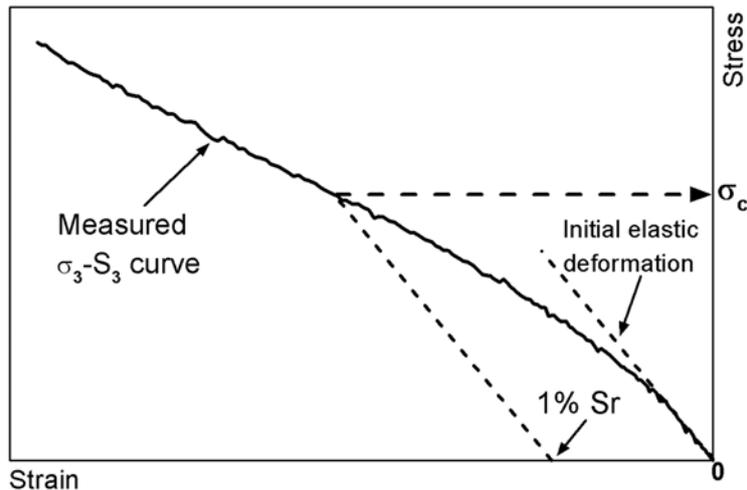


Abbildung 3.12: Schema der konventionellen Versatzmethode, um das Einsetzen des Domänenenumklappens zu ermitteln, nach Zhou et al. [34, 35] (S^r bezeichnet hier S^{sat})

Mit der Hilfe einer Geraden parallel zur initialen elastischen Deformation des Versuchskörpers ausgehend vom gewählten Punkt des Versatzes (hier 1% von S^{sat}) findet man die Koerzitivspannung σ^c .

Diese Methode wurde auf verschiedene Werte der Polarisation und Dehnung angewandt. Die daraus resultierenden Domänenenumklappflächen sind in Abbildung 3.13 dargestellt. In Abbildung 3.13 a) ist die Domänenenumklappfläche aus dielektrischen Verschiebungsmessungen gezeigt. Das Diagramm in Abbildung 3.13 b) beinhaltet die Umklappfläche auf der Basis eines Versatzes der Längsdehnung.

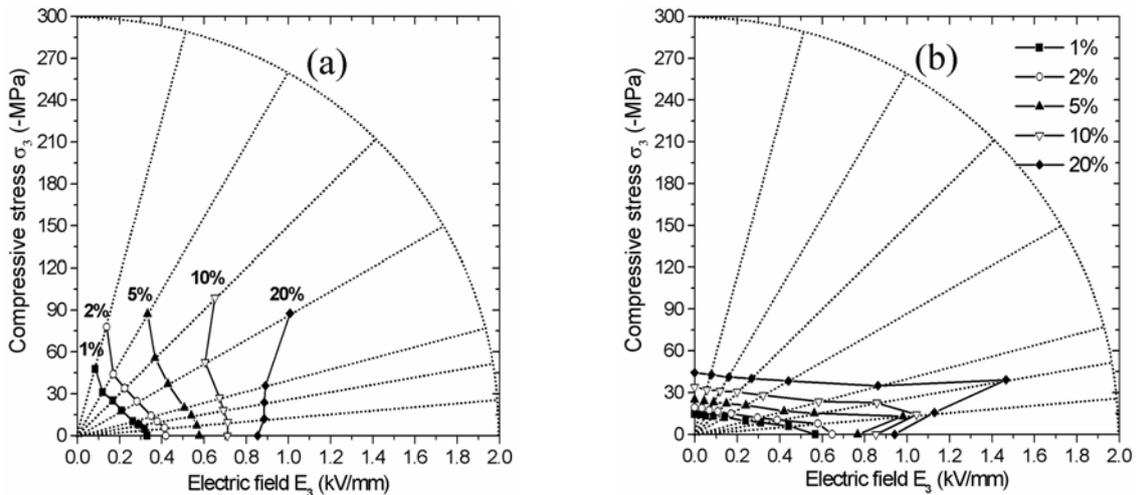


Abbildung 3.13: Domänenumklappflächen aus
 a) dielektrischen Verschiebungsmessungen
 b) Längsdehnungsmessungen
 für verschiedene Versätze der Polarisation und Dehnung nach
 Zhou et al. [34, 35]

Um den Punkt der Initiierung des Domänenumklappens festzustellen, werden in Zhou et al. [34, 35] relativ kleine Werte von 1% bis 2% von P^{sat} oder S^{sat} vorgeschlagen. Im Falle größerer Versatzwerte wird das Einsetzen des Domänenumklappens zu spät bemerkt. Lange Zeitperioden des Domänenumklappens würden nicht erfasst und als frei von Umklappvorgängen missinterpretiert werden. Das heißt, dass (vgl. Abbildung 3.13) bei Verwendung größerer Versatzwerte die aus der Methode erhaltenen Werte für die Koerzitivspannung und die Koerzitivfeldstärke ebenfalls zu groß sind und damit nicht den Punkt des Einsetzens von Domänenumklappvorgängen kennzeichnen.

Im Fall einer rein mechanischen Belastung ist es nicht möglich, einen Wert für das Einsetzen des Domänenumklappens aus den Messungen der Polarisationsänderung zu finden, da die Koerzitivspannung im Unendlichen erscheint (vgl. Abbildung 3.13 a)). Deswegen kann an dieser Stelle die Umklappfläche nicht geschlossen werden. Aus den Dehnungsmessungen dagegen kann in diesem Fall ein Wert für die Koerzitivspannung ermittelt werden und die Fläche ist geschlossen (vgl. Abbildung 3.13 b)). Wenn man die beiden gewonnenen Domänenumklappflächen (aus Polarisation bzw. Dehnung) miteinander vergleicht, so erscheint diejenige aus den Dehnungsänderungsmessungen realistischer zu sein.

Ein Vergleich der gemessenen Werte mit vorgeschlagenen Kriterien für das Domänenumklappen anderer Forscher [39-41] ist in Abbildung 3.14 dargestellt. Die Achsen der mechanischen Spannung und des elektrischen Feldes wurden normalisiert mit σ^c ($\theta = 90^\circ$) und E^c ($\theta = 0^\circ$).

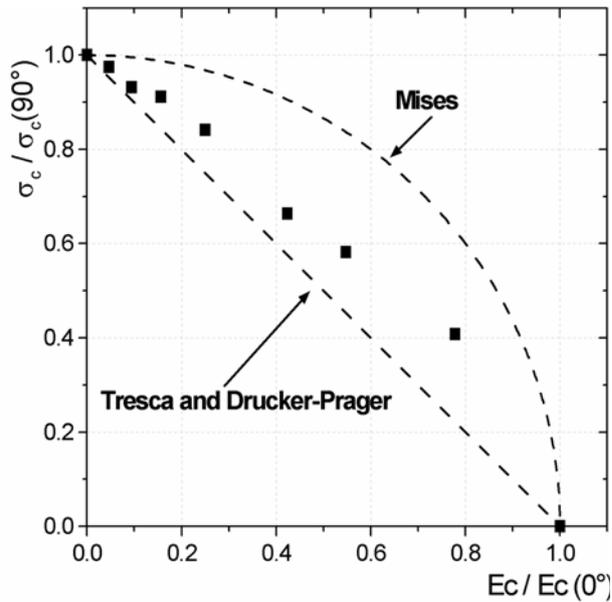


Abbildung 3.14: Vergleich von Domänenumklappflächen bei einem Dehnungsversatz von 1% der remanenten Dehnung mit Tresca-, Drucker-Prager- und von Mises-Kriterien nach Zhou et al. [34, 35]

In der einachsigen elektromechanischen Formulierung (nach [39-41]) lautet das von Mises-Kriterium

$$\left(\frac{T_{33}}{\sigma^c}\right)^2 + \left(\frac{E_3}{E^c}\right)^2 = 1 \quad (3.1)$$

und das Tresca-/Drucker-Prager-Kriterium

$$\left|\frac{T_{33}}{\sigma^c} + \frac{E_3}{E^c}\right| = 1. \quad (3.2)$$

Dabei ist T_{33} die mechanische Spannung und E_3 das elektrische Feld jeweils in 3-Richtung.

3.2.6 Versuchsergebnisse für mehrachsige, nichtproportionale elektrische Belastungen

Neben den zuvor beschriebenen koaxialen, proportionalen elektromechanischen Experimenten, aus denen man die Domänenumklappfläche im Raum des elektrischen Feldes und der mechanischen Spannung erhält, wurden von Zhou et al. [43] Experimente an vorgepolten Proben ähnlich zu den Untersuchungen von Huber und Fleck [41] durchgeführt, um zusätzlich die Domänenumklappfläche unter einer zweiachsigen elektrischen Belastung zu bestimmen. Dazu wurden aus einer vorgepolten piezokeramischen Platte aus PIC 151 (Materialeigenschaften vgl. vorangegangene Abschnitte) Versuchskörper mit unterschiedlicher Ausrichtung der Polarisation zur deren Längsseite herausgeschnitten und mit einem elektrischen Feld parallel zur Längsseite belastet (vgl. Abbildung 3.15).

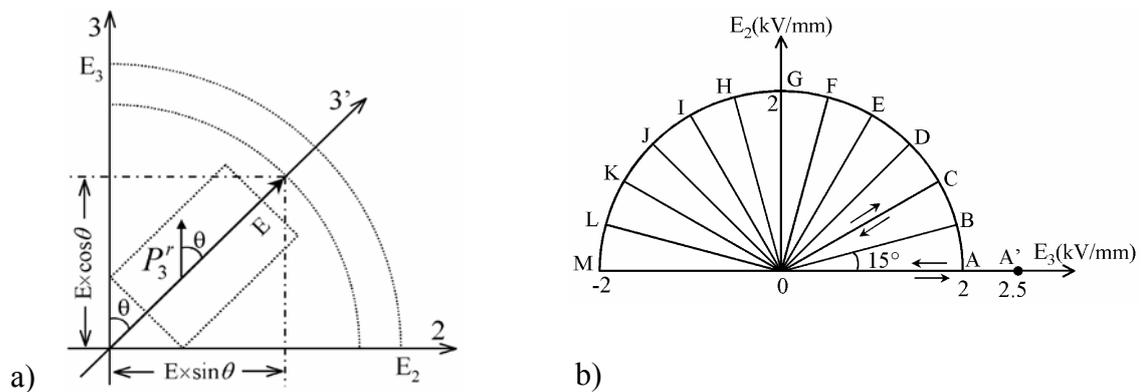


Abbildung 3.15: (a) Vorgepolter Versuchskörper unter zweiachsiger elektrischer Belastung und (b) Belastungspfade der elektrischen Belastung nach Zhou et al. [43]

In den Versuchen wurden die Polarisation und – im Gegensatz zu den Experimenten von Huber und Fleck [41] - die Dehnung gemessen. Bedingt durch die Winkel θ zwischen dem ursprünglichen Polarisationsfeld und dem aktuellen elektrischen Feld ist die Belastungsgeschichte nichtproportional. Im Laufe der Belastung und mit Erreichen der Koerzitivfeldstärke richtet sich der Polarisationsvektor aufgrund von Domänenumklappvorgängen in die Richtung des aktuellen elektrischen Feldes aus, was dazu führt, dass der anfängliche Winkel θ kleiner wird, so dass sich die Polarisation der Richtung des aktuellen elektrischen Feldes annähert.

Abbildung 3.16 zeigt die Ergebnisse der Polarisationsmessung für verschiedene Winkel θ sowie die für verschiedene Versätze der Polarisation (vgl. Abschnitt 3.2.5) bestimmten Domänenumklappflächen für eine zweiachsige elektrische Belastung.

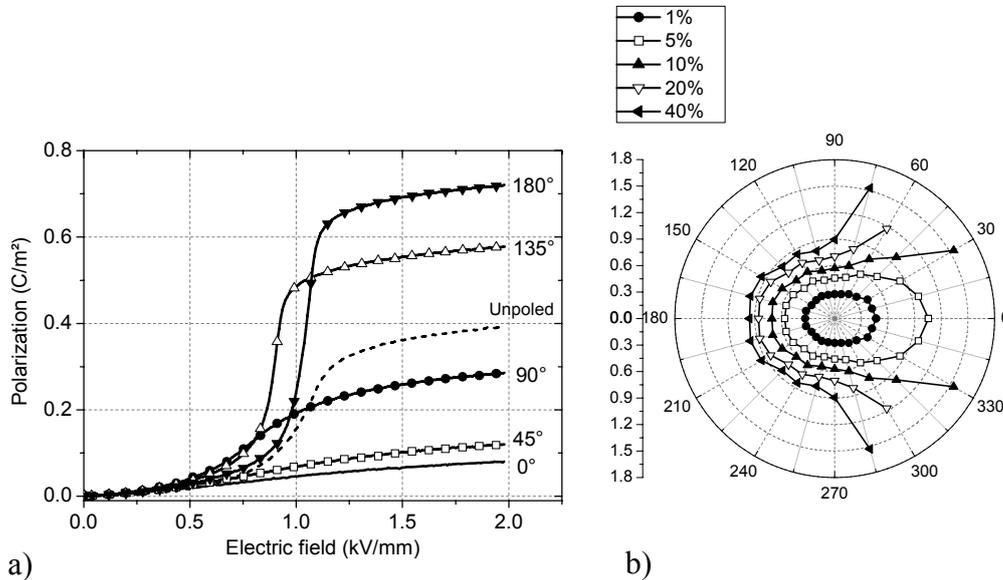


Abbildung 3.16: (a) Versuchsergebnisse der mehrachsigen, nichtproportionalen elektrischen Experimente für verschiedene Winkel zwischen der anfänglichen Polarisationsrichtung und der Resultierenden des aufgetragenen elektrischen Feldes und (b) Domänenumklappfläche aus Polarisationsmessungen für verschiedene Versätze der remanenten Polarisation nach Zhou et al. [43] (die radiale Achse zeigt das elektrische Feld in [kV/mm] und die polare Achse den Winkel θ zwischen anfänglicher Polarisation und dem elektrischen Feld)

Für Versätze von 1 % bzw. 5 % der remanenten Polarisation erhält man eine geschlossene Domänenumklappfläche, die durch die Domänenumklappfunktion

$$\sqrt{(E_3 - E_3^B)^2 + C(E_2)^2} = E_0 \quad (3.3)$$

beschrieben werden kann. Dabei ist E_0 das kritische Feld, das für die irreversible Polarisation, um einen bestimmten Wert zu erreichen, erforderlich ist, E_3^B ist das kinematische Verfestigungsfeld, das eine Verschiebung der Umklappfläche in $+E_3$ -Richtung beschreibt und C ist ein Formfaktor, der die Verzerrung der Umklappfläche in $\pm E_2$ -Richtung skaliert. Für einen Versatz von 1% der remanenten Polarisation ergeben sich aus den Messungen für $E_0 = 0,399$ kV/mm, $E_3^B = 0,0666$ kV/mm und $C = 1,965$.

Die Ergebnisse der Dehnungsmessungen (vgl. Abbildung 3.17) zeigen, dass für gleiche Werte des Versatzes der remanenten Dehnung wie bei den Polarisationsmessungen bei ungepolten Proben eine größere Domänenumklappfläche zu beobachten ist.

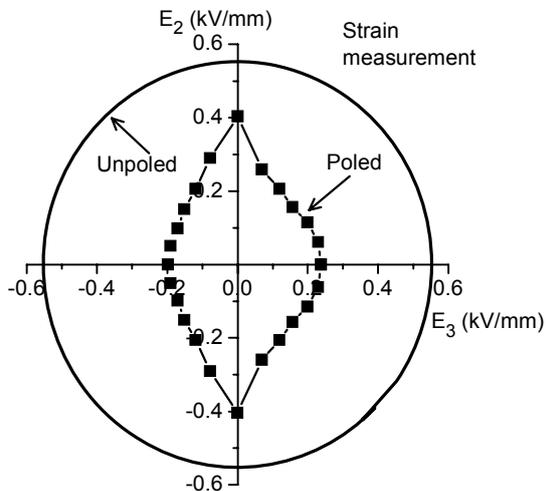


Abbildung 3.17: Vergleich der Domänenumklappflächen aus Dehnungsmessungen für ungepolte und vorgepolte Proben bei einem Versatz von 1% der remanenten Dehnung nach Zhou et al. [43]

Dies erklären Zhou et al. [43] damit, dass zu Anfang der Umklappvorgängen 180°-Umklappen vorherrscht. 180°-Umklappvorgänge führen zu einer Änderung der Polarisati- on aber zu keiner Dehnungsänderung, wodurch die Umklappfläche, die man aus den Dehnungsmessungen erhält, größer ist. Dagegen verkleinert sich die Umklappfläche aus Dehnungsmessungen bei vorgepolten Proben im Vergleich zur Umklappfläche für ungepolte Versuchskörper. Der Grund für diese Entfestigung soll Gegenstand zukünftiger Untersu- chungen sein. Zusätzlich ergeben sich für Winkel θ im Bereich von $\pm 90^\circ$ unrealistische Werte für die Domänenumklappfläche aus Dehnungsmessungen bei vorgepolten Proben, da hier die Schubverzerrungen einen bedeutenden Einfluss besitzen, der aber aufgrund der vorgenommenen Dehnungsmessungen mit jeweils zwei gegenüberliegenden Dehnungs- messstreifen (Messungen in longitudinale und transversale Richtung) nicht erfasst werden konnte (Versuchsaufbau vgl. vorangegangene Abschnitte). Aufgrund der vorgenannten Ergebnisse für die Dehnungsmessungen bedürfen die beobachteten Phänomene weiterer Untersuchungen, um qualitativ und quantitativ schlüssigere Aussagen über die Domänen- umklappflächen unter mehrachsiger elektrischer Belastung mittels Dehnungsmessungen abgeben zu können.

4 Wissensstand zu konstitutiven Stoffgesetzen piezokeramischer Werkstoffe

Im Folgenden wird der Wissensstand zu konstitutiven Stoffgesetzen piezokeramischer Werkstoffe und eventuell dazugehöriger Finite-Elemente-Implementierungen dargelegt. Dabei wird zwischen phänomenologischen und mikromechanischen Stoffgesetzen unterschieden. Auf die Forschungen, mit denen sich auch diese Arbeit auseinandersetzt, wird im Folgenden nicht eingegangen werden, da ausführliche Beschreibungen in späteren Kapiteln folgen.

4.1 Phänomenologische konstitutive Stoffgesetze

Die phänomenologische Betrachtungsweise ist ein einfacher Weg, um das komplexe konstitutive Verhalten piezokeramischer Werkstoffe zu beschreiben. Insbesondere die Geschwindigkeit, mit der solche Probleme auf Rechnern heutzutage gelöst werden können, ist soweit fortgeschritten, dass auch größere Probleme angegangen werden können. Nachteile bestehen darin, dass das Materialverhalten phänomenologisch (der Gültigkeitsbereich eines phänomenologischen Stoffgesetzes ist i. d. R. auf ein Material beschränkt und macht eine Kalibrierung erforderlich) erfasst wird, was zu Ungenauigkeiten bzw. nicht gültigen Anwendungsbereichen führen kann.

Im Bereich der phänomenologischen Stoffgesetze wurden seit den Arbeiten von Chen [44] beträchtliche Fortschritte erzielt, auf die im Folgenden zusammenfassend eingegangen wird.

McMeeking und Landis [45] schlugen ein phänomenologisches Stoffgesetz für ferroelektrische Umklappvorgänge unter mehrachsigen mechanischen und elektrischen Belastungen vor. Es basiert auf einer kinematischen plastischen Verfestigungstheorie mit einer Umklappfläche im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes. Im Allgemeinen bestimmen konstitutive Modelle für Ferroelektrika die Größe und Form der Umklappfläche durch interne Variablen, wie z.B. die remanente Polarisation und die remanente Dehnung. Das trifft auch auf das Modell von McMeeking und Landis [45] zu, aber sie drückten die remanente Dehnung durch eine Funktion der remanenten Polarisation aus.

Diese Vorgehensweise vereinfacht das Modell signifikant, aber auf der anderen Seite kann das Modell das ferroelastische Hystereseverhalten nicht beschreiben.

Die Grundlage des Modells von Landis [46] beinhaltet eine angenommene Form der Helmholtzschen freien Energie des Materials. Domänenumklappflächen und Fließregeln im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes werden eingeführt. Die abgeleiteten konstitutiven Gesetze besitzen symmetrische Tangentenmoduli. Diese Vorgehensweise führt zu einer schnellen Berechnungszeit und geringerem Speicherbedarf der Finite-Elemente-Implementierung - verglichen mit Modellen, welche die asymmetrischen Tangentenmoduli berücksichtigen.

Huber und Fleck [41] schlugen – zusätzlich zur Kristallplastizitätstheorie [59, 60] – ein phänomenologisches Modell vor, welches den Autoren als geeignet für nahezu einachsige Belastungen, im Speziellen zyklische Belastungen, erschien. Die Berechnungszeit in der Finite-Elemente-Implementierung ist kurz, aber es fehlt eine Berücksichtigung genereller, mehrachsiger Belastungszustände.

Kessler und Balke [47] leiteten einen Ausdruck für die lokale und durchschnittliche Energiefreisetzungsrates während Polarisationsorientierungsprozessen ab. Diese kann in Polarisationsorientierungsmodellen angewandt werden. Um die Leistungsfähigkeit ihrer Methodik zu veranschaulichen, entwickelten sie ein Repolarisationsmodell, das die Polarisationsrotation beschreiben kann.

Schröder und Gross [48] entwickelten eine vollständig gekoppelte elektromechanische Formulierung für transversal isotrope Werkstoffe für reversibles Materialverhalten. Eine Variations- und Finite-Elemente-Formulierung für vollständig gekoppelte Probleme bei kleinen Verzerrungen wird in der Arbeit präsentiert. Schröder und Romanowski [49] erweiterten das Modell durch Berücksichtigung des Domänenumklappens, um die fundamentalen Hystereseeffekte beschreiben zu können. Allerdings liegt die Polarisations- und Dehnungsrichtung bedingt durch die Koppelung an eine Vorzugsrichtung, die sich am transversal isotropen Materialtensor orientiert, fest. Damit kann sich lediglich der Betrag der irreversiblen Polarisation ändern, nicht aber deren Richtung.

Belov und Kreher [50] haben einen neuartigen Ansatz für die Modellierung nichtlinearer Hystereseerscheinungen in Ferroelektrika gewählt. Sie schlagen zwei viskoplastische Modelle ohne Umklappbedingungen vor. Die Domänenstrukturentwicklung wird durch ratenabhängige Gleichungen der Volumenanteile der Orientierungsvarianten beschrieben. Das

erste Modell stellt sechs verschiedene Domänenorientierungen zur Verfügung und wird zur Anwendung auf einachsige Belastungen empfohlen. Das zweite Modell besitzt 42 mögliche Domänenorientierungen und kann für mehrachsige Simulationen verwendet werden.

Elhadrouz et al. [52, 53] verwenden das Stoffgesetz von Kamlah und Böhle [5, 6, 8, 9], weswegen auf ihre Arbeit nur insoweit eingegangen wird, da sie im Gegensatz zu den anderen hier genannten Autoren einen kommerziellen Code für die Finite-Elemente-Implementierung verwendeten. Hierfür haben sie eigens ein Element entwickelt, um das Stoffgesetz zu implementieren.

Klinkel [54] hat auf der Basis einer thermodynamisch konsistenten Betrachtungsweise ein eindimensionales Modell für ferroelastische und ferroelektrische Hystereseeffekte von Piezokeramiken entwickelt. Dabei verwendete er die freie Helmholtzsche Energie und eine Domänenumklappfläche für den thermodynamischen Rahmen seiner Arbeit. Als innere Variablen verwendete er neben der irreversiblen Dehnung und der remanenten Polarisati- on ein lediglich theoretisch bedeutsames, irreversibles elektrisches Feld. Diese Vorge- hensweise soll eine Finite-Elemente-Implementierung deutlich vereinfachen.

4.2 Mikromechanische konstitutive Stoffgesetze

Viele verfügbare theoretischen Studien basieren auf mikromechanischen Materialmodel- len (vgl. hierzu [10-13, 55-66]), die zu einem besseren Verständnis der Vorgänge bei Fer- roelektrizität geführt haben. Im Allgemeinen ist aber eine Anwendung von mikromecha- nischen Modellen auf gängige Ingenieurproblematiken schwierig, da die Modelle im All- gemeinen sehr komplex und rechenzeitintensiv sind. Aber dennoch bieten sie eindeutige Vorteile im Vergleich zu den phänomenologischen Stoffgesetzen, da i. d. R. der Gültig- keitsbereich der mikromechanischen Modelle allgemeiner ist (grundsätzliche Mechanis- men auf der mikroskopischen Eben werden erfasst) als bei den phänomenologischen.

Im Folgenden werden einige der oben genannten Arbeiten herausgegriffen, um deren An- wendungsbereiche und ihre Leistungsfähigkeit insbesondere im Hinblick auf das später in dieser Arbeit näher betrachtete mikroskopisch motivierte Stoffgesetz zu beleuchten.

Chen und Lynch [57] haben auf der Basis des konstitutiven Verhaltens von Einkristallen ein mikromechanisches Modell für polykristalline, ferroelektrische Keramiken entwickelt. Das Modell simuliert die tetragonalen und rhomboedrischen Kristallstrukturen, wobei eine Sättigung des linear piezoelektrischen Effekts beinhaltet ist. Ebenso ist eine Interaktion zwischen den verschiedenen Körnern im Polykristall enthalten. Ein Umklappkriterium wurde entwickelt, das die jeweiligen Umklappvorgänge der Domänen in der tetragonalen und rhomboedrischen Kristallstruktur berücksichtigt.

Huber et al. [59, 60] beschreiben ein auf der elastisch-plastischen Kristallplastizitätstheorie beruhendes mikromechanisches Stoffgesetz. Dabei wird das Polykristall als ein aus vielen Einzelkristallen aufgebaute Struktur betrachtet. Umklappvorgänge in diesen Einheitszellen, die dieses in eine andere Kristallvariante umwandeln, bewirken eine Änderung in der irreversiblen Polarisation und der irreversiblen Dehnung wie auch der gemittelten, linearen elektromechanischen Eigenschaften des Polykristalls. Mit diesem Modell lassen sich beliebige mehrachsige elektromechanische Belastungszustände erfassen. Die Autoren demonstrieren in einer Analyse einer tetragonalen Kristallstruktur die außerordentliche Leistungsfähigkeit ihres Modells. Eine Finite-Elemente-Implementierung des Modells zeigen Kamlah et al. [61].

Seemann et al. [62, 63] haben ein Modell auf der Ebene der Körner eines Polykristalls aufgestellt, wobei angenommen wurde, dass nach Polung die Domänen in einem Korn die gleiche Ausrichtung aufweisen. Die Grundlage des Modells ist ein energetischer Ansatz, bei dem die potenzielle Energie einer Domäne betrachtet wird. Unterschreitet die potenzielle Energie einen Grenzwert, so klappt die Domäne um. Die Gesamtantwort des Polykristalls wird durch Mittelung aller Domänenvorgänge gebildet. Da aber intergranulare Effekte die Umklappvorgänge beeinflussen können, werden probabilistische Funktionen für die Domänenprozesse eingeführt, die es auch ermöglichen, dass die Domänen eines Kornes umklappen, obwohl sie die kritische Energie noch nicht überschritten haben.

Smith et al. [65] entwickelten auf der Grundlage der freien Helmholtzschen und Gibbschen Energie auf Gitterebene der Kristallstruktur eines Einkristalls ein mikromechanisches Modell. Die Übertragung auf polykristalline Strukturen findet mit der Hilfe einer stochastischen Homogenisierung statt, um die inhomogene Struktur von Polykristallen zu erfassen. Damit gelingt es den Autoren auch das makroskopische Verhalten von Polykristallen zu simulieren.

5 Phänomenologisches Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung

Das phänomenologische Stoffgesetz wurde von Kamlah und Böhle [5, 6, 8, 9] am Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Institut für Materialforschung II entwickelt. Einige der Haupteigenschaften von piezokeramischen Werkstoffen, die das Modell wiedergeben kann, sind in Kapitel 2 beschrieben worden. Kamlah und Böhle realisierten eine Finite-Elemente-Implementierung des Modells, die sehr rechenzeitintensiv ist, da ein System von gewöhnlichen Differenzialgleichungen gelöst werden musste. Deswegen fand eine Fortentwicklung der Implementierung auf der Basis eines Radial-Return-Mapping-Algorithmuses in ein Open Source-Finite-Elemente-Programm mit dem Namen PSU [7] von Laskewitz und Kamlah [51] statt. Diese „neue“ Implementierung reduziert die erforderliche Rechenzeit beträchtlich und ermöglicht auch größere Strukturen mit mehreren tausend Elementen zu berechnen. Radial-Return-Mapping-Algorithmen für Finite-Elemente-Implementierungen finden sich angewandt auf Plastizität und Viskoplastizität bei Simo et al. [67, 68].

5.1 Elektromechanische Feldtheorie

Zur Beschreibung eines Körpers wird ein System von Feldgleichungen (Bilanzgleichungen und Stoffgesetze) benötigt. Die Bilanzgleichungen können durch ein System von partiellen Differenzialgleichungen ausgedrückt werden und sind unabhängig von den Materialeigenschaften. Durch konstitutive Gesetze finden die speziellen Eigenschaften und das Verhalten des Materials Berücksichtigung und das Gleichungssystem ist vollständig aufgestellt. Dieses Gleichungssystem muss dann durch gegebene Anfangs- und Randbedingungen gelöst werden.

Mit der Annahme, dass sich ein Körper im statischen Gleichgewicht befindet und Volumenkräfte vernachlässigbar sind, führt die Impulsbilanz zur Gleichgewichtsbedingung

$$\operatorname{div} \boldsymbol{T} = \vec{0} \quad (5.1)$$

mit dem Spannungstensor \boldsymbol{T} .

Der Erhaltungssatz des Drehimpulses führt zur Symmetrie

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (5.2)$$

des Spannungstensors.

Die Deformation eines Körpers kann durch den Verschiebungsvektor \vec{u} ausgedrückt werden. Dieser ist i. d. R. eine Funktion des Ortes. Der linearisierte Verzerrungstensor \mathbf{S} ist definiert als der symmetrische Anteil des Deformationsgradienten wie folgt:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\text{grad}\vec{u} + (\text{grad}\vec{u})^T). \quad (5.3)$$

Dieser Anteil wird auch als Green'sche Verzerrungstensor bezeichnet.

Die Feldgleichung der Elektrostatik ist gegeben durch das Gauß'sche Gesetz mit

$$\text{div}\vec{D} = 0. \quad (5.4)$$

Fremdladungen im Dielektrikum werden dabei vernachlässigt. Die dielektrische Verschiebung \vec{D} aus Gleichung 5.4 ist definiert als

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \quad (5.5)$$

wobei ε_0 die dielektrische Feldkonstante im Vakuum, \vec{E} der elektrische Feldvektor und \vec{P} der Polarisationsvektor ist (vgl. hierzu Gerthsen und Meschede [14]).

Da das elektrische Feld des hier betrachteten idealen Nichtleiters rotationsfrei ist, was durch

$$\text{rot}\vec{E} = 0 \quad (5.6)$$

ausgedrückt werden wird, kann das elektrische Feld als negativer Gradient des elektrischen Potentials

$$\vec{E} = -\text{grad}\varphi \quad (5.7)$$

beschrieben werden.

Das so erhaltene System von Differenzialgleichungen muss dann für gegebene Randbedingungen von \vec{u} , \mathbf{T} , φ und \vec{D} gelöst werden.

5.2 Konstitutive Modellierung piezokeramischer Werkstoffe

Die konstitutiven Gleichungen setzen die mechanische Spannung, die dielektrische Verschiebung, die Verzerrung und das elektrische Feld in Beziehung zueinander. Analog zur Plastizität motiviert das Hystereseverhalten piezokeramischer Werkstoffe eine Aufteilung der Dehnung \mathbf{S} und der Polarisation \vec{P} in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^r + \mathbf{S}^i \quad (5.8)$$

$$\vec{P} = \vec{P}^r + \vec{P}^i. \quad (5.9)$$

Die irreversiblen Anteile, die in Abhängigkeit der Belastungsgeschichte stehen, können auch als innere Variablen aufgefasst werden, die das nichtlineare Materialverhalten berücksichtigen.

Die reversiblen Anteile können durch

$$\mathbf{S}^r = \mathbb{C}^{-1} : \mathbf{T} + \mathbf{d} \mathbf{l}^T \cdot \vec{E} \quad (5.10)$$

und

$$\vec{P}^r = \mathbf{d} \mathbf{l} : \mathbf{T} + \kappa \cdot \vec{E} \quad (5.11)$$

ausgedrückt werden, wobei \mathbb{C} den Elastizitätstensor, $\mathbf{d} \mathbf{l}$ den Piezoelektrizitätstensor, κ den Suszeptibilitätstensor und, wie weiter oben schon erwähnt wurde, \mathbf{T} den Spannungstensor und \vec{E} den elektrischen Feldvektor bezeichnen.

Der Elastizitäts- und der Suszeptibilitätstensor werden als isotrop angenommen. Dies trifft nicht auf den Piezoelektrizitätstensor zu. In diesem Fall wird eine geschichtsabhängige Anisotropie angenommen mit $\mathbf{e}_i = (\vec{e}^{P^i})_i$, wobei

$$\vec{e}^{P^i} = \frac{\vec{P}^i}{\|\vec{P}^i\|} \quad (5.12)$$

$$\mathbf{d}_{kij} = \frac{\|\vec{P}^i\|}{P^{sat}} \cdot \left\{ d^{\parallel} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k + d^{\perp} (\delta_{ij} - \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_k + d^{\perp} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[(\delta_{ki} - \mathbf{e}_k \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_j + (\delta_{kj} - \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_i \right] \right\}. \quad (5.13)$$

Eine Interpretation der Wirkung der piezoelektrischen Konstanten im Piezoelektrizitätstensor ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Dabei bestehen die Zusammenhänge

$d^{\parallel} = d_{33}$, $d^{\perp} = d_{31}$, $d^{\ominus} = \frac{1}{2}d_{15}$, während in x_3 -Richtung gepolt wird.

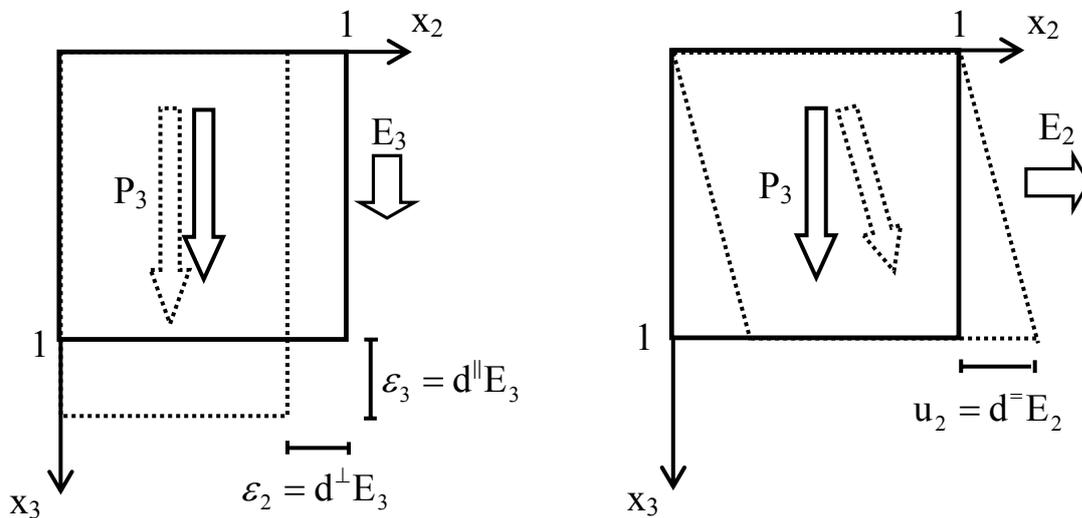


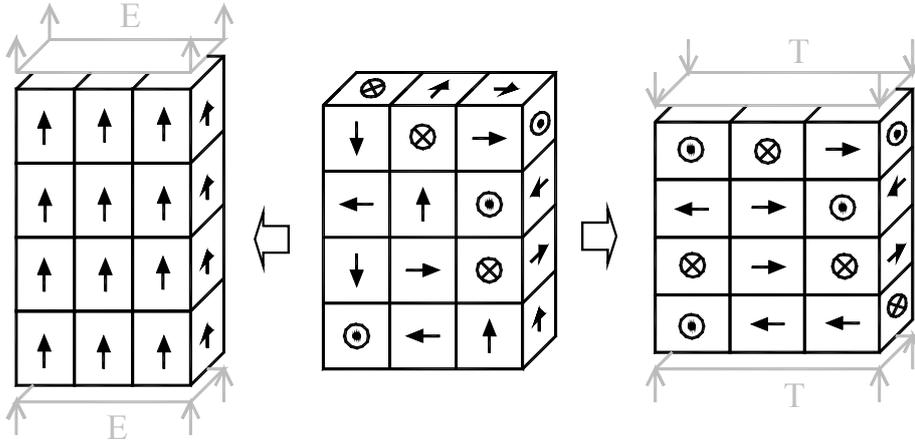
Abbildung 5.1: Interpretation der Effekte der piezoelektrischen Konstanten auf das Deformationsverhalten von Ferroelektrika nach Böhle [5]

Die Piezomoduli bewirken eine Deformation in Richtung und normal zum elektrischen Feld, falls die Polarisation in dessen Richtung oder entgegengesetzt dazu gerichtet ist. Im anderen Fall, wenn das elektrische Feld normal zur Polarisationsrichtung orientiert ist, entsteht eine Deformation in die Richtung des elektrischen Felds und es ist eine infinitesimale Rotation des Polarisationsvektors zu beobachten. Wie Gleichung 5.13 zeigt, hängen die Piezomoduli von der Polarisation oder vielmehr dem Polarisationsgrad ab. Mit anderen Worten: Das elektrische Feld hat keine Auswirkung auf die Verzerrung oder die mechanische Spannung auf die Polarisation, so lange keine irreversible Polarisation zu beobachten ist. In diesem Fall liegt linear dielektrisches Verhalten im Modell vor, was auch im Experiment beobachtet werden kann.

Die irreversible Dehnung \mathbf{S}^i und die irreversible Polarisation \vec{P}^i erhält man über Evolutionsgleichungen. Dabei wird die irreversible Dehnung \mathbf{S}^i in einen elektrisch bedingten (\mathbf{S}^{ie}) und einen mechanisch bedingten (\mathbf{S}^{im}) Anteil zerlegt. Der Zusammenhang dieser beiden Größen wird durch

$$\mathbf{S}^i = \mathbf{S}^{ie} + \mathbf{S}^{im} \quad (5.14)$$

beschrieben. Die Motivation dieser Zerlegung ist in Abbildung 5.2 dargestellt.



$$\vec{P}^i \neq 0 \rightarrow \mathbf{S}^{ie} \quad \vec{P}^i = 0 \quad \vec{P}^i = 0 \rightarrow \mathbf{S}^{im}$$

Abbildung 5.2: Zerlegung der irreversiblen Dehnung \mathbf{S}^i in einen elektrisch bedingten Anteil \mathbf{S}^{ie} und einen mechanisch bedingten Anteil \mathbf{S}^{im} nach Böhle [5]

Ausgehend vom ungepolten Zustand, der in der Mitte der Abbildung 5.2 dargestellt ist, kann eine mechanische Spannung eine irreversible Dehnung \mathbf{S}^{im} bedingt durch 90°-Domänenumklappvorgänge induzieren (vgl. rechte Seite in Abbildung 5.2). Makroskopisch ist in diesem Fall keine Polarisationsänderung zu verzeichnen. Andererseits führt ein hinreichend starkes elektrisches Feld zu Domänenumklappvorgängen in dessen Richtung, die mit einer irreversiblen Dehnung und einer Polarisationsänderung einhergehen. Dieser Sachverhalt findet sich auf der linken Seite der Abbildung 5.2. Die elektrisch bedingte Dehnung \mathbf{S}^{ie} kann durch

$$\mathbf{S}^{ie} = \frac{3}{2} \mathbf{S}^{sat} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P^{sat}} \left(\vec{e}^{P^i} \otimes \vec{e}^{P^i} - \frac{1}{3} \mathbb{1} \right) \quad (5.15)$$

ausgedrückt werden.

Die irreversible mechanisch bedingte Dehnung \mathbf{S}^{im} erhält man von einem mechanischen Fließkriterium (Anm. d. Autors: Fließen, aufgrund der Ähnlichkeit zur Plastizität), bei dem nur deviatorische Dehnungsänderungen Eingang finden. Als zusätzliche Bedingung gilt, dass die Summation der beiden Anteile der gesamten irreversiblen Dehnung die Sättigungsdehnung \mathbf{S}^{sat} nicht überschreiten darf.

Um die Punkte zu finden, an denen ein Umklappen der Domänen für die ferroelektrische und ferroelastische Hysterese einsetzt, werden mehrere Funktionen eingeführt. Das elektrische Fließkriterium

$$f^e(\vec{E}, \vec{P}^i) = \|\vec{E} - c^e \vec{P}^i\| - E^c \quad (5.16)$$

beschreibt den Punkt, an dem die Koerzitivfeldstärke E^c erreicht wird und die Domänen beginnen in die Richtung des elektrischen Feldes umzuklappen. Dabei entwickelt sich eine irreversible Polarisation \vec{P}^i . In Gleichung 5.16 sind E^c und c^e nicht-negative Materialparameter.

Die elektrische Sättigungsfunktion

$$h^e(\vec{E}, \vec{P}^i, \mathbf{T}) = \|\vec{P}^i\| - \hat{P}^{sat}(\vec{E}, \vec{P}^i, \mathbf{T}) \quad (5.17)$$

begrenzt die Entwicklung auf die Sättigungspolarisation \hat{P}^{sat} . Dadurch wird dem Sachverhalt Rechnung getragen, dass an diesem Punkt nahezu alle Domänen in Richtung des elektrischen Feldes umgeklappt sind. Die Sättigungspolarisation \hat{P}^{sat} hängt vom elektrischen Feldvektor \vec{E} , dem irreversiblen Polarisationsvektor \vec{P}^i und dem Spannungstensor \mathbf{T} ab. Das bedeutet bspw., dass eine Druckspannung in der Lage ist, die Sättigungspolarisation zu vermindern. Die Sättigungspolarisation ist definiert durch

$$\hat{P}^{sat}(\mathbf{T}, \vec{E}, \vec{P}^i) = (P^{sat} - P^\delta) \left\langle 1 - \frac{1}{m} \left\langle -\frac{3}{2} \vec{e}^{P^i} \cdot \mathbf{T}^D \cdot \vec{e}^{P^i} - \hat{T}^c \right\rangle \right\rangle + P^\delta. \quad (5.18)$$

P^δ bezeichnet darin die remanente Restpolarisation, die bei einer mechanischen Depolarisation grundsätzlich erhalten bleibt und m ist ein positiver Materialparameter.

Die Koerzitivspannung ist durch

$$\hat{T}^c(\vec{E}, \vec{P}^i) = \left\langle T^c + n \frac{\vec{E}}{E^c} \cdot \vec{e}^{P^i} \right\rangle \quad (5.19)$$

gegeben, worin n ein nicht-negativer Materialparameter ist.

Die mechanische Fließfunktion

$$f^m(\vec{E}, \vec{P}^i, \mathbf{T}, \mathbf{S}^{im}) = \|(\mathbf{T} - c^m \mathbf{S}^{im})^D\| - \hat{T}^c(\vec{E}, \vec{P}^i) \quad (5.20)$$

bestimmt den Punkt, an dem die Koerzitivspannung \hat{T}^c erreicht wird und eine irreversible, mechanisch bedingte Dehnung \mathbf{S}^{im} aufgrund von Domänenumklappvorgängen induziert wird. c^m ist dabei ein nicht-negativer Materialparameter.

Die mechanische Sättigungsfunktion

$$h^m(\bar{P}^i, \mathbf{S}^{im}) = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\mathbf{S}^{im}\| - \left(\mathbf{S}^{sat} - \sqrt{\frac{2}{3}} \|\mathbf{S}^{e}\| \right) \quad (5.21)$$

begrenzt die Entwicklung der gesamten irreversiblen Dehnung \mathbf{S}^i (elektrisch und mechanisch bedingter Anteil) auf die Sättigungsdehnung \mathbf{S}^{sat} .

Die irreversible Polarisation und die irreversible Dehnung erhält man aus Evolutionsgleichungen, die von der Normalenregel und Konsistenzbedingungen abgeleitet werden. Deswegen müssen mehrere verschiedene Belastungszustände betrachtet werden, die zu unterschiedlichen rechten Seiten der verwendeten Gleichungen führen.

Mit der Einführung der Notationen

$$\boxed{x} = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}, \quad \bar{x} = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (5.22)$$

und

$$f^e = \frac{d}{dt} f^e \Big|_{\dot{p}^i=0}, \quad h^e = \frac{d}{dt} h^e \Big|_{\dot{p}^i=\boxed{f^e} \mid \bar{f}^e} \lambda_f^e \frac{\partial f^e}{\partial E}, \quad (5.23)$$

$$f^m = \frac{d}{dt} f^m \Big|_{\dot{s}^m=0}, \quad h^m = \frac{d}{dt} h^m \Big|_{\dot{s}^m=\boxed{f^m} \mid \bar{f}^m} \lambda_f^m \frac{\partial f^m}{\partial T}, \quad (5.24)$$

wie auch

$$F^i = \boxed{f^i} \mid \bar{f}^i, \quad H^i = \boxed{\boxed{h^i} \mid \bar{h}^i + f^i}, \quad i = e, m, \quad (5.25)$$

und schließlich

$$\vec{b} = \frac{\partial h^e}{\partial \bar{P}^i}, \quad \mathbf{N}^m = \frac{\partial h^m / \partial \mathbf{S}^i}{\|\partial h^m / \partial \mathbf{S}^i\|} \quad (5.26)$$

können die Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen als

elektrische Sättigungsfunktion h^e kleiner als Null. Weder das Fließ- noch das Sättigungskriterium sind verletzt. Nach Erreichen der Koerzitivfeldstärke E^c beginnen die Domänen in Richtung des elektrischen Feldes umzuklappen und eine irreversible Polarisation \vec{P}^i entwickelt sich. Das Fließkriterium $f^e = 0$ ist befriedigt, aber das Sättigungskriterium $h^e = 0$ ist noch nicht erfüllt. Wenn die Sättigungspolarisation P^{sat} erreicht ist – nahezu alle Domänen sind in die Richtung des elektrischen Feldes orientiert – wird die Entwicklung der irreversiblen Polarisation \vec{P}^i abgebrochen, da das Sättigungskriterium von h^e erfüllt ist. Ab diesem Punkt bleibt das Fließkriterium von f^e ohne weitere Wirkung verletzt, da das Sättigungskriterium von h^e von höherer Ordnung ist als das Fließkriterium von f^e .

5.3 Finite-Elemente-Implementierung

In der Implementierung des phänomenologischen, konstitutiven Modells durch Kamlah und Böhle [5, 6, 8, 9] wurde das komplexe System von 9 gewöhnlichen Differenzialgleichungen (vgl. Gleichungen 5.27 und 5.28) mit seinen mehreren, verschiedenen Belastungszuständen mit Hilfe eines Runge-Kutta-Integrationsverfahren gelöst. Deswegen sind Finite-Elemente-Simulationen mit dieser Implementierung rechenzeitintensiv und eine Anwendung auf größere Probleme ist ausgeschlossen.

Um die Rechenzeit zu verkürzen, wurde in der vorliegenden Arbeit die Finite-Elemente-Implementierung mit der Anwendung eines Radial-Return-Mapping-Algorithmuses nach Simo et al. [67, 68] realisiert (vgl. Laskewitz und Kamlah [51]). Diese „neue“ Methode der Implementierung hat lediglich eine algebraische Gleichung zu lösen und kann damit in der Berechnung bis zu 40-mal schneller sein als die „alte“ Methode. Die Grundidee hinter der neuen Vorgehensweise ist, skalare Parameter anzupassen, so dass sie die Kriterien, die im vorangegangenen Abschnitt aufgestellt wurden, erfüllen.

In der nichtlinearen Finite-Elemente-Methode wird die Belastungsgeschichte in Lastschritte unterteilt. Im Folgenden bezeichnet der Index n den Zustand am Beginn und der Index $n+1$ den Zustand am Ende des Inkrements.

Die elektromechanische Finite-Elemente-Formulierung von Allik und Hughes [69] wird verwendet, in welcher die unbekannt, primären Knotenvariablen, die stetige Verschie-

bung \vec{u} und das elektrische Potenzial φ , durch Interpolationsfunktionen gegeben sind. Zu Beginn des Inkrements n ist der Zustand aller Variablen bekannt. Die globale Newtoniteration liefert Vorschläge (trials) für ${}^{n+1}\mathbf{S}$ und ${}^{n+1}\vec{E}$ am Ende des Inkrements, die auf Gleichgewicht und der Vereinbarkeit mit dem Gaußschen Gesetz geprüft werden. Zu diesem Zweck müssen die irreversible Polarisation ${}^{n+1}\vec{P}^i$ und die irreversible, mechanisch bedingte Dehnung ${}^{n+1}\mathbf{S}^{im}$ berechnet werden. Sobald der Zustand am Ende des Inkrements (${}^{n+1}\mathbf{S}$, ${}^{n+1}\vec{E}$, ${}^{n+1}\vec{P}$, ${}^{n+1}\mathbf{S}^{im}$) bekannt ist, können ${}^{n+1}\mathbf{T}$ und ${}^{n+1}\vec{D}$ berechnet und das Gleichgewicht bestimmt und das Gaußsche Gesetz angewandt werden.

Im Folgenden werden die verschiedenen Belastungszustände und die zu lösenden Gleichungen besprochen. Eine ausführlichere Beschreibung von Radial-Return-Mapping-Algorithmen nach Simo [67, 68] findet sich bei der Beschreibung der Implementierung des mikroskopisch motivierten Modells später in dieser Arbeit.

Im Allgemeinen werden die irreversible Polarisation und die irreversible Dehnung am Ende eines Inkrements durch

$${}^{n+1}\vec{P}^i = {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i + \Delta\vec{P}_h^i \quad (5.29)$$

und

$${}^{n+1}\mathbf{S}^{im} = {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im} + \Delta\mathbf{S}_h^{im} \quad (5.30)$$

ausgedrückt, worin $\Delta\vec{P}_f^i$, $\Delta\vec{P}_h^i$, $\Delta\mathbf{S}_f^{im}$ und $\Delta\mathbf{S}_h^{im}$ die Korrektoren der irreversiblen Polarisation bzw. der mechanisch bedingten, irreversiblen Dehnung im Radial-Return-Mapping-Algorithmus darstellen.

Die verschiedenen Belastungszustände und Lösungsstrategien werden im Folgenden beschrieben. Zunächst müssen die Kriterien überprüft werden. Dann, abhängig vom Fall, müssen die irreversible Polarisation und die mechanisch bedingte, irreversible Dehnung berechnet werden. Der Ansatz mit den skalaren Parametern α^e , α^m , β^e und β^m führt zu den folgenden Bedingungen. Die Parameter werden aus der Bedingung, dass das spezifische Kriterium gleich Null sein muss, errechnet. Zuerst müssen die f -Kriterien überprüft werden und dann als nächster Schritt die h -Kriterien, da, wie schon zuvor erwähnt wurde, die h -Kriterien von höherer Ordnung sind als die f -Kriterien. Das bedeutet, dass in jedem Fall die h -Kriterien erfüllt sein müssen, falls sie größer wie Null werden. Im Gegensatz

dazu können die f -Kriterien verletzt sein, falls die h -Kriterien in einem Bereich sind, wo sie größer wie Null wären.

Die f -Kriterien sind nicht miteinander gekoppelt, da sie lediglich entweder von elektrischen oder mechanischen Größen abhängen. Bei den h -Kriterien dagegen müssen die elektrischen und mechanischen Größen zur gleichen Zeit ermittelt werden, was bedeutet, dass sie vollständig miteinander gekoppelt sind.

1.

$$f^e({}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i) \leq 0 \longrightarrow \Delta\vec{P}_f^i = \vec{0}$$

2.

$$f^e({}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i) > 0 \quad \text{Ansatz: } \Delta\vec{P}_f^i = \alpha^e \frac{\partial f^e({}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i)}{\partial \vec{E}}$$

$$f^e({}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i) = f^e(\alpha^e) = 0 \quad \xrightarrow{\text{analytisch}} \quad \alpha^e = \frac{E^c}{c^e} \cdot f^e({}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i)$$

3.

$$f^m({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im}) \leq 0 \longrightarrow \Delta\mathbf{S}_f^{im} = \mathbf{0}$$

4.

$$f^m({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im}) > 0 \quad \text{Ansatz: } \Delta\mathbf{S}_f^{im} = \alpha^m \frac{\partial f^m({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im})}{\partial \mathbf{T}}$$

$$f^m({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im}) = f^m(\alpha^m) = 0 \quad \xrightarrow{\text{analytisch}} \quad$$

$$\alpha^m = \left[\left((\mathbf{T} - c^m \cdot {}^n\mathbf{S}^{im})^D : (\mathbb{C} : \mathbb{N} + c^m \mathbb{N}) - \sqrt{\left((\mathbf{T} - c^m \cdot {}^n\mathbf{S}^{im})^D : (\mathbb{C} : \mathbb{N} + c^m \mathbb{N}) \right)^2 - (\mathbb{C} : \mathbb{N} + c^m \mathbb{N})^2} \right. \right.$$

$$\left. \left. \cdot \left[\left((\mathbf{T} - c^m \cdot {}^n\mathbf{S}^{im})^D \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\hat{T}^c({}^{n+1}\vec{E}, {}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i) \right)^2 \right] \right] / (\mathbb{C} : \mathbb{N} + c^m \mathbb{N})^2$$

$$\text{mit } \mathbb{N} = \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{c}^m \cdot {}^n \mathbf{S}^{im})^D}{\|(\mathbf{T} - \mathbf{c}^m \cdot {}^n \mathbf{S}^{im})^D\|} \quad \text{und } (\cdot)^2 \text{ als inneres Produkt}$$

5.

$$h^e({}^{n+1} \mathbf{S}, {}^{n+1} \bar{\mathbf{E}}, {}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) \leq 0 \quad \wedge \quad h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) \leq 0$$

$$\longrightarrow \Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i = \bar{\mathbf{0}} \quad \wedge \quad \Delta \mathbf{S}_h^{im} = \mathbf{0}$$

6.

$$h^e({}^{n+1} \mathbf{S}, {}^{n+1} \bar{\mathbf{E}}, {}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) > 0 \quad \wedge \quad h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) \leq 0$$

$$\text{Ansatz: } \Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i = \beta^e \frac{\partial h^e({}^{n+1} \mathbf{S}, {}^{n+1} \bar{\mathbf{E}}, {}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im})}{\partial \bar{\mathbf{P}}^i} \quad \wedge \quad \Delta \mathbf{S}_h^{im} = \mathbf{0}$$

$$h^e({}^{n+1} \mathbf{S}, {}^{n+1} \bar{\mathbf{E}}, {}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) = 0 \quad \xrightarrow{\text{numerisch}} \quad \beta^e$$

Nach diesem Schritt ist nicht mehr gewährleistet, dass das h^m -Kriterium nicht verletzt ist.

Deswegen muss am Ende des Inkrements h^m und das berechnete $\Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i$ überprüft werden:

$$h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) \leq 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Ende des Inkrements}$$

$$h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) > 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Fall 8.}$$

7.

$$h^e({}^{n+1} \mathbf{S}, {}^{n+1} \bar{\mathbf{E}}, {}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) \leq 0 \quad \wedge \quad h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im}) > 0$$

$$\text{Ansatz: } \Delta \bar{\mathbf{P}}_h^i = \bar{\mathbf{0}} \quad \wedge \quad \Delta \mathbf{S}_h^{im} = \beta^m \frac{\partial h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im})}{\partial \mathbf{S}^{im}}$$

$$h^m({}^n \bar{\mathbf{P}}^i + \Delta \bar{\mathbf{P}}_f^i, {}^n \mathbf{S}^{im} + \Delta \mathbf{S}_f^{im} + \Delta \mathbf{S}_h^{im}) = 0 \quad \xrightarrow{\text{numerisch}} \quad \beta^m$$

Nach diesem Schritt ist nicht mehr gewährleistet, dass das h^e -Kriterium nicht verletzt ist. Deswegen muss am Ende des Inkrements h^e und das berechnete $\Delta\bar{P}_h^i$ überprüft werden:

$h^e({}^{n+1}\mathbf{S}, \bar{E}_{n1}, {}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im} + \Delta\mathbf{S}_h^{im}) \leq 0 \quad \Rightarrow \text{Ende des Inkrements}$
$h^e({}^{n+1}\mathbf{S}, \bar{E}_{n1}, {}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im} + \Delta\mathbf{S}_h^{im}) > 0 \quad \Rightarrow \text{Fall 8.}$

8.

$h^e({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\bar{E}, {}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im}) > 0 \wedge h^m({}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im}) > 0$
$\text{Ansatz: } \Delta\bar{P}_h^i = \beta^e \frac{\partial h^e({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\bar{E}, {}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im})}{\partial \bar{P}^i}$
$\wedge \Delta\mathbf{S}_h^{im} = \beta^m (\beta^e) \frac{\partial h^m({}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im})}{\partial \mathbf{S}^{im}}$
$\rightarrow \beta^m = \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \mathbf{S}^{sat} \left(1 - \frac{\left\ \bar{P}_n^i + \Delta\bar{P}_f^i + \beta^e \cdot \frac{\partial h^e({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\bar{E}, {}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im})}{\partial \bar{P}^i} \right\ }{P^{sat}} \right) - \left\ {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im} \right\ $
$h^e({}^{n+1}\mathbf{S}, {}^{n+1}\bar{E}, {}^n\bar{P}^i + \Delta\bar{P}_f^i + \Delta\bar{P}_h^i, {}^n\mathbf{S}^{im} + \Delta\mathbf{S}_f^{im} + \Delta\mathbf{S}_h^{im}) = 0$
$\xrightarrow{\text{numerisch}} \beta^e$

Alle zu lösenden Gleichungen sind nichtlineare algebraische Gleichungen, die lediglich von einer Variablen abhängen. Im Fall des elektrischen und mechanischen Fließkriteriums wird die Lösung analytisch gefunden. In den anderen Fällen werden numerische Lösungsmethoden wie das Newton-Verfahren und die Regula-Falsi-Methode verwendet (vgl. Hermann [70] und Bronstein und Semendjajew [71]). Um Stabilität der Berechnung, d.h. Konvergenz, zu erzielen wird ein dreistufiges Lösungsschema angewandt. Zu Anfang der Lösung wird das Newtonverfahren mit einem Startwert von Null für die unbekannt Variablen α^e , α^m , β^e und β^m verwendet. Falls Oszillationen während der Iteration auftreten, d.h. die Wurzel kann nicht gefunden werden, wird der Startwert dahingehend abgeändert, dass der neue Startwert der Mittelwert der letzten beiden Newtonschritte ist. Falls dann immer noch keine Lösung gefunden werden kann, wird die Regula-Falsi-Methode angewandt, die in den meisten Fällen erfolgreich ist. Als allerletzte Konsequenz, falls

selbst damit keine Lösung gefunden werden kann, wird das globale Inkrement unterbrochen und die Schrittweite halbiert.

Für den Fall der dielektrischen Hysterese ist die Vorgehensweise zur Lösung des Problems mit dem Radial-Return-Mapping-Algorithmus in Abbildung 5.4 dargestellt.

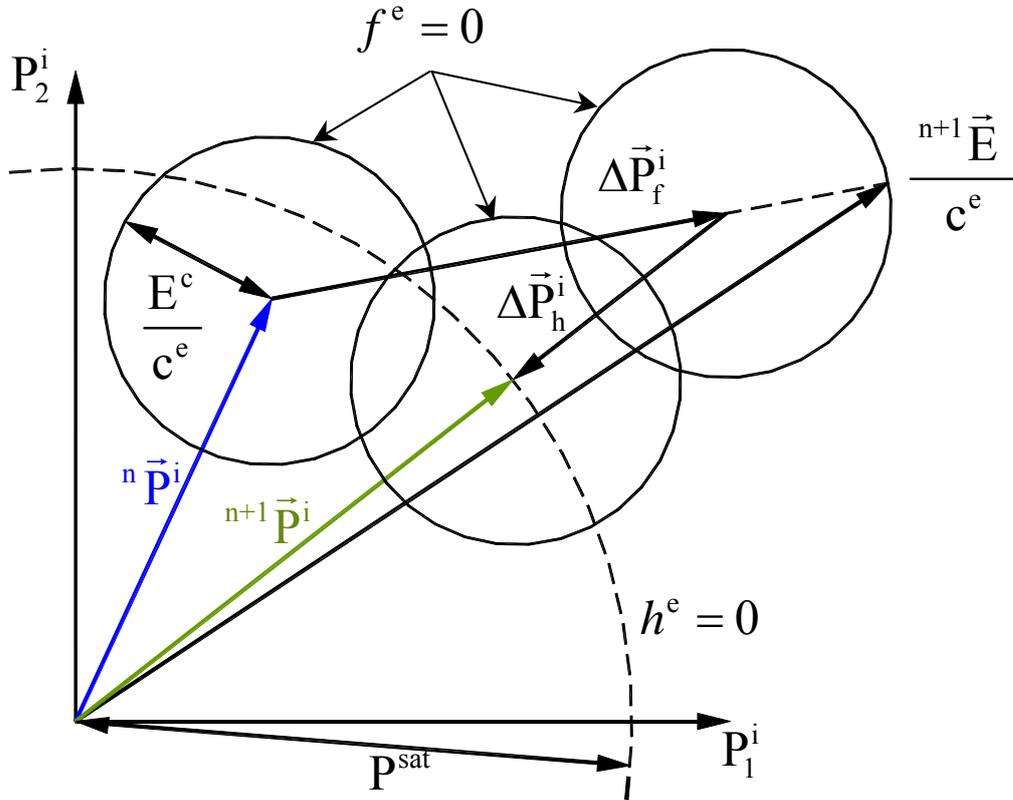


Abbildung 5.4: Radial-Return-Mapping-Algorithmus, der in der Finite-Elemente-Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes verwendet wurde, im Fall der dielektrischen Hysterese

Ausgehend von einem irreversiblen Polarisationsvektors ${}^n\vec{P}^i$ des letzten Inkrements und dem Prädiktor $\frac{{}^{n+1}E}{c^e}$, der das elektrische Fließkriterium f^e (hier durch einen Kreis dargestellt) verletzt, wird der Korrektor $\Delta\vec{P}_f^i$ gefunden. Da am Ende alle Domänen in Richtung des elektrischen Feldes umgeklappt sind, muss das elektrische Sättigungskriterium h^e , welches durch die gestrichelte Linie dargestellt ist, betrachtet werden. Der neue Prädiktor ${}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i$ muss geprüft werden, ob er außerhalb des Bereiches liegt, der durch die Erfüllung des Sättigungskriterium beschrieben wird. Falls er außerhalb liegt, muss ein neuer Korrektor $\Delta\vec{P}_h^i$ berechnet werden, der auf der Wirkungslinie von ${}^n\vec{P}^i + \Delta\vec{P}_f^i$ liegt.

Der neue irreversible Polarisationsvektor ${}^{n+1}\vec{P}^i$ am Ende des Inkrements hat das Sättigungskriterium h^e zu erfüllen. Er kann zu Beginn des Vorganges außerhalb des Fließkriteriums f^e liegen, da das Sättigungskriterium h^e von höherer Ordnung als das Fließkriterium ist.

5.4 Verifizierung der Finite-Elemente-Implementierung

5.4.1 Vergleich experimenteller Daten mit Berechnungsergebnissen

Vergleiche mit Simulationen von Böhle [5] zeigen, dass die „neue“ Implementierung die Differenzialgleichungen hinreichend genau löst. Deswegen kann das phänomenologische Stoffgesetz mit den Experimenten aus Kapitel 3 verglichen werden, während das Anpassen des Modells auf Basis der „neuen“ Implementierung geschieht. Die Materialparameter, die in den Simulationen verwendet werden, werden in einem gewichteten MKS-System repräsentiert, um eine bessere Konditionierung der elektroelastischen Steifigkeitsmatrix k^* zu erzielen. Eine gut konditionierte Steifigkeitsmatrix ist wichtig für genaue Ergebnisse. Es ist bekannt, dass die Materialmatrix \mathbf{M} piezokeramischer Werkstoffe schlecht konditioniert ist, d.h. sie ist beinahe singulär. Als ersten Schritt werden die Konditionszahlen der piezoelektrischen Materialmatrix für das MKS- und das gewichtete MKS-System berechnet. Der Vergleich in Tabelle 5.1 zeigt eine signifikante Verbesserung der Kondition der Matrix von ungefähr 10^{20} auf lediglich 10. Die Konditionszahl der elektroelastischen Steifigkeitsmatrix $cond(k^*)$ wird von ungefähr 10^{36} auf 10^{19} reduziert. Deswegen wird $cond(k^*) \cdot eps$ der elektroelastischen Steifigkeitsmatrix für ein Element nach Allik und Hughes [69] berechnet. eps ist dabei die relative Genauigkeit des verwendeten Rechners, die leicht berechnet werden kann. In Tabelle 5.1 ist eine Verbesserung von $cond(k^*) \cdot eps$ von ungefähr 10^{20} auf 10^2 erzielt. Allik und Hughes [69] nennen $cond(k^*) \cdot eps \ll 1$ als Bedingung für eine gut konditionierte Matrix. Dieses Ziel wurde mit den verwendeten Materialparametern noch nicht erreicht, aber es ist eine deutliche Verbesserung zu verzeichnen. Die Materialparameter in Tabelle 5.1 wurden entsprechend der Versuchsergebnisse aus Kapitel 3 angepasst und unterscheiden sich insbesondere hinsichtlich der piezoelektrischen Koeffizienten.

Tabelle 5.1: Einfluss der Materialparameter auf die elektroelastische Steifigkeits- und piezoelektrische Materialmatrix

Parameter	MKS	gewichtetes MKS
E^c	1,0E+06 V/m	1,0E+03 MV/mm
P^{sat}	310E-03 C/m ²	310E-03 kN/(MVmm)
σ^c	40,0E+06 N/m ²	40,0E-03 kN/mm ²
S^{sat}	0,00225	0,00225
Y	60,0E+09 N/m ²	60,0 kN/mm ²
ν	0,37	0,37
d^{\parallel}	6,75E-10 m/V	6,75E-01 mm/MV
d^{\perp}	-3,15E-10 m/V	-3,15E-01 mm/MV
d^F	4,35E-10 m/V	4,35E-01 mm/MV
c^e	1,0E+06 Vm/C	1,0E-03 MV ² /kN
c^m	20,0E+09 N/m ²	20,0 kN/mm ²
P^{δ}	100E-03 C/m ²	100E-03 kN/(MVmm)
n	20,0E+06 N/m ²	20,0E-03 kN/mm ²
m	150E+06 N/m ²	150E-03 kN/mm ²
piezoelektrische Materialmatrix $cond(\mathbf{M})$	1,2E+19	11,9
elektroelastische Steifigkeitsmatrix $cond(k^*) \cdot eps$	8,4E+19	118

Nach dieser kurzen Beschreibung zur Verbesserung der Rechengenauigkeit, werden im Folgenden die Vergleiche der Berechnungen mit experimentellen Ergebnissen vorgestellt. In Abbildung 5.5 sind die dielektrische Hysterese und die Schmetterlingshysterese dargestellt. Die Eckpunkte der Simulationsergebnisse repräsentieren die elektrischen Fließ- und Sättigungskriterium des phänomenologischen Modells.

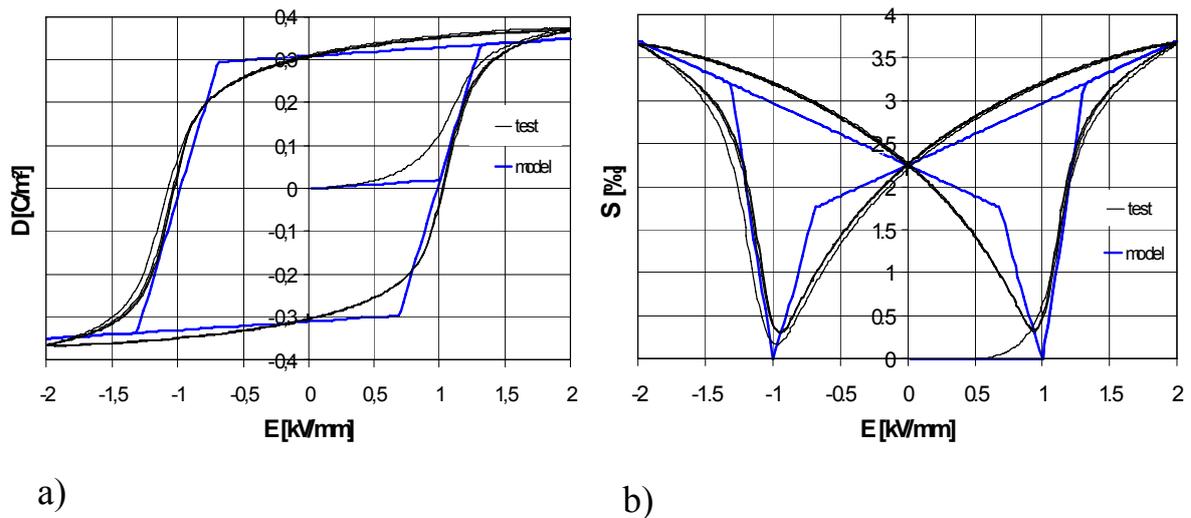


Abbildung 5.5: Vergleich der Berechnungsergebnisse mit experimentellen Ergebnissen
 a) dielektrische Hysterese
 b) Schmetterlingshysterese

In Abbildung 5.6 sind die Vergleiche der Berechnungsergebnisse mit den koaxialen elektromechanischen Experimenten dargestellt. Zusätzlich zeigen die Diagramme, dass die mechanische Depolarisationseigenschaft des Modells funktioniert. Es existiert eine vertikale Linie in der Kurve, wo die Druckspannung nach vollständiger Polung einsetzt. Die Unterschiede zwischen Berechnung und Experiment – besonders ab dem Zeitpunkt des Einsetzens der elektrischen Entlastung – können durch Zeiteffekte erklärt werden. Dies sollte näher untersucht werden, bspw. durch eine Verminderung der Belastungsgeschwindigkeit im Experiment.

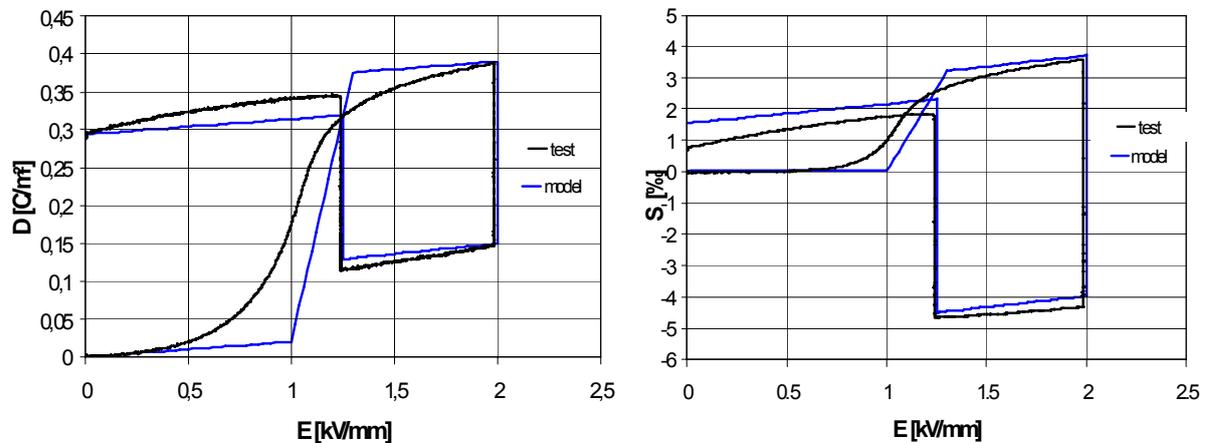


Abbildung 5.6: Vergleich der Berechnungsergebnisse mit experimentellen Ergebnissen: koaxiale, nichtproportionale elektromechanische Belastungen

5.4.2 Rotation des irreversiblen Polarisationsvektors

Ein weiterer wichtiger Aspekt des phänomenologischen Stoffgesetzes ist die Möglichkeit der Rotation des irreversiblen Polarisationsvektors. Diese Eigenschaft ist notwendig für die Simulation von Bauteilen, in denen nichtproportionale elektrische Felder im Laufe der Belastung auftreten. Um dies zu erreichen, wurden in der Lösung des Differenzialgleichungssystems (Kamlah und Böhle [5, 6, 8, 9]) Projektionsterme eingeführt. Diese Vorgehensweise ist sehr rechenzeitintensiv. In der „neuen“ Implementierung enthält der Radial-Return-Mapping-Algorithmus bereits die Projektion, weswegen in der Simulation ohne weitere Berechnungsschritte eine Rotation des irreversiblen Polarisationsvektors erzielt wird. Dies resultiert in eine schnellere Berechnungsroutine.

Ein Demonstrationsbeispiel wird in Abbildung 5.7 gezeigt. Es wurde mit der „neuen“ Implementierungsmethode berechnet.

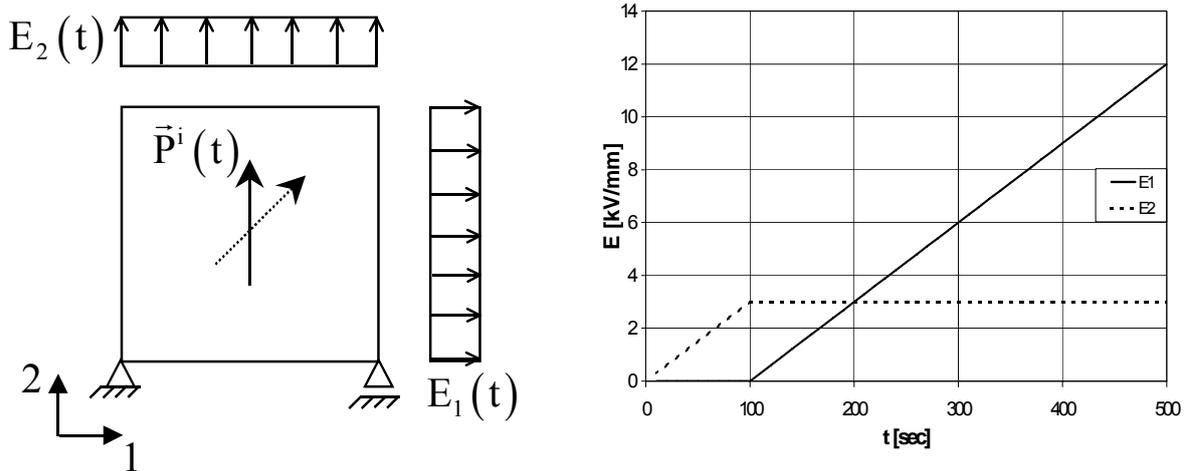


Abbildung 5.7: Demonstration der Polarisationsrotationsmöglichkeit des phänomenologischen Stoffgesetzes und der Finite-Elemente-Implementierung

Ein Element wird durch zwei elektrische Felder im ebenen Raum belastet. Zunächst wird das Element vollständig in 2-Richtung gepolt und das elektrische Feld konstant gehalten. Danach wird ein elektrisches Feld zusätzlich in 1-Richtung aufgebracht, was in eine Rotation des irreversiblen Polarisationsvektors in Richtung des zweiten elektrischen Feldes resultiert. In Abbildung 5.8 sind die Ergebnisse dargestellt.

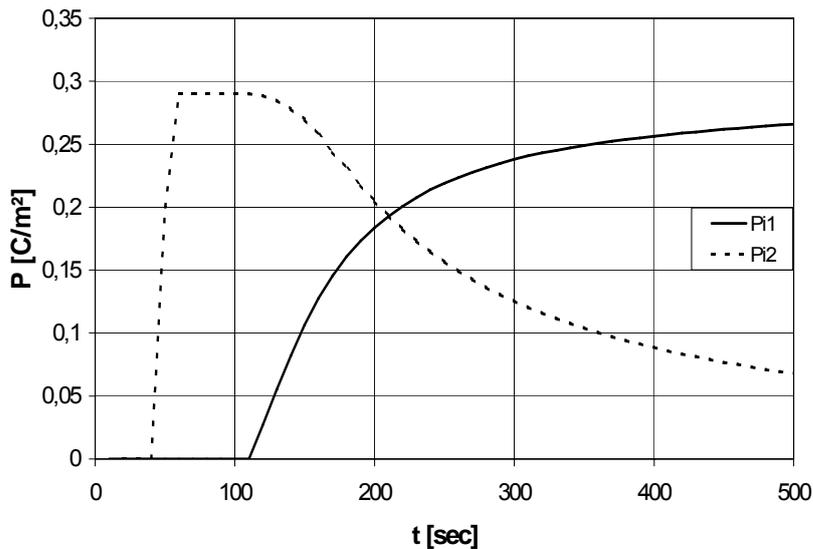


Abbildung 5.8: *Demonstration der Rotation des irreversiblen Polarisationsvektors: Berechnungsergebnisse*

Zunächst erreicht die Polarisation die Sättigungspolarisation in 2-Richtung. Während das elektrische Feld in 2-Richtung konstant gehalten wird, erzwingt das elektrische Feld in 1-Richtung eine Reduzierung der irreversiblen Polarisation in 2-Richtung und eine Entwicklung in 1-Richtung beginnt. Addiert man beide Polarisationsanteile vektoriell, so bleibt die Sättigungspolarisation als Resultierende vorhanden.

Böhle [5] untersuchte ebenfalls die Rotation der Polarisation mit der zuvor genannten Projektionsmethode der irreversiblen Polarisation und seine Ergebnisse sind identisch mit den hier vorgestellten in Abbildung 5.8. Verglichen mit den Ergebnissen von Shieh et al. [42], die die Polarisationsrotation für verschiedene Materialien untersuchten, findet sich eine gute Übereinstimmung in der Gestalt der berechneten und gemessenen Kurven.

5.5 Simulationsbeispiel: Stapelaktor

Um die Fähigkeit des vorgestellten Finite-Elemente-Werkzeuges zu demonstrieren, wird im Folgenden ein Simulationsbeispiel präsentiert (siehe Abbildung 5.9). Dabei handelt es sich um einen Polungsprozess eines Stapelaktors, der aus vielen dünnen Schichten mit innenliegenden Elektroden besteht. Böhle [5] berechnete ebenfalls einen Stapelaktor, aber mit weitaus weniger Elementen. Trotzdem kam er im Großen und Ganzen auf die gleichen Schlussfolgerungen, wie sie im Folgenden in dieser Arbeit dargestellt werden.

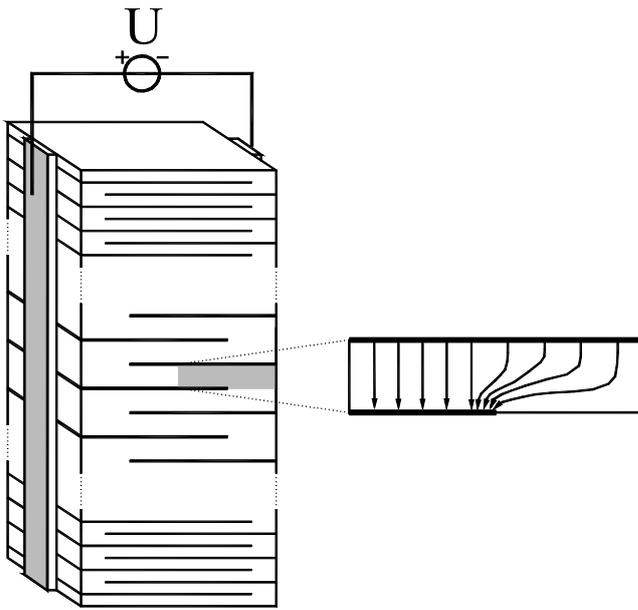


Abbildung 5.9: Vereinfachte Skizze eines Stapelaktors

Mit einem Stapelaktuator können große Verformungen mit relativ niedrigen elektrischen Spannungen erreicht werden. Das reduziert die Gefahr des elektrischen Durchschlags und es wird keine Hochspannungsquelle benötigt. Die innenliegenden Elektroden enden an einer Seite in einem gewissen Abstand von den Längsseiten des Aktors, um entgegengerichtete Polungen auf den beiden Seiten des Aktors zu erzielen. Ansonsten entstünde ein Kurzschluss und der Aktor könnte nicht gepolt werden. Mit dieser Herstellungsmethode werden lediglich zwei Hauptelektroden benötigt, um eine Versorgung der inneren Elektroden zu bewerkstelligen. Stapelaktoren werden bspw. in Dieseleinspritzventilen oder als Stellglieder (z.B. optische Teleskope) verwendet, da sie sehr kurze Antwortzeiten haben und eine sehr genaue Positionierung ermöglichen.

Im Finite-Elemente-Modell wurde, um Rechenzeit zu sparen, eine halbe piezokeramische Schicht modelliert (vgl. Abbildung 5.9). Das zu erwartende elektrische Feld wurde qualitativ in den Ausschnitt eingezeichnet. Das Modell ist $1000\ \mu\text{m}$ breit und $50\ \mu\text{m}$ hoch. Die Finite-Elemente-Diskretisierung ist in Abbildung 5.10 dargestellt und besitzt folgende Randbedingungen: Die horizontalen Verschiebungen auf der linken Seite und die vertikalen Verschiebungen am unteren Ende werden unterdrückt und auf der oberen Seite sind alle Knoten in vertikaler Richtung gekoppelt, um intakte Verbindungen der Schichten des Aktors zu gewährleisten. Das elektrische Potenzial ist gleich Null an der oberen Elektrode, die sich über die gesamte Breite des Ausschnittes erstreckt, während die untere Elekt-

rode eine Belastungsgeschichte wie in Abbildung 5.11 gezeigt wird, besitzt. Wie man schon aus Abbildung 5.9 erkennen kann, ist die untere Elektrode nicht durchgängig und endet in 200 μm Abstand vom rechten Rand des Modells. Die Anzahl der 4-Knoten-Elemente (ebener Dehnungszustand) ist ungefähr 1000 und die Anzahl der Knoten beträgt etwa 1100.

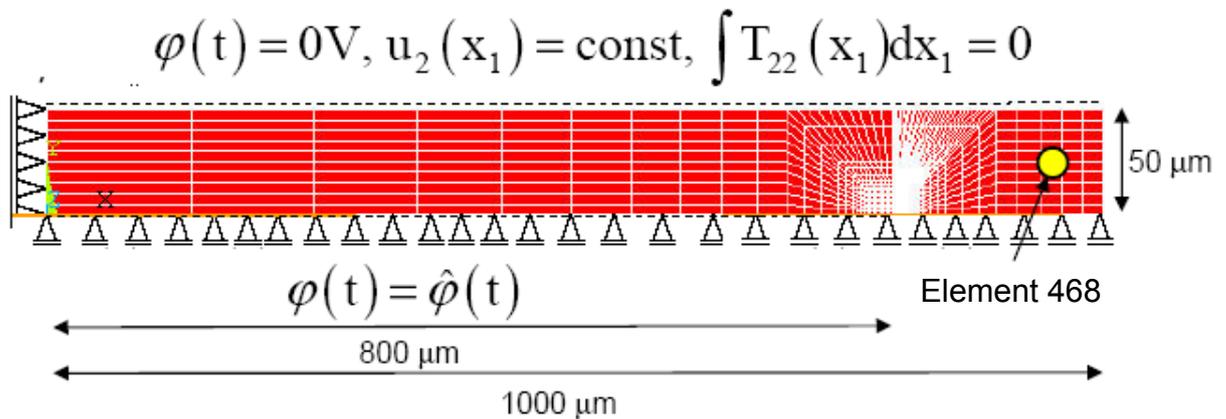


Abbildung 5.10: Finite-Elemente-Diskretisierung eines Ausschnittes aus einer Schicht eines Stapelaktors

Die elektrische Belastung verläuft linear und das maximal aufgebrachte, elektrische Potenzial beträgt 150 V. Danach wird der Aktor wieder entlastet. Das zugehörige elektrische Feld beträgt 3 kV/mm.

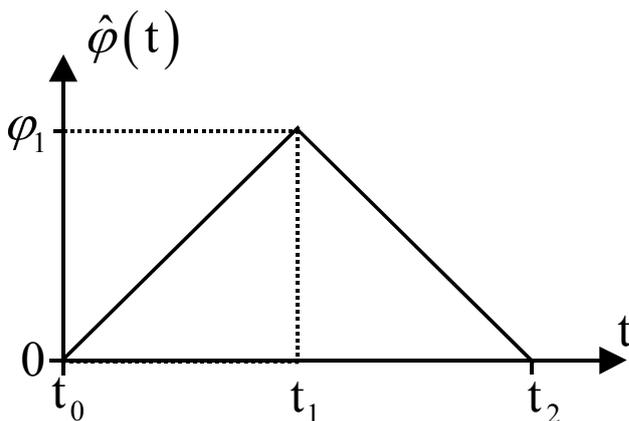


Abbildung 5.11: Belastungsgeschichte der Simulation des Polungsprozesses eines Stapelaktors

Abbildung 5.12 zeigt Simulationsergebnisse für die Verteilung des elektrischen Potenzials um den Unterschied einer linearen, piezoelektrischen Berechnung mit dem phänomenologischen Stoffgesetz und seiner Finite-Elemente-Implementierung zu verdeutlichen. Der

Hauptunterschied zwischen diesen beiden Berechnungsvarianten besteht darin, dass die lineare, piezoelektrische Simulation von einem angenommenen anfänglichen Polungszustand - gleichmäßig über das Modell hin verteilt - ausgeht, während im phänomenologischen Stoffgesetz die entsprechende Polarisation und ihre Verteilung berechnet wird. Daraus folgt, dass im Anfangszustand die Polarisation in diesem Fall gleich Null ist. Die Verteilung des elektrischen Potentials wird bei maximaler Belastung (siehe Abbildung 5.12 a), b)) und nach Entlastung (siehe Abbildung 5.12 c)) gezeigt.

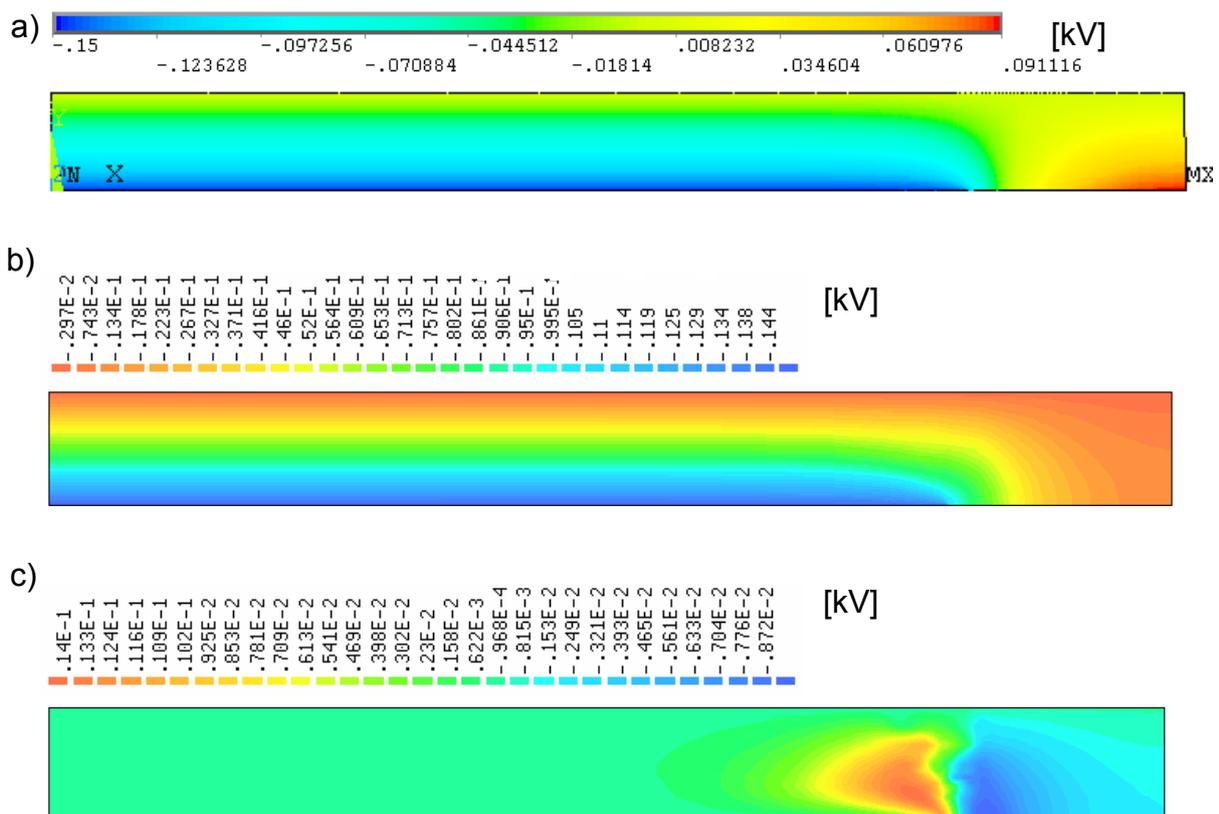


Abbildung 5.12: Verteilung des elektrischen Potentials in einem Teil einer Schicht eines Stapelaktors:

- a) lineare, piezoelektrische Simulation bei maximalem elektrischen Potential
- b) nichtlineare, ferroelektrische Simulation bei maximalem elektrischen Potential
- c) nichtlineare, ferroelektrische Simulation nach Entlastung

In der linearen, piezoelektrischen Simulation, die mit ANSYS® durchgeführt wurde, wird ein homogener Polungszustand in der vertikalen Richtung angenommen. Deswegen ergibt sich eine Polarisation auf der rechten Seite des Modells und die Piezomoduli sind nicht gleich Null.

Im Gegensatz dazu wird im Fall der nichtlinearen, ferroelektrischen Simulation der Polungszustand berechnet und nicht angenommen. Das elektrische Potenzial ist beinahe gleich Null in der zuvor angesprochenen Region auf der rechten Seite des Modells, wo keine untere Elektrode vorhanden ist. Das bedeutet, dass sich dort keine irreversible Polarisation entwickelt und die Piezomoduli gleich Null sind. Deswegen kann sich an dieser Stelle kein elektrisches Potenzial einstellen. In Abbildung 5.12 c), nachdem das ferroelektrische Modell entlastet wurde, verbleibt ein elektrisches Potenzial in der Nähe der Elektrodenspitze, was durch die Divergenz des irreversiblen Polarisationsvektors erklärt werden kann. Dies wird im Folgenden beschrieben.

Abbildung 5.13 zeigt die Vektoren der irreversiblen Polarisation bei maximaler Belastung (Abbildung 5.13 a)), nach Entlastung (Abbildung 5.13 b)) und eine Vergrößerung im Bereich der Elektrodenspitze bei maximaler Belastung (Abbildung 5.13 c)).

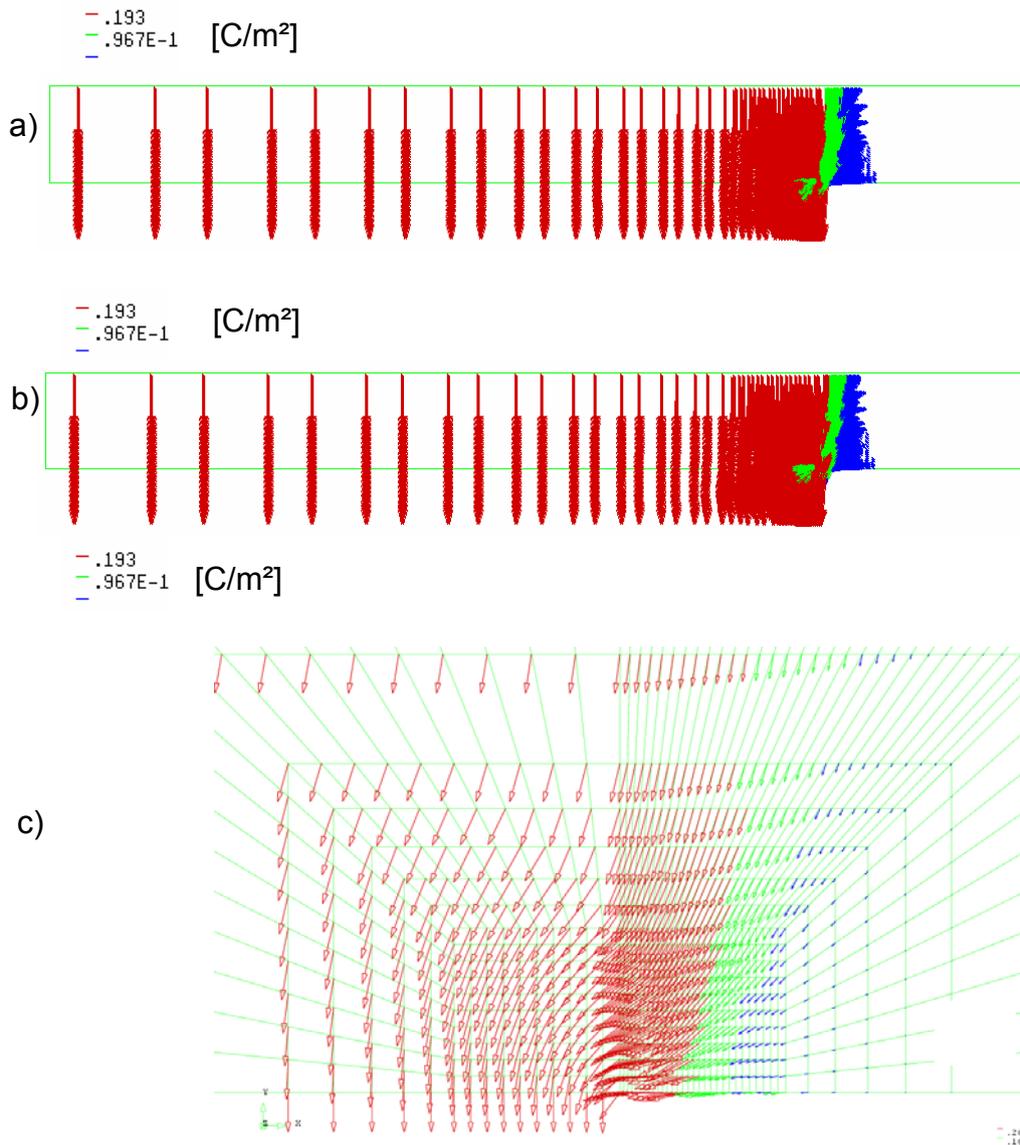


Abbildung 5.13: Darstellung der Vektoren der irreversiblen Polarisation eines Ausschnittes aus einer Schicht eines Stapelaktors:
 a) bei maximalem elektrischen Potenzial
 b) nach Entlastung
 c) Vergrößerung im Bereich der Elektrodenspitze bei maximalem elektrischen Potenzial

Drei unterschiedliche Bereiche der Polarisationsverteilung können ausgemacht werden: Die linke Seite, wo vollständige, homogene Polarisation erreicht wurde, die rechte Seite, wo sich keine Polarisation entwickeln konnte und die Region um die Elektrodenspitze, wo die Polarisation inhomogen ist. Dort ist die Divergenz der Polarisation ungleich Null ($\text{div} \vec{P}^i \neq 0$). Das kann gezeigt werden, indem man den Spannungstensor mit $\mathbf{T} = 0$ und das Gaußsche Gesetz $\text{div} \vec{D} = 0$ in Betracht zieht. Berücksichtigt man das nicht ver-

schwindende elektrische Feld an der Elektrodenspitze und Gleichungen 5.9 und 5.11 kann die Divergenz der irreversiblen Polarisation mit

$$(\varepsilon_0 \mathbb{1} + \epsilon) \operatorname{div} \vec{E} = -\operatorname{div} \vec{P}^i \quad (5.31)$$

berechnet werden. Dies resultiert in das beobachtete Depolarisationsfeld. Offensichtlich führt eine Divergenz des elektrischen Feldes zur Divergenz der irreversiblen Polarisation, die wiederum zu dem elektrischen Potenzial im Bereich der Elektrodenspitze führt (vgl. Abbildung 5.12 c)).

Abbildung 5.14 zeigt die Verteilung der mechanischen Spannung an der unteren Seite des Modells zum Zeitpunkt der maximalen Belastung und nach Entlastung.

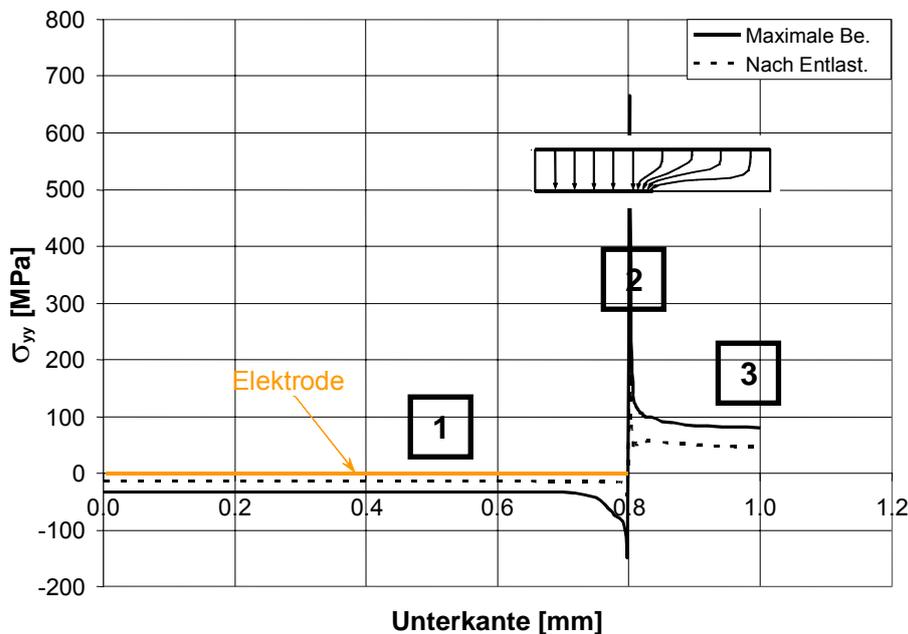


Abbildung 5.14: Spannungsverteilung normal zur Unterkante des Finite-Elemente-Modells eines Stapelaktors bei maximalem elektrischen Potenzial und nach Entlastung

Entlang der unteren Elektrode ist eine Druckspannung zu beobachten, die gegen Null bei einer größeren Länge der Elektrode gehen würde. An der Elektrodenspitze ist eine Spannungsüberhöhung vorhanden. Was aber wichtiger ist, dass sich die Höhe der Zugspannung in der ungepolten Region selbst nach Entlastung im Bereich von 40 MPa bewegt. Das ist im Bereich der Zugfestigkeit des Materials und kann zu Rissen, während das Bauteil gepolt wird, führen. Des Weiteren ist nach dem Polen im Betrieb eine zyklische Belastung vorhanden, welche die Gefahr eines Ermüdungsversagens aufgrund der inhomogenen

Verteilung des elektrischen Feldes in der elektrodenfreien Region erhöht. In der Praxis werden Aktoren im Betrieb vorgespannt, um Risse zu verhindern. Durch die Nutzung des vorgestellten Finite-Elemente-Werkzeuges besteht die Möglichkeit, die Größe der Vorspannkraft zu bestimmen und die Geometrie des Bauteils zu optimieren. Aber - bedingt durch die Vorspannkraft - kann mechanische Depolarisation einsetzen. Dieser Effekt muss minimiert werden, um ein gut funktionierendes Bauteil zu gewährleisten. Auf der anderen Seite gibt es aber die Zugspannung, die auch mittels einer Vorspannkraft minimiert werden muss. Ein Optimum zwischen minimaler Depolarisation und minimaler Zugspannung muss gefunden werden.

Abbildung 5.15 zeigt die mechanische Spannung über der Dehnung in vertikaler Richtung über den Belastungszeitraum hinweg. Das Diagramm bezieht sich auf die Region auf der rechten Seite des Modells, wo keine Polarisation aber eine Zugspannung zu verzeichnen ist. Der genaue Ort des betrachteten Elements kann Abbildung 5.10 entnommen werden.

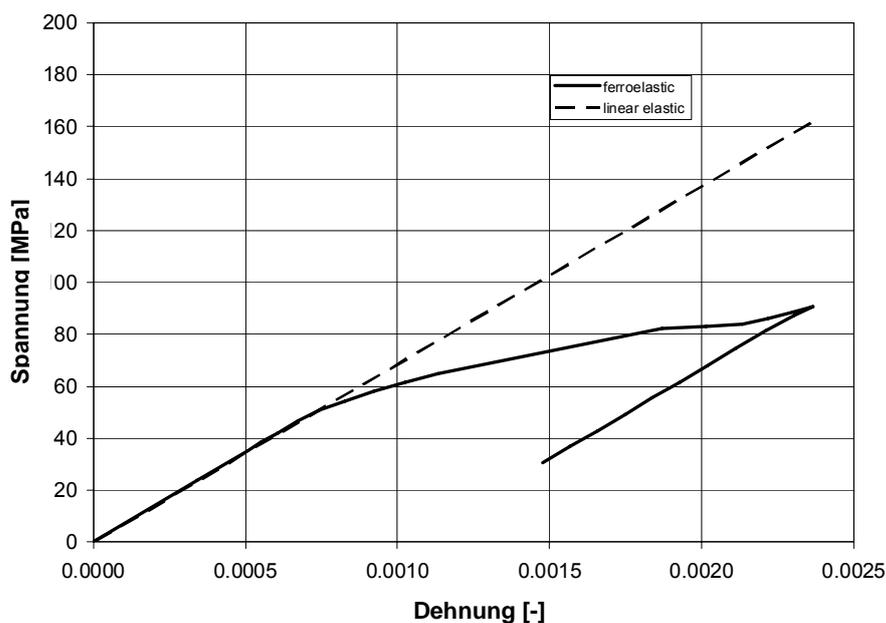


Abbildung 5.15: *Mechanische Spannung über Dehnung in vertikaler Richtung für ein Element in der ungepolten Region auf der rechten Seite des Modells*

Die Simulation ist verschiebungsgesteuert. Am Beginn ist ein linear elastisches Materialverhalten zu beobachten, bis eine kritische Zugspannung von ungefähr 50 MPa erreicht wird. Danach ist irreversibles Verhalten zu beobachten. Die Initiierung ferroelastischer Prozesse liegt dagegen bei 40 MPa. Ein Grund für das spätere Einsetzen ist der mehrachsige Spannungszustand in dieser Region. Ein Vergleich mit einer linear elastischen Simu-

lation zeigt, dass die Zugspannungen im ferroelektrischen Fall signifikant niedriger sind. In der linear elastischen Berechnung werden mehr als 160 MPa erreicht. Aufgrund ferroelektrischer Eigenschaften werden aber in der vorgestellten Simulation lediglich ungefähr 90 MPa erreicht. Während der linear elastischen Entlastungsphase gehen die Spannungen auf 30 MPa zurück. Die linear elastische Simulation liefert in diesem Fall noch 100 MPa. Diese Diskussion zeigt, dass es wichtig ist, ferroelastisches Verhalten zu berücksichtigen, was z. B. im Modell von McMeeking und Landis [45] nicht der Fall ist.

5.6 Folgerungen aus der Verifizierung

Die Verifizierung der Finite-Elemente-Implementation des phänomenologischen Stoffgesetzes zeigt die Fähigkeiten und Grenzen in der Beschreibung piezokeramischen Materialverhaltens und für Simulationen von piezokeramischen Bauteilen.

Zunächst zeigte der Vergleich mit experimentell gewonnenen Daten aus rein elektrischen Belastungen mit Finite-Elemente-Berechnungen auf der Grundlage des phänomenologischen Modells, dass die Differenzialgleichungen des Modells hinreichend genau gelöst mittels einer Finite-Elemente-Implementierung auf der Basis eines Radial-Return-Mapping-Algorithmus werden.

Weitergehend zeigten die Simulationen von koaxialen, nichtproportionalen elektromechanischen Experimenten, dass das Stoffgesetz die Materialantwort in den Experimenten, wie z.B. die Koerzitivfeldstärke, die Sättigungsdehnung und das mechanische Depolarisationsverhalten wie auch die Rotation des Polarisationsvektors gut repräsentiert.

Ein Simulationsbeispiel an einem Stapelaktor bestätigte die Anwendbarkeit des Finite-Elemente-Werkzeuges auf die Simulation von Polungsprozessen in piezokeramischen Bauteilen mit inhomogenen elektrischen und mechanischen Feldern. Ein Vergleich mit einer linearen, piezoelektrischen mit der nichtlinearen, ferroelektrischen Simulation offenbarte die Notwendigkeit ein nichtlineares, konstitutives Stoffgesetz zu verwenden. Die ferroelastische Simulation zeigte die Divergenz der irreversiblen Polarisation an der Elektrodenpitze und dessen Rotation und bleibende mechanische Spannungen nach Entlastung, die zu Rissen führen können und in der Herstellung solcher Bauteile Berücksichtigung finden sollten.

Im Folgenden werden zwei Anwendungsbeispiele mit Problemstellungen, wie sie in der Laborpraxis bei der Untersuchung des Verhaltens piezokeramischer Bauteile auftreten können, vorgestellt. Damit soll abschließend für das phänomenologische Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung die praktische Einsetzbarkeit demonstriert werden.

5.7 Anwendungsbeispiel: Untersuchung des nichtlinearen Verhaltens piezokeramischer Zylinder

Im Folgenden soll ein weiteres Beispiel vorgestellt werden, das die Möglichkeiten des phänomenologischen Modells und dessen „neue“ Finite-Elemente-Implementierung bei der Anwendung auf ein komplexes, kontinuumsmechanisches Problem aufzeigt. Dazu wird dieses Beispiel ausführlich diskutiert.

In der Kontinuumsmechanik werden dünnwandige Zylinder oft eingesetzt, um mehrachsige Spannungszustände zu untersuchen („dünnwandig“ bedeutet dabei, Verhältnisse der Wandstärke zum Radius des Zylinders von 1:10 oder kleiner). In diesem Unterkapitel wird die Anwendbarkeit von piezokeramischen Hohlzylindern (im Bereich von dickwandigen bis dünnwandigen Zylindern) auf die Erforschung von elektromechanischen Belastungsgeschichten mit mehrachsigen Spannungszuständen untersucht. Hierbei sei zusätzlich auf die Veröffentlichung Laskewitz et al. [72] verwiesen.

Analytische Untersuchungen geben einen ersten Hinweis auf nichtlineare Verteilungen des elektrischen Potentials und daraus resultierend auf ein inhomogenes elektrisches Feld. Diese Ergebnisse motivieren eine tiefer gehende Analyse mit der Hilfe von Finite-Elemente-Berechnungen, die ferroelektrisches und ferroelastisches Materialverhalten berücksichtigen. Das phänomenologische Stoffgesetz und die vorgestellte Finite-Elemente-Implementierung wurden verwendet, um den Polungsprozess in radiale Richtung mit einer mechanischen Spannung in axialer Richtung zu simulieren.

Die Ergebnisse bestätigen inhomogene Verteilungen der elektrischen Felder und mechanischen Spannungen während des und nach dem Polen. Dieses Verhalten begrenzt die Anwendbarkeit piezokeramischer Zylinder auf die Untersuchung des mehrachsigen, elektro-

mechanischen Verhaltens von Piezokeramiken. Im Folgenden wird auch eine Geometrievariation diskutiert, um die zuvor genannten Effekte zu minimieren.

5.7.1 Linear dielektrische Kreisringplatte

Um das prinzipielle Verhalten piezokeramischer Zylinder zu demonstrieren, wird eine Kreisringplatte, wie in Abbildung 5.16 gezeigt, mit linear dielektrischen Eigenschaften als erster Schritt untersucht.

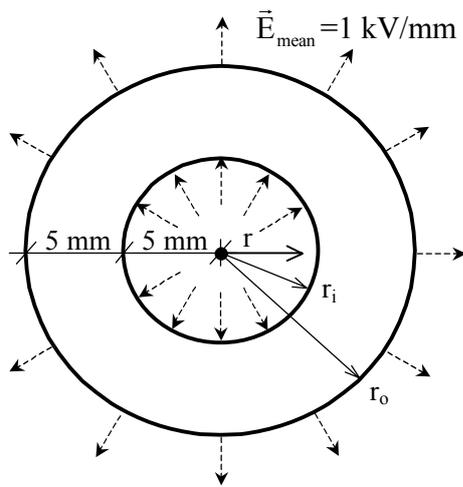


Abbildung 5.16: Linear dielektrische Kreisringplatte

In Analogie zum Querschnitt eines Zylinders wird angenommen, dass die elektrische Belastung in radiale Richtung aufgebracht wird. Die Laplacegleichung des elektrischen Potentials lautet

$$\nabla^2 \varphi = 0. \quad (5.32)$$

Ausgedrückt in Polarkoordinaten und mit der Annahme radialer Symmetrie führt die Gleichung auf

$$\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} = 0. \quad (5.33)$$

Die allgemeine Lösung lautet

$$\varphi = C_1 + C_2 \ln r \quad (5.34)$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned}\varphi(r_i) &= 0 \\ \varphi(r_o) &= U\end{aligned}\tag{5.35}$$

worin U die elektrische Spannung an der Außenseite ist. Dies führt zur Lösung

$$\varphi = \frac{U}{\ln r_o - \ln r_i} (\ln r - \ln r_i).\tag{5.36}$$

Damit ist das elektrische Potenzial eine logarithmische Funktion des Radius und hängt von der Krümmung über r_o / r_i ab.

Das elektrische Feld ist gegeben durch

$$E = -\text{grad}\varphi = -\frac{U}{r(\ln r_o - \ln r_i)}.\tag{5.37}$$

Um den Einfluss der Krümmung zu illustrieren, wird der Kreisring in Abbildung 5.16 mit unterschiedlichen Verhältnissen r_o / r_i (2, 1,5, 1,2 und 1,1) betrachtet. Das elektrische Potenzial auf der Innenseite beträgt 0 kV und auf der Außenseite 5 kV. Abbildung 5.17 zeigt dimensionslose Diagramme des elektrischen Potenzials und des elektrischen Feldes über $(r - r_i) / (r_o - r_i)$.

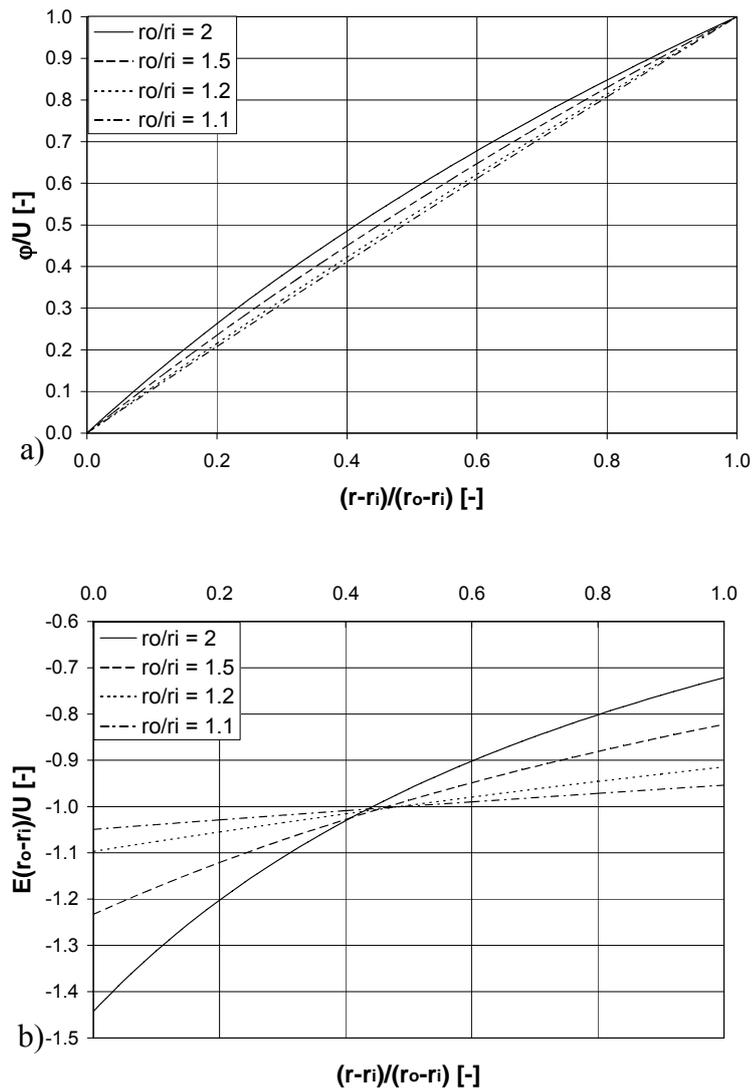


Abbildung 5.17: (a) Elektrisches Potenzial und (b) elektrisches Feld über verschiedene $(r - r_i)/(r_o - r_i)$ einer linear dielektrischen Kreisringplatte

Die Lösung zeigt, dass die Verteilung des elektrischen Potenzials nichtlinear innerhalb der Platte ist. Als Konsequenz daraus ist die Verteilung des elektrischen Feldes inhomogen. Mit einem sinkenden Verhältnis r_o/r_i wird die Verteilung des elektrischen Potenzials linearer und die Verteilung des elektrischen Feldes konstanter. Aufgrund dieser Voruntersuchungen werden inhomogene elektromechanische Zustände innerhalb von Hohlzylindern erwartet, was im Folgenden näher betrachtet wird.

5.7.2 Untersuchungen an piezokeramischen Hohlzylindern

Motiviert von den oben angegebenen Beobachtungen, wurden detaillierte Analysen von piezokeramischen Hohlzylindern mit der Hilfe von Finite-Elemente-Simulationen durchgeführt. Dafür wurde das weiter oben eingeführte Finite-Elemente-Werkzeug auf der Basis des phänomenologischen Materialmodells verwendet.

Geometrien der Hohlzylinder und deren Finite-Elemente-Modelle

Abbildung 5.18 zeigt die analysierte Zylindergeometrie. Im gleichen Bild ist das axial-symmetrische Finite-Elemente-Modell dargestellt. Aus Symmetriegründen wurde lediglich die obere Hälfte des Zylinders modelliert. Die Anzahl der Elemente betrug im Modell ca. 2500 bei 2600 Knoten. Die Belastungsgeschichte ist ebenfalls abgebildet. Zu Anfang wurde ein Polungsprozess des Zylinders in radiale Richtung simuliert. Nach elektrischer Entlastung wurde eine mechanische Zugspannung in axiale Richtung aufgebracht.

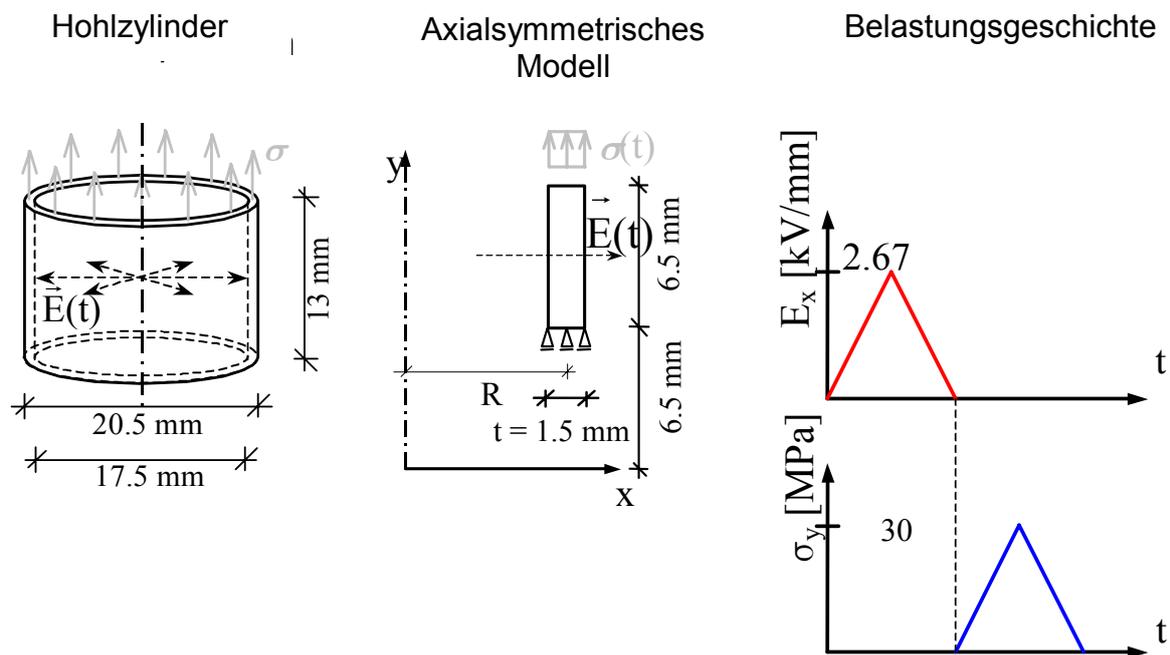


Abbildung 5.18: Piezokeramischer Hohlzylinder, Finite-Elemente-Modell und Belastungsgeschichte

Die Materialparameter sind ähnlich zu dem Weich-PZT, der in den weiter oben vorgestellten Experimenten verwendet wurde, und sind in Tabelle 5.2 aufgeführt.

Tabelle 5.2: *Materialparameter für die Simulationen*

E-Modul Y [GPa]	60,0
Poissonsche Zahl ν [-]	0,396
Koerzitivspannung σ_c [MPa]	40,0
Sättigungsdehnung ε_{sat} [-]	0,002
Koerzitivfeldstärke E_c [kV/mm]	1,0
Sättigungspolarisation [C/m ²]	0,29
Piezomodul d_{33} [m/V]	0,45e-9
Piezomodul d_{31} [m/V]	-0,21e-9
Piezomodul d_{15} [m/V]	0,58e-9

Simulationsergebnisse

Zunächst werden in Abbildung 5.19 das undeformierte und das deformierte Netz des Finite-Elemente-Modells bei maximaler Belastung gezeigt. Am Ende des Zylinders ist zu erkennen, dass die vertikale Verschiebung an der Außenseite größer ist als an der Innenseite. Deswegen wird die Zylinderwand in Richtung der Symmetrieachse des Zylinders gebogen. Dadurch ergibt sich kein homogener Zustand der Zylinder während und nach dem Polen in radialer Richtung. Das bedeutet, dass von einem Experiment, in dem globale Werte wie Verschiebungen usw. gemessen werden, kaum lokale Werte wie die Dehnung erhalten werden. Eine detaillierte Diskussion dieses inhomogenen Zustandes wird im Folgenden durchgeführt.

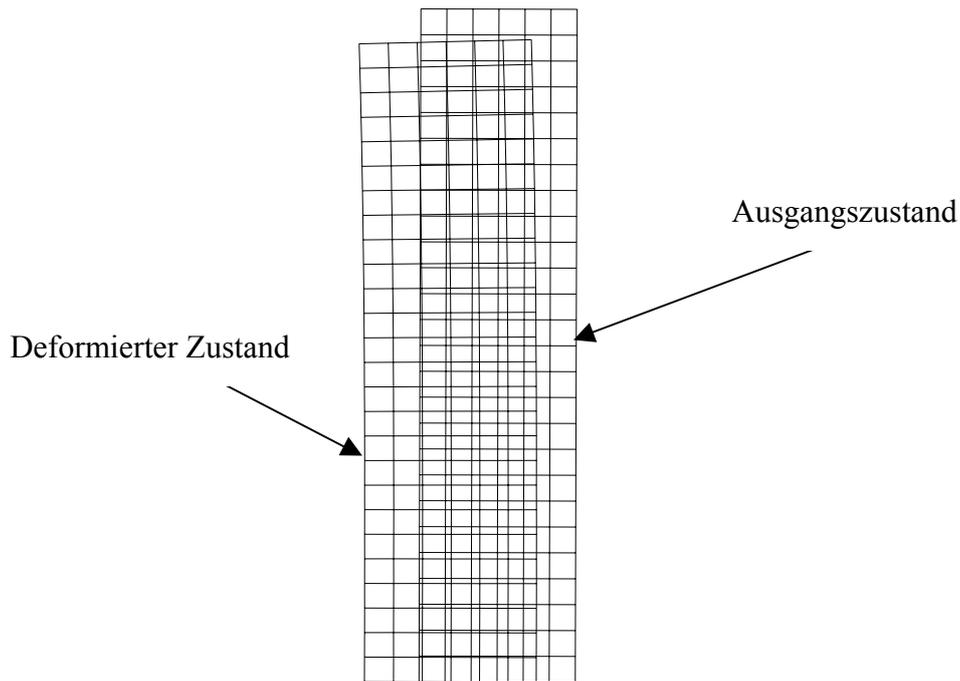


Abbildung 5.19: *Undeformiertes und deformiertes Finite-Elemente-Netz bei maximalem elektrischem Potenzial: Skalierungsfaktor 30:1 (aus Übersichtlichkeitsgründen gröbere Vernetzung als in den Simulationen gewählt)*

Die Verteilungen des elektrischen Potenzials und des elektrischen Feldes für verschiedene Belastungsschritte über der Wanddicke sind in Abbildung 5.20 dargestellt. Die Kurven sind entlang der Symmetrielinie am unteren Ende des Modells aufgetragen.

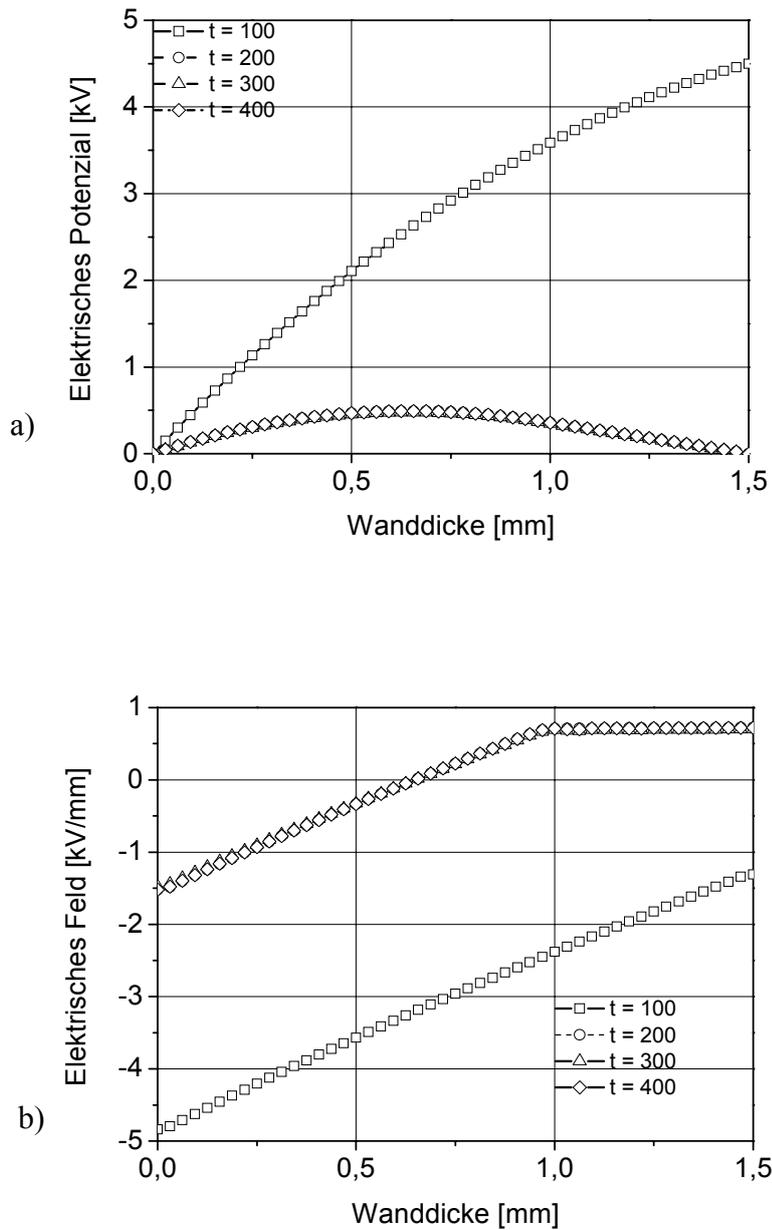


Abbildung 5.20: (a) *Elektrisches Potenzial* und (b) *elektrisches Feld* über der *Wanddicke* für verschiedene *Lastschritte*: *Schritt 100*: bei *maximaler Belastung*, *Schritt 200*: *unbelastet*, *Schritt 300*: bei *maximaler Zugspannung*, *Schritt 400*: *elektrisch und mechanisch entlastet*

Ähnliche Effekte wie bei den linear dielektrischen Berechnungen können beobachtet werden. Bei dem maximalen elektrischen Potenzial kann eine nichtlineare Verteilung des elektrischen Potenzials festgestellt werden, ähnlich zu den linear dielektrischen Ergebnissen. Deswegen ist die Verteilung des elektrischen Feldes nichtkonstant bzw. inhomogen. Auf der Innenseite beträgt es ungefähr -5 kV/mm und auf der Außenseite ungefähr

1,3 kV/mm, was höher als die Koerzitivfeldstärke von 1.0 kV/mm ist. Betrachtet man die Verteilung des elektrischen Feldes, so ist offensichtlich, dass die aufgebrachte Spannung von 4,5 kV gerade hoch genug ist, um ein elektrisches Feld höher als die Koerzitivfeldstärke überall im Zylinder zu gewährleisten. Für diese Spannung beträgt das elektrische Feld im Mittel 3 kV/mm.

Nach elektrischer Entlastung verbleibt ein nicht verschwindendes elektrisches Potenzial innerhalb der Zylinderwand. Für diesen Fall beträgt die maximale Spannung nahezu 500 V, was vergleichsweise hoch ist. Auf den Oberflächen ist das elektrische Potenzial gleich Null. Aufgrund des verbleibenden, nichtlinearen elektrischen Potenzials nach Entlastung kann ebenso ein elektrisches Feld innerhalb des Zylinders beobachtet werden. Das elektrische Feld ist bis auf den Bereich nahe der Außenwand gegenüber dem Zustand bei maximalem elektrischem Potenzial parallel verschoben. In diesem Außenwandbereich ist es nahezu konstant bei einem Wert von +0,7 kV/mm. An der Innenwand beträgt es ungefähr -1,5 kV/mm.

Das Aufbringen der Zugspannung und die endgültige Entlastung verändern die Kurvenverläufe nicht signifikant.

In Abbildung 5.21 sind die mechanischen Spannungsverteilungen in axiale und Umfangsrichtung über der Wanddicke für verschiedene Lastschritte aufgetragen. Da durch den verwendeten Postprozessor Extrapolationsprobleme an den Punkten an der Innen- bzw. Außenwand auftraten, wurden diese auf der Basis der Gaußpunkte am Rande linear extrapoliert.

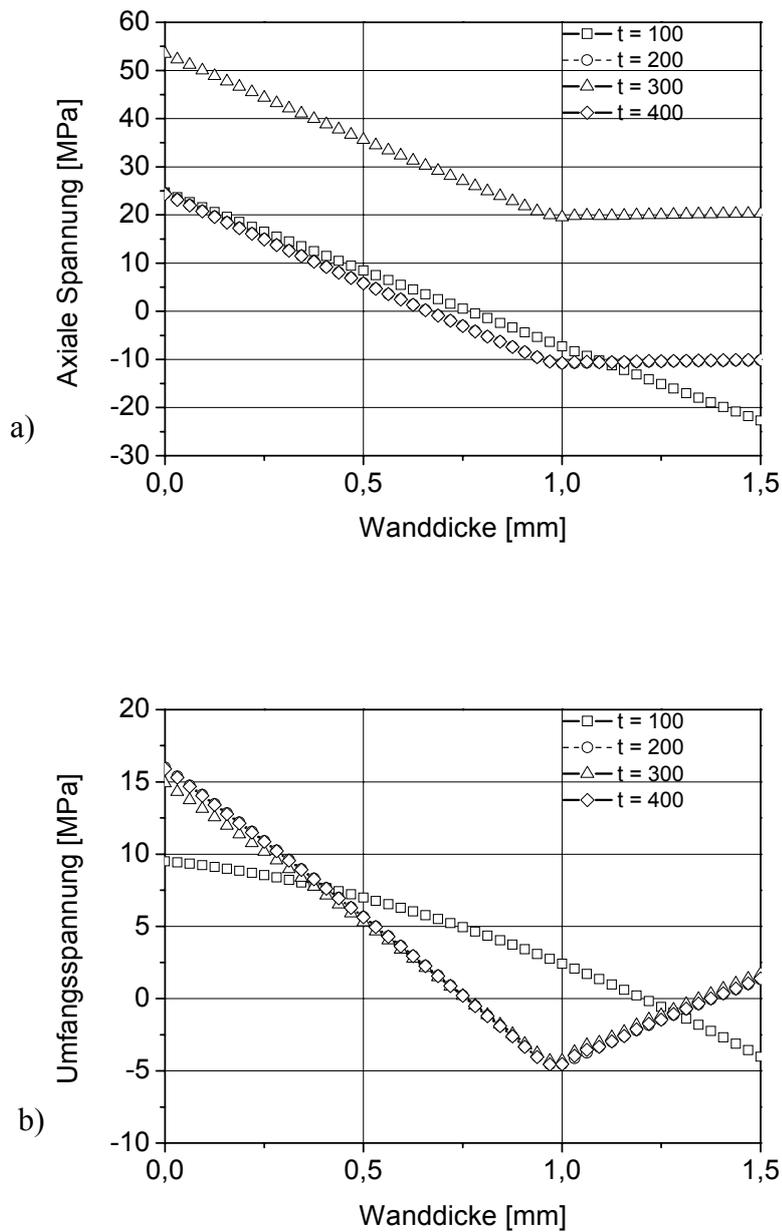


Abbildung 5.21: (a) Axialspannung und (b) Umfangsspannung Feld über der Wanddicke für verschiedene Lastschritte: Schritt 100: bei maximaler Belastung, Schritt 200: unbelastet, Schritt 300: bei maximaler Zugspannung, Schritt 400: elektrisch und mechanisch entlastet

Betrachtet man den Zustand bei maximaler elektrischer Spannung, ist die Verteilung der Axialspannung nahezu linear. Auf der Innenseite kann man eine Zugspannung und auf der Außenseite eine Druckspannung verzeichnen. Die maximalen und minimalen Werte sind signifikant hoch bei ungefähr ± 25 MPa. Die Zugspannung ist im Bereich der Zugfestigkeit von PZT und könnte zu Rissen führen.

Nach elektrischer Entlastung verbleiben Axialspannungen. Auf der Innenseite ist nahezu kein Unterschied zu den Werten bei maximaler elektrischer Spannung auszumachen. Im Bereich nahe der Außenfläche sind reduzierte Spannungen bis ungefähr -10 MPa zu beobachten. Diese sind in Analogie zum elektrischen Feld nahezu konstant. Mit dem Aufbringen der Zugspannung wird die Kurve parallel verschoben.

Das Diagramm der Umfangsspannung über der Wanddicke zeigt ebenfalls signifikante Spannungswerte. Auf der Innenseite können Zugspannungen von ungefähr 10 MPa und auf der Außenseite Druckspannungen von ungefähr -4 MPa beobachtet werden, deren Verteilungen ebenfalls nichtlinear sind.

Nach elektrischer Entlastung ändert sich die Form der Kurve signifikant. Auf der Innenseite steigern sich die Zugspannungen bis ca. 17 MPa. Ausgenommen den Bereich nahe zur äußeren Wand ist die Verteilung nahezu linear. Dort ändert die Spannung auch ihr Vorzeichen (von Druck nach Zug), bei der Annäherung an die Außenseite. Das Aufbringen der Zugspannung ändert ebenfalls nicht signifikant die Umfangsspannungen.

Wie zu erwarten war, sind die Spannungen in radialer Richtung ungefähr gleich Null und aus diesem Grund auch nicht dargestellt.

Betrachtet man das elektrische Feld in Abbildung 5.20 b) zum Zeitpunkt $t = 100$, ist es offensichtlich, dass die Koerzitivfeldstärke auf der Innenseite früher erreicht wird als auf der Außenseite. Das führt zu Domänenumklappvorgängen in radiale Richtung auf der Innenseite, während auf der Außenseite die Koerzitivfeldstärke noch nicht erreicht wird. Aufgrund dessen führt die größere Verkürzung in vertikaler Richtung auf der Innenseite, verglichen zu der auf der Außenseite, zu Druckspannungen in axialer Richtung auf der Innenseite.

Die gleichen Erklärungen treffen auch auf die Verteilungen der Umfangsspannungen zu. Aufgrund der Umklappvorgänge in radiale Richtung auf der Innenseite, wird der Perimeter des Zylinders verglichen zur Außenseite auf der Innenseite kleiner. Dies führt wiederum zu Zugspannungen in Umfangsrichtung auf der Innenseite. Druckspannungen in Umfangsrichtung auf der Außenseite müssen sich aufgrund des Gleichgewichts entwickeln.

Abbildung 5.22 zeugt die irreversible Polarisation über der Wanddicke für verschiedene Lastschritte.

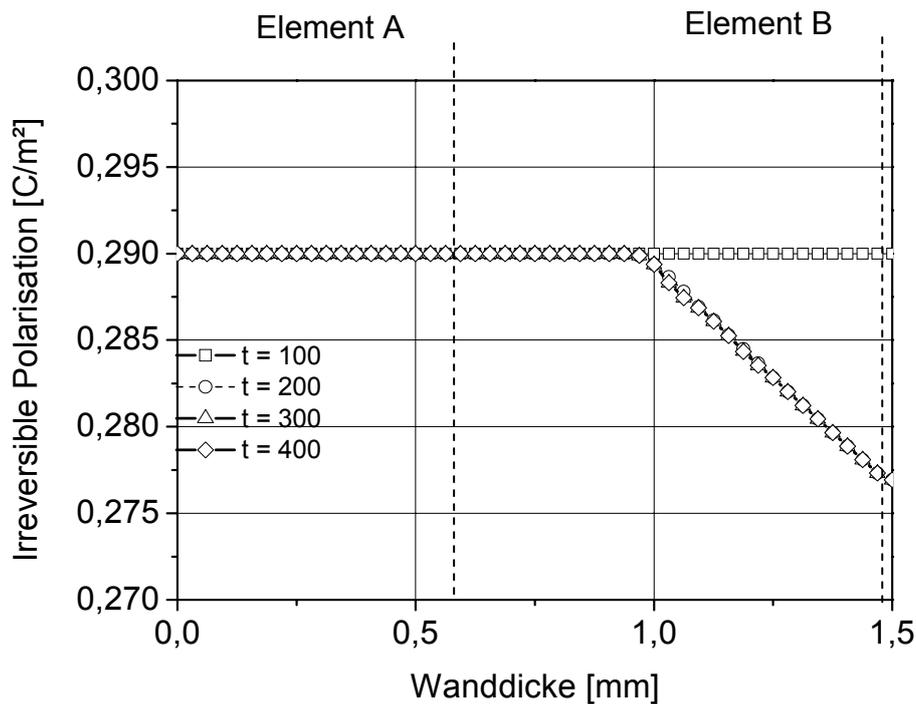


Abbildung 5.22: Irreversible Polarisation über der Wanddicke für verschiedene Lastschritte: Schritt 100: bei maximaler Belastung, Schritt 200: unbelastet, Schritt 300: bei maximaler Zugspannung, Schritt 400: elektrisch und mechanisch entlastet. Die Lage der Elemente A und B ist eingezeichnet.

Bei maximaler Spannung wird die Sättigungspolarisation an jeder Stelle innerhalb des Zylinders erreicht. Nach elektrischer Entlastung nimmt die irreversible Polarisation im äußeren Drittel der Zylinderwand aufgrund elektrischer Depolarisation ab. In dieser Region hat das elektrische Feld nun das entgegengesetzte Vorzeichen und ist nahe der Koerzitivfeldstärke.

Abbildung 5.23 zeigt zwei Diagramme der dielektrischen Verschiebung über dem elektrischen Feld für verschiedene Elemente. Element A (vgl. Abbildung 5.22) liegt in einem Bereich, wo vollständige Polarisation nach Entlastung erhalten bleibt, wohingegen Element B (vgl. Abbildung 5.22) das äußerste Element ist. Nach vollständiger Polarisation ergibt sich das elektrische Feld zu $\|\vec{E}\| = E^c - c^e \cdot \hat{P}^{sat} = 0,7 \text{ kV/mm}$ (vgl. Gleichung 5.16).

Aufgrund der großen Steigung in den Polungs- und Depolarisationsteilen der Hysterese, führen kleine Änderungen des elektrischen Feldes zu signifikanten Änderungen in der irreversiblen Polarisation. Deswegen ist das elektrische Feld, während die irreversible Pola-

risation signifikant in der Nähe der Außenwand fällt, nahezu konstant mit einem kaum sichtbaren Anstieg. Das wiederum führt zu einer beinahe linearen Verteilung des elektrischen Potentials (vgl. Abbildung 5.20).

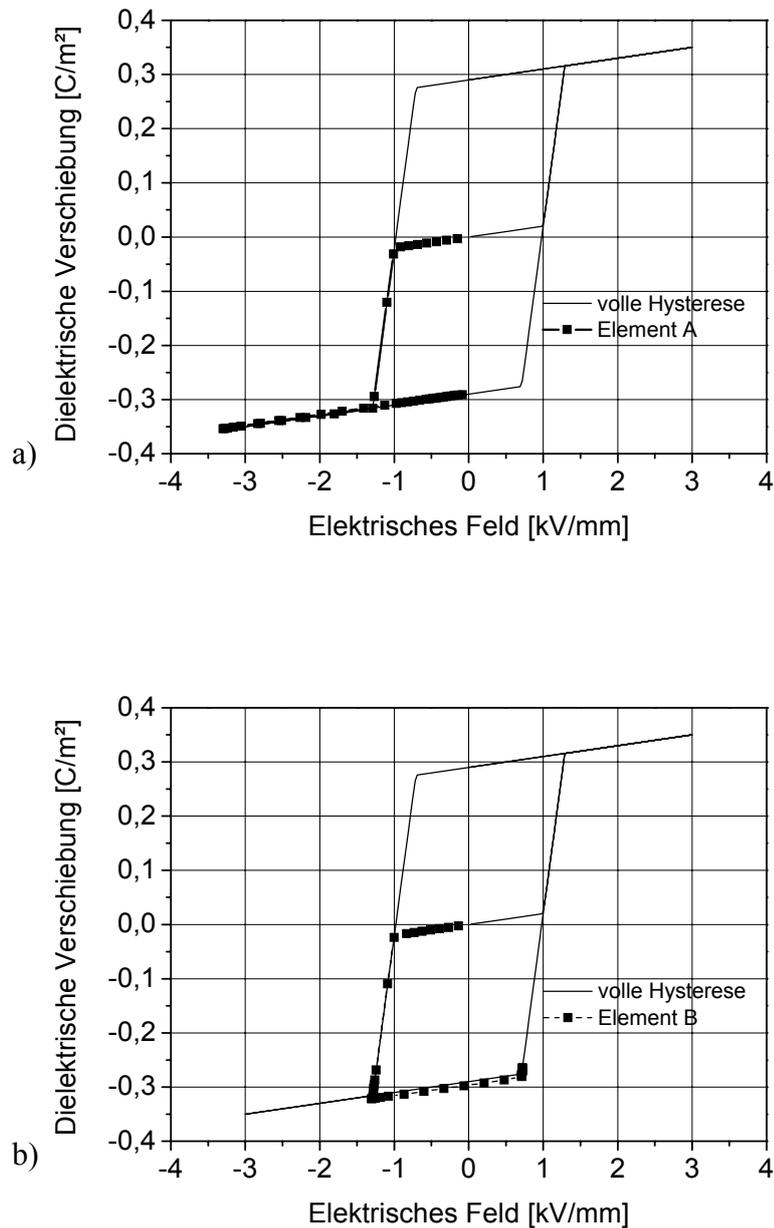


Abbildung 5.23: Dielektrische Verschiebung über dem elektrischen Feld über alle Lastschritte für Element A (a) und B (b) (Lage der Elemente vgl. Abbildung 5.22)

Dieser Effekt ist ähnlich zum Bauschingereffekt, der in Metallen beobachtet werden kann. In dem vorliegenden Kontext hat dieser „elektrische“ Bauschingereffekt die Bedeutung,

dass die kritische Koerzitivfeldstärke für Domänenumklappvorgänge von der Belastungsgeschichte abhängig ist. Aufgrund dessen vermag nicht einmal eine sehr hohe aufgebrachte elektrische Spannung eine vollständige Polarisierung nach Entlastung sicherzustellen. Deswegen unterscheiden sich die Spannungsverteilungen in Abbildung 5.21 nach Entlastung signifikant von denen bei maximaler, angelegter Spannung. Das Aufbringen einer zusätzlichen mechanischen Spannung scheint keinen bedeutenden Einfluss auf die Polarisierung innerhalb der Zylinderwand zu besitzen (vgl. Abbildung 5.22, $t = 300$).

Geometrievariation

Die analytische Lösung und die zuvor beschriebenen Untersuchungen zeigen, dass die Krümmung von piezokeramischen, dünnwandigen Zylindern einen signifikanten Einfluss auf die elektromechanischen Quantitäten innerhalb eines Zylinders besitzt. Dieser Sachverhalt motivierte die folgende Geometrievariation des inneren und äußeren Radius.

In den Simulationen verwendete Geometrien

In allen Simulationen wurde eine konstante Wanddicke von 1,5 mm verwendet. Tabelle 5.3 gibt einen Überblick über die untersuchten Geometrien. Der Stern (*) in den Bezeichnungen wird als Platzhalter für die Laststufe verwendet. Das untersuchte Material ist das gleiche wie in Tabelle 5.2.

Tabelle 5.3: *Geometrien in den Finite-Elemente-Simulationen*

	Innenradius r_i [mm]	Außenradius r_o [mm]	Wanddicke t [mm]
tu2_*	2	3,5	1,5
tu4_*	4	5,5	1,5
tu6_*	6	7,5	1,5
tu8_*	8	9,5	1,5
tu10_*	10	11,5	1,5
tu12_*	12	13,5	1,5
tu14_*	14	15,5	1,5
tu16_*	16	17,5	1,5

Im Folgenden zeigen die präsentierten Diagramme den Zustand bei maximaler elektrischer Spannung und nach dem Polungsvorgang.

Simulationsergebnisse bei maximaler elektrischer Spannung

Abbildung 5.24 zeigt das elektrische Potenzial und das elektrische Feld über der Wanddicke für verschiedene Geometrien aufgetragen.

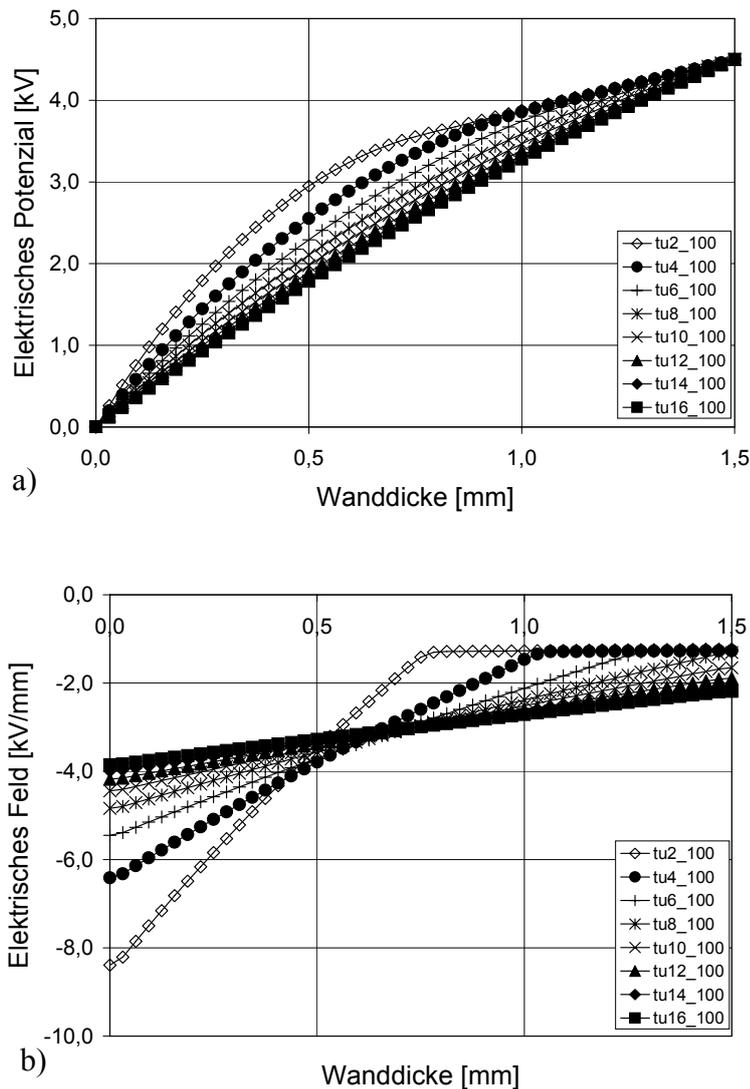


Abbildung 5.24: (a) *Elektrisches Potenzial* und (b) *elektrisches Feld über der Wanddicke bei maximaler elektrischer Spannung für verschiedene Geometrien*

Die Verteilungen des elektrischen Potentials sind nichtlinear. Der Einfluss der Krümmung wird mit abnehmendem Radius stärker. Je größer der Radius (äquivalent zu einer schwächeren Krümmung), desto linearer ist die Verteilung des elektrischen Potentials in

der Wand. Das Gleiche trifft auch auf die Verteilung des elektrischen Feldes zu. Der Unterschied zwischen maximalem und minimalem elektrischem Feld wird mit zunehmendem Radius kleiner. Für Radien kleiner als 8 mm erscheint die Kurve des elektrischen Potentials linearer in der Nähe der Außenwand. Dies resultiert in eine nahezu konstante Verteilung des elektrischen Feldes.

Die Verteilung der Polarisation ist in Abbildung 5.25 dargestellt.

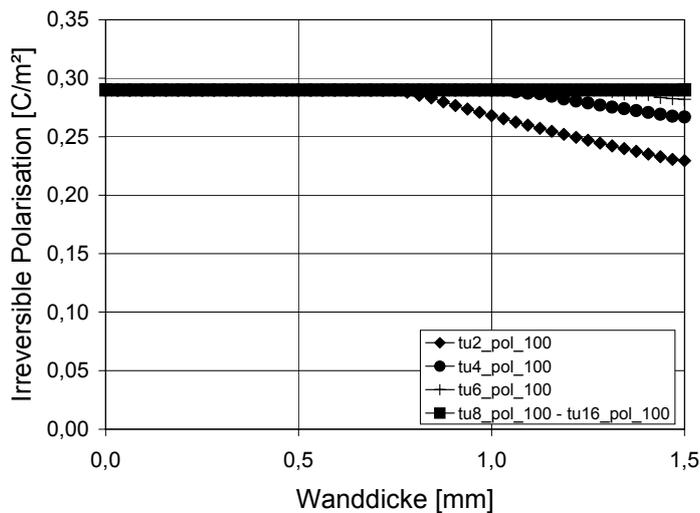


Abbildung 5.25: Irreversible Polarisation über der Wanddicke bei maximaler elektrischer Spannung für verschiedene Geometrien

Vollständige Polarisation (Sättigungspolarisation) wird an der Außenwand für kleine Radien mit der in den Simulationen aufgebrauchten elektrischen Spannung nicht erreicht. Das Polen von Null bis \hat{P}^{sat} findet in einem verhältnismäßig kleinen Bereich des elektrischen Feldes von $E^c = 1,0$ kV/mm bis $E^c - c^e \cdot \hat{P}^{sat} = 1,3$ kV/mm (vgl. Gleichung 5.16) statt. Deswegen wird der ausgeprägte Abfall von $\|\vec{P}^i\|$ zum äußeren Rand hin von einer nahezu nicht sichtbaren Verminderung des elektrischen Feldes und einem beinahe konstanten elektrischen Potenzial begleitet (vgl. Abbildung 5.24). Für Innenradien von 8 mm oder größer wird die Sättigungspolarisation über die gesamte Wanddicke hinweg erreicht.

Abbildung 5.26 zeigt die mechanischen Spannungsverteilungen über der Wanddicke. Wie zuvor bereits erwähnt wurde, sind die mechanischen Spannungen in radialer Richtung vernachlässigbar. Deswegen werden im Folgenden lediglich die Axial- und Umfangsspannungen dargestellt.

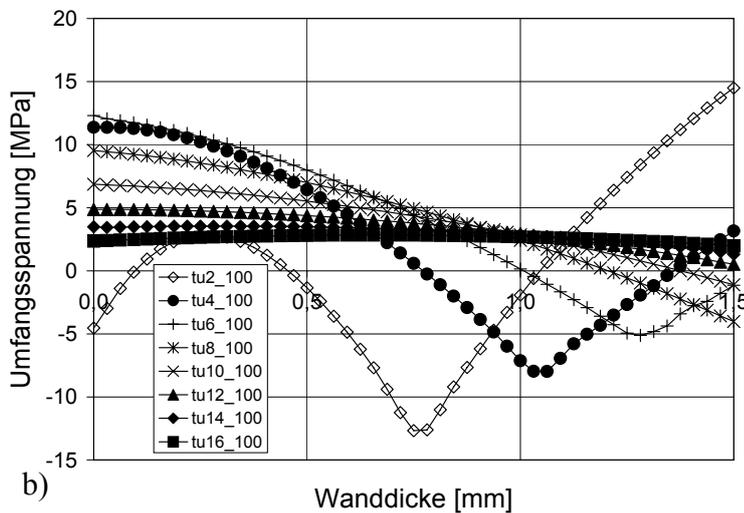
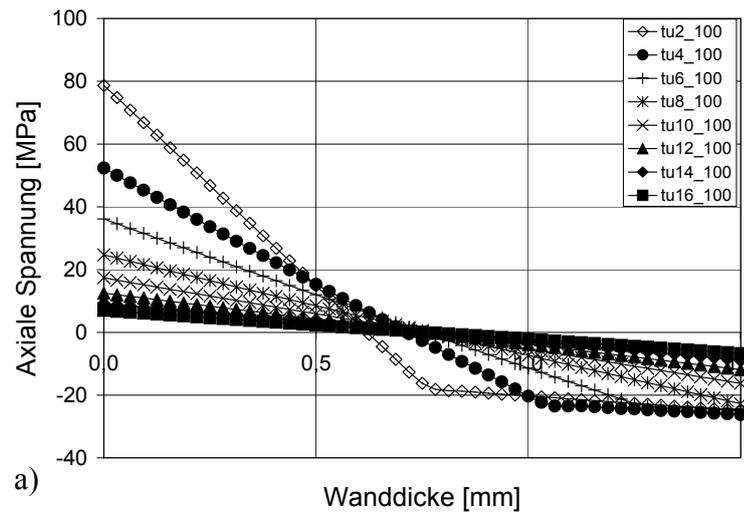


Abbildung 5.26: (a) Axialspannung und (b) Umfangsspannung über der Wanddicke bei maximaler elektrischer Spannung für verschiedene Geometrien

Mit sinkendem Radius werden die mechanischen Spannungen und der Unterschied zwischen Zug- und Druckspannung größer. Dabei werden die Verteilungen innerhalb der Wand homogener. Die Größenordnung der Zugspannungen kann zu Rissen führen, was bei der Herstellung solcher Hohlzylinder vermieden werden muss. Nach Rücksprache mit einem Hersteller wurden als Vermeidungsmaßnahmen spezielle Polungsprozeduren wie Erwärmen und das vorsichtige Aufbringen der elektrischen Spannung genannt.

Simulationsergebnisse nach elektrischer Entlastung

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse nach dem Polen vorgestellt und diskutiert. Die Verteilungen des elektrischen Potentials und des elektrischen Feldes über der Wanddicke sind in Abbildung 5.27 dargestellt.

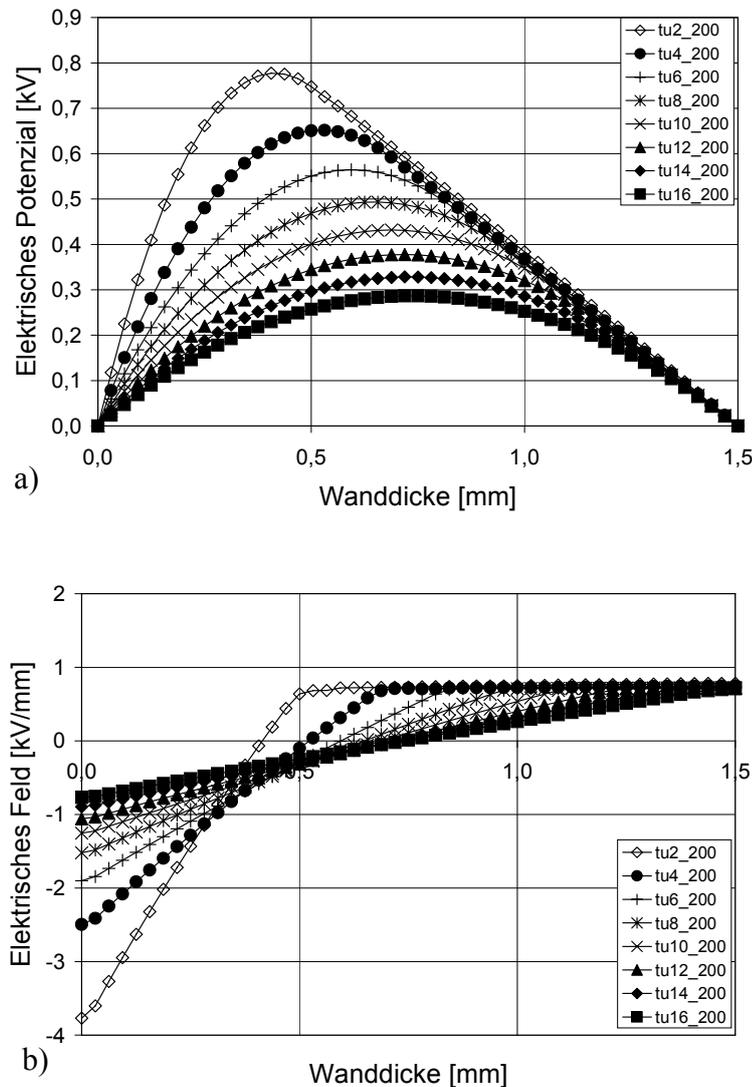


Abbildung 5.27: (a) Elektrisches Potenzial und (b) elektrisches Feld über der Wanddicke nach elektrischer Entlastung für verschiedene Geometrien

Das elektrische Potenzial auf der Innen- wie auch auf der Außenseite ist gleich Null. Es verbleibt ein nicht verschwindendes elektrisches Potenzial innerhalb des Zylinders. Die Maxima variieren von ungefähr 300 V bis 800 V. Die korrespondierenden Verteilungen der elektrischen Felder finden sich in Abbildung 5.27 b). Die Absolutwerte des elektrischen Feldes sind kleiner als bei maximaler elektrischer Spannung, sind aber immer noch

auf einer vergleichsweise hohen Stufe. Des Weiteren ist das elektrische Feld auf der Innenseite negativ, während es auf der Außenseite positive Werte aufweist.

Die Verteilung der irreversiblen Polarisation über der Wanddicke ist in Abbildung 5.28 dargestellt.

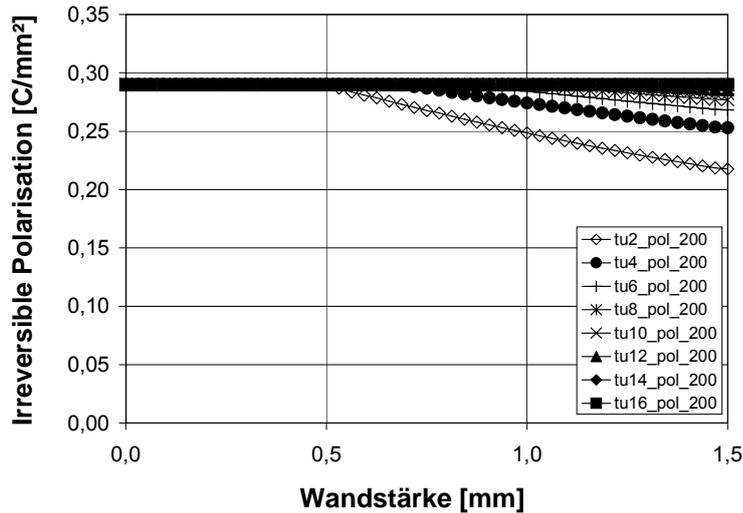


Abbildung 5.28: Irreversible Polarisation über der Wanddicke nach elektrischer Entlastung für verschiedene Geometrien

Für Radien kleiner als 16 mm wurde keine Sättigung in der Nähe der Außenwand erreicht, da dort elektrische Depolarisation auftritt, wie zuvor schon beschrieben wurde. Für Radien gleich oder größer als 16 mm ist die Verteilung der irreversiblen Polarisation wenigstens homogen und gleich der Sättigungspolarisation nach elektrischer Entlastung. Dagegen steht, dass das elektrische Feld nahezu linear und das elektrische Potenzial nichtlinear über der Wanddicke hinweg verläuft.

Die verbleibenden mechanischen Spannungen sind in Abbildung 5.29 dargestellt. Wie zuvor sind die Axialspannungen und die Umfangsspannungen über der Wanddicke abgebildet.

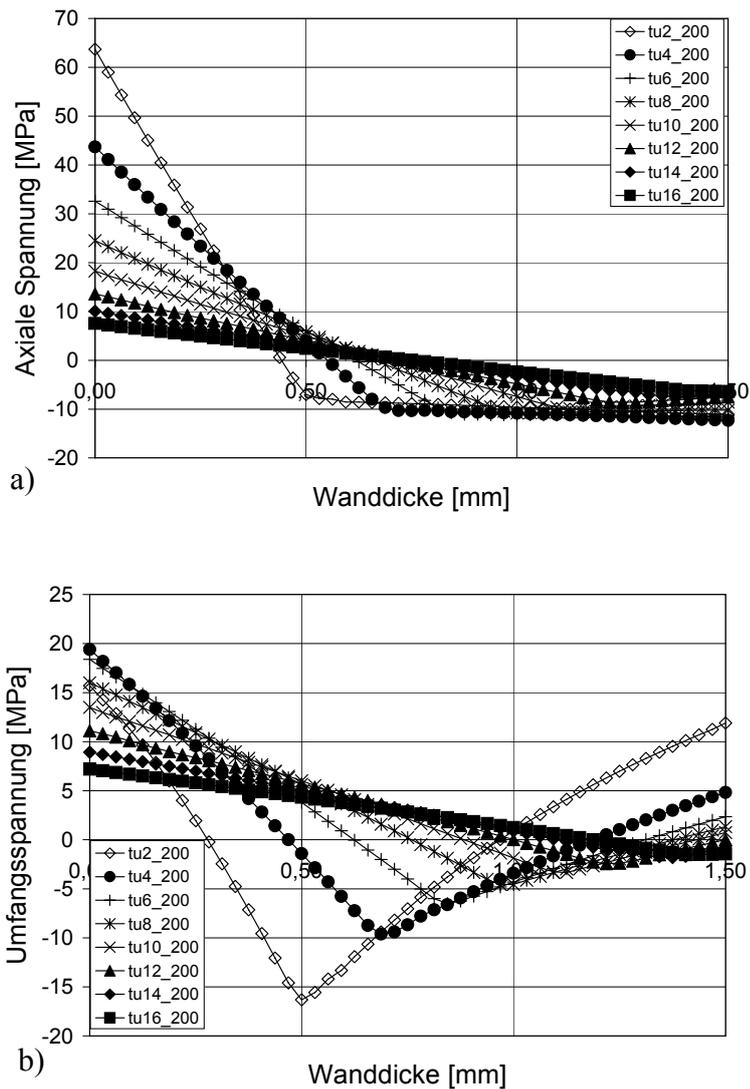


Abbildung 5.29: (a) Axialspannung und (b) Umfangsspannung über der Wanddicke nach elektrischer Entlastung für verschiedene Geometrien

Die Spannungen werden größer mit kleineren Radien. Besonders die Kurvenverläufe werden dabei nichtlinearer. Die Druckspannungen in axialer Richtung sind begrenzt auf etwa -10 MPa, während die Zugspannungen in der gleichen Richtung an der Innenwand in den Bereich der Zugfestigkeit gelangen. Im Fall der Umfangsspannungen werden die Druckspannungen wie auch die Zugspannungen größer mit kleiner werdenden Radien. Für Radien gleich oder größer als 16 mm sind die verbleibenden Spannungen auf einem vergleichsweise niedrigen Niveau.

5.7.3 *Folgerungen*

Als eine Schlussfolgerung aus den Simulationen lässt sich festhalten, dass der hier beobachtete, signifikante Einfluss der Geometrie auf das Polungsverhalten piezokeramischer Hohlzylinder Berücksichtigung in der Herstellung oder Verwendung solcher Zylinder finden sollte. Insbesondere die nichtlinearen Verteilungen der Quantitäten wie auch die vergleichsweise hohen mechanischen Spannungen können zu Problemen bei der Anwendung piezokeramischer Hohlzylinder führen. Für den Einsatz zur Untersuchung mehrschichtiger elektromechanischer Zustände erscheinen sie nur bedingt geeignet. Bei einer solchen Verwendung sollten möglichst große Radien gewählt werden, um Schwierigkeiten bei der Auswertung der experimentellen Daten zu vermeiden.

Wie schon das Simulationsbeispiel des Stapelaktors zeigte auch das Anwendungsbeispiel an piezokeramischen Hohlzylindern die Einsetzbarkeit des entwickelten Finite-Elemente-Werkzeuges in komplexen Problemstellungen. Insbesondere nichtlineare, ferroelektrische Zustände während der Polungsvorgänge können zuverlässig und schnell erfasst werden. Diese nichtlinearen Zustände können zu Schwierigkeiten und vorzeitigem Versagen in der Herstellung und Anwendung piezokeramischer Bauteile führen. Mit Hilfe des Finite-Elemente-Werkzeuges auf der Grundlage des phänomenologischen Stoffgesetzes können schon im Vorfeld der Entwicklung piezokeramischer Bauteile diese mögliche Problematiken erkannt und beseitigt bzw. zumindest berücksichtigt werden, um für ihren Anwendungszweck optimale Bauteilgeometrien zu entwickeln.

5.8 Anwendungsbeispiel: Risswachstum in der Bruchmechanik

Als letztes Anwendungsbeispiel für das phänomenologische Modell und dessen Finite-Elemente-Implementierung wird ein Simulationsbeispiel vorgestellt, das insbesondere die Kapazitäten der Finite-Elemente-Implementierung hinsichtlich der Modellgröße und der daraus resultierenden Rechenzeit demonstrieren soll.

Für die Arbeitsgruppe nichtmetallisch-anorganische Werkstoffe des Fachbereichs Materialwissenschaft der Technischen Universität Darmstadt (Westram et al. [73, 74]) wurden unterstützende Simulationen an bruchmechanischen Proben durchgeführt. Hierbei wurden Experimente durchgeführt, bei denen Risse bei kritischen elektrischen Feldstärken auftra-

ten. Diese Risse zeigten ein so genanntes „Pop-in“-Verhalten auf eine Länge von ungefähr 500 μm . Das bedeutet, dass Risse mit instabilem Risswachstum auftraten. Eine nachfolgende zyklische Belastung verursachte dann ein stabiles Risswachstum. Westram et al. [73, 74] führten bruchmechanische Analysen auf der Basis von Gewichtsfunktionen durch, um das „Pop-in“-Verhalten mittels Spannungsintensitätsfaktoren zu diskutieren. Die vorliegenden Finite-Elemente-Berechnungen sind die Grundlage für diese Analysen.

Abbildung 5.30 zeigt das Finite-Elemente-Modell, welches in den Simulationen verwendet wurde.

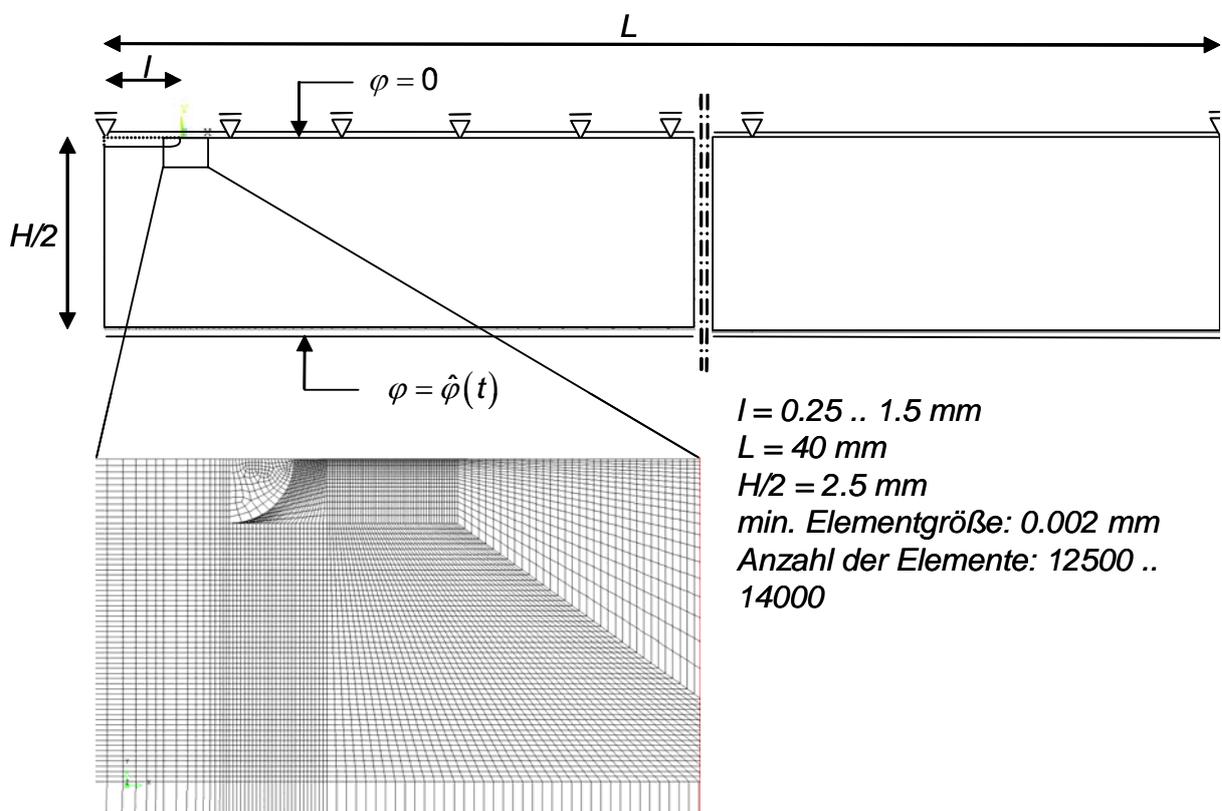


Abbildung 5.30: Finite-Elemente-Modell der bruchmechanischer Versuchskörper

Wie auch in den Experimente wurde in den Simulationen die Kerblänge variiert. Die verschiedenen Längen betragen 0,25, 0,5, 0,75, 1,0, 1,25 und 1,5 mm. Das verwendete Material war das aus den vorangegangenen Abschnitten bekannte PIC 151, ein Weich-PZT, der Firma PI Ceramic. In der Kerbe wurde Silikonöl mit einer relativen Permittivität von 2,69 modelliert. Die aufgebrachte zyklische elektrische Spannung sollte zu einem mittleren elektrischen Feld von $\pm 2 \text{ kV/mm}$ führen. Aufgrund der Symmetrie wurde nur eine Hälfte

des Versuchskörpers modelliert. Die Modelle bestanden aus bis zu 14000 Elementen. An der Oberseite wurde das elektrische Potenzial gleich Null gesetzt und die vertikalen Verschiebungen unterdrückt. Am rechten Rand wurden die horizontalen Verschiebungen unterdrückt und an der Unterseite wurde ein elektrisches Potenzial über der Zeit aufgebracht. Die Modelle wurden belastet und danach wieder vollständig entlastet.

Abbildung 5.31 zeigt einen Konturplot aus der Finite-Elemente-Simulation für eine Kerblänge von 1,5 mm bei maximaler elektrischer Belastung..

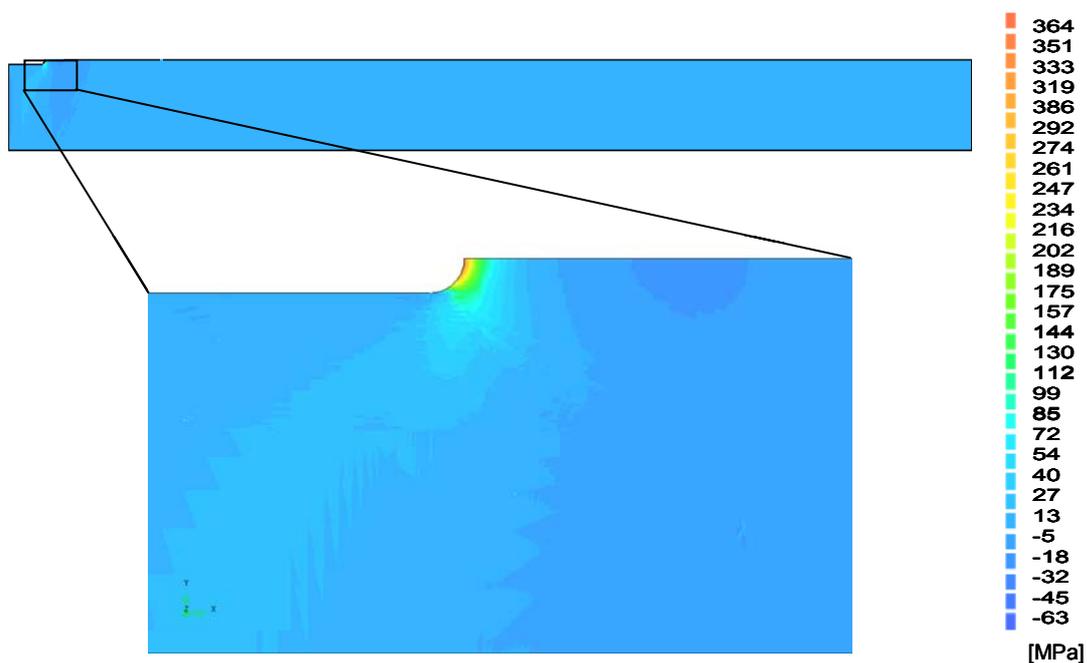


Abbildung 5.31: *Mechanische Spannungsverteilung in vertikaler Richtung des gesamten Modells für eine Kerblänge von 1,5 mm bei maximaler elektrischer Belastung*

Deutlich sind in der Nähe des Kerbgrundes Spannungsspitzen im Zugbereich zu erkennen, die weit über der Zugfestigkeit des Materials liegen, während im restlichen Bereich verhältnismäßig kleine Druckspannungen auftreten, die zum rechten Rand des Modells verschwinden.

Abbildung 5.32 zeigt weitere Ergebnisse der Finite-Elemente-Untersuchungen von Westram et al. [73, 74] aufbereitet. Dabei wurde die mechanische Spannung in Polungsrichtung entlang der Symmetrieachse vom Kerbgrund an beginnend über eine Länge von maximal 1,0 mm aufgetragen.

Exemplarisch wurden die Zustände bei der maximalen elektrischen Belastung und nach Entlastung für Kerblängen von 0,25 und 1,5 mm abgebildet.

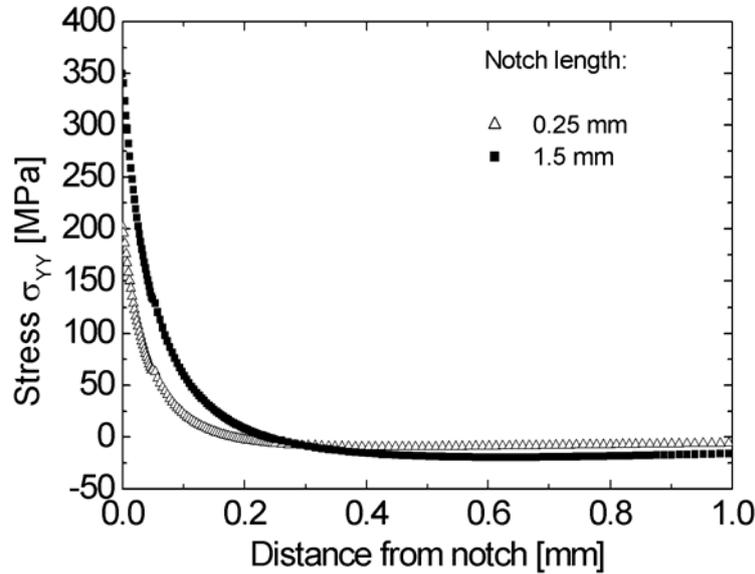


Abbildung 5.32: Mechanische Spannungsverteilungen in vertikaler Richtung bei maximalem elektrischem Potenzial für Kerblängen von 0,25 und 1,5 mm nach Westram et al. [73, 74]

Die mechanischen Zugspannungen werden im Kerbgrund größer mit zunehmender Kerblänge (vgl. Abbildung 5.32). Dies stimmt mit den experimentellen Ergebnissen, wo Risse bei kleineren elektrischen Feldern für Experimente mit größeren Kerblängen auftraten, überein. Die auf die Simulationen aufbauenden Analysen auf der Basis von Gewichtsfunktionen für die Spannungsintensitätsfaktoren (vgl. Fett und Munz [75]) von Westram et al. [73, 74] sind in Abbildung 5.33 dargestellt. In Abbildung 5.33 a) wurde dabei eine halbkreisförmige Abrundung des Risses und in Abbildung 5.33 b) ein rechteckförmiger Riss angenommen, was zu den folgenden Spannungsintensitätsfaktoren unter Berücksichtigung unterschiedlicher Gewichtsfunktionen (vgl. Fett und Munz [75]) führt:

$$K_I^{(1)} = \frac{2,24}{\sqrt{\pi a}} \int_0^a \frac{\sigma(r) r dr}{\sqrt{a^2 - r^2}} \quad (\text{halbkreisförmig}) \quad (5.38)$$

$$K_I^{(2)} = 2,24 \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_0^a \frac{\sigma(r) r dr}{\sqrt{a^2 - r^2}} \quad (\text{rechteckförmig}) \quad (5.39)$$

Dabei ist a die Risslänge, r die Koordinate entlang des Risses und $\sigma(r)$ die Spannung an der Stelle r .

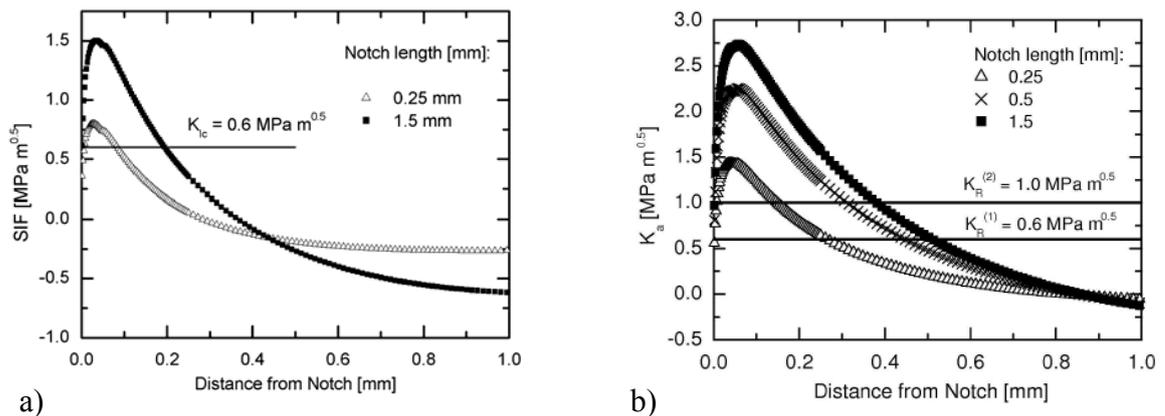


Abbildung 5.33: Spannungsintensitätsfaktor K_I für Risse mit einer halbkreisförmigen Ausrundung (a) und rechteckförmige Risse (b) für unterschiedliche Kerbtiefen nach Westram et al. [73, 74]

Abbildung 5.34 zeigt einen Vergleich der berechneten Spannungsintensitätsfaktoren aus den Finite-Elemente-Simulationen (vgl. Abbildung 5.33) mit den experimentell bestimmten Spannungsintensitätsfaktoren.

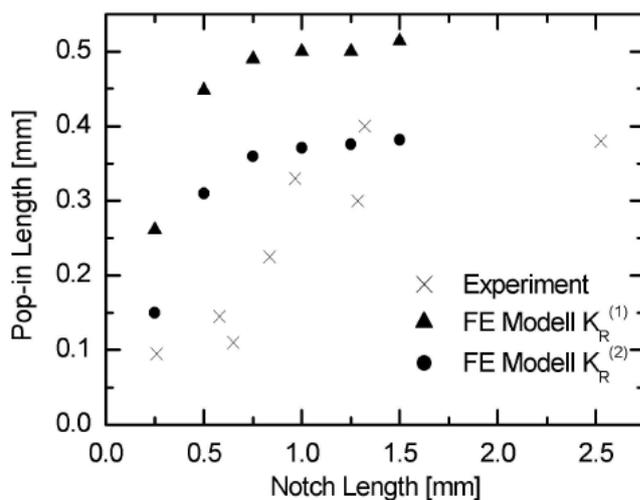


Abbildung 5.34: Vergleich der aus den Finite-Elemente-Simulationen berechneten Spannungsintensitätsfaktoren mit denen aus den Experimenten bestimmten nach Westram et al. [73, 74]

Die Werte der aus den Finite-Elemente-Simulationen berechneten Spannungsintensitätsfaktoren zeigen qualitativ eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Die berechneten Werte liegen in der gleichen Größenordnung wie die experimentell bestimmten und die „Pop-in“-Längen zeigen wie auch in den Experimenten die Tendenz mit größer werdender Kerbtiefe zuzunehmen.

Mit diesem letzten Anwendungsbeispiel für das phänomenologische Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung wurde ein weiteres, komplexes Einsatzgebiet gezeigt, das die Einsetzbarkeit des Finite-Elemente-Werkzeuges eindrucksvoll aufzeigt. Insbesondere die Modelle mit einer maximalen Elementzahl von 14000, die in einer akzeptablen Zeit berechnet werden konnten, seien an dieser Stelle erwähnt. Dies zeigt auch, dass große Finite-Elemente-Modelle berechnet werden können.

Im folgenden Kapitel wird ein mikroskopisch motiviertes Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung vorgestellt, dessen Leistungsfähigkeit in der genauen Beschreibung des Verhaltens piezokeramischer Werkstoffe deutlich höher ist als die vorhandenen Möglichkeiten im phänomenologischen Modell. Das ermöglicht eine noch tiefer gehende Betrachtung der Vorgänge in piezokeramischen Bauteilen, wenn diese Vorgehensweise auch rechenzeitintensiver ist. Eine abschließende Diskussion über die beiden Modelle und deren jeweiligen Einsatzgebiete wird zum Schluss dieser Arbeit gegeben werden.

6 Mikroskopisch motiviertes Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung

Das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz, das im Folgenden in dieser Arbeit vorgestellt wird, wurde von Kamlah und Jiang [10, 11] in einer einachsigen Formulierung aufgestellt und dann von Kamlah und Wang [12, 13] auf die dreidimensionale Form erweitert und verfeinert. Es gibt das Verhalten piezokeramischer Werkstoffe, das in Kapitel 2 ausführlich beschrieben ist, physikalisch realistischer wieder, als es das phänomenologische Stoffgesetz vermag. Dadurch ist es auch komplexer in seiner Formulierung, was in der weiter unten in dieser Arbeit beschriebenen Finite-Elemente-Implementierung sichtbar wird. Im Gegensatz zur Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes, in der das zu lösende gewöhnliche Differenzialgleichungssystem auf jeweils eine algebraische Gleichung zurückgeführt werden konnte, musste hier das vollständige Differenzialgleichungssystem simultan gelöst werden. Allerdings lässt sich der Aufwand durch die Anwendung des impliziten Eulerverfahrens und eines Radial-Return-Mapping-Algorithmus nach Simo et al. [67, 68] einschränken. Hinzukommend wird das Problem mit der Hilfe der Anwendung von generalisierten Koordinaten für einzelne Bereiche des Stoffgesetzes vereinfacht, was die Anzahl der zu lösenden Gleichungen reduziert. Zunächst soll aber das Stoffgesetz nach Kamlah und Wang [12, 13] beschrieben werden und anschließend dessen Finite-Elemente-Implementierung. Im Nachfolgenden wird bei der Darstellung der Vektoren und Tensoren die Einsteinsche Summenkonvention aus Übersichtlichkeitsgründen angewandt.

6.1 Thermodynamischer Rahmen

Jede Formulierung eines konstitutiven Stoffgesetzes muss Vorgänge ausschließen, die den 2. Hauptsatz der Thermodynamik verletzen könnten. Diese allgemein anerkannte Regel für die Aufstellung konstitutiver Stoffgesetze wurde von Coleman und Noll [76] mit der Hilfe einer Methode umgesetzt, welche die Clausius-Duhem-Ungleichung heranzieht, um diese Regel zu befriedigen. Dabei wird die Clausius-Duhem-Ungleichung für alle zulässigen Vorgänge erfüllt. In einer späteren Arbeit erweiterten Coleman und Gurtin [77] diese Vorgehensweise auf eine Theorie mit inneren Variablen.

Das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz, das auf der Grundlage der Arbeiten von Coleman et al. [76, 77] entstanden ist, findet seinen thermodynamische Rahmen in einer abgeleiteten Funktion der Gibbschen freien Energie. Diese Funktion schließt das linear piezoelektrische Verhalten ein. Wie in Kapitel 2 bereits erwähnt wurde, besteht ein Polykristall aus polarisierten Einheitszellen, die in Domänen mit gleicher Ausrichtung der spontanen Polarisation und Dehnung zusammengefasst sind. Diese polarisierten Einheitszellen können als Mikrodipole aufgefasst werden. Deren Zustand auf der makroskopischen Ebene wird durch mikrostrukturelle Parameter repräsentiert, die im mikroskopisch motivierten Stoffgesetz als innere Variablen eingeführt werden. Die Clausius-Duhem-Ungleichung kann dabei durch die Ableitung der Evolutionsgleichungen von einer konvexen Umklappfunktion mittels der Normalenregel für jeden zulässigen, elektromechanischen Vorgang erfüllt werden. Im Folgenden wird die Herleitung des Stoffgesetzes eingehend erläutert.

Aufbau des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes

Wie auch beim phänomenologischen Stoffgesetz werden die Polarisation P_i und die Dehnung S_{ij} in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil analog zur Plastizitätstheorie, was bereits schon von Bassiouny et al. [78, 79, 80, 81] auf elektromechanische Hystereseeffekte angewandt wurde, zerlegt:

$$S_{ij} = S_{ij}^r + S_{ij}^i \quad (6.1)$$

$$P_i = P_i^r + P_i^i. \quad (6.2)$$

Dabei sind die irreversible Polarisation und die irreversible Dehnung von inneren Variablen q^1, \dots, q^n abhängig:

$$S_{ij}^i = S_{ij}^i(q^1, \dots, q^n) \quad (6.3)$$

$$P_i^i = P_i^i(q^1, \dots, q^n). \quad (6.4)$$

Da es sich beim betrachteten Modell um ein mikroskopisch motiviertes Stoffgesetz handelt, sind die irreversible Polarisation und die irreversible Dehnung makroskopische Größen, die aus einer Mittelung der mikroskopischen Größen hervorgehen. Diesen Zweck erfüllen die inneren Variablen, da diese das mikrostrukturelle Verhalten wie Domänenaus-

richtung auf die makroskopische Ebene übertragen. Kamlah und Wang [12, 13] merken bei dieser Betrachtungsweise an, dass im vorliegenden mikroskopisch motivierten Stoffgesetz rein formal eine phänomenologische Theorie beinhaltet ist, da die inneren Variablen q^1, \dots, q^n mit den irreversiblen Größen wie S_{ij}^i und P_i^i in Verbindung gebracht werden. Eine rein phänomenologische Theorie wäre dadurch gekennzeichnet, dass die irreversiblen Größen S_{ij}^i und P_i^i selbst als innere Variablen verwendet würden, wie es beim phänomenologischen Stoffgesetz aus Kapitel 5 der Fall ist.

Die reversiblen Größen der Polarisierung und Dehnung können wieder durch das lineare Stoffgesetz für Piezoelektrizität beschrieben werden:

$$S_{ij}^r = C_{ijkl}^{-1} T_{kl} + d_{ijk}^T E_k \quad (6.5)$$

$$P_i^r = d_{ijk} T_{jk} + \kappa_{ij} \cdot E_j. \quad (6.6)$$

Darin bezeichnet C_{ijkl} den Elastizitätstensor vierter Stufe, d_{ijk} den Piezoelektrizitätstensor dritter Stufe und κ_{ij} des Suszeptibilitätstensor zweiter Stufe. Diese Gleichungen geben für festgehaltene innere Variablen q^1, \dots, q^n das linear piezoelektrische Verhalten wieder. Allerdings ist der irreversible Zustand, wie schon in der Beschreibung des phänomenologischen Stoffgesetzes angedeutet wurde, ebenfalls abhängig von der Belastungsgeschichte und damit von den inneren Variablen, die diese beschreiben. Dies kann durch

$$\kappa_{ij} = \kappa_{ij}(q^1, \dots, q^n) \quad (6.7)$$

$$d_{ijk} = d_{ijk}(q^1, \dots, q^n) \quad (6.8)$$

$$C_{ijkl} = C_{ijkl}(q^1, \dots, q^n) \quad (6.9)$$

ausgedrückt werden. Im vorliegenden Modell ist dieser Umstand durch einen belastungsabhängigen, anisotropen Piezoelektrizitätstensor

$$d_{kij} = \frac{\|\bar{P}^i\|}{P^{sat}} \cdot \left\{ d^{\parallel} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k + d^{\perp} (\delta_{ij} - \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_k + d^{\perp} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[(\delta_{ki} - \mathbf{e}_k \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_j + (\delta_{kj} - \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_i \right] \right\}. \quad (6.10)$$

mit $\mathbf{e}_i = \mathbf{e}_i^{P_i}$, wobei $\mathbf{e}_i^{P_i} = \frac{\mathbf{P}_i^i}{\|\mathbf{P}_i^i\|}$, wiedergegeben.

Vorgegriffen auf die Finite-Elemente-Implementierung finden dort die tatsächlich vorhandenen Abhängigkeiten von der Belastungsgeschichte des Suszeptibilitätstensors κ_{ij} und des Elastizitätstensors C_{ijkl} (wie auch dessen Anisotropie), die Kamlah und Wang [12] ebenfalls hergeleitet haben, aus vereinfachenden Gründen keine Anwendung. Lediglich für die Modellbildung seien diese Abhängigkeiten (Gleichungen 6.7 und 6.9) an dieser Stelle der Vollständigkeit halber erwähnt.

Reversible Vorgänge in der thermodynamischen Formulierung des Stoffgesetzes

Wie eingangs schon erwähnt wurde, folgt das mikroskopisch motivierte Modell den Beschränkungen, die Coleman et al. [76, 77] in den sechziger Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts für die Formulierung konstitutiver Stoffgesetze postuliert haben. Dabei wird die Einhaltung des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik durch Erfüllung der Clausius-Duhem-Ungleichung für jeden zulässigen thermodynamischen Vorgang gefordert, die im vorliegenden Fall für einen deformierbaren dielektrischen Körper in einem isothermen Prozess mit gleichförmiger Temperatur durch

$$E_i \dot{P}_i + T_{ij} \dot{S}_{ij} \geq \rho \dot{\psi} \quad (6.11)$$

gegeben ist, wobei ρ die Dichte des Körpers und $\psi = U - T \cdot S$ die Helmholtzsche freie Energie darstellt, in der U die innere Energie, T die Temperatur und S die Entropie eines Körpers ist. Im mikroskopisch motivierten Stoffgesetz wird die Helmholtzsche freie Energie als eine Funktion beschrieben, die von der reversiblen Polarisierung, der reversiblen Dehnung und den inneren Variablen abhängig ist:

$$\psi = \psi(P_i^r, S_{ij}^r, q^1, \dots, q^n). \quad (6.12)$$

In diesem Fall sind die Potenzialbeziehungen

$$E_i = \rho \frac{\partial \psi}{\partial P_i^r}(P_k^r, S_{kl}^r, q^1, \dots, q^n) \quad (6.13)$$

$$T_{ij} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial S_{ij}^r} (P_k^r, S_{kl}^r, q^1, \dots, q^n) \quad (6.14)$$

notwendige und hinreichende Bedingungen, um die Clausius-Duhem-Ungleichung für reversible Vorgänge, d.h. $\dot{q}^\alpha = 0$ mit $\alpha = 1, \dots, n$ zu erfüllen.

Die Gibbsche Energiedichte erhält man unter der Annahme, dass die zuvor genannten Beziehungen für S_{ij}^r und P_i^r lösbar sind, mittels der Legendre-Transformation zu

$$\rho g = -\rho \psi + T_{ij} \cdot S_{ij}^r + E_i \cdot P_i^r, \quad (6.15)$$

wobei

$$S_{ij}^r = \rho \frac{\partial g}{\partial T_{ij}} (E_k, T_{kl}, q^1, \dots, q^n) \quad (6.16)$$

und

$$P_i^r = \rho \frac{\partial g}{\partial E_i} (E_k, T_{kl}, q^1, \dots, q^n) \quad (6.17)$$

sind.

Wie im vorangegangenen Abschnitt erwähnt wurde, wird für festgehaltene innere Variablen q^1, \dots, q^n das reversible, linear piezoelektrische Verhalten in Abhängigkeit des elektrischen Feldes und der mechanischen Spannung beschrieben (vgl. Gleichungen 6.5 und 6.6).

Die Gibbsche freie Energie kann wie folgt in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil aufgeteilt werden:

$$g = g^r (E_i, T_{ij}, q^1, \dots, q^n) + g^i (q^1, \dots, q^n) \quad (6.18)$$

Um Konsistenz mit den linear piezoelektrischen Beziehungen (Gleichungen 6.5 und 6.6) zu gewährleisten, muss der reversible Anteil der Gibbschen freien Energie quadratisch vom elektrischen Feld E_i und der mechanischen Spannung T_{ij} für die Potenzialbeziehungen (Gleichungen 6.16 und 6.17) abhängen:

$$\rho g^r = \frac{1}{2} \kappa_{kl} E_k E_l + d_{kij} E_k T_{ij} + \frac{1}{2} C_{ijkl}^{-1} T_{ij} T_{kl}. \quad (6.19)$$

Irreversible Vorgänge in der thermodynamischen Formulierung des Stoffgesetzes

Bei irreversiblen Vorgängen, die dadurch gekennzeichnet sind, dass die Zeitableitungen der inneren Variablen $\dot{q}^\alpha \neq 0$ mit $\alpha = 1, \dots, n$ sind, wird die Clausius-Duhem-Ungleichung in Bezug auf die Beschränkungen für die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen aufgestellt. Zunächst lässt sich mittels der Legendre-Transformation und den Potenzialbeziehungen aus Gleichungen 6.13 und 6.14 für die Zeitableitung der Helmholtzschen Energiedichte

$$\rho \dot{\psi} = \dot{E}_i \dot{P}_i^r + T_{ij} \dot{S}_{ij}^r - \rho \sum_{\alpha=1}^n \frac{\partial g}{\partial q^\alpha} \dot{q}^\alpha \quad (6.20)$$

finden.

Durch Einsetzen in die rechte Seite der Clausius-Duhem-Ungleichung (Gleichung 6.11) unter Berücksichtigung der additiven Zerlegung ergibt sich diese zu

$$\sum_{\alpha=1}^n \left(E_i \frac{\partial P_i^r}{\partial q^\alpha} + T_{ij} \frac{\partial S_{ij}^r}{\partial q^\alpha} + \rho \frac{\partial g}{\partial q^\alpha} \right) \cdot \dot{q}^\alpha \geq 0. \quad (6.21)$$

Jede der Größen in der Klammer der Gleichung 6.21 wird als thermodynamisch konjugierte Kraft der jeweiligen inneren Variable

$$\phi^\alpha = E_i \frac{\partial P_i^r}{\partial q^\alpha} + T_{ij} \frac{\partial S_{ij}^r}{\partial q^\alpha} + \rho \frac{\partial g}{\partial q^\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (6.22)$$

bezeichnet.

Die innere Dissipation des Systems ist durch

$$\zeta = \sum_{\alpha=1}^n \phi^\alpha \dot{q}^\alpha \quad (6.23)$$

nach Coleman und Gurtin [77] gegeben.

Kamlah und Jiang [10, 11] erfüllten die Bedingung einer nicht-negativen Energiedissipation hinreichend durch

$$\dot{q}^\alpha = \Lambda^\alpha \phi^\alpha, \quad \Lambda^\alpha \geq 0, \quad \alpha = 1, \dots, n. \quad (6.24)$$

Kamlah und Wang [12, 13] erstellten dagegen auf der Grundlage von Cocks und McMeeking [82], Huber und Fleck [41] und Landis [46] eine Theorie, die der Vorgehensweise

bei inkrementeller Plastizität ähnlich ist. Dieses Ziel wurde durch die Anwendung einer konvexen Umklappfunktion

$$f = f(\phi^1, \dots, \phi^n) \quad (6.25)$$

erreicht, die den Ursprung einschließt und die assoziative Fließregel (Normalenregel)

$$\dot{q}^\alpha = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^\alpha} \quad (6.26)$$

für die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen enthält, wobei λ als „plastischer“ Multiplikator bezeichnet wird. Hierzu kann man auch die Arbeiten von Simo et al. [67, 68], die sich auf Plastizität und Viskoplastizität beziehen, zum Vergleich heranziehen, die ebenfalls einen plastischen Multiplikator λ verwenden.

Bei einer ratenunabhängigen Theorie wird der plastische Multiplikator λ mit Hilfe der Konsistenzbedingung bestimmt. Dabei gilt:

$$\lambda \begin{cases} \text{löst } \dot{f} = \sum_{\alpha=1}^n \frac{\partial f}{\partial \phi^\alpha} \cdot \frac{\partial \phi^\alpha}{\partial q^\beta} \dot{q}^\beta = 0 \text{ für } f(\phi^1, \dots, \phi^n) = 0 \\ \text{und } \dot{f} \Big|_{\dot{q}^1, \dots, \dot{q}^n=0} > 0 \\ = 0 \text{ sonst} \end{cases} \quad (6.27)$$

Ebenso lässt sich mit der Einführung von

$$\lambda = \Lambda^0 \langle f \rangle \quad (6.28)$$

mit den McAuley-Klammern ($\langle f \rangle = 0$ für $f \leq 0$ und $\langle f \rangle = f$ für $f > 0$) eine ratenabhängige Theorie aufstellen, die aber in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt wird. Vor- und Nachteile können der Arbeit von Kamlah und Wang [12] entnommen werden.

6.2 Formulierung des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes

Ausgehend von einer tetragonalen Struktur der Einheitszellen entwickelten Kamlah und Wang [12, 13] ein mikroskopisch motiviertes Stoffgesetz, welches die Ausrichtung der Kristallachsen und die Orientierung der spontanen Polarisation berücksichtigt. In einer tetragonalen Einheitszelle wird zwischen zwei Achsen unterschieden (vgl. Kapitel 2). Zum

Zum einen ist das die so genannte c-Achse, die etwa um 1% länger ist als die andere Achse, die so genannte a-Achse. Bereiche in Körnern von Ferroelektrika, welche die gleiche Ausrichtung der c-Achsen besitzen, nennt man, wie zuvor schon erwähnt wurde, Domänen. Unter kritischen Belastungen kann die c-Achse einer tetragonalen Einheitszelle entweder in die entgegengesetzt gerichtete Richtung umklappen, was man als 180°-Umklappvorgang bezeichnet oder sie kann um 90° umklappen, was durch einen Übergang der c-Achse in die a-Achse (und umgekehrt) gekennzeichnet ist. Bei einem 180°-Umklappvorgang der tetragonalen Einheitszelle ist keine Dehnungsänderung zu verzeichnen. Lediglich der Polarisationsvektor dreht sich um 180°. Der 90°-Umklappvorgang geht mit einer Dehnungsänderung und einer Rotation des Polarisationsvektors um 90° einher.

6.2.1 *Eindimensionale Betrachtungsweise*

Im Folgenden sollen diese mikroskopischen Vorgänge, wie sie sich auch im Stoffgesetz wieder finden, näher betrachtet werden. Hierzu werden innere Variablen q^1, \dots, q^n eingeführt, die den mikroskopischen Zustand anhand von makroskopischen Durchschnittswerten beschreiben. Zunächst wird aus Anschauungsgründen von einer eindimensionalen Darstellung ausgegangen. Später wird dann noch die vollständige dreidimensionale Formulierung angegeben.

In Abbildung 6.1 ist die Projektion einer Kugel mit dem Radius 1 mit zwei Kegeln, deren Rotationsachsen parallel zur Belastungsachse liegen, welche hier mit x_3 bezeichnet wird, und die Ausrichtung der c-Achsen sowie die Orientierungen der Polarisationsvektoren gezeigt. Die Kugel repräsentiert einen mikroskopischen Ausschnitt aus einem Kontinuum. Mit Hilfe der Kegel soll die mikroskopische Verteilung der c-Achsen beschrieben werden.

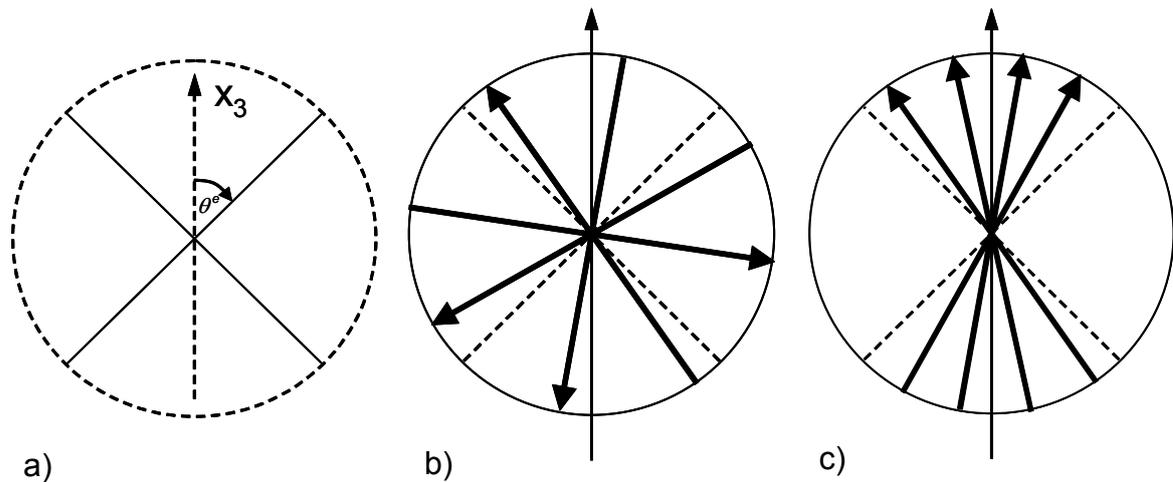


Abbildung 6.1: Projektion einer Kugel mit zwei Kegeln um die Belastungsachse x_3

Die Kegel besitzen einen Öffnungswinkel, der mit θ^e bezeichnet wird (vgl. Abbildung 6.1 a)). In Abbildung 6.1 b) ist der thermisch depolarisierte Ausgangszustand gezeigt, bei dem die Verteilung der c-Achsen gleichmäßig über die Kugel ist. Die c-Achsen werden durch in die Kugel eingezeichneten Linien symbolisiert. Zu jeder c-Achse findet sich zusätzlich die Ausrichtung der spontanen Polarisation. Deutlich zu erkennen ist, dass im vorgestellten Fall, die über die Kugel gemittelte Polarisation bzw. Dehnung gleich Null ist. Die erste innere Variable $q^1 = \beta$, die aus Abbildung 6.1 identifiziert werden kann, ist der Anteil der c-Achsen, die innerhalb der Kegel liegen. Der Wertebereich für β ergibt sich dann zu $\beta \in [0;1]$, wobei die Null für den Fall steht, dass keine c-Achsen in den Kegeln vorhanden sind (z.B. mechanische Druckbelastung entlang der Belastungsachse). Im Falle $\beta = 1$ sind alle c-Achsen innerhalb der Kegel (vgl. Abbildung 6.1 c)), was bspw. bei einer elektrischen Belastung in Richtung x_3 auftritt. Der Anteil von β in den Kegeln ist direkt mit der makroskopischen irreversiblen Dehnung S_{ij}^i korreliert (im Beispiel: $\beta = 1 \Rightarrow S_{33}^i = S^{sat}$). Betrachtet man nun den thermisch depolarisierten Ausgangszustand, so ergibt sich für diesen Fall, dass β einen Referenzwert β^{ref} annimmt, da in der ungepolten Keramik immer ein gewisser Anteil der c-Achsen innerhalb der Kegel liegt.

Der Öffnungswinkel der Kegel θ^e und die innere Variable β haben eine physikalische Bedeutung, die sich anhand einer transversal isotropen Orientierungsverteilungsfunktion auf mikromechanischer Ebene darstellen lässt. Die Orientierungsverteilungsfunktion

$$p(\theta) = \begin{cases} \frac{\beta}{4\pi(1-\cos\theta^e)} & \text{für } 0 \leq \theta \leq \theta^e \text{ und } \pi-\theta^e \leq \theta \leq \pi \\ \frac{1-\beta}{4\pi\cos\theta^e} & \text{für } \theta^e < \theta < \pi-\theta^e \end{cases}, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (6.29)$$

bestimmt die Verteilung der c-Achsen in der Kugel mit dem Radius 1 und damit ist durch sie die Domänenverteilungsdichte festgelegt. Eine grafische Darstellung dieser Funktion im Bereich $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ (Symmetrie) ist in Abbildung 6.2 gezeigt.

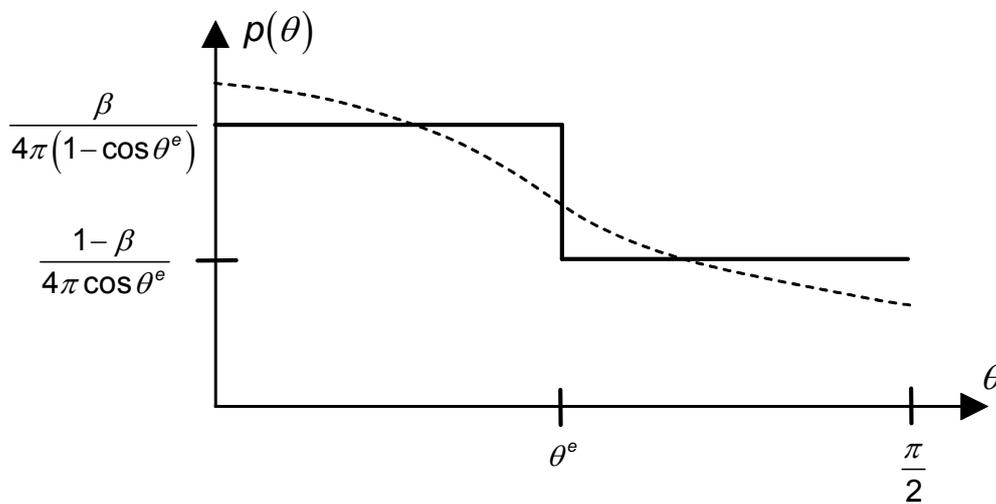


Abbildung 6.2: *Transversal isotrope Orientierungsverteilungsfunktion $p(\theta)$ für die Domänenverteilungsdichte. Die gestrichelte Linie ist der tatsächliche Verlauf und die durchgezogene Linie die im Stoffgesetz verwendete Näherung*

Die beiden Variablen θ^e und β nähern die tatsächlich Orientierungsverteilungsfunktion (dargestellt durch eine gestrichelte Linie) mittels einer Stufenfunktion (durchgezogene Linie) an. Durch die zwei gewählten Stufen ist die Orientierungsverteilung transversal isotrop, d.h. dass es bezogen auf das betrachtete Koordinatensystem zwei Richtungen - die vertikale und die radiale Richtung - gibt, denen sich die c-Achsen zuordnen lassen (in Abhängigkeit des Öffnungswinkels θ^e). Der Öffnungswinkel der Kegel θ^e , der eine Materialkonstante ist, sollte so gewählt werden, dass eine möglichst gute Annäherung an den tatsächlichen Verlauf der Orientierungsverteilungsfunktion erzielt wird. Eine noch genauere Approximation wäre durch zusätzliche Schritte in der Stufenfunktion möglich, was aber

zu einer Erhöhung der Parameteranzahl und damit zu einer komplexeren Formulierung des Stoffgesetzes führen würde. Der Vorschlag von Kamlah und Wang [12, 13] für eine zweistufige Orientierungsverteilungsfunktion ist hinsichtlich der höheren Komplexität ausreichend genau für die Beschreibung des makroskopischen Verhaltens von Ferroelektrika.

Betrachtet man nun die spontane Dehnung S^{spon} einer Einheitszelle, erhält man die makroskopische irreversible Dehnung S_{33}^i in Richtung der Belastungsachse aus Abbildung 6.1 mittels Integration über die Orientierungsverteilungsfunktion aus Gleichung 6.29:

$$S_{33}^i = \frac{1}{2}(\beta + \beta \cos \theta^e - \sin^2 \theta^e) S^{spon}. \quad (6.30)$$

Im Falle von $\beta = 1$, d.h. alle c-Achsen sind in die Kegel geklappt, erreicht die irreversible Dehnung die Sättigungsdehnung

$$S^{sat} = \frac{1}{2} \cos \theta^e (1 + \cos \theta^e) S^{spon}. \quad (6.31)$$

Gleichung 6.31 in 6.30 eingesetzt führt zu

$$S_{33}^i(\beta) = \frac{\beta + \beta \cos \theta^e - \sin^2 \theta^e}{\cos \theta^e (1 + \cos \theta^e)} S^{sat}. \quad (6.32)$$

Für den thermisch depolarisierten Fall, der zuvor bereits beschrieben wurde, erhält man aus Gleichung 6.29 den Referenzwert für β zu

$$\beta^{ref} = 1 - \cos \theta^e \quad (6.33)$$

für $p(\theta) = \text{konst.}$ in $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$.

Damit lässt sich Gleichung 6.32 umschreiben zu

$$S_{33}^i(\beta) = S^{sat} \frac{\beta - \beta^{ref}}{1 - \beta^{ref}}. \quad (6.34)$$

Mit den Grenzen für β lässt sich der folgende Wertebereich für Gleichung 6.34 für die irreversible Dehnung bei einer eindimensionalen Belastung finden:

$$-S^{sat} \frac{\beta^{ref}}{1-\beta^{ref}} \leq S_{33}^i(\beta) \leq S^{sat}. \quad (6.35)$$

Dies entspricht auch der zu erwartenden Asymmetrie bei Ferroelektrika für die maximale bzw. minimale irreversible Dehnung, die bei Zug- und Druckbelastung im Experiment zu beobachten ist (vgl. Kapitel 2 und 3). Durch eine sorgfältige Wahl von θ^e können realistische Werte für diese Größen gefunden werden. Kamlah und Wang [12] schlagen unter Berücksichtigung der Ergebnisse von Fröhlich [83] und Landis [84] Grenzen für θ^e bei einer tetragonalen Struktur von $48^\circ \leq \theta^e \leq 64^\circ$ vor, für die sie eine sehr gute Übereinstimmung der skalaren Auswertung von Gleichung 6.35 mit den Ergebnissen aus der Literatur fanden.

Betrachtet man nun den Polungsprozess (vgl. Abbildung 6.1 c)) genauer, bei dem eine elektrische Belastung in Richtung der Belastungsachse aufgebracht wird, wird sofort offensichtlich, dass β als einzige innere Variable nicht ausreichend ist, um den mikroskopischen Zustand innerhalb der Einheitskugel aus Abbildung 6.1 zu beschreiben. Es wird eine zweite innere Variable $q^2 = \gamma$ eingeführt, die den Zustand der relativen makroskopischen Polarisierung innerhalb der Einheitskugel wiedergibt:

$$\gamma = \frac{\|P_i^i\|}{P^{sat}}. \quad (6.36)$$

Für einen vorgegebenen Orientierungszustand, bei dem alle spontanen Dipole in positive x_3 -Richtung (vgl. Abbildung 6.1) ausgerichtet liegen, führt eine Integration über die Orientierungsverteilungsfunktion aus Gleichung 6.29 zur maximalen irreversiblen Polarisierung

$$P_3^{i, \max} = \frac{1}{2} \beta (1 + \cos \theta^e) P^{spon} + \frac{1}{2} (1 - \beta) \cos \theta^e P^{spon} \quad (6.37)$$

für ein gegebenes β . Dabei steht der erste Term in Gleichung 6.37 für den Beitrag zur Polarisierung von Domänen innerhalb der Kegel und der zweite Term für den Beitrag von Domänen außerhalb der Kegel. Zusammengefasst lautet die Gleichung für die maximale irreversible Polarisierung:

$$P_3^{i, \max} = \frac{1}{2} P^{spon} (\beta + \cos \theta^e). \quad (6.38)$$

Der maximale Wert bzw. Sättigungswert der irreversiblen Polarisation P^{sat} , der im Falle $\beta = 1$, d.h. alle c-Achsen liegen in den Kegeln, erreicht wird, lässt sich durch

$$P^{sat} = \frac{1}{2} P^{spon} (1 + \cos \theta^e) \quad (6.39)$$

ausdrücken, was sich leicht durch Einsetzen von $\beta = 1$ in Gleichung 6.38 nachvollziehen lässt. Kamlah und Wang [12] überprüften diese Gleichung für $\theta^e = 48^\circ$ und fanden dafür eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Fröhlich [83], der sich auf Baerwald [85] bezieht.

Im thermisch depolarisierten Ausgangszustand ist $\gamma = 0$, da makroskopisch keine Polarisation zu beobachten ist. Die innere Variable γ ist nicht ganz unabhängig von β , so dass das Maximum bzw. Minimum von $\gamma = \pm 1$ nur dann erreicht werden kann, wenn alle c-Achsen innerhalb der Kegel liegen. Dagegen verbleibt eine irreversible Restpolarisation

$$|\gamma| \leq \gamma^{\max, \parallel, \text{limit}}, \quad (6.40)$$

falls alle c-Achsen außerhalb der Kegel liegen (hier zunächst nur für den eindimensionalen Fall). Für Werte $0 \leq \beta \leq 1$ ist die maximal mögliche irreversible Polarisation eine Funktion von β in der Form

$$|\gamma| \leq \gamma^{\max, \parallel}(\beta). \quad (6.41)$$

Schließlich geben Kamlah und Wang [12, 13] Eigenschaften an, welche die monotone Funktion $\gamma^{\max, \parallel}(\beta)$ aufweisen muss, um das Verhalten von Ferroelektrika wiederzugeben:

$$\gamma^{\max, \parallel}(0) \geq 0 \quad (6.42)$$

$$\frac{d\gamma^{\max, \parallel}(\beta)}{d\beta} \geq 0 \quad \text{für } 0 \leq \beta \leq 1 \quad (6.43)$$

$$\gamma^{\max, \parallel}(1) = 1. \quad (6.44)$$

Daraus ergibt sich der zulässige Bereich für β und γ zu

$$\mathbf{G} = \{(\beta, \gamma) \mid |\gamma| \leq \gamma^{\max, \parallel}(\beta), 0 \leq \beta \leq 1\}. \quad (6.45)$$

In Abbildung 6.3 ist der Zusammenhang zwischen den beiden inneren Variablen β und γ grafisch dargestellt. Dabei lässt sich der zulässige Bereich G als Region definieren, in dem die inneren Variablen β und γ liegen müssen und den sie nicht verlassen dürfen. Die Begrenzung des Bereiches G wird im Folgenden als ∂G bezeichnet.

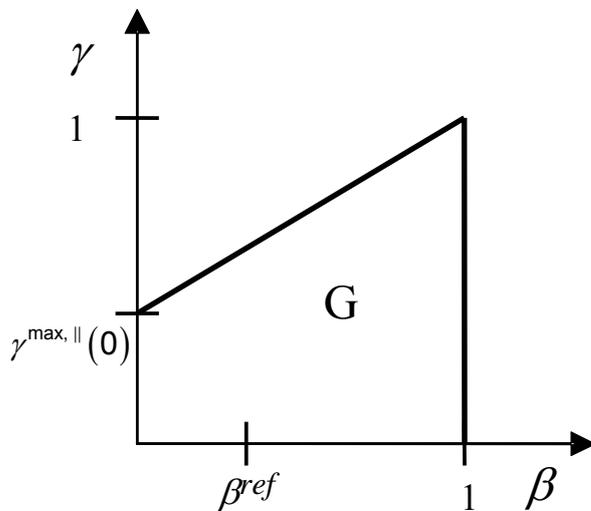


Abbildung 6.3: Zulässiger Bereich G für die inneren Variablen β und γ

Gleichungen 6.42 bis 6.44 werden von

$$|\gamma| \leq \gamma^{\max, ||}(\beta) = \frac{\beta + \cos \theta^e}{1 + \cos \theta^e} = \frac{\beta - \beta^{\text{ref}} + 1}{2 - \beta^{\text{ref}}} \quad (6.46)$$

erfüllt.

6.2.2 Dreidimensionale Fortsetzung und Erweiterung des Stoffgesetzes

Im Folgenden werden die oben beschriebenen Zusammenhänge dreidimensional erweitert und die Formulierung des Stoffgesetzes auf diese Weise fortgesetzt. Hierzu werden weitere innere Variablen eingeführt, da in der Mehrdimensionalität eine statisch festliegende Ausrichtung der Kegel innerhalb der Einheitskugel nicht mehr ausreichend ist, um die mi-

mikroskopischen Umklappvorgänge ausreichend beschreiben zu können. Deswegen wird zunächst ein Einheitsvektor $\mathbf{q}^3 = \mathbf{e}_i^\beta$ mit

$$\mathbf{e}_i^\beta = \mathbf{e}_1^\beta \vec{\mathbf{e}}_1 + \mathbf{e}_2^\beta \vec{\mathbf{e}}_2 + \mathbf{e}_3^\beta \vec{\mathbf{e}}_3 \quad (6.47)$$

eingeführt, der die Lage der transversal isotropen Orientierungsverteilungsfunktion im Raum festlegt. Dabei sind $\vec{\mathbf{e}}_1, \vec{\mathbf{e}}_2, \vec{\mathbf{e}}_3$ die Einheitsbasisvektoren des kartesischen Koordinatensystems. Diese Lage im Raum ist von der Belastungsgeschichte abhängig und der Anteil der c-Achsen in den Kegeln, der durch die innere Variable β ausgedrückt wird, ist damit in seiner Orientierung eindeutig bestimmt.

In Folge der Orientierungsverteilungsfunktion der Domänen ergibt sich die irreversible Dehnung zu

$$\mathbf{S}_{ij}^i = \frac{3}{2} \mathbf{S}^{\text{sat}} \frac{\beta - \beta^{\text{ref}}}{1 - \beta^{\text{ref}}} \left(\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_j^\beta - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \quad (6.48)$$

mit dem Kronecker-Delta δ_{ij} (für $i = j \Rightarrow \delta_{ij} = 1$ und für $i \neq j \Rightarrow \delta_{ij} = 0$).

Da die Richtungen \mathbf{e}_i^β der Orientierungsverteilungsfunktion und der irreversiblen Polarisation aufgrund der Belastungsgeschichte nicht miteinander übereinstimmen müssen, wird eine weitere innere Variable $\mathbf{q}^4 = \mathbf{e}_i^\gamma$ mit

$$\mathbf{e}_i^\gamma = \mathbf{e}_1^\gamma \vec{\mathbf{e}}_1 + \mathbf{e}_2^\gamma \vec{\mathbf{e}}_2 + \mathbf{e}_3^\gamma \vec{\mathbf{e}}_3 \quad (6.49)$$

eingeführt, welche die Richtung der irreversiblen Polarisation geschichtsabhängig festlegt.

Hierdurch lässt sich die irreversible Polarisation durch

$$\mathbf{P}_i^i = \gamma \mathbf{P}^{\text{sat}} \mathbf{e}_i^\gamma \quad (6.50)$$

ausdrücken.

Da \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ im Allgemeinen einen beliebigen Winkel mit $|\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma| < 1$ einschließen, muss der zulässige Bereich G erweitert werden. Falls $\mathbf{e}_i^\beta = \mathbf{e}_i^\gamma$, ist der maximale Wert für $|\gamma| = \gamma^{\text{max, ||}}(\beta)$ nach Gleichung 6.46. Im Falle, dass \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ rechtwinklig zueinander stehen, erhält man aus Integration über der Orientierungsverteilungsfunktion das maximale $|\gamma| = \gamma^{\text{max, } \perp}(\beta)$ mit

$$\gamma^{\max, \perp}(\beta) = \frac{\pi - 2\theta^e + \sin 2\theta^e}{\pi \cos \theta^e (1 + \cos \theta^e)} + \left(\frac{2\theta^e - \sin 2\theta^e}{\pi (1 - \cos^2 \theta^e)} - \frac{\pi - 2\theta^e + \sin 2\theta^e}{\pi \cos \theta^e (1 + \cos \theta^e)} \right) \beta. \quad (6.51)$$

Für einen beliebigen Winkel $\cos|\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma|$ wird eine lineare Interpolation zwischen den beiden Fällen zu

$$\gamma^{\max}(\beta, \mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma) = \gamma^{\max, \perp}(\beta) + (\gamma^{\max, \parallel}(\beta) - \gamma^{\max, \perp}(\beta)) |\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma| \quad (6.52)$$

von Kamlah und Wang [12] vorgeschlagen.

Dadurch ergibt sich der zulässige Bereich zu

$$\mathbf{G} = \left\{ (\beta, \gamma, \mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma) \mid 0 \leq |\gamma| \leq \gamma^{\max}(\beta, \mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma) \leq 1, 0 \leq \beta \leq 1 \right\}. \quad (6.53)$$

Eine dreidimensionale Darstellung der Begrenzungsflächen findet sich weiter unten in dieser Arbeit in Abbildung 6.17 im Rahmen eines Berechnungsbeispiels.

Der Piezoelektrizitätstensor d_{ijk} wird entsprechend Gleichung 6.10 gewählt, um eine geschichtsabhängige Anisotropie des piezoelektrischen Verhaltens in das Stoffgesetz einzuführen.

6.2.3 Dreidimensionale Formulierung der Evolutionsgleichungen

Der irreversible Anteil der Gibbschen Energiedichte (vgl. Gleichung 6.13) lautet für den allgemeinen dreidimensionalen Fall:

$$\rho g^i = -\frac{1}{2} \mathbf{c}^\beta (\beta - \beta^{\text{ref}})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{c}^\gamma \gamma^2 - F^G(\beta, \gamma, \mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma), \quad (6.54)$$

wobei \mathbf{c}^β und \mathbf{c}^γ nicht-negative Materialparameter sind, deren Bedeutung weiter unten in dieser Arbeit erläutert wird. Zurückkommend auf Abbildung 6.3, in der der zulässige Bereich G der inneren Variablen β und γ dargestellt ist, gewährleistet die Energiebarrierefunktion F^G , dass β und γ innerhalb des Gebietes bleiben. Kamlah und Wang [12] folgten bei dieser Vorgehensweise Frémond [86]. Es sei noch darauf hingewiesen, dass die Energiebarrierefunktion F^G als einziger verfestigender Parameter für die vektoriellen inneren Variablen \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ in Gleichung 6.54 wirkt. Kamlah und Wang [12] untersuch-

ten mehrere Formen der Energiebarrierefunktion. Die in der vorliegenden Arbeit verwendete Funktion muss die Bedingungen

$$F^G \rightarrow \infty \quad \text{für } (\beta, \gamma, \mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma) \rightarrow \partial G$$

$$F^G = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial F^G}{\partial \beta} = 0; \quad \frac{\partial F^G}{\partial \gamma} = 0 \quad \text{für } (\beta, \gamma) = (\beta^{ref}, 0) \quad \text{für alle } (\mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma) \quad (6.55)$$

erfüllen. Mit der zweiten Zeile der Gleichung 6.55 soll gewährleistet werden, dass die Referenzwerte $(\beta, \gamma) = (\beta^{ref}, 0)$ beibehalten werden, solange noch keine Entwicklung der inneren Variablen initiiert wurde.

Die für diese Arbeit gewählte Form der Energiebarrierefunktion, welche die Bedingungen aus Gleichung 6.55 erfüllt, unterscheidet sich geringfügig von der in Kamlah, Wang [13] vorgeschlagenen Energiebarrierefunktion (in Kamlah und Wang [12] sind weitere mögliche Energiebarrierefunktionen angegeben) und lautet:

$$F^G = A \left(b(\beta) (\beta^{-N} + (1-\beta)^{-N}) + g(\gamma) (\gamma^{\max} - |\gamma|)^{-N} \right), \quad (6.56)$$

wobei A und N positive Konstanten darstellen.

Mit der Einführung zweier Zusatzterme $b(\beta)$ und $g(\gamma)$ wird die Einhaltung der Bedingungen aus Gleichung 6.55 sichergestellt. Die Zusatzterme haben die Form

$$b(\beta) = (\beta - \beta^{ref})^4 \quad (6.57)$$

und

$$g(\gamma) = \gamma^4 \quad (6.58)$$

und müssen den Anforderungen

$$\lim_{\beta \rightarrow \beta^{ref}} b(\beta) = 0; \quad b(\beta) > 0; \quad \beta \neq \beta^{ref}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} g(\gamma) = 0; \quad g(\gamma) > 0; \quad \gamma \neq 0 \quad (6.59)$$

genügen, welche die Erfüllung der Bedingungen für F^G aus Gleichung 6.55 gewährleisten.

Schließlich ergeben sich durch Einsetzen der Gibbschen Energiedichte aus Gleichung 6.54 in Gleichung 6.22 die thermodynamisch konjugierten Kräfte (vgl. Gleichung 6.55) zu

$$\begin{aligned}\phi^\beta &= \frac{3}{2} \cdot \frac{S^{\text{sat}}}{1 - \beta^{\text{ref}}} \left(\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_j^\beta - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) T_{ij} \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \beta}{}_{jklm} T_{jk} T_{lm} + \frac{1}{2} \frac{\partial \kappa_{jk}}{\partial \beta} E_j E_k - \mathbf{c}^\beta (\beta - \beta^{\text{ref}}) - \frac{\partial F^G}{\partial \beta}\end{aligned}\quad (6.60)$$

$$\phi^\gamma = P^{\text{sat}} E_i \mathbf{e}_i^\gamma + \frac{\partial d_{kij}}{\partial \gamma} E_k T_{ij} - \mathbf{c}^\gamma \gamma - \frac{\partial F^G}{\partial \gamma}\quad (6.61)$$

$$\phi_i^{\bar{\beta}} = 3S^{\text{sat}} \frac{\beta - \beta^{\text{ref}}}{1 - \beta^{\text{ref}}} T_{ij} \mathbf{e}_j^\beta + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{e}_i^\beta}{}_{jklm} T_{jk} T_{lm} + \frac{1}{2} \frac{\partial \kappa_{jk}}{\partial \mathbf{e}_i^\beta} E_j E_k - \frac{\partial F^G}{\partial \mathbf{e}_i^\beta}\quad (6.62)$$

$$\phi_i^{\bar{\gamma}} = P^{\text{sat}} \gamma E_i + \gamma \frac{\partial d_{krs}^{\text{sat}}}{\partial \mathbf{e}_i^\gamma} E_k T_{rs} - \frac{\partial F^G}{\partial \mathbf{e}_i^\gamma}.\quad (6.63)$$

Da die inneren Variablen \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ während der gesamten Belastungsgeschichte Einheitsvektoren bleiben müssen, gehen in die später beschriebenen Evolutionsgleichung lediglich die Projektionen

$$\phi_i^{\bar{\beta}, \perp} = \left(\delta_{ij} - \mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_j^\beta \right) \phi_j^{\bar{\beta}}\quad (6.64)$$

und

$$\phi_i^{\bar{\gamma}, \perp} = \left(\delta_{ij} - \mathbf{e}_i^\gamma \mathbf{e}_j^\gamma \right) \phi_j^{\bar{\gamma}}\quad (6.65)$$

der thermodynamisch konjugierten Kräfte $\phi_i^{\bar{\beta}}$ und $\phi_i^{\bar{\gamma}}$ zu einer Ebene rechtwinklig zu den zugehörigen inneren Variablen \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ ein. Das bedeutet, dass der Anteil der thermodynamisch konjugierten Kraft, der in Richtung des jeweiligen Einheitsvektors wirkt und welcher dessen Betrag ändern würde, entfernt wird und nur der Anteil rechtwinklig dazu bestehen bleibt, da dieser für die Rotation des Einheitsvektors verantwortlich ist. Kamlah und Wang [13] weisen in diesem Zusammenhang auf die Theorie der inkrementellen Plastizität hin, bei der die Evolution der volumentreuen plastischen Verzerrung nur vom deviatorischen Spannungszustand abhängig ist.

Aus Gleichungen 6.60 bis 6.63 geht hervor, dass die Triebkräfte hauptsächlich vom elektrischen Feld und der mechanischen Spannung beeinflusst werden. Die Terme, welche die nicht-negativen Konstanten \mathbf{c}^β und \mathbf{c}^γ enthalten, wirken als Rückstellkräfte, die umso größere Wirkung zeigen, je größer die mikrostrukturellen Parameter β und γ sind. Die-

ser Effekt ist ähnlich zur linear kinematischen Verfestigung in der Plastizität. Als mikrostrukturelle Interpretation kann dafür gegeben werden, dass diese Terme das Verhalten repräsentieren, möglichst den ungepolten Ausgangszustand anzunehmen und mit beginnender Polung einen zunehmenden Widerstand aufgrund der Zwängung durch benachbarte Domänen und Körner symbolisieren. An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Terme $\frac{\partial \mathbf{C}_{ijklm}}{\partial \mathbf{e}_i^\beta}$ und $\frac{\partial \kappa_{jk}}{\partial \mathbf{e}_i^\beta}$ in Gleichungen 6.60 und 6.62 keine Anwendung in der vorliegenden Arbeit finden, da eine Geschichtsabhängigkeit des Elastizitäts- und des Suszeptibilitätstensors aus Vereinfachungsgründen ausgeschlossen wurde, was zuvor schon erwähnt wurde. Der interessierte Leser findet die vollständige Herleitung der beiden oben genannten Tensoren in Kamlah und Wang [12]. In dieser Arbeit hat der Ausschluss der Geschichtsabhängigkeit zur Folge, dass die beiden betroffenen Terme in Gleichungen 6.60 und 6.62 wegfallen, da die Ableitungen des Elastizitäts- und Suszeptibilitätstensor gleich Null für diesen Fall sind.

Der Vollständigkeit halber werden im Folgenden die Ableitungen der Energiebarrierefunktion, die in den Gleichungen 6.60 bis 6.63 aufgeführt sind, dargestellt:

$$\frac{\partial F^G}{\partial \beta} = A \left[\left(\frac{\partial b(\beta)}{\partial \beta} - \frac{b(\beta)N}{\beta} \right) \frac{1}{\beta^N} + \left(\frac{\partial b(\beta)}{\partial \beta} + \frac{b(\beta)N}{1-\beta} \right) \frac{1}{(1-\beta)^N} - \frac{g(\gamma)N}{(\gamma^{\max} - |\gamma|)^{N+1}} \left(\frac{\partial \gamma^{\max, \parallel}}{\partial \beta} |\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma| + \frac{\partial \gamma^{\max, \perp}}{\partial \beta} (1 - |\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma|) \right) \right] \quad (6.60a)$$

$$\frac{\partial F^G}{\partial \gamma} = A \left[\frac{\partial g(\gamma)}{\partial \gamma} + g(\gamma) \frac{N \operatorname{sgn} \gamma}{\gamma^{\max} - |\gamma|} \right] \frac{1}{(\gamma^{\max} - |\gamma|)^N} \quad (6.61a)$$

$$\frac{\partial F^G}{\partial \mathbf{e}_k^\beta} = - \frac{ANg(\gamma)}{(\gamma^{\max} - |\gamma|)^{N+1}} \cdot (\gamma^{\max, \parallel}(\beta) - \gamma^{\max, \perp}(\beta)) \cdot \operatorname{sgn}(\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma) \mathbf{e}_k^\gamma \quad (6.62a)$$

$$\frac{\partial F^G}{\partial \mathbf{e}_k^\gamma} = - \frac{ANg(\gamma)}{(\gamma^{\max} - |\gamma|)^{N+1}} \cdot (\gamma^{\max, \parallel}(\beta) - \gamma^{\max, \perp}(\beta)) \cdot \operatorname{sgn}(\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma) \mathbf{e}_k^\beta. \quad (6.63a)$$

Wie bei den thermodynamischen Vorüberlegungen in Abschnitt 6.1 bereits erwähnt wurde, wird durch

$$f = \sqrt{\left(\frac{\phi^\beta}{\phi^{\beta,0}}\right)^2 + \left(\frac{\phi^\gamma}{\phi^{\gamma,0}}\right)^2 + \left(\frac{|\vec{\phi}^{\bar{e}^{\beta,\perp}}|}{\phi^{\bar{e}^{\beta,0}}}\right)^2 + \left(\frac{|\vec{\phi}^{\bar{e}^{\gamma,\perp}}|}{\phi^{\bar{e}^{\gamma,0}}}\right)^2} - 1 \quad (6.66)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi^{\beta,0} &= \frac{S^{\text{sat}} \sigma^c}{1 - \beta^{\text{ref}}}, \quad \phi^{\gamma,0} = P^{\text{sat}} E^c, \\ \phi^{\bar{e}^{\beta,0}} &= \sqrt{3} \sigma^c S^{\text{sat}} \frac{\beta - \beta^{\text{ref}}}{1 - \beta^{\text{ref}}}, \quad \phi^{\bar{e}^{\gamma,0}} = \gamma P^{\text{sat}} E^c \end{aligned} \quad (6.67)$$

eine konvexe Domänenumklappfunktion definiert, die den Ursprung im Raum der thermodynamisch konjugierten Kräfte beinhaltet. Die einfachste Annäherung ist die in Gleichung 6.66 dargestellte Anwendung einer quadratischen Abhängigkeit von den thermodynamisch konjugierten Kräften. Wie bei der inkrementellen Plastizität wird aus Normalisierungsgründen die Quadratwurzel gezogen. Die Parameter $\phi^{\beta,0}$, $\phi^{\gamma,0}$, $\phi^{\bar{e}^{\beta,0}}$, $\phi^{\bar{e}^{\gamma,0}}$ repräsentieren dabei die kritischen Zustände, bei denen irreversibles Verhalten einsetzt. Die Parameter σ^c für die Koerzitivspannung und E^c für die Koerzitivfeldstärke kennzeichnen die Punkte, an denen mechanisch oder elektrisch bedingte Umklappvorgänge einsetzen. Falls $f = 0$, setzen diese Umklappvorgänge ein - im Modell dadurch gekennzeichnet, dass sich die inneren Variablen entsprechend ihrer Evolutionsgleichungen ändern. Falls $f < 0$ bleiben die inneren Variablen konstant und das Stoffgesetz verhält sich rein linear.

Aufgrund der Normalenregel (Gleichung 6.26) sind die inkrementellen Werte der inneren Variablen normal zur konvexen Umklappfläche und können durch die Evolutionsgleichungen

$$\dot{\beta} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^\beta} = \frac{\lambda}{1+f} \left(\frac{1}{\phi^{\beta,0}} \right)^2 \phi^\beta \quad (6.68)$$

$$\dot{\gamma} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^\gamma} = \frac{\lambda}{1+f} \left(\frac{1}{\phi^{\gamma,0}} \right)^2 \phi^\gamma \quad (6.69)$$

$$\dot{\vec{e}}^\beta = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^{\bar{e}^\beta}} = \frac{\lambda}{1+f} \left(\frac{1}{\phi^{\bar{e}^{\beta,0}}} \right)^2 \vec{\phi}^{\bar{e}^{\beta,\perp}} \quad (6.70)$$

$$\dot{\mathbf{e}}^{\gamma} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^{\bar{\alpha}^{\gamma}}} = \frac{\lambda}{1+f} \left(\frac{1}{\phi^{\bar{\alpha}^{\gamma},0}} \right)^2 \vec{\phi}^{\bar{\alpha}^{\gamma},1} \quad (6.71)$$

dargestellt werden. Dieses System mit 8 gewöhnlichen Differenzialgleichungen muss nun im Folgenden in der Finite-Elemente-Implementierung gelöst werden. Hierzu wird die Formulierung des Stoffgesetzes in kartesischen Koordinaten mit Zwangsbedingungen, die geeignet für die physikalische Motivation sind, größtenteils in generalisierte (unabhängige) Koordinaten übergeführt, so dass die Zwangsbedingungen identisch erfüllt sind (vgl. Hauger et al. [87]). Dadurch erübrigen sich die Zwangsbedingungen, auf die später eingegangen wird, in der kartesischen Formulierung und die Gleichungszahl wird dadurch reduziert. Im folgenden Abschnitt wird diese Transformation beschrieben.

6.3 Finite-Elemente-Implementierung

Nachdem in den beiden vorangegangenen Abschnitten das Stoffgesetz von Kamlah und Wang [12, 13] in einer für eine Finite-Elemente-Implementierung passenden Form dargestellt und aufbereitet wurde, wird in diesem Abschnitt die Implementierung des Stoffgesetzes in das Open Source-Finite-Elemente-Programm PSU [7], das bereits bei der Implementierung des phänomenologischen Modells aus Kapitel 5 verwendet wurde, beschrieben. Da der Rechenaufwand mit zunehmender Anzahl der zu lösenden gewöhnlichen Differenzialgleichungen zunimmt, wurde aus diesem Grund das Stoffgesetz in eine Darstellung mit generalisierten Koordinaten übergeführt, was zu einer Reduzierung der Gleichungszahl führt. Deswegen werden im Folgenden die Änderungen vorgestellt, um dem Leser einen vollständigen Einblick in das vorliegende Verfahren zu ermöglichen.

6.3.1 Darstellung der vektoriellen inneren Variablen in generalisierten Koordinaten

Durch die Überführung der vektoriellen inneren Variable \mathbf{e}_i^{β} aus dem kartesischen Koordinatensystem in generalisierte Koordinaten entfallen zwei Differenzialgleichungen, was zu einer schnelleren Rechenzeit führt und zusätzlich numerischen Problemen (Rundungsfehler) bezüglich der Norm der vektoriellen inneren Variablen, die gleich Eins sein muss (Zwangsbedingung), vorbeugt (es handelt sich bei den vektoriellen inneren Variablen um Einheitsvektoren).

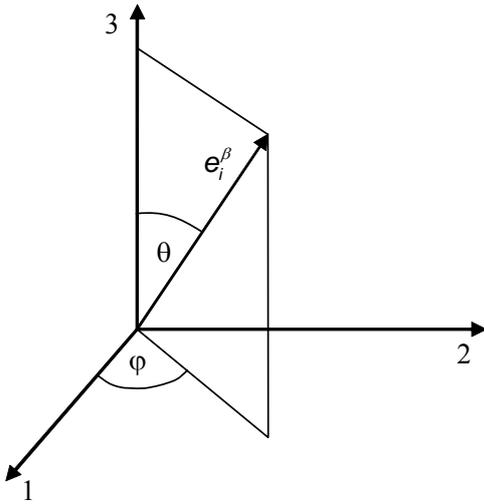


Abbildung 6.4: Generalisierte Koordinaten für \mathbf{e}_i^β

In Abbildung 6.4 ist der Vektor \mathbf{e}_i^β in generalisierten Koordinaten dargestellt. Im Übrigen lassen sich im Folgenden auf unterschiedliche Koordinatensysteme angewandt weitere Darstellungen finden, falls es zu numerischen Problemen wie Divisionen durch Null kommen sollte (vgl. Evolutionsgleichungen weiter unten), die auch Eingang in die Finite-Elemente-Implementierung fanden. Unter Berücksichtigung, dass es sich bei dem Vektor \mathbf{e}_i^β um einen Einheitsvektor handelt, findet sich seine Darstellung in generalisierten Koordinaten zu

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^\beta &= \sin \theta \cos \varphi \\ \mathbf{e}_2^\beta &= \sin \theta \sin \varphi . \\ \mathbf{e}_3^\beta &= \cos \theta \end{aligned} \tag{6.72}$$

Um die innere Variable γ und \mathbf{e}_i^γ darzustellen, wird der Anteil an der irreversiblen Polarisation durch

$$\gamma \mathbf{e}_i^\gamma = \gamma_1 \bar{\mathbf{e}}_1 + \gamma_2 \bar{\mathbf{e}}_2 + \gamma_3 \bar{\mathbf{e}}_3 \tag{6.73}$$

mit der Hilfe der Einheitsvektorenbasis des kartesischen Koordinatensystems ausgedrückt.

Aus Gleichung 6.73 ergibt sich für γ und \mathbf{e}_i^γ dann

$$\gamma = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2} \tag{6.74}$$

und

$$\mathbf{e}_i^\gamma = \frac{\gamma_k}{\gamma}. \quad (6.75)$$

Wie man aus der obigen Darstellung sieht, wird durch eine Zusammenfassung von γ und \mathbf{e}_i^γ und die Überführung von \mathbf{e}_i^β in generalisierte Koordinaten mit den neuen inneren Variablen θ und φ die Anzahl der inneren Variable um zwei reduziert. Zugleich ist damit gewährleistet, dass der Einheitsvektor \mathbf{e}_i^β immer die Länge gleich Eins besitzt (Zwangsbedingung identisch erfüllt).

Durch die zuvor genannten Schritte ergeben sich zum Teil transformierte Evolutionsgleichungen, die im Folgenden dargestellt werden. Zum einen ergibt sich für die nun vektorielle innere Variable γ_i die Evolutionsgleichung mit der Hilfe der Kettenregel zu

$$\dot{\gamma}_i = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^\gamma} \mathbf{e}_i^\gamma + \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi_i^{\bar{\epsilon}^\gamma}} \gamma = \frac{\lambda}{1+f} \left(\frac{\phi^\gamma}{(\phi^{\gamma,0})^2} \mathbf{e}_i^\gamma + \frac{\phi_i^{\bar{\epsilon}^\gamma, \perp}}{(\phi^{\bar{\epsilon}^\gamma, 0})^2} \gamma \right) \quad (6.76)$$

mit den thermodynamisch konjugierten Kräften aus Gleichungen 6.61 und 6.65 und den kritischen Zustandsbedingungen aus Gleichung 6.67.

Die Überführung der vektoriellen inneren Variablen \mathbf{e}_i^β in generalisierte Koordinaten hat zur Folge, dass sich zwei neue innere Variablen für die Winkel θ und φ mit den Evolutionsgleichungen

$$\dot{\theta} = \frac{\cos \varphi}{\cos \theta} \dot{\epsilon}_1^\beta + \frac{\sin \varphi}{\cos \theta} \dot{\epsilon}_2^\beta \quad (6.77)$$

und

$$\dot{\varphi} = -\frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \dot{\epsilon}_1^\beta + \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \dot{\epsilon}_2^\beta \quad (6.78)$$

aus Gleichung 6.72 ableiten lassen, wobei sich die verwendeten Komponenten der Evolutionsgleichung des Einheitsvektors \mathbf{e}_i^β (vgl. Gleichung 6.70) zu

$$\dot{\epsilon}_1^\beta = \frac{\lambda}{1+f} \cdot \frac{\phi_1^{\bar{\epsilon}^\beta, \perp}}{(\phi^{\bar{\epsilon}^\beta, 0})^2} = \frac{\lambda}{1+f} \cdot \frac{\phi_1^{\bar{\epsilon}^\beta} - \mathbf{e}_1^\beta \mathbf{e}_j^\beta \phi_j^{\bar{\epsilon}^\beta}}{(\phi^{\bar{\epsilon}^\beta, 0})^2} \quad (6.79)$$

und

$$\dot{\mathbf{e}}_1^\beta = \frac{\lambda}{1+f} \cdot \frac{\phi_2^{\bar{\mathbf{e}}^{\beta,\perp}}}{(\phi^{\bar{\mathbf{e}}^{\beta,0}})^2} = \frac{\lambda}{1+f} \cdot \frac{\phi_2^{\bar{\mathbf{e}}^\beta} - \mathbf{e}_2^\beta \mathbf{e}_j^\beta \phi_j^{\bar{\mathbf{e}}^\beta}}{(\phi^{\bar{\mathbf{e}}^{\beta,0}})^2} \quad (6.80)$$

ergeben.

Die Evolutionsgleichung für β aus Gleichung 6.68 ändert sich nicht.

6.3.2 Integrationsverfahren in der Finite-Elemente-Implementierung

Bevor die in dieser Arbeit betrachtete Finite-Elemente-Implementierung eingehend erläutert wird, soll an dieser Stelle ein Überblick über gängige numerische Integrationsverfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differenzialgleichungssystemen, wie sie in der Implementierungspraxis häufig vorkommen, gegeben werden. Analytische Lösungen sind aufgrund der Komplexität der vorhandenen Gleichungen selten möglich, weswegen numerische Verfahren bevorzugt verwendet werden. Allerdings haben die numerischen Verfahren, insbesondere hinsichtlich der Konvergenz der Algorithmen und der Rechengeschwindigkeit, Nachteile gegenüber analytischer Verfahren, weswegen bei jeder Finite-Elemente-Implementierung diese Punkte eingehend betrachtet werden müssen, um ein optimales Lösungsverfahren für das jeweilige Problem zu finden.

Der folgende Überblick über numerische Verfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differenzialgleichungssystemen stellt nicht den Anspruch umfassend zu sein. Tiefer gehende Informationen zu den behandelten Lösungsverfahren und weitere Möglichkeiten finden sich bspw. in Simo et al. [67, 68], Quarteroni et al. [88] und Wriggers [89] und vielen anderen Lehrbüchern zur numerischen Mathematik und Finite-Elemente-Methode.

Zunächst soll aber anhand der Abbildung 6.5 das prinzipielle Verfahren zur inkrementellen Lösung des Anfangsrandwertproblems in der Finite-Elemente-Methode erläutert werden. Dabei wird zwischen der *globalen* Newtoniteration, welche das Finite-Elemente-Programm zur Ermittlung des Gleichgewichtes und der Erfüllung der Energiekriterien durchführt und auf die nur beschränkt Einfluss ausgeübt werden kann, und der *lokalen* Newtoniteration, welche im so genannten „Materialmodul“ vonstatten geht und die Hauptbestandteil der nachfolgenden Ausführungen ist, unterschieden.

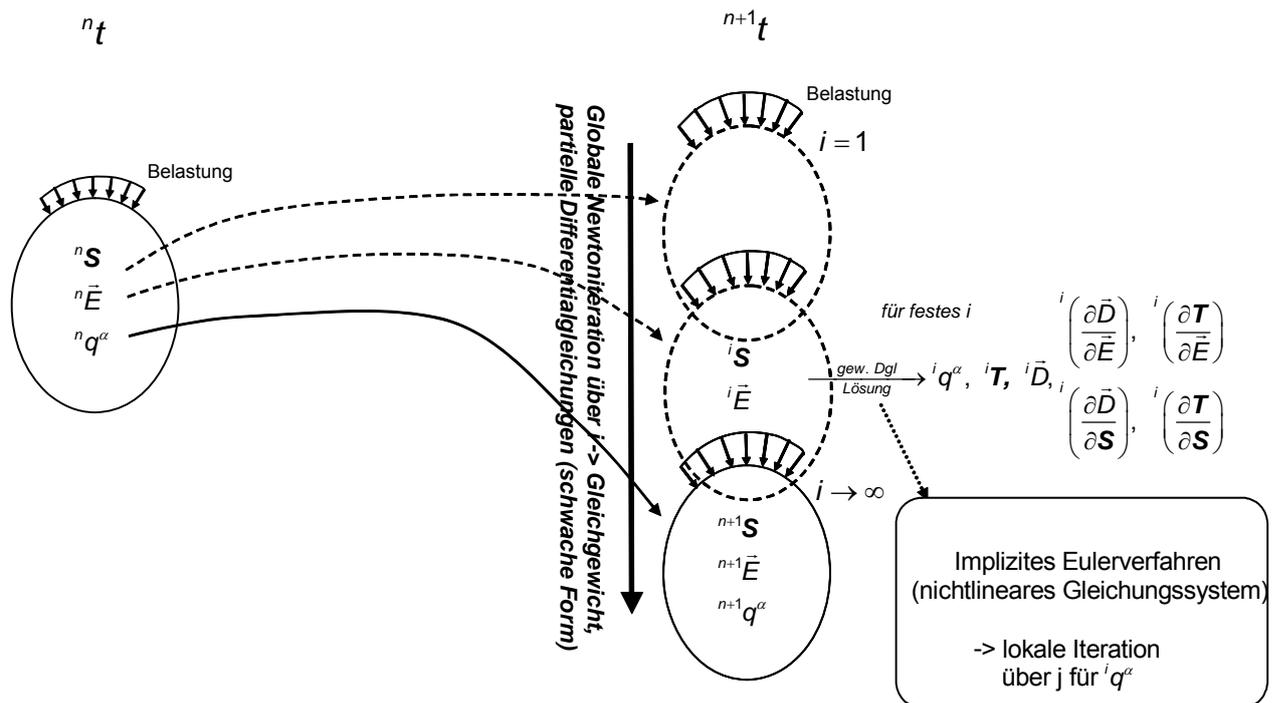


Abbildung 6.5: Inkrementelle Lösung des Anfangsrandwertproblems in der nichtlinearen Finite-Elemente-Methode

Ausgehend vom Zustand zum Zeitpunkt t (Anfang des Zeitinkrementes) auf der linken Seite der Abbildung sind die Größen aus dem letzten Lastschritt bekannt und werden mit dem Index n bezeichnet. Für ein elektromechanisches Problem sind das der Verzerrungstensor ${}^n \mathbf{S}_{ij}$, der elektrische Feldvektor ${}^n \mathbf{E}_i$ und die inneren Variablen ${}^n q^\alpha$ zum Zeitpunkt n . Nun liefert die globale Newtoniteration des Finite-Elemente-Programms mittels der Gleichgewichtsbildung und der Lösung des partiellen Differentialgleichungssystems (schwache Form) Vorschlagswerte für den Verzerrungstensor ${}^i \mathbf{S}_{ij}$ und dem elektrischen Feldvektor ${}^i \mathbf{E}_i$, die im so genannten ‚Materialmodul‘ in das gewöhnliche Differentialgleichungssystem mit den inneren Variablen ${}^n q^\alpha$ als Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt n aus den Evolutionsgleichungen eingehen, das mit der Hilfe numerischer Verfahren gelöst wird. Dabei findet in der Regel eine Iteration über die inneren Variablen (in Abbildung 6.5 mit dem Index j gekennzeichnet) mit festgehaltenen ${}^i \mathbf{S}_{ij}$ und ${}^i \mathbf{E}_i$ statt, bis der Zustand der inneren Variablen ${}^i q^\alpha = {}^{n+1} q^\alpha$ zum Zeitpunkt $n+1$ (${}^{n+1} \mathbf{S}_{ij}$ und ${}^{n+1} \mathbf{E}_i$) gefunden ist. Dazu soll das numerische Verfahren in der Praxis möglichst wenige Schritte erfordern; allerdings soll an dieser Stelle erwähnt sein, dass eine exakte Lösung nur für $i \rightarrow \infty$ erzielt wird. Aus diesem neuen Zustand zum Iterationsschritt i werden der mecha-

nische Spannungstensor ${}^i T_{ij}$, der dielektrischen Verschiebungsvektor ${}^i D_i$ und die Materialtangente $\left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j} \right)$, $\left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k} \right)$, $\left(\frac{\partial D_i}{\partial S_{jk}} \right)$ und $\left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right)$ berechnet, bis letztendlich der Zustand zum Zeitpunkt $i = n+1$ für $i \rightarrow \infty$ gefunden ist. Danach werden die zuvor genannten Größen an das Finite-Elemente-Programm zurückgegeben, welches dann in der Regel anhand eines Energie- und Residualkriteriums prüft, ob diese Lösung innerhalb der Toleranzschranken der Finite-Elemente-Methode liegt. Trifft dies zu, so wird das Inkrement beendet und aus den zurückgegebenen Werten neue Vorschlagswerte für ${}^n S_{ij}$ und ${}^n E_i$ (${}^{n+1} S_{ij}$ und ${}^{n+1} E_i$ für $i \rightarrow \infty$) berechnet und ein neues Inkrement gebildet. Falls die zurückgegebene Lösung außerhalb der Toleranz liegt, werden im Allgemeinen die Vorschlagswerte mit der globalen Newtonmethode erneut berechnet, innerhalb des Materialmoduls eine neue Lösung (neues i) errechnet und schließlich geprüft. Falls nach einer vorgegebenen Anzahl von globalen Iterationen keine Konvergenz erzielt werden kann, wird in der Regel das Lastinkrement verkleinert und neue Vorschlagswerte für S_{ij} und E_i berechnet und wieder an das Materialmodul übergeben, bis letztendlich Konvergenz erzielt oder die Rechnung abgebrochen wird.

Nach dieser kurzen Zusammenfassung des prinzipiellen Vorgehens in der nichtlinearen Finite-Elemente-Methode werden in den folgenden Abschnitten einige bedeutsame Methodiken vorgestellt, um gewöhnliche Differenzialgleichungssysteme numerisch zu lösen. Unterschieden wird bei den numerischen Verfahren zwischen expliziten und impliziten Verfahren (vgl. Quarteroni et al. [88], Wriggers [89]). Verfahren, die es ermöglichen, die Differenzialgleichung $\dot{q}(t, q) = f(q)$ in Abhängigkeit der Werte aus dem vorangegangenen Lastschritt zum Zeitpunkt ${}^n t$ (ohne aufwändige Lösung eines Gleichungssystems) zu lösen, nennt man explizit. Implizite Verfahren hängen über $f(q)$ auch implizit von sich selbst ab. Hierbei sind in der Regel nichtlineare Gleichungssysteme bspw. mit dem Newton-Verfahren zu lösen. Ein Vergleich zwischen verschiedenen Verfahren für die numerische Integration piezoelektrischer konstitutiver Stoffgesetze findet sich in Quarteroni et al. [88]. Es wird festgestellt, dass explizite Verfahren für steife Differenzialgleichungen - wie im vorliegenden Fall des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes - weniger geeignet sind als implizite Verfahren.

Explizites Eulerverfahren

Ein wichtiges explizites Verfahren ist das explizite Eulerverfahren. In Abbildung 6.6 ist das explizite Eulerverfahren, das auf einer Taylorreihenentwicklung basiert, in einer Prinzipskizze dargestellt. Dabei soll $\dot{q} = f(q)$ eine gewöhnliche Differenzialgleichung sein, deren Lösung zum Zeitpunkt ${}^n t$ (Anfang des Zeitinkrementes) bekannt und deren Lösung q zum Zeitpunkt ${}^{n+1} t$ (Ende des Zeitinkrementes) gesucht sei.

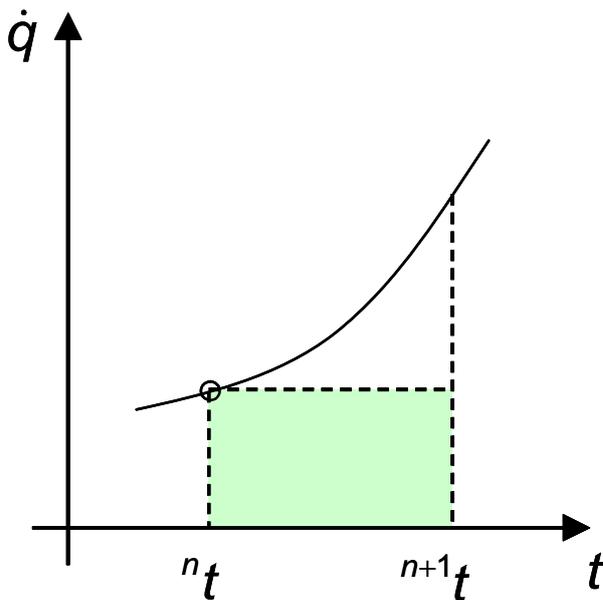


Abbildung 6.6: Prinzip des expliziten Eulerverfahrens

Ausgehend vom Zeitpunkt ${}^n t$, an dem alle Größen bekannt sind, wird die Differenzialgleichung in einem Schritt integriert, um den Funktionswert $f(q)$ an der Stelle ${}^{n+1} t$ näherungsweise zu berechnen:

$${}^{n+1} q = {}^n q + \Delta t \cdot {}^n \dot{q}, \quad (6.81)$$

wobei $\Delta t = {}^{n+1} t - {}^n t$ ist.

Wie man in Gleichung 6.81 sieht, stimmt lediglich der von Δt abhängige Term mit dem ersten Glied der formalen Taylorreihenentwicklung überein, weswegen das Verfahren von erster Ordnung ist.

Vorteil des expliziten Eulerverfahrens ist, dass es sehr einfach und unkompliziert umzusetzen ist. Der Nachteil ergibt sich aus dem Verfahren selbst: Wie in der Abbildung 6.6 zu erkennen ist, muss eine sehr kleine Schrittweite gewählt werden, um eine möglichst exak-

te Lösung zum Zeitpunkt ${}^{n+1}t$ zu finden. Dadurch ist die Anwendbarkeit begrenzt auf die jeweilige Problemgröße und die verfügbare Rechenzeit.

Implizites Eulerverfahren

Das implizite Eulerverfahren basiert ebenfalls auf einer Taylorreihenentwicklung. in Abbildung 6.7 ist eine Prinzipskizze des Verfahrens dargestellt.

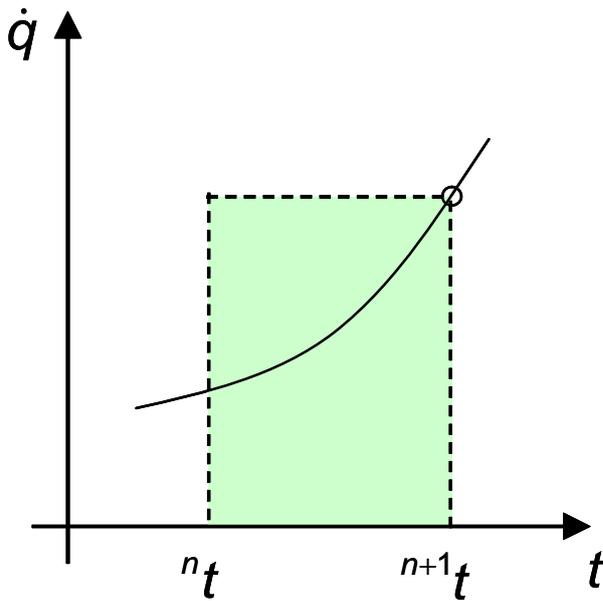


Abbildung 6.7: Prinzip des impliziten Eulerverfahrens

Wie auch schon das explizite Verfahren ist das implizite Verfahren von erster Ordnung und deswegen bei Verwendung in einem Ein-Schrittverfahren nicht sehr genau.

Der Funktionswert wird durch

$${}^{n+1}q = {}^nq + \Delta t \cdot {}^{n+1}\dot{q} \quad (6.82)$$

bestimmt.

Allerdings zeigt sich durch die Verwendung von impliziten Größen zum Zeitpunkt ${}^{n+1}t$ zur Lösung der Differentialgleichung eine spürbar bessere Stabilität des Verfahrens bei steifen Differentialgleichungen (vgl. Quarteroni et al. [88]), die im Allgemeinen eine größere Schrittweite im Vergleich zum expliziten Verfahren ermöglicht. Die Komplexität des Problems steigt aber durch die implizite Anwendung stark an, da in der Regel eine nicht-lineare Gleichung (oder ein nichtlineares Gleichungssystem) gelöst werden muss.

Verallgemeinerte Mittelpunktsregel

Die verallgemeinerte Mittelpunktsregel stellt üblicherweise ein implizites Ein-Schritt-Verfahren dar. In Abbildung 6.8 ist eine Prinzipskizze des Verfahrens dargestellt.

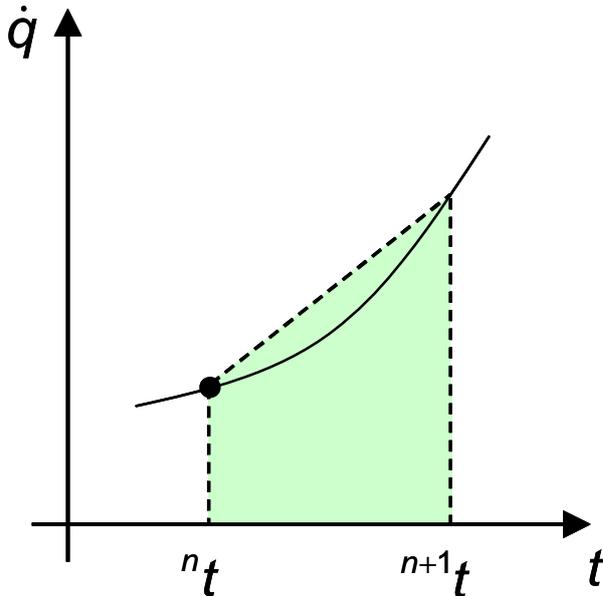


Abbildung 6.8: Prinzip der verallgemeinerten Mittelpunktsregel

In der verallgemeinerten Mittelpunktsregel werden in der Regel beide Intervallgrenzen des Inkrements zur Berechnung des Funktionswertes q an der Stelle ${}^{n+1}t$ verwendet. Die dazugehörige Gleichung für q lautet:

$${}^{n+1}q = {}^nq + \Delta t \cdot \left((1 - \lambda) \cdot {}^n\dot{q} + \lambda \cdot {}^{n+1}\dot{q} \right), \quad (6.83)$$

wobei λ eine Zahl zwischen Null und Eins ist. Für $\lambda = 0$ erhält man das explizite Eulerverfahren und für $\lambda = 1$ das implizite Eulerverfahren (vgl. Simo und Hughes [67]). Für den Spezialfall $\lambda = \frac{1}{2}$ lässt sich Gleichung 6.83 wie folgt schreiben:

$${}^{n+1}q = {}^nq + \frac{\Delta t}{2} \cdot ({}^n\dot{q} + {}^{n+1}\dot{q}). \quad (6.84)$$

Damit erhält man die Mittelpunktsregel, für die alleinig das vorgestellte Verfahren von zweiter Ordnung ist. Das lässt sich anhand der exakten Lösung mittels der Taylorreihenentwicklung

$${}^{n+1}q = {}^nq + \Delta t {}^n\dot{q} + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \frac{d}{dt} {}^n\dot{q} + \dots + \frac{\Delta t^p}{p!} \cdot \frac{d^{p-1}}{dt^{p-1}} {}^n\dot{q} + O(\Delta t^{p+1}) \quad (6.85)$$

zeigen. Entwickelt man nun Gleichung 6.84 mittels der Taylorreihenentwicklung, ergibt sich:

$$\begin{aligned} {}^{n+1}q &= {}^nq + \frac{\Delta t}{2} \left({}^n\dot{q} + {}^n\dot{q} + \Delta t \frac{d}{dt} {}^n\dot{q} + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \frac{d^2}{dt^2} {}^n\dot{q} + \dots \right) \\ &= {}^nq + \Delta t {}^n\dot{q} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d}{dt} {}^n\dot{q} + \frac{\Delta t^3}{4} \cdot \frac{d^2}{dt^2} {}^n\dot{q} + \dots \end{aligned} \quad (6.86)$$

Gleichung 6.86 unterscheidet sich von Gleichung 6.85 im Term dritter Ordnung, weswegen dann der Spezialfall der verallgemeinerten Mittelpunktsregel für $\lambda = \frac{1}{2}$ (Gleichung 6.84) ein Verfahren zweiter Ordnung ist.

Für alle anderen $\lambda \in]0;1[\setminus \frac{1}{2}$ ist das Verfahren lediglich implizit und von erster Ordnung.

Die höhere Genauigkeit des Verfahrens geht mit einem ebenso höheren Rechenaufwand einher, weswegen die Vor- und Nachteile gegenüber dem expliziten bzw. impliziten Eulerverfahren abgewogen werden müssen.

Ein-Schritt-Verfahren höherer Ordnung

Bei den Ein-Schritt-Verfahren höherer Ordnung ist das Runge-Kutta-Verfahren zu erwähnen, das durch mehrere Stufen eine sehr gute Genauigkeit, aber auf Kosten der Komplexität der Umsetzung und der Rechenzeit, erzielt. Hierbei kann zwischen expliziten (z.B. Dormand u. Prince) und impliziten Runge-Kutta-Verfahren (z.B. Radau) unterschieden werden. Die expliziten Verfahren eignen sich zumeist weniger für steife Differenzialgleichungssysteme (vgl. Quarteroni et al. [88]), sind aber weniger aufwändig (keine Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems) wie die impliziten Verfahren, die sich durch eine hohe Stabilität auszeichnen.

Mehrschrittverfahren

Mehrschrittverfahren sind Verfahren, die im Gegensatz zu Einschrittverfahren, die Informationen aus den zuvor berechneten Stützstellen nutzen. Eine Definition für Mehrschrittverfahren findet sich in Quarteroni et al. [88]: „Ein q -schrittiges Verfahren ($q \geq 1$) ist eines, bei dem $u_{n+1} \forall n \geq q-1$ von u_{n+1-q} , aber nicht von den Werten u_k mit $k < n+1-q$ abhängt.“ (Hierbei ist u_{n+1} mit ${}^{n+1}q$ in dieser Arbeit gleichzusetzen).

Als Mehrschrittverfahren ist an dieser Stelle, da es auch in der vorliegenden Arbeit verwendet wurde, das Prädiktor-Korrektor-Verfahren (Radial-Return-Mapping-Algorithmus) zu erwähnen (vgl. Simo et al [67, 68]). Beim Prädiktor-Korrektor-Verfahren, bei dem es sich um ein implizites Verfahren handelt, wird in der Regel der zu berechnende Wert ${}^{n+1}u$ durch eine explizite Methode gewonnen und anschließend durch Nachiteration verbessert. Abbildung 6.9 zeigt eine Prinzipskizze für die Prädiktor-Korrektor-Methode.

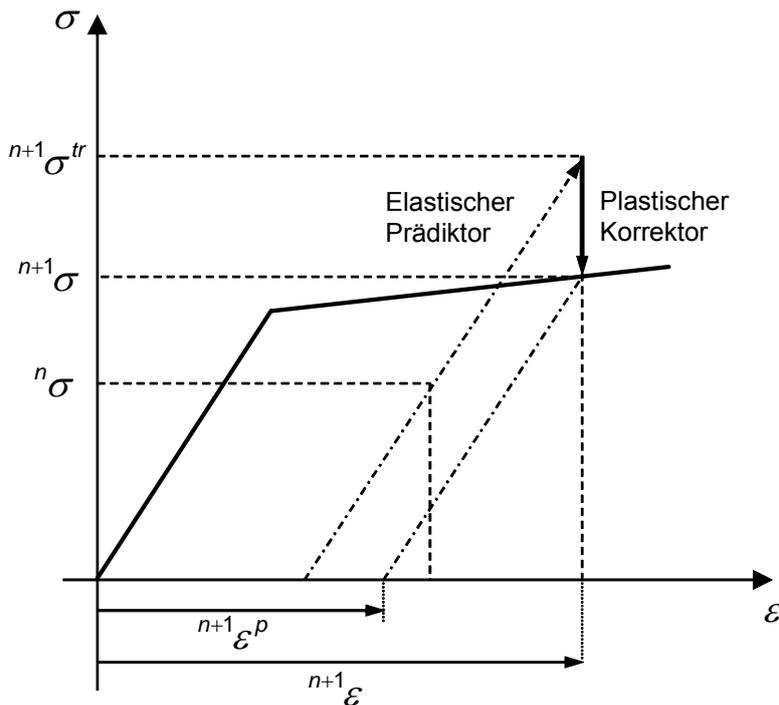


Abbildung 6.9: Prinzip des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens (Simo und Hughes [67])

Hierbei ist die Spannung über der Dehnung aufgetragen (dieses Beispiel für ratenunabhängige Plastizität mit isotroper Verfestigung ist Simo und Hughes [67] entnommen). Zunächst wird ein elastischer Prädiktor ${}^{n+1}\sigma^{tr}$ für die Spannung errechnet, der anschließend im nächsten Schritt mit einem plastischen Korrektor korrigiert wird, was in der Regel

mehrere Iterationen benötigt, um schließlich die tatsächlich Spannung ${}^{n+1}\sigma$ am Ende des Inkrements zu berechnen.

Die Prädiktor-Korrektor-Methode stellt ein effizientes Werkzeug zur Lösung gewöhnlicher Differenzialgleichungen dar, falls eine Fließfläche in Form von Fallunterscheidungen gegeben ist, und zeichnet sich durch eine hohe Stabilität des Verfahrens aus. Bei bspw. viskoelastischen Problemstellungen, die keine Fließfläche besitzen (vgl. Simo und Hughes [67]), ist dieses Verfahren nicht geeignet.

Der Aufwand bei der Prädiktor-Korrektor-Methode hält sich bei der Umsetzung und der Rechenzeit, insbesondere im Vergleich mit den Runge-Kutta-Verfahren, in Grenzen und verhältnismäßig große Schrittweiten sind mit dieser Methode möglich. Das lässt sich damit erklären, dass der Aufwand für die Ermittlung des expliziten Schrittes sehr gering ist und der damit erhaltene Startwert im Allgemeinen mit dem Newtonverfahren schnell und effizient zum tatsächlich gesuchten Wert hin iteriert werden kann. Auf das Newtonverfahren, bei dem ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen ist, wird weiter unten in dieser Arbeit eingegangen.

An dieser Stelle wird die Aufzählung für numerische Verfahren zur Lösung gewöhnlicher Differenzialgleichungen abgeschlossen, da es unzählige unterschiedliche Methoden und leicht abgeänderte Verfahren gibt, deren Beschreibung den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Der interessierte Leser sei deswegen nochmals auf weiterführende Literatur aus dem Bereich der numerischen Mathematik und der Finite-Elemente-Methode verwiesen. Hervorzuheben sind hier nochmals die Lehrbücher von Simo und Hughes [67], Quarteroni et al. [88], Wriggers [89], Hermann [70] und Engeln-Müllges et al. [90]. Auch wurde durch diese kurze Einführung in die numerischen Methodiken deutlich, dass bei der Finite-Elemente-Implementierung und der dabei dazugehörenden numerischen Betrachtungsweise eine sorgfältige Abwägung bei der Auswahl der Verfahren nötig ist, um effizient hinreichend genaue Lösungen des jeweiligen vorliegenden Problems zu erzielen.

6.3.3 *Vorgehensweise bei der Implementierung des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes*

Wie schon in den vorangegangenen Abschnitten erwähnt wurde, wurde das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz mit einer Prädiktor-Korrektor-Methode auf der Basis des im-

pliziten Eulerverfahrens in das Open Source-Finite-Elemente-Programm PSU [7] implementiert. Im Folgenden soll die Vorgehensweise beschrieben werden.

Zunächst müssen im elastischen Bereich für die vektoriellen inneren Variablen \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ , solange noch keine Evolution der inneren Variablen \mathbf{q}^α stattgefunden hat, die Anfangsbedingungen gefunden werden, um beim Einsetzen des Umklappens (d.h. für $f > 0$) Startwerte für die Lösung des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems zur Verfügung zu haben. Hierbei muss zwischen mehreren Fällen unterschieden werden, die in Tabelle 6.1 dargestellt sind. Dabei ist ${}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}$ der elastische Spannungstensor und ${}^{n+1}\mathbf{E}_i$ der elektrische Feldvektor am Ende des Inkrements. In der Tabelle sind die Fallunterscheidungen aus der mathematischen Betrachtungsweise dargestellt. Tatsächlich wurden in der Implementierung für $\|{}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\|$ und $\|{}^{n+1}\mathbf{E}_i\|$ Toleranzschranken, die bei Überschreitung zum jeweiligen Fall führen, verwendet, da es bei jedem numerisch zu lösenden Problem (wie in der Finite-Elemente-Methode) zu numerischen Ungenauigkeiten im kleinen Maßstab kommt.

Tabelle 6.1: Startwerte für die Einheitsvektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ

Fall	$\ {}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\ = 0$ \wedge $\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ = 0$	$\ {}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\ = 0$ \wedge $\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ > 0$	$\ {}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\ > 0$ \wedge $\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ = 0$	$\ {}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\ > 0$ \wedge $\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ > 0$
Startwerte für die Einheitsvektoren	unbestimmt	$\mathbf{e}_i^\beta = \frac{{}^{n+1}\mathbf{E}_i}{\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ }$ $\mathbf{e}_i^\gamma = \frac{{}^{n+1}\mathbf{E}_i}{\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ }$	$\mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma$: Eigenvektor von ${}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{elast}$	\mathbf{e}_i^β : Eigenvektor von ${}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}$ $\mathbf{e}_i^\gamma = \frac{{}^{n+1}\mathbf{E}_i}{\ {}^{n+1}\mathbf{E}_i\ }$

Für den Fall, dass keine mechanische Spannung $\|{}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\| = 0$ und kein elektrisches Feld $\|{}^{n+1}\mathbf{E}_i\| = 0$ anliegt und $\beta = \beta^{ref}$ sowie $\gamma = 0$, bleiben die Startwerte für die Einheitsvektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ zunächst unbestimmt, d.h. es sind keine Anfangsbedingungen erforderlich. Erst mit Einsetzen einer Belastung werden die Einheitsvektoren entsprechend der weiteren Spalten der Tabelle gesetzt. Für den Fall $\|{}^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\| = 0$ und $\|{}^{n+1}\mathbf{E}_i\| > 0$ ergeben

sich die Startwerte für die Einheitsvektoren zu $\mathbf{e}_i^\beta = \frac{^{n+1}\mathbf{E}_i}{\|^{n+1}\mathbf{E}_i\|}$ und $\mathbf{e}_i^\gamma = \frac{^{n+1}\mathbf{E}_i}{\|^{n+1}\mathbf{E}_i\|}$. Diese

Wahl, den Einheitsvektoren die Richtung des elektrischen Feldvektors zuzuweisen, begründet sich in der Annahme, dass die Entwicklung der Polarisierung und der Dehnung für diesen Fall in die Richtung des elektrischen Feldes vonstatten gehen wird. Analog trifft das auch auf den Fall $\|^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{rev}\| > 0$ und $\|^{n+1}\mathbf{E}_i\| = 0$ zu. Allerdings wird hier der zum größten Eigenwert gehörende Eigenvektor des Spannungstensors, der in Richtung der größten, positiven Hauptspannung zeigt, als Startvektor vorgegeben. Dieser Eigenvektor wird iterativ mit dem Verfahren von v. Mises nach Engeln-Müllges et al. [90] bestimmt. Aus dem Mangel, dass kein elektrisches Feld in diesem Fall vorhanden ist, wird auch der Startwert für \mathbf{e}_i^γ in die gleiche Richtung gesetzt, da für die numerische Integration bzw. Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems zwingend Startwerte für alle Größen gegeben sein müssen. Allerdings sollte ein elektrisches Feld im späteren Verlauf der Belastung aufgebracht werden, so wird dann der Vektor \mathbf{e}_i^γ in dessen Richtung gesetzt.

Der letzte zu betrachtende Fall ist der allgemeine Fall einer kombinierten elektromechanischen Belastung mit $\|^{n+1}\mathbf{T}_{ij}^{dev}\| > 0$ und $\|^{n+1}\mathbf{E}_i\| > 0$. Dabei wird der Startwert für \mathbf{e}_i^β gleich dem Eigenvektor des größten, positiven Eigenwertes und \mathbf{e}_i^γ in die Richtung des elektrischen Feldvektors gesetzt.

Nach erstmaligen Umklappen müssen keine Startwerte mehr für die Vektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ vorgegeben werden, da diese aus der Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme hervorgehen. Aufgrund möglicher Divisionen durch Null (vgl. Gleichungen 6.66 und 6.67) müssen beim erstmaligen Umklappen (d.h. für $f > 0$) die inneren Variablen β und γ ohne Berücksichtigung der Terme mit $\bar{\mathbf{e}}^\beta$ und $\bar{\mathbf{e}}^\gamma$ und deren Evolutionsgleichungen berechnet werden (Situation: „ $\frac{0}{0}$ “), da in diesem Fall zunächst $\beta = \beta^{ref}$ und $\gamma = 0$ sind. Bei der analytischen Betrachtung der Gleichungen 6.66 und 6.67 zeigt sich, dass die von $\bar{\mathbf{e}}^\beta$ und $\bar{\mathbf{e}}^\gamma$ abhängigen Terme tatsächlich für den Fall des erstmaligen Umklappen gleich Null sind, da eine hebbare Singularität vorliegt. Einfaches Einsetzen der Gleichungen 6.60 bis 6.65 in 6.66 zeigt, dass man den Term $(\beta - \beta^{ref})$ und γ kürzen kann.

Die Lösung wird ebenfalls mit dem Newtonverfahren (s. unten) erzielt, wobei das Gleichungssystem im Vergleich zum allgemeinen Fall reduziert ist. Sobald die beiden inneren Variablen β und γ von ihren Referenzwerten verschieden sind, kann das vollständig besetzte Gleichungssystem im nächsten Lastschritt auf die weiter unter beschriebene Weise gelöst werden.

Im Folgenden wird der allgemeine Fall einer Berechnung zu einem beliebigen Zeitpunkt der Simulation betrachtet. Zu Beginn der Rechnung stehen in der Regel lediglich die inneren Variablen ${}^n q^\alpha$ zum Zeitpunkt ${}^n t$ (aus dem letzten Lastinkrement) und die Größen für den Verzerrungstensor ${}^{n+1} S_{ij}$ und das elektrische Feld ${}^{n+1} E_i$ aus der globalen Newtoniteration zum Ende des Lastinkrements ${}^{n+1} t$ zur Verfügung. Gesucht sind die inneren Variablen ${}^{n+1} q^\alpha$ zum Zeitpunkt ${}^{n+1} t$, aus denen sich der Spannungstensor ${}^{n+1} T_{ij}$, der dielektrische

Verschiebungsvektor ${}^{n+1} D_i$ und die Materialtangente $\begin{pmatrix} \frac{\partial D_i}{\partial E_j} \\ \frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k} \end{pmatrix}$ und

$\begin{pmatrix} \frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \end{pmatrix}$ (auf die Ermittlung der Materialtangente wird noch weiter unten in dieser Arbeit eingegangen) berechnen lassen, welche an das Finite-Elemente-Programm zurückgegeben werden, um das globale Gleichgewicht zu bilden. Die globale Newtoniteration berechnet dann neue Vorschlagswerte für die Dehnung und das elektrische Feld. Als Grundlage zur Ermittlung der inneren Variablen ${}^{n+1} q^\alpha$ dienen die Evolutionsgleichungen in der Form $\dot{q}^\alpha = \lambda \frac{\partial f}{\partial \phi^\alpha}(q^\beta, t)$ aus Gleichung 6.26 (q^β steht für sämtliche innere Variablen).

Das implizite Eulerverfahren für Gleichung 6.26 liefert

$${}^{n+1} q^\alpha(t + \Delta t) = {}^n q^\alpha(t) + \Delta t \cdot {}^{n+1} \lambda(t + \Delta t) \left(\frac{\partial f}{\partial \phi^\alpha}(q^\beta(t + \Delta t), t + \Delta t) \right).$$

Das implizite Eulerverfahren für Gleichung 6.26 liefert

$${}^{n+1} q^\alpha(t + \Delta t) = {}^n q^\alpha(t) + \Delta t \cdot {}^{n+1} \lambda(t + \Delta t) \left(\frac{\partial f}{\partial \phi^\alpha}(q^\beta(t + \Delta t), t + \Delta t) \right). \quad (6.87)$$

Hierbei bezeichnet Δt die Schrittweite. Zur besseren Verdeutlichung auf welchen Zeitpunkt sich die Größen aus Gleichung 6.87 beziehen, wurde die unabhängige Zeitvariable t zusätzlich angeschrieben.

Gesucht sind nun die inneren Variablen ${}^{n+1}\mathbf{q}^\alpha = \mathbf{q}^\alpha(t + \Delta t)$ und der plastische Multiplikator ${}^{n+1}\lambda = \lambda(t + \Delta t)$. Dieses Ziel lässt sich in der Tradition des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens durch Umstellung von Gleichung 6.87 in die Form

$$\mathbf{F}^\alpha = \mathbf{q}^\alpha(t + \Delta t) - \mathbf{q}^\alpha(t) - \Delta t \cdot \lambda(t + \Delta t) \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \phi^\alpha}(\mathbf{q}^\beta(t + \Delta t), t + \Delta t) = 0 \quad (6.88)$$

bewerkstelligen (aus Übersichtlichkeitsgründen wurde auf eine Indizierung des Zeitschrittes verzichtet). Zusätzlich wird noch eine Gleichung für die Umklappbedingung benötigt, um das nichtlineare Gleichungssystem zu vervollständigen. Das erfüllte Fließkriterium am Inkrementende lautet:

$$f(\mathbf{q}^\alpha(t + \Delta t), t + \Delta t) = 0. \quad (6.89)$$

Dies entspricht der Vorgehensweise von Ortiz und Simo [68], die das Verfahren auf elastoplastische Stoffgesetze angewandt haben.

Nun können mit Hilfe der Taylorreihenentwicklung, die nach dem ersten Glied abgebrochen wird, die Änderungen innerhalb des Zeitinkrementes der impliziten Funktion \mathbf{F}^α und der Umklappfunktion f aus Gleichung 6.88 und 6.89 wie folgt geschrieben werden:

$$\Delta \mathbf{F}^\alpha = \frac{\partial \mathbf{F}^\alpha}{\partial \mathbf{q}^\alpha} \cdot \Delta \mathbf{q}^\alpha + \frac{\partial \mathbf{F}^\alpha}{\partial \lambda} \cdot \Delta \lambda \quad (6.90)$$

$$\Delta f = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}^\alpha} \cdot \Delta \mathbf{q}^\alpha. \quad (6.91)$$

Da eine analytische Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems aus 6.88 und 6.89 im Allgemeinen unmöglich ist, findet sich eine Iterationsvorschrift mit der Hilfe der Taylorreihenentwicklung aus Gleichungen 6.90 und 6.91 für die implizite Funktion und die Umklappfunktion zu

$${}^{j+1}\mathbf{F}^\alpha = {}^j\mathbf{F}^\alpha + \left(\frac{\partial \mathbf{F}^\alpha}{\partial \mathbf{q}^\alpha} \right)^j \cdot {}^{j+1}\delta \mathbf{q}^\alpha + \left(\frac{\partial \mathbf{F}^\alpha}{\partial \lambda} \right)^j \cdot {}^{j+1}\delta \lambda = 0 \quad (6.92)$$

mit

$${}^j\mathbf{F}^\alpha = {}^j\mathbf{q}^\alpha - \mathbf{q}^\alpha(t) - \Delta t \cdot {}^j\lambda \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \phi^\alpha}({}^j\mathbf{q}^\beta, t + \Delta t). \quad (6.93)$$

Diese Vorgehensweise entspricht dem Verfahren nach Newton-Kantorowitsch, bei dem eine Linearisierung durch eine Taylorreihenentwicklung vollzogen wird (vgl. Bronstein und Semendjajew [71] – ein übliches und effizientes Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme). Mit dieser Iterationsvorschrift lässt sich für $i \rightarrow \infty$ eine exakte Lösung des ursprünglichen nichtlinearen Gleichungssystems finden. In der Praxis sind aber in der Regel wenige Schritte nötig, um die vordefinierte Toleranz zur Ermittlung der Nullstellen des Gleichungssystems (eine hinreichend genaue Lösung) zu finden, was zu einer verhältnismäßig schnellen Berechnung des Problems führt.

Eine grafische Verdeutlichung des Verfahrens am Beispiel der Umklappbedingung findet sich in Abbildung 6.8.

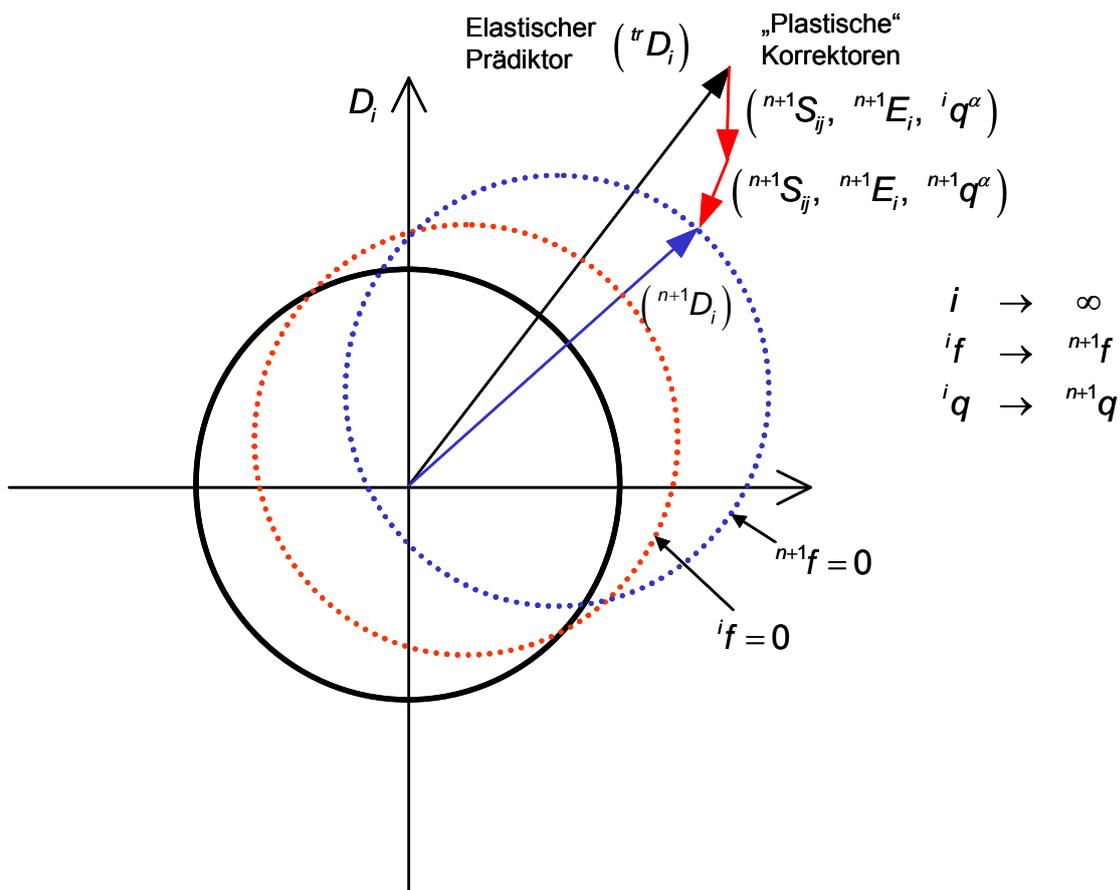


Abbildung 6.8: Prinzip des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens am Beispiel der Umklappbedingung

Ausgehend von der Umklappfläche (durchgezogene Linie) wird mit dem linear dielektrischen Prädiktor ${}^t D_i$ bzw. elastischen Prädiktor ${}^t T_{ij}$ die Umklappbedingung verletzt (hier

nur im Raum der dielektrischen Verschiebung D_i dargestellt). Dann wird anhand der Iterationsvorschrift eine Lösung für die ${}^i q^\alpha$ (und damit der „plastische“ Korrektor $({}^{n+1}S_{ij}, {}^{n+1}E_i, {}^i q^\alpha)$) gefunden und in die Umklappbedingung eingesetzt. Ergibt die Prüfung, dass die Umklappfunktion mit den neuen Werten nicht gleich Null ist, muss nachiteriert werden, bis eine zuvor festgelegte Toleranzschranke unterschritten wird. So können sich im Laufe einer Rechnung mehrere „plastische“ Korrektoren ergeben, die aufsummiert werden, um letztendlich den dielektrischen Verschiebungsvektor oder den Spannungstensor am Ende des Inkrements $({}^{n+1}D_i, {}^{n+1}T_{ij})$ zu finden.

Wie schon eingangs erwähnt wurde, benötigt die vorgestellte Iterationsvorschrift Startwerte für ${}^0 q^\alpha$ und ${}^0 \lambda$, die gewählt werden müssen. Auf die Wahl wird später in dieser Arbeit eingegangen werden. Grundsätzlich gilt für das implizite Eulerverfahren:

$$\begin{aligned} {}^0 q^\alpha &= q^\alpha(t) \\ {}^0 \lambda &= 0 \end{aligned} \quad (6.94)$$

Die Annahme, dass der Startwert für ${}^0 \lambda = 0$ ist, ergibt sich aus der Überlegung zum Prädiktor-Korrektor-Verfahren, dass der erste Schritt der elastische Prädiktor ist und deswegen der plastische Multiplikator gleich Null sein muss.

Durch die Linearisierung des Gleichungssystems aus Gleichungen 6.88 und 6.89 ergibt sich das folgende lineare Gleichungssystem unter Verwendung von generalisierten Koordinaten:

$$\begin{aligned} {}^j F^\beta + \left(\frac{\partial F^\beta}{\partial \beta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \beta + \left(\frac{\partial F^\beta}{\partial \gamma_i} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \gamma_i + \left(\frac{\partial F^\beta}{\partial \theta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \theta + \left(\frac{\partial F^\beta}{\partial \varphi} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F^\beta}{\partial \lambda} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \lambda &= 0 \\ {}^j F^{\bar{\gamma}} + \left(\frac{\partial F^{\bar{\gamma}}}{\partial \beta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \beta + \left(\frac{\partial F^{\bar{\gamma}}}{\partial \gamma_i} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \gamma_i + \left(\frac{\partial F^{\bar{\gamma}}}{\partial \theta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \theta + \left(\frac{\partial F^{\bar{\gamma}}}{\partial \varphi} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F^{\bar{\gamma}}}{\partial \lambda} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \lambda &= 0 \\ {}^j F^\theta + \left(\frac{\partial F^\theta}{\partial \beta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \beta + \left(\frac{\partial F^\theta}{\partial \gamma_i} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \gamma_i + \left(\frac{\partial F^\theta}{\partial \theta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \theta + \left(\frac{\partial F^\theta}{\partial \varphi} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F^\theta}{\partial \lambda} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \lambda &= 0 \\ {}^j F^\varphi + \left(\frac{\partial F^\varphi}{\partial \beta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \beta + \left(\frac{\partial F^\varphi}{\partial \gamma_i} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \gamma_i + \left(\frac{\partial F^\varphi}{\partial \theta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \theta + \left(\frac{\partial F^\varphi}{\partial \varphi} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F^\varphi}{\partial \lambda} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \lambda &= 0 \\ {}^j f + \left(\frac{\partial f}{\partial \beta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \beta + \left(\frac{\partial f}{\partial \gamma_i} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \gamma_i + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \theta + \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \cdot {}^{j+1} \delta \varphi &= 0 \end{aligned} \quad (6.95).$$

Die partiellen Ableitungen der Jacobi-Matrix werden durch Differenzenquotienten der Form

$${}^j \left(\frac{\partial F^\alpha}{\partial q^\alpha} \right) = {}^j \left(\frac{F^\alpha(q^\alpha + h) - F^\alpha(q^\alpha)}{h} \right) \quad (6.96)$$

mit $h = \sqrt{\text{eps}} \approx 1,5 \cdot 10^{-8}$ (eps : Maschinengenauigkeit) angenähert, womit sich formal für den implementierten Lösungsalgorithmus das diskretisierte Newtonverfahren (Hermann[70], Wriggers [89]) ergibt. Der einseitige Differenzenquotient wurde gewählt, um die Berechnungszeit im Vergleich zum symmetrischen Differenzenquotienten zu verringern. Einfache Vergleichsberechnungen der beiden zuvor genannten Möglichkeiten zeigten keinen Nachteil.

Die Lösung des Gleichungssystems kann auf klassische Weise bspw. unter Verwendung des Gauß-Algorithmus vollzogen werden.

Nachdem eine Lösung gefunden wurde, ist eine Aktualisierung der inneren Variablen und des plastischen Multiplikators nötig:

$$\begin{aligned} {}^{j+1}\beta &= {}^j\beta + {}^{j+1}\delta\beta \\ {}^{j+1}\gamma_i &= {}^j\gamma_i + {}^{j+1}\delta\gamma_i \\ {}^{j+1}\theta &= {}^j\theta + {}^{j+1}\delta\theta \\ {}^{j+1}\varphi &= {}^j\varphi + {}^{j+1}\delta\varphi \\ {}^{j+1}\lambda &= {}^j\lambda + {}^{j+1}\delta\lambda \end{aligned} \quad (6.97)$$

Danach findet eine Überprüfung der zuvor festgelegten Toleranzschranken statt:

$$\left. \begin{array}{l} f(j^{+1}\beta, j^{+1}\gamma_i, j^{+1}\theta, j^{+1}\varphi, {}^{n+1}E_i, {}^{n+1}S_{ij}) \\ F^\alpha(j^{+1}\beta, j^{+1}\gamma_i, j^{+1}\theta, j^{+1}\varphi, j^{+1}\lambda, {}^{n+1}E_i, {}^{n+1}S_{ij}) \end{array} \right\} \sqrt{f^2 + F^{\alpha 2}} > \text{Toleranz}$$

→ neuer Iterationsschritt mit:

$${}^j\beta = {}^{j+1}\beta$$

$${}^j\gamma_i = {}^{j+1}\gamma_i$$

$${}^j\theta = {}^{j+1}\theta$$

$${}^j\varphi = {}^{j+1}\varphi$$

$${}^j\lambda = {}^{j+1}\lambda$$

$$\left. \begin{array}{l} f(j^{+1}\beta, j^{+1}\gamma_i, j^{+1}\theta, j^{+1}\varphi, {}^{n+1}E_i, {}^{n+1}S_{ij}) \\ F^\alpha(j^{+1}\beta, j^{+1}\gamma_i, j^{+1}\theta, j^{+1}\varphi, j^{+1}\lambda, {}^{n+1}E_i, {}^{n+1}S_{ij}) \end{array} \right\} \sqrt{f^2 + F^{\alpha 2}} < \text{Toleranz}$$

→

$${}^{n+1}\beta = {}^{j+1}\beta$$

$${}^{n+1}\gamma_i = {}^{j+1}\gamma_i$$

$${}^{n+1}\theta = {}^{j+1}\theta$$

$${}^{n+1}\varphi = {}^{j+1}\varphi$$

$${}^{n+1}\lambda = {}^{j+1}\lambda$$

→ Ende des Inkrements

Wie im Schema dargestellt ist, wird bei Nichteinhalten der Toleranz jedes Mal ein neuer Iterationsschritt mit aktualisierten inneren Variablen und plastischem Multiplikator durchgeführt, bis die Toleranzschranke eingehalten wird. Ist dies der Fall, so wird mit diesen neuen inneren Variablen der Spannungstensor ${}^{n+1}T_{ij}$, der dielektrische Verschiebungsvektor ${}^{n+1}D_i$ und die Materialtangente

$$\left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j} \right), \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k} \right), \left(\frac{\partial D_i}{\partial S_{jk}} \right) \text{ und } \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right)$$

(siehe nächster Abschnitt) berechnet und an das Finite-Elemente-Programm übergeben. Falls innerhalb des Materialmoduls die Iterationsvorschrift nicht erfolgreich ist und keine Lösung gefunden werden kann, wird als letztes Mittel (andere Maßnahmen werden weiter unten in dieser Arbeit erläutert) das Inkrement abgebrochen und die globale Zeitschrittweite halbiert, um mit einer kleineren Schrittweite erneut zu versuchen, Konvergenz für die Berechnung zu finden.

6.3.4 Konsistente Tangentenmoduli

Da in der globalen Newtoniteration des Finite-Elemente-Programms die Linearisierung der schwachen Form des Gleichgewichts benötigt wird (Wriggers [89], Simo und Hughes[67]) und dort die mit dem Lösungsalgorithmus konsistenten Materialtangente auftreten, müssen diese berechnet werden, um quadratische Konvergenz in der globalen Newton-Iteration zu erzielen (vgl. Wriggers [89] und Simo und Hughes [67]). Die Berechnung kann analytisch oder durch Differenzenquotienten angenähert geschehen. Im nichtlinearen Bereich wurden in den meisten Fällen (siehe weiter unten) die Materialtangente durch Differenzenquotienten berechnet, da die Gleichungen aufgrund ihrer Komplexität in diesem Bereich ungeeignet für eine analytische Lösung sind. Im linearen Bereich (d.h. $f < 0$) wurden die zutreffenden, exakten linearen Materialtangente verwendet, deren analytische Form im Folgenden angegeben ist:

$${}^{n+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial D_i}{\partial E_j} \end{pmatrix} = \kappa_{ij} - d_{imn} C_{mnkl} d_{klj} \quad (6.98)$$

$${}^{n+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial D_i}{\partial S_{jk}} \end{pmatrix} = d_{imn} C_{mnjk} \quad (6.99)$$

$${}^{n+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k} \end{pmatrix} = -C_{ijmn} d_{mnk} \quad (6.100)$$

$${}^{n+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \end{pmatrix} = C_{ijkl} \quad (6.101)$$

Hierbei ist C_{ijkl} der Elastizitätstensor, d_{ijk} der Piezoelektrizitätstensor und κ_{ij} der Suszeptibilitätstensor.

Nach Einsetzen des Umklappens, d.h. $f = 0$, werden i. d. R. die konsistenten Materialtangente in der Form von Differenzenquotienten an das Finite-Elemente-Programm übergeben. Bei einfachen Problemen sind die linearen Tangente ausreichend. Bei komplexeren Problemen sollten die nichtlinearen Tangente verwendet werden, um die Gesamt-Rechenzeit zu verkürzen. Zur Ermittlung der Materialtangente werden folgenden Gleichungen verwendet, wobei lediglich die für die Ableitungsbestimmung zu störende unabhängige Größe in den Argumentenklammern aufgeführt ist:

$${}^{n+1} \left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j} \right) = \frac{D_i(E_j + h) - D_i(E_j)}{h} \quad (6.102)$$

$${}^{n+1} \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial E_k} \right) = \frac{T_{ij}(E_k + h) - T_{ij}(E_k)}{h} \quad (6.103)$$

$${}^{n+1} \left(\frac{\partial D_i}{\partial S_{jk}} \right) = \frac{D_i(S_{jk} + h) - D_i(S_{jk})}{h} \quad (6.104)$$

$${}^{n+1} \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right) = \frac{T_{ij}(S_{kl} + h) - T_{ij}(S_{kl})}{h} \quad (6.105)$$

mit $h = \sqrt{\text{eps}} \approx 1,5 \cdot 10^{-8}$. eps ist dabei die Maschinengenauigkeit. In der vorliegenden Programmiersprache und dem verwendeten Computer liegt diese ungefähr bei dem oben angegebenen Wert.

Wie aus den Gleichungen 6.102 bis 6.105 hervorgeht, muss das nichtlineare Gleichungssystem (Gleichungen 6.88 und 6.89) für die Bestimmung der Materialtangente mehrmals erneut gelöst werden, da das elektrische Feld oder die Dehnung gestört werden. Dies führt zu einer signifikanten Verlängerung der Rechenzeit, weswegen für eine praktische Berechnung abgewogen werden sollte, ob eine Konvergenz mit der Übergabe der linearen Materialtangente (Gleichungen 6.98 bis 6.101), was dem Quasi-Newtonverfahren entspricht, erzielt werden kann und lediglich in schwierigen Fällen dieses genauere Verfahren angewandt werden sollte. Allerdings sollte dabei bedacht werden, dass mit der Verwendung des Quasi-Newtonverfahrens i. d. R. nur noch lineare Konvergenz erzielt werden kann.

6.3.5 Verfahren zur Konvergenzverbesserung und Berechnungsbeschleunigung

In diesem Abschnitt sollen Verfahren und Techniken vorgestellt werden, die zur Konvergenzverbesserung der zuvor beschriebenen Implementierung führen. Grundlegend ist zu sagen, dass die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems mittels des diskretisierten Newtonverfahrens gelegentlich zu lokalen Konvergenzproblemen aufgrund des Auffindens physikalisch nicht sinnvoller Nullstellen und Divergenzen geführt hat. Insbesondere wurde bei komplexeren Modellen bei inhomogener Verteilung des elektrischen Feldes festgestellt, dass es zu zwei zu unterscheidenden Effekten kam. Zum einen bestanden

Probleme darin, mit einer kleinen Iterationszahl von kleiner als 20 Konvergenz zu erzielen. Stattdessen wurde mittels des diskretisierten Newtonverfahrens häufig nach einigen erfolgreichen Lastschritten keine Konvergenz mehr erzielt, was schließlich nach Unterschreitung der kleinsten vorgegebenen Schrittweite zu einem Abbruch der Rechnung führte. Zum anderen wurden nicht zutreffende Nullstellen gefunden, die außerhalb des Wertebereiches für die inneren Variablen lagen, und damit physikalisch nicht korrekt waren. Eine Verkleinerung der Schrittweite in diesem Fall führte nicht immer zum Erfolg.

Ein Aspekt, der beide zuvor genannten Probleme anspricht, ist die Beobachtung, dass aufgrund der Form der Energiebarrierefunktion (Gleichung 6.56), die eine Hyperbel abbildet, in der lokalen Newtoniteration prinzipiell ein Verlassen des Wertebereichs der inneren Variablen möglich sein kann. Die Hyperbelfunktion besitzt eine Singularitätsstelle auf der Grenze des zulässigen Bereichs. Wird dieser während der Iteration verlassen, so nimmt die Energiebarrierefunktion kleinere Werte an, als erforderlich sind, um die inneren Variablen innerhalb der Grenzen zu halten. Damit ist aber die Physik des Stoffgesetzes nicht mehr korrekt, so dass dafür Sorge getragen werden muss, dass auch innerhalb der lokalen Newtoniteration die inneren Variablen nie das zulässige Gebiet verlassen.

Diese Problematik schränkt die Möglichkeiten des Auffindens eines geeigneten Startvektors für das Newtonverfahren stark ein. Genauere Ausführungen hierzu finden sich weiter unten in den Techniken zur Konvergenzverbesserung in diesem Kapitel. Eine andere Energiebarrierefunktion anstatt der Hyperbelfunktion zu verwenden, die keine Singularitätsstelle aufweist wie z.B. eine Exponentialfunktion, hat aber zwei signifikante Nachteile, die durch versuchsweise Implementierungen gezeigt werden konnten. Zum Einen besteht bei Verwendung einer monoton steigenden Funktion keine strikte Grenze mehr für die inneren Variablen, was zu Werten außerhalb des physikalisch sinnvollen Bereiches führen kann und zum anderen erscheinen die inneren Variablen im Exponenten, was bei der lokalen Newtoniteration zu einem Programmfehler führen kann, da schnell eine zu große, nicht mehr darstellbare Zahl vom Programm berechnet wird. Dieser Fall tritt insbesondere dann auf, falls die lokale Newtoniteration Schwierigkeiten hat, Konvergenz zu erzielen, was sich durch große Werte für die inneren Variablen auszeichnet (eine Beschränkung des zulässigen Bereiches wie bei der Hyperbelfunktion ist in diesem Fall weder sinnvoll noch möglich). Aufgrund dieser Problematiken wurden stetig wachsende Funktionen als Ersatz

für die implementierte Hyperbelfunktion zur Verbesserung der Konvergenz wieder verworfen.

Um nun das Konvergenzverhalten des nichtlinearen Gleichungssystems zu verbessern, so dass eine physikalisch richtige Lösung, die in hinreichend wenigen Schritten konvergiert, gefunden wird, wurden verschiedene Lösungsstrategien für nichtlineare Gleichungssysteme betrachtet, deren Wirksamkeit im Folgenden beschrieben wird. Unterteilt ist die Betrachtung dabei in zwei Abschnitte. Zum einen wird die Entscheidung diskutiert, für die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems das diskretisierte Newtonverfahren in der vorliegenden Form zu verwenden. Zum anderen werden Techniken beschrieben, die eine Konvergenzverbesserung des implementierten Algorithmus zur Folge hatten.

Lösungsverfahren für Systeme nichtlinearer Gleichungen

Im Folgenden werden die am meisten verbreiteten Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme vorgestellt und deren Anwendbarkeit für das in dieser Arbeit zu lösende Gleichungssystem diskutiert. Grundsätzlich ist bei allen hier beschriebenen Verfahren ein nichtlineares Gleichungssystem in der Form

$$\begin{aligned}
 f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\
 f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0
 \end{aligned} \tag{6.106}$$

zu lösen. Durch Definition lassen sich die Vektoren

$$\mathbf{F}(x_1, x_2, \dots, x_n) \equiv (f_1(x_1, x_2, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, x_2, \dots, x_n))^T \tag{6.107}$$

und

$$\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \tag{6.108}$$

beschreiben. Damit lässt sich 6.106 als

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0 \tag{6.109}$$

schreiben.

Ein gängiges Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssystem ist die *Fixpunktiteration* (Hermann [70]), die Gleichung 6.109 in einer iterierfähigen Form voraussetzt, auch Fixpunkt-Gleichung genannt:

$$\mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x}). \quad (6.110)$$

Die Umformung 6.109 nach 6.110 ist oft nicht eindeutig und kann in der Form

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{g}(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (6.111)$$

mit

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \neq 0 \quad (6.112)$$

erfolgen (vgl. Engeln-Müllges et al. [90]). Damit ist sofort zu sehen, dass das Newtonverfahren als Fixpunktiteration betrachtet werden kann, da hier für $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ die Inverse der Jacobi-Matrix verwendet wird (siehe weiter unten in diesem Abschnitt).

Oftmals wird $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = konst.$ gesetzt, so dass sich

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{x} - \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (6.113)$$

ergibt.

Die Iterationsvorschrift lautet dann:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{G}(\mathbf{x}^{(k-1)}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.114)$$

In der praktischen Durchführung zeigte sich eine schlechte Konvergenz, auch aufgrund dessen, dass die Fixpunktiteration zu den linear konvergenten Techniken zählt (vgl. Hermann [70]). Es wurde mit einer vertretbaren Iterationszahl (< 10000) keine Lösung innerhalb der vorgegebenen Toleranz erzielt. Oftmals kam es auch zu einer Divergenz der Lösung. Da die klassische Fixpunktiteration eine Vereinfachung des Newtonverfahrens darstellt, wurde dieses Verfahren für die Implementierung verworfen.

Das *Newtonverfahren* ist eine quadratisch konvergente Technik, bei der Gleichung 6.111 die Form

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{J}(\mathbf{x})^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (6.115)$$

besitzt. Dabei ist $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ die Jacobi-Matrix:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\mathbf{x}_i)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\mathbf{x}_i)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(\mathbf{x}_i)}{\partial x_n} \end{pmatrix}. \quad (6.116)$$

Die Iterationsvorschrift lautet:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{G}(\mathbf{x}^{(k-1)}) = \mathbf{x}^{(k-1)} - \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k-1)})^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k-1)}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.117)$$

Dieses Verfahren wurde in der Variation des diskretisierten Newtonverfahrens in der vorliegenden Finite-Elemente-Implementierung verwendet (vgl. vorangegangener Abschnitt). Beim diskretisierten Newtonverfahren wird die Jacobi-Matrix mit der Hilfe von Differenzenquotienten approximiert. Eine weitere Möglichkeit ist anstatt des Differenzenquotienten die Sekantensteigung beispielhaft für $f'(\mathbf{x}_1)$ mit

$$\frac{\partial f_1(\mathbf{x}_1)}{\partial x_1} \approx \frac{f(\mathbf{x}_1) - f(\mathbf{x}_0)}{x_1 - x_0} \quad (6.118)$$

zu verwenden, was aber in dieser Arbeit nicht weiter untersucht wurde, da das Sekantenverfahren keine Vorteile gegenüber dem Verfahren unter Verwendung mit Differenzenquotienten hat und zusätzlich zwei Startwerte nötig werden, um das nichtlineare Gleichungssystem zu lösen.

Das Newtonverfahren stellt das für das vorliegende nichtlineare Gleichungssystem effektivste Verfahren dar, da es verhältnismäßig gut konvergiert. Allerdings zeigt die praktische Durchführung, dass die Wahl eines geeigneten Startvektors (d.h. Startwerte sind hinreichend nahe an der Lösung) von essentieller Bedeutung für das Finden der Lösung des Gleichungssystems ist (vgl. Hermann [70]). Der interessierte Leser findet in Hermann und Engeln-Müllges et al. [90] weitere Verfahren, die auf dem Newtonverfahren basieren und die meist eine Rechenzeitbeschleunigung (Broyden, Brown) bewirken. Allerdings erfordern diese die gleichen Voraussetzungen für einen „gut“ gewählten Startvektor und des-

wegen besitzen sie kaum Vorteile gegenüber der in dieser Arbeit gewählten Lösungsmethode und wurden deswegen im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter studiert.

Das *Gradientenverfahren* ist eine linear konvergente Technik, die hier der Vollständigkeit halber erwähnt wird. Es wird eine Funktion

$$Q(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^n f_m^2(\mathbf{x}) \quad (6.119)$$

definiert, die für gleiche \mathbf{x} gleich Null ist wie $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ (vgl. Engeln-Müllges et al. [90]).

Die Iterationsvorschrift lautet:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} - \frac{Q(\mathbf{x}^{(k-1)})}{\left(\nabla Q(\mathbf{x}^{(k-1)})\right)^2} \nabla Q(\mathbf{x}^{(k-1)}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.120)$$

mit

$$\left(\nabla Q(\mathbf{x}^{(k-1)})\right)^2 = \sum_{m=1}^n Q_{x_m}^2(\mathbf{x}). \quad (6.121)$$

Wie beim Newtonverfahren benötigt das Gradientenverfahren Startwerte, die nahe an der tatsächlichen Lösung liegen. Allerdings können gröbere Näherungen als beim Newtonverfahren verwendet werden (vgl. Engeln-Müllges et al. [90]). Das Gradientenverfahren hat aber einen entscheidenden Nachteil, falls in der Umgebung der gesuchten Nullstelle Nichtnull-Minima der Funktion $Q(\mathbf{x})$ existieren. In diesem Fall besteht die Möglichkeit, dass die Iteration gegen eines der Nichtnull-Minima konvergiert. Aufgrund der zuvor beschriebenen Probleme und einer ähnlichen Startvektorproblematik wie beim Newtonverfahren, wurde das Gradientenverfahren als adäquate Lösungsmöglichkeit des nichtlinearen Gleichungssystems nicht weiter verfolgt und Strategien entwickelt, um das diskretisierte Newtonverfahren in seinen Konvergenzeigenschaften zu verbessern, die im Folgenden vorgestellt werden.

Techniken zur Konvergenzverbesserung beim diskretisierten Newtonverfahren

Wie zuvor beschrieben wurde, wurde als Lösungsverfahren für das vorliegende nichtlineare Gleichungssystem das diskretisierte Newtonverfahren mit Differenzenquotienten

verwendet. Um das Konvergenzverhalten des Verfahrens zu verbessern, wurden verschiedene Techniken angewandt, die im Folgenden beschrieben werden.

In Abschnitt 6.3.4 wurden die *konsistenten Tangentenmoduli*, die numerisch mit der Hilfe von Differenzenquotienten berechnet wurden, bereits diskutiert. In der Praxis zeigte sich vor allem bei Simulationen, bei denen die globale Konvergenz des Newtonverfahrens für eine erfolgreiche Berechnung entscheidend ist, eine Verbesserung gegenüber der Verwendung der linearen Tangentenmoduli (Quasi-Newtonverfahren). Dabei gilt, je inhomogener die Verteilung des elektrischen Feldes ist, desto größeren Einfluss hat die Verwendung der konsistenten Tangentenmoduli (Verbesserung). Bei diesen komplexeren Simulationen zeigte sich ebenfalls ein besseres Konvergenzverhalten für die lokale Newtoniteration, da die Vorschlagswerte für die Dehnung und das elektrische Feld aus der globalen Newtoniteration physikalisch sinnvoller sind. Aufgrund des deutlich höheren Rechenaufwandes zur Bestimmung der numerischen Tangentenmoduli, muss sorgfältig abgewogen werden, in welchen Fällen mit einer Verbesserung des Konvergenzverhaltens zu rechnen ist. Für den Fall, dass die numerischen Tangentenmoduli verwendet werden, sollte zur Ermittlung von diesen eine Iterationszahl nicht größer als 10 angestrebt werden, da ansonsten ein Rechnungsabbruch durch das Auffinden physikalisch nicht korrekter Nullstellen außerhalb des zulässigen Bereichs der inneren Variablen aus der Erfahrung heraus zu erwarten ist. In der vorliegenden Implementierung wurde dies auf die Weise realisiert, indem ab Überschreitung einer vordefinierten maximalen Iterationszahl für die globale Newtoniteration nur noch die linearen Tangentenmoduli an das Finite-Elemente-Programm zurückgegeben wurden (Übergang zum Quasi-Newtonverfahren).

Die vorangegangenen Betrachtungen führen zu der Wahl der *maximalen Iterationszahl* für die lokale Newtoniteration. Hier zeigte sich, dass bei einfachen Problemstellungen (bspw. Simulation der dielektrischen Hysterese an einem Element) in der Regel 10 Newtoniterationen ausreichend sind, um Konvergenz zu gewährleisten. Bei größeren Problemen kann eine höhere Anzahl von Iterationen (100 – 200) notwendig sein. Allerdings nimmt dann die Gefahr zu, dass Nullstellen, die physikalisch nicht korrekt sind, gefunden werden und im weiteren Verlauf der Berechnung zu einem Rechnungsabbruch führen.

Ein weiterer wichtiger Aspekt sind die vordefinierten *Toleranzschranken* für die lokale Newtoniteration. Hier zeigten sich Werte zwischen $1,0E-05$ bis $1,0E-10$ als praktikabel.

Da bei großer gewählter Anfangsschrittweite in der Finite-Elemente-Berechnung oftmals Werte für β und γ außerhalb des *zulässigen Bereichs* gefunden werden (siehe Problematik mit physikalisch nicht korrekten Nullstellen), wurde nach jeder erfolgreichen Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems geprüft, ob die inneren Variablen β und γ innerhalb des zulässigen Bereiches liegen. Dabei wurde entsprechend Abbildung 6.3 der zulässige Bereich durch Gleichung 6.52

$$\gamma^{\max}(\beta, \mathbf{e}_i^\beta, \mathbf{e}_i^\gamma) = \gamma^{\max, \perp}(\beta) + (\gamma^{\max, \parallel}(\beta) - \gamma^{\max, \perp}(\beta)) |\mathbf{e}_i^\beta \mathbf{e}_i^\gamma|$$

und den Bedingungen $\beta \leq 1,0$ und $\beta > 0$ definiert.

Falls die inneren Variablen β und γ nicht im zulässigen Bereich lagen, wurde die Rechnung abgebrochen und die Zeitschrittweite verkleinert. Wie zuvor schon erwähnt wurde, schränkt diese Vorgehensweise die Startvektorsuche erheblich ein, da nun lediglich eine Richtung für diese Suche zur Verfügung steht. Eine Suche in die andere Richtung würde in den nichtzulässigen Bereich führen, was nun nicht mehr möglich ist. Allerdings werden diese Vorgehensweise nicht zutreffende Lösungen des nichtlinearen Gleichungssystems ausgeschlossen.

Des Weiteren wurden ein Drehen der Winkel θ und φ zwischen zwei Lastschritten beschränkt (üblicherweise um mehr als $\frac{\pi}{4}$), um zu gewährleisten, dass nicht zu große Lastschritte vorgegeben werden, da sich zeigte, dass dann verstärkt Konvergenzprobleme zu beobachten waren. Es existieren periodische Lösungen, die ein Drehen des Vektors \mathbf{e}_i^β um 180° in einem Lastschritt erlauben, da dieser bspw. in die entgegengesetzte Richtung von \mathbf{e}_i^γ zeigen und doch physikalisch korrekt sein kann. In diesen Fällen zeigten sich verstärkt Konvergenzprobleme, was durch die oben genannte Maßnahme verbessert werden konnte.

Eine deutliche Verbesserung der lokalen Konvergenz wurde mit der Einführung des quadratisch konvergenten *gedämpften Newtonverfahrens* erzielt. In Engeln-Müllges et al. [90], aus dem das Verfahren entnommen wurde, wird darauf hingewiesen, dass umfangreiche Tests ergeben haben, dass das gedämpfte Newtonverfahren im Allgemeinen wesentlich besser ist als das normale Newtonverfahren, das Verfahren von Brown oder das Gradienten-

tenverfahren. Bei der Implementierung des gedämpften Newtonverfahrens wurde folgender Algorithmus nach Engeln-Müllges et al. [90] angewandt:

1. Berechnung von $\Delta \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} - \mathbf{x}^{(k)}$ (erster Schritt der lokalen Newtoniteration „normal“ ausgeführt)
2. Berechnung für $m = 0, 1, \dots$

$$\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)_m = \mathbf{x}^{(k-1)} + \frac{1}{2^m} \Delta \mathbf{x}^{(k)} \quad (6.122)$$

Falls $\left\| \left(\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\right)_m \right\| < \left\| \mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{(k-1)}\right) \right\|$, dann ist $\mathbf{x}^{(k)} = \left(\mathbf{x}^{(k)}\right)_m$. Wenn nicht: Wiederholung des Schrittes mit nächstem m .

Falls mit vorgegebenen $m_{\max} \in \mathbb{N}$ die obige Bedingung nicht erfüllt werden konnte, so wird $\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) = \mathbf{x}^{(k-1)} + \Delta \mathbf{x}^{(k)}$ gesetzt.

Das vorgegebene m_{\max} wurde verschieden gewählt. Engeln-Müllges et al. [90] weisen darauf hin, dass für unterschiedliche m_{\max} die Newtoniteration zu unterschiedlichen Nullstellen konvergieren kann.

Da die meisten Abbrüche vermutlich aufgrund von Startvektoren, die nicht nahe genug an der tatsächlichen Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems liegen (vgl. Wriggers [89] und Hermann [70]), verursacht wurden, wurden verschiedene Strategien zur *Wahl des Startvektors* angewandt. Zum einen wurde in allen Lastschritten außer dem ersten (nachdem also ein Integrationspunkt zum ersten Mal die Umklappbedingung verletzt hatte), ein expliziter Eulerschritt (mit ${}^0 \mathbf{q}^\alpha = \mathbf{q}^\alpha(t)$ und ${}^0 \lambda = \lambda(t)$) durchgeführt, um einen Startvektor für die inneren Variablen zu erhalten, solange dieser innerhalb der Gebietsgrenzen für die inneren Variablen lag.

Falls diese Methode nicht zum Erfolg führte, wurde mit den Werten für die inneren Variablen (${}^0 \mathbf{q}^\alpha = \mathbf{q}^\alpha(t)$ und ${}^0 \lambda = 0$) aus dem letzten Lastschritt als Startvektor gerechnet. Misslang dieser Ansatz ebenfalls, so wurde ausgehend von diesen beiden Startvektoren (expliziter und letzter Lastschritt) ein Startvektor durch Unterteilung dieses Intervalls in gleich große Abschnitte berechnet. Diese „Suche“ nach einem geeigneten Startvektor, die auch in den Raum kleiner als der letzte Lastschritt durchgeführt wurde (d.h. die explizit

erhaltenen Werte für die inneren Variablen wurden vom Startvektor aus dem letzten Lastschritt abgezogen und das dazwischen liegende Intervall untersucht), verbesserte das Konvergenzverhalten ebenso, wenn auch die Rechenzeit durch diese Maßnahmen beträchtlich anstieg. Eine grafische Veranschaulichung der Startvektorsuche ist in Abbildung 6.9 dargestellt.

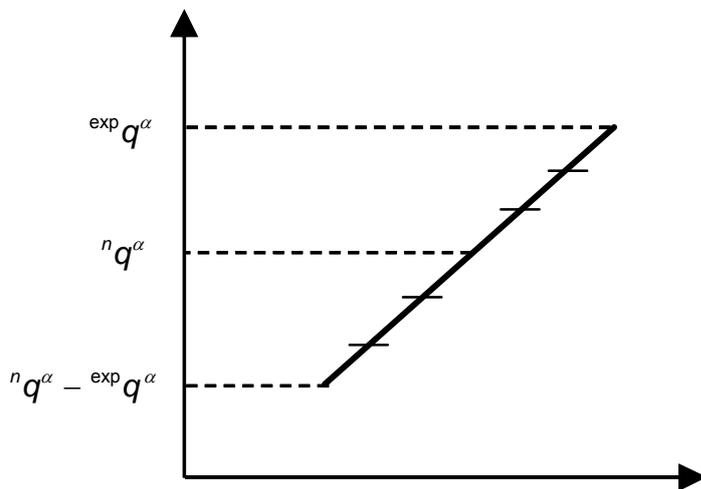


Abbildung 6.9: Grafische Veranschaulichung der Startvektorsuche innerhalb der lokalen Newtoniteration

Leider führt diese „Suche“ nicht immer zum Erfolg und das Newtonverfahren divergierte. Deswegen wurde zusätzlich aufgrund der Beobachtung, dass bei größer werdenden Startvektoren der erste Wert der Überprüfung des Residuums abnimmt, ein Faktor für den nächsten Startvektor (für die Differenz des expliziten Schrittes und des Lösungsvektors aus dem letzten Lastschritt des zuvor beschriebenen Verfahrens) errechnet, der aus einer linearen Extrapolation der letzten beiden Residuumsüberprüfungen gewonnen wird, so dass das Residuum für diesen Startvektor gegen Null gehen sollte (vgl. Abbildung 6.10). Dies führte ebenfalls zu einer Konvergenzverbesserung.

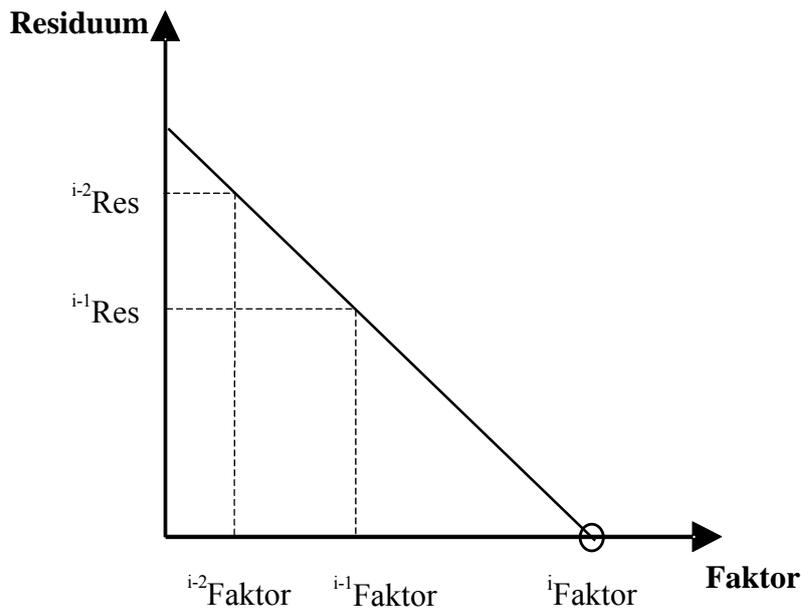


Abbildung 6.10: Erweiterung der Startvektorsuche durch Einbeziehung der Residuumsüberprüfung und Faktorermittlung für die Differenz des expliziten Schrittes und des Lösungsvektors aus dem letzten Lastschritt

Falls die vorgenannten Methoden versagten, kam eine Subinkrementierung des aktuellen Lastschrittes innerhalb des Materialmoduls zum Einsatz, wobei das Lastinkrement in mehrere Schritte unterteilt und jedes Mal das nichtlineare Gleichungssystem aus dem impliziten Eulerverfahren gelöst wurde. Diese Methode zeigte deutliche Konvergenzverbesserungen. Die übliche Anzahl von Subinkrementen lag bei 10.

Eine weitere Möglichkeit zur erfolgreichen Beendigung des Inkrements war die Verwendung des expliziten Eulerverfahrens, falls die anderen Methoden versagten. Dazu wurde der Lastschritt wie auch schon bei der Subinkrementierung des impliziten Verfahrens in mehrere Schritte unterteilt, um möglichst genaue Lösungen zu finden. Der erforderliche „plastische“ Multiplikator wurde aus dem vorangegangenen impliziten Lastschritt gewonnen und der entsprechende Wert am Ende des Inkrements durch Lösung der nichtlinearen Gleichung $f\left({}^{n+1}\beta\left({}^{n+1}\lambda\right), {}^{n+1}\gamma_k\left({}^{n+1}\lambda\right), {}^{n+1}\theta\left({}^{n+1}\lambda\right), {}^{n+1}\varphi\left({}^{n+1}\lambda\right)\right) = 0$ berechnet, so dass dieser im Falle erneuter Konvergenzprobleme im nächsten Lastschritt verwendet werden konnte. Wie auch schon bei der Subinkrementierung des impliziten Schrittes wurde die Anzahl der Unterschritte auf 10 festgelegt. In Einzelfällen konnte ebenfalls eine Konvergenzverbesserung beobachtet werden.

Als letzte Maßnahme zur Konvergenzverbesserung, die zum Einsatz kam, ist die Rückführung des Systems generalisierter Koordinaten auf *kartesische Koordinaten* zu nennen, was in Einzelfällen zur Konvergenzverbesserung beitrug.

Tabelle 6.2 zeigt die angewandten Verfahren zur Konvergenzverbesserung zur besseren Übersichtlichkeit.

Tabelle 6.2: *Untersuchte Methoden zur Konvergenzverbesserung des diskretisierten Newtonverfahrens*

Methode zur Konvergenzverbesserung	Vor- und Nachteile
Numerische konsistente Tangentenmoduli mit Differenzenquotienten	+ Verbesserung der globalen Konvergenz + lokale Konvergenz i. d. R. besser - sehr großer Rechenaufwand - wenn physikalisch nicht korrekte Nullstelle innerhalb der Bestimmung der Tangentenmoduli gefunden wird -> Abbrüche der Rechnung oder Quasi-N.-Verfahren
Erhöhung der maximalen Iterationszahl	+ Verbesserung der lokalen Konvergenz + Rechenzeit steigt nicht so sehr wie bei den numerischen Tangentenmoduli - bei Iterationszahlen > 15 oftmals Auffinden physikalisch nicht korrekter Nullstellen -> Abbrüche der Rechnungen im späteren Verlauf
Wahl der lokalen Toleranzschranken	+ praktikable Ergebnisse für Toleranzen zwischen 1,0E-05 und 1,0E-10 - kleinere Toleranzschranken führen die Berechnungen schnell an die compilerabhängige Rechengenauigkeit
Einhaltung des zulässigen Bereiches für β und γ	+ Konvergenzverbesserung in Kombination mit der Weiterführung der globalen Newtoniteration (kein Abbruch aus dem Materialmodul heraus) -Einschränkung der Suchmöglichkeit für den Startvektor
Beschränkung der Änderung der Winkel θ und φ des aktuellen und des vorher gehenden Lastschrittes	+ Konvergenzverbesserung durch nicht zu große Lastschritte und gleichmäßigerer Ausrichtung der Vektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ
Gedämpftes Newtonverfahren	+ deutliche Konvergenzverbesserung + nur geringe Erhöhung der Rechenzeit - stark abhängig von der maximalen Schrittzahl des gedämpften Verfahrens (verschiedene Nullstellen können gefunden werden) - Startvektorproblem als maßgebende Einflussgröße auf die lokale wie globale Konvergenz dadurch nicht gelöst
Bestimmung des Startvektors durch expliziten Eulerschritt, letzten Lastschritt oder „Suche“ im Intervall der Startvektoren aus dem letzten Lastschritt und dem expliziten Eulerschritt	+ Konvergenzverbesserung + solange nicht nach dem Startvektor „gesucht“ werden muss, akzeptable Rechenzeit - Bei „Suche“ nach dem Startvektor, deutliche Erhöhung der Rechenzeit - führt nicht zwangsläufig zum Erfolg
Erweiterung der Startvektorsuche durch lineare Extrapolation der letzten beiden Residuumsüberprüfungen zur vermuteten Nullstelle, falls eine Abnahme der zugehörigen Werte der ersten Residuumsüberprüfungen festgestellt wird	+ Konvergenzverbesserung - wie zuvor: Rechenzeit - nicht immer erfolgreich
Subinkrementierung des Lastschrittes (mehrfache Lösung des Gleichungssystems und Addition der inneren Variablen): Implizites Verfahren	+ deutliche Konvergenzverbesserung - Rechenzeit steigt stark an (deswegen max. Anzahl der Unterschritte: 10)
Subinkrementierung des Lastschrittes: Explizites Verfahren	+ gelegentlich erfolgreiche Beendigung des Lastschrittes möglich - kleine Schritte nötig, da explizites Verfahren - zusätzliche Lösung einer nichtlinearen Gleichung zur Bestimmung des „plastischen“ Multiplikators
Rückführung auf kartesische Koordinaten	+ in Einzelfällen Konvergenzverbesserung - höherer Rechenaufwand als mit generalisierten Koordinaten - nicht immer erfolgreich

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die in diesem Abschnitt vorgestellten Verfahren zu einer Konvergenzverbesserung im Vergleich zum klassischen diskretisierten Newtonverfahren geführt haben. Letztendlich ist aber die Anwendung der einzelnen Verfahren von der Problemstellung abhängig und bedarf sorgfältiger Prüfung, um zum einen, Konvergenz lokal wie auch global zu erzielen und zum anderen, in einer möglichst geringen Rechenzeit dieses Ziel zu bewerkstelligen.

Möglichkeiten, die Konvergenz weiter zu verbessern, ergeben sich eventuell durch Anwendung aufwändiger Integrationsalgorithmen wie bspw. das Runge-Kutta-Verfahren, die aber im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht wurden.

6.4 Verifizierung der Implementierung des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes

6.4.1 Vergleich experimenteller Daten mit Berechnungsergebnissen

Wie auch schon bei der Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes werden im Folgenden Ergebnisse aus Finite-Elemente-Simulationen mit dem mikroskopisch motivierten Stoffgesetz mit den Versuchsergebnissen der rein elektrischen und elektromechanischen Versuchen aus Kapitel 3 zum Zwecke der Verifizierung des Stoffgesetzes und dessen Implementierung verglichen. Hierzu kamen die an die Versuche angepassten Materialparameter aus Tabelle 6.3 zum Einsatz. Dabei wurden diese entsprechend der Ausführungen in Abschnitt 5.4 umgerechnet, um eine bessere Konditionierung der elektroelastischen Steifigkeitsmatrix k^* zu erzielen.

Tabelle 6.3: *Materialparameter für das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz*

Materialparameter	gewichtetes MKS
E^c	1,0E+03 MV/mm
P^{sat}	310E-03 kN/(MVmm)
σ^c	40,0E-03 kN/mm ²
S^{sat}	0,00225
Y	60,0 kN/mm ²
ν	0,37
d^{\parallel}	6,75E-01 mm/MV
d^{\perp}	-3,15E-01 mm/MV
$d^=$	4,35E-01 mm/MV
c^{γ}	3,0E-05 [kN/mm ²]
c^{β}	1,0E-04 [kN/mm ²]
N	2,0 [-]
A	5,0E-11 [kN/mm ²]

In Abbildung 6.11 sind die dielektrische Hysterese und die Schmetterlingshysterese aus den Versuchen und den Berechnungsergebnissen dargestellt. Im direkten Vergleich können die Berechnungsergebnisse und damit das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung die dielektrische Hysterese und die Schmetterlingshysterese sehr gut abbilden. Im Folgenden sollen die Hysterese und die Entwicklung der inneren Variablen des Stoffgesetzes für diesen einfachen Fall einer einachsigen elektrischen Belastung diskutiert werden.

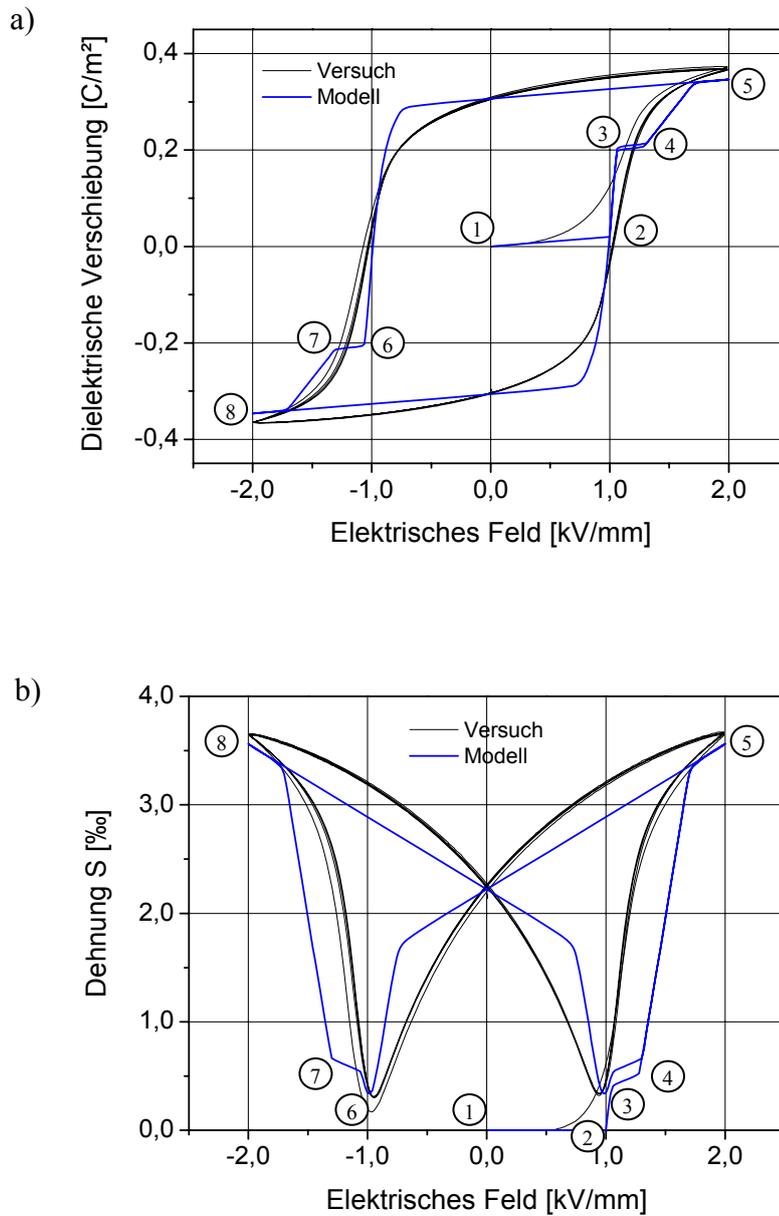


Abbildung 6.11: (a) Dielektrische Hysterese und (b) Schmetterlingshysterese aus Versuch und Berechnung

Abbildung 6.12 zeigt die Entwicklung der inneren Variablen β und γ (hier als $\gamma \frac{e_i^\gamma}{|e_i^\gamma|}$ dargestellt, um $-1 \leq \gamma \leq 1$ bei Anwendung generalisierter Koordinaten zu gewährleisten) für die Belastung aus Abbildung 6.11. Dabei halten diese die durch die Energiebarrierefunktion F^G festgelegte Grenze ein (vgl. Abschnitt 6.2 und Abbildung 6.3).

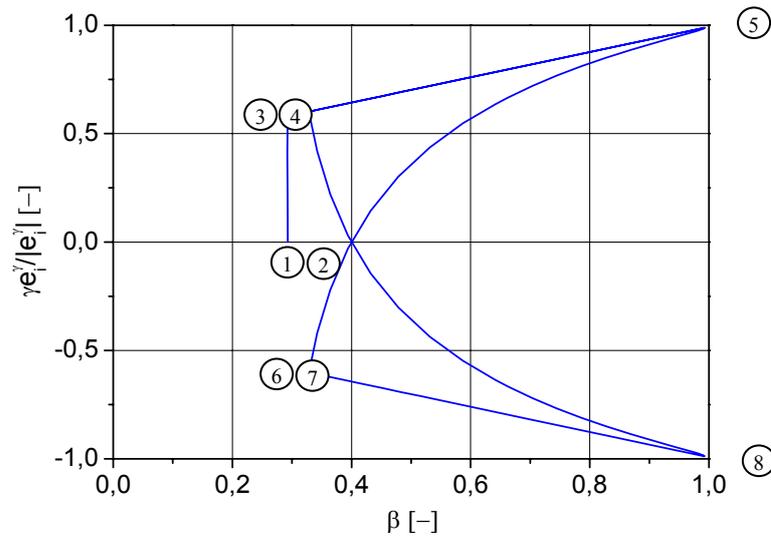


Abbildung 6.12: Entwicklung der inneren Variablen β und $\gamma \frac{e_i^\gamma}{|e_i^\gamma|}$ am Beispiel einer zyklischen elektrischen Belastung

Ausgehend von Punkt 1 in den Abbildungen liegt ein thermisch depolarisierter Ausgangszustand, d.h. makroskopisch ist keine Polarisation zu beobachten, vor. Mit steigendem elektrischem Feld kann bis Punkt 2 lediglich rein linear dielektrisches Verhalten beobachtet werden, was zu einer Zunahme der dielektrischen Verschiebung führt. Da die Koerzitivfeldstärke in diesem Bereich noch nicht erreicht wird, kann sich auch keine Dehnung oder eine Entwicklung der inneren Variablen, die ihre Referenzwerte $\gamma = 0$ und $\beta = \beta^{ref}$ einnehmen, einstellen. Mit dem Erreichen des Punktes 2 setzt eine Entwicklung bis Punkt 3 der inneren Variable γ ein, wobei $\beta = \beta^{ref}$ bleibt. Damit verbunden entwickelt sich eine irreversible Polarisation und irreversible Dehnung. Nach Punkt 3 hält die Entwicklung der inneren Variablen an, da die Grenze ∂G , die durch die Energiebarrierefunktion F^G definiert ist, erreicht wird. Dieser erste Bereich der Entwicklung der inneren Variablen kann mikromechanisch als 180° -Domänenumklappvorgänge betrachtet werden, da anzunehmen ist, dass diese Umklappvorgänge im Vergleich mit 90° -Domänenumklappvorgängen weniger Energie benötigen. Bis Punkt 4 findet sich dann rein linear piezoelektrisches Verhalten. Danach beginnt auch die innere Variable β gemeinsam mit γ sich entlang der Grenze ∂G zu entwickeln. Eine mikromechanische Erklärung hierfür ist, dass in diesem Bereich - bis Punkt 5 - die Entwicklung aufgrund der höheren

Energie durch 180°- wie auch 90°-Domänenenumklappvorgänge ausgelöst wird. Begleitet wird dies auch durch eine Zunahme der irreversiblen Polarisation und der irreversiblen Dehnung. Im Punkt 5, an dem β und γ in die Nähe ihres Grenzwertes Eins kommen, wird den inneren Variablen in ihrer Entwicklung durch die Energiebarrierefunktion eine größer werdende Grenze entgegengesetzt, die im vorliegenden Fall für ein sehr großes elektrisches Feld gegen unendlich gehen würde, so dass zu keinem Zeitpunkt die Grenze ∂G verletzt würde. Bei elektrischer Entlastung findet zunächst keine Veränderung der inneren Variablen β und γ statt, was sich durch einen linear piezoelektrischen Verlauf der beiden Hysteresen zeigt. Erst bei einem entgegengesetzten elektrischen Feld einer gewissen Größe unterhalb der Koerzitivfeldstärke folgen die inneren Variablen einem nichtlinearen Verlauf, der zu einer Reduzierung der beiden Größen und zu einem ebenso ausgeprägtem nichtlinearen Verlauf in den Hysteresen führt. Bei Erreichen des Punktes 6 hält die Entwicklung der inneren Variablen wiederum an und linear piezoelektrisches Verhalten ist bis Punkt 7 zu beobachten. Danach folgen die inneren Variablen wieder der Grenze ∂G bis Sättigung in die entgegengesetzte Richtung erreicht ist.

6.4.2 *Berechnungsergebnisse des typischen Verhaltens piezokeramischer Werkstoffe*

Im Folgenden werden einige Berechnungsergebnisse vorgestellt, welche die Möglichkeiten des implementierten Stoffgesetzes demonstrieren sollen. Dazu wurden typische Belastungsfälle berechnet, die das Verhalten piezokeramischer Werkstoffe wiedergeben. Die Materialparameter wurden der Tabelle 6.3 entnommen.

Betrachtet man nun die ferroelastische Hysterese in Abbildung 6.13, so lässt sich aufgrund der Wahl von β^{ref} eine starke Asymmetrie des Sättigungsverhaltens im Zug- bzw. Druckbereich beobachten, wie es zumindest aus mikromechanischen Überlegungen heraus (vgl. Kamlah [8], Fröhlich [83] und Landis [84]) zu vermuten ist.

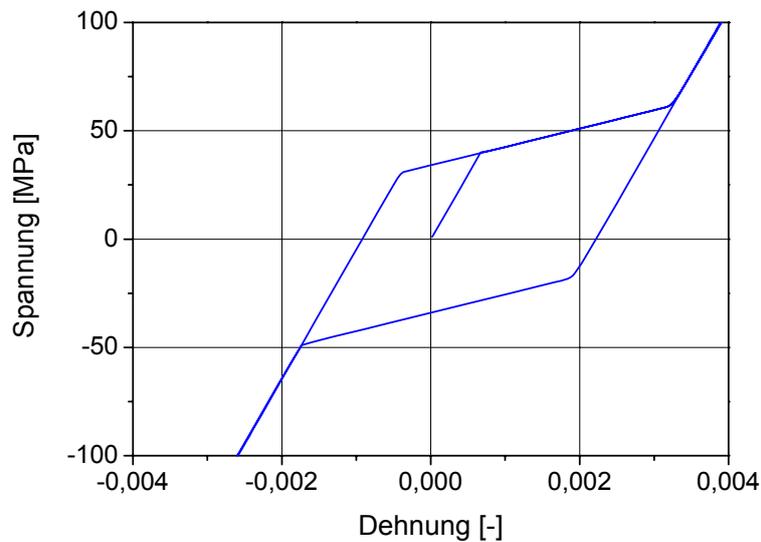


Abbildung 6.13: *Berechnete ferroelastische Hysterese*

Beim Erreichen der Koerzitivspannung σ^c setzt die Entwicklung von β ein, was eine nichtlineare Dehnungszunahme initiiert. Sind alle c-Achsen in die Kegel geklappt (d.h. $\beta = 1$) wird die Entwicklung gestoppt und im weiteren Verlauf ist lineares Verhalten zu beobachten. Mit Entlastung und anschließender Druckbelastung und der Berücksichtigung der Versetzung der Spannung (kinematische Verfestigung) klappen die c-Achsen aus den Kegeln heraus und eine nichtlineare Reduktion der Dehnung setzt ein, bis alle c-Achsen aus den Kegeln heraus geklappt sind ($\beta = 0$). Danach ist wiederum lineares Verhalten zu beobachten und die Hysterese wird im weiteren Verlauf geschlossen.

In Abbildung 6.14 ist das mechanische Depolarisationsverhalten dargestellt. Hierbei wird zunächst das Finite-Elemente-Modell mit einem elektrischen Feld belastet, um vollständige Polung zu erreichen. Nach der elektrischen Entlastung wird eine Druckbelastung aufgebracht.

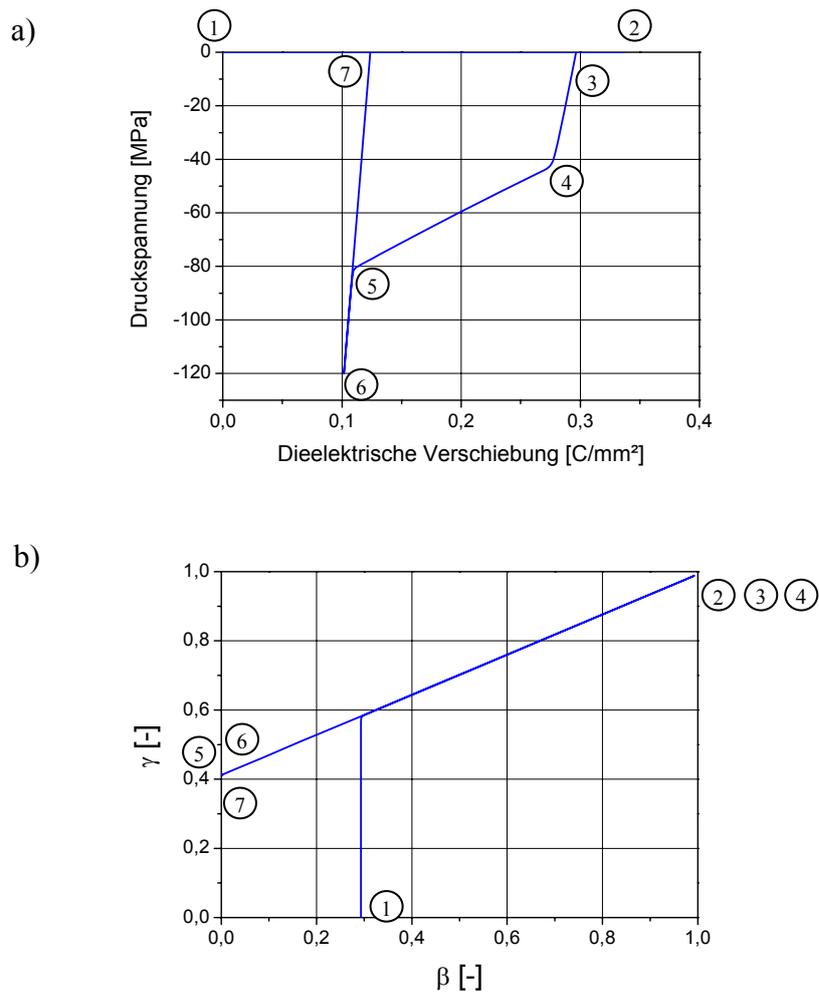


Abbildung 6.14: (a) *Mechanisches Depolarisationsverhalten* und (b) *zugehöriger $\beta - \gamma$ -Verlauf*

Aus Abbildung 6.14 b) ist ersichtlich, dass selbst unter einer sehr großen Druckbelastung keine vollständige Depolarisation, d.h. $\gamma = 0$, erzielt wird, obwohl die innere Variable $\beta = 0$ ist. Ausgehend von Punkt 1 bis Erreichen des Punktes 2 wird das Modell vollständig gepolt. Nach elektrischer Entlastung entspricht die Polarisation der remanenten Polarisation. Mit Einsetzen einer Druckspannung ist bis Punkt 4 lineares, piezoelektrisches Verhalten mit einer Reduzierung der dielektrischen Verschiebung zu beobachten. Erst ab einer Grenze, die im Zusammenhang mit der Koerzitivspannung steht, setzt stark nichtlineares Verhalten ein und es kommt zu einer Abnahme der irreversiblen Polarisation (durch γ festgelegt) bis Punkt 5. Währenddessen klappen immer mehr c-Achsen aus den Kegeln heraus, was an der Abnahme von β zu erkennen ist, bis $\beta = 0$ ist. Ab diesem Punkt kommt es zu keiner weiteren Abnahme der irreversiblen Polarisation und das Verhalten ist

entkoppelt (d.h. die piezoelektrische Koppelung zwischen Polarisation und Spannung ist mit $\beta = 0$ nicht mehr gegeben). Deswegen ist mit der weiteren Zunahme der Belastung bis Punkt 6 und der anschließenden vollständigen mechanischen Entlastung bis Punkt 7 eine andere Steigung zu beobachten als beim Einsetzen der Druckspannung.

Um die Rotationsmöglichkeit des Vektors \mathbf{e}_i^β , der die Ausrichtung der c-Achsen beschreibt, zu demonstrieren, wurde ein Beispiel unter Schubbelastung gerechnet. Zunächst wurde das Finite-Elemente-Modell vollständig gepolt, d.h. $\mathbf{e}_i^\beta = \mathbf{e}_i^\gamma = \vec{\mathbf{e}}_2$, und anschließend eine Schubbelastung in der 1-2-Ebene aufgebracht. Abbildung 6.15 zeigt die Schubspannung über der Schubverzerrung und die Rotation des Vektors \mathbf{e}_i^β .

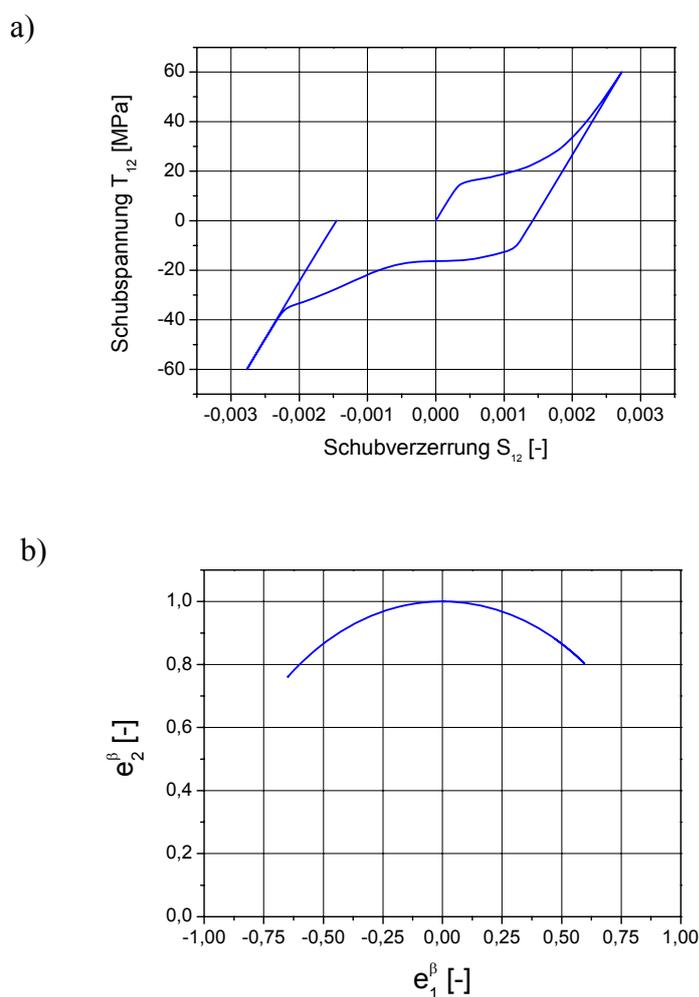


Abbildung 6.15: (a) Schubspannung über Schubverzerrung für einen gepolten Zustand, (b) Rotation von \mathbf{e}_i^β (Richtung der c-Achsen) in der 1-2-Ebene infolge der Schubverzerrung

Während des Scherens ändert sich die Polarisationsrichtung \mathbf{e}_i^γ kaum und nur eine leichte, mechanisch bedingte Depolarisation ist zu beobachten. Der Vektor \mathbf{e}_i^β dreht sich entsprechend der aufgetragenen Schubspannung.

Als Abschlussbeispiel für das prinzipielle Verhalten des implementierten Stoffgesetzes wird im Folgenden eine Berechnung vorgestellt, bei der zunächst ein Element in vertikale Richtung voll durchgepolt und danach das elektrische Feld in horizontale Richtung rotiert wird. Dabei wird der Betrag des elektrischen Feldes konstant bei 2 kV/mm gehalten, was dem zweifachen der Koerzitivfeldstärke entspricht. Hierdurch soll die Rotationsfähigkeit der beiden Vektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ demonstriert werden. In Abbildung 6.16 ist eine schematische Darstellung des Elements und der Belastung gezeigt.

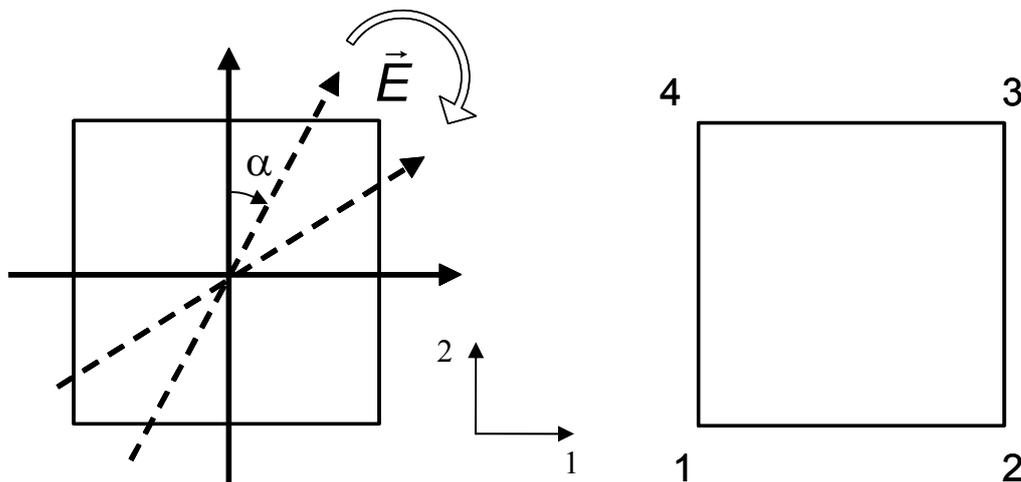


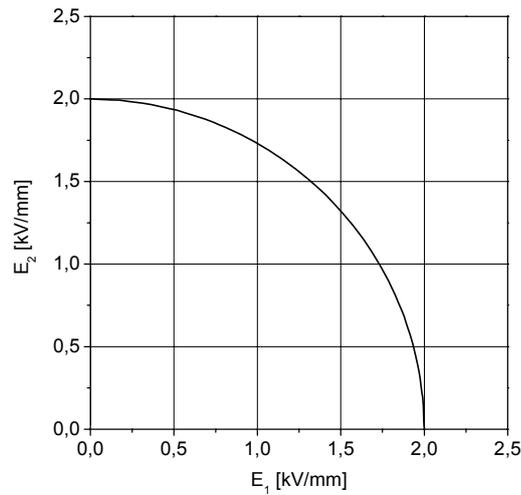
Abbildung 6.16: Schematische Darstellung der elektrischen Belastung und des Elements mit Knotennummern des Rotationsbeispiels

Um die zuvor geforderte Konstanz des Betrages des elektrischen Feldes zu gewährleisten, werden folgende elektrische Potenziale an den Knoten in 5°-Inkrementen (vgl. Abbildung 6.16) aufgebracht:

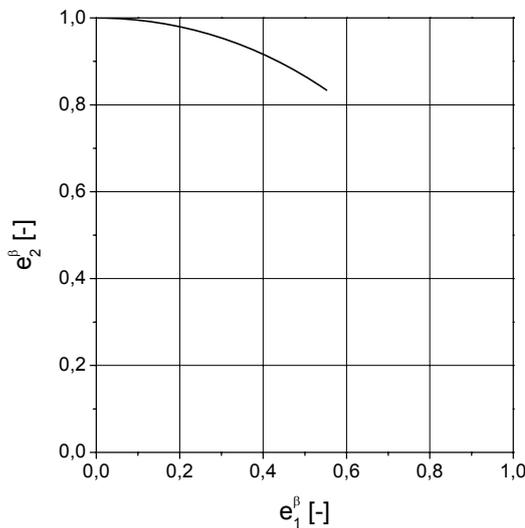
$$\begin{aligned}
 \varphi_1(t) &= 0 \\
 \varphi_2(t) &= \varphi^{\max} \cdot \sin \alpha \\
 \varphi_3(t) &= \varphi^{\max} \cdot (\sin \alpha + \cos \alpha) \\
 \varphi_4(t) &= \varphi^{\max} \cdot \cos \alpha
 \end{aligned}
 \tag{6.123}$$

In Abbildung 6.17 sind das elektrische Feld während der Berechnung und die Rotation der Einheitsvektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ dargestellt.

a)



b)



c)

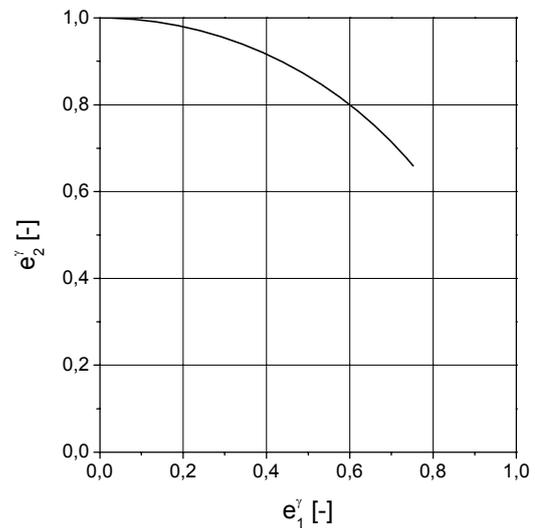


Abbildung 6.17: (a) Rotation des elektrischen Feldes, (b) Rotation des Vektors \mathbf{e}_i^β und (c) des Vektors \mathbf{e}_i^γ

Aus Abbildung 6.17 a) ist gut zu erkennen, dass der Betrag des elektrischen Feldes über die Belastungsdauer konstant bleibt. Dem elektrischen Feld folgen die beiden Vektoren \mathbf{e}_i^β und \mathbf{e}_i^γ , wenn auch eine vollständige Rotation in Richtung des elektrischen Feldes erst mit einer weiteren elektrischen Belastung in 2-Richtung vollzogen werden könnte. Der Vektor \mathbf{e}_i^β folgt dem Vektor \mathbf{e}_i^γ und erreicht am Schluss der Rechnung nicht ganz dessen Wert. Die physikalische Ursache hierfür ist die Kinematik des Systems, die in den Gleichungen für die thermodynamisch konjugierten Kräfte (Gleichungen 6.60 bis 6.63) Eingang findet. Aus diesen Gleichungen ist im spannungsfreien System zu erkennen, dass

mit dem Einsetzen der Rotation zunächst nur eine Entwicklung für e_i^γ in Richtung des elektrischen Feldes stattfindet (vgl. Gleichung 6.63). Erst mit dem Einsetzen dieser Entwicklung kommt es nachfolgend ebenso zu einer Entwicklung von e_i^β (vgl. Gleichung 6.62).

Abbildung 6.18 zeigt den $\beta - \gamma$ -Pfad über den Betrag des Skalarproduktes der beiden Vektoren $|e_i^\beta e_i^\gamma|$, was dem Winkel zwischen den beiden Vektoren entspricht.

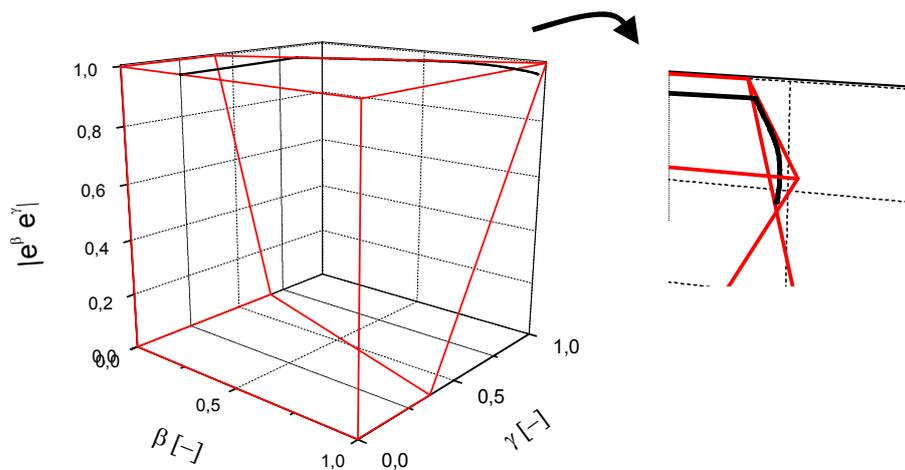


Abbildung 6.18: Raum der zulässigen Werte für β und γ über $|e_i^\beta e_i^\gamma|$ mit eingezeichnetem $\beta - \gamma$ -Pfad

In Abbildung 6.18 ist gut zu erkennen, wie die inneren Variablen β und γ der Begrenzung folgen, die sich durch die zulässigen Werte für γ aus Gleichung 6.52 ergibt. Mit dem Einsetzen der Rotation und der damit verbundenen Änderung von $|e_i^\beta e_i^\gamma|$ (vgl. Abbildung 6.17) kommt es zu einer Verminderung der irreversiblen Polarisation und Dehnung (Reduktion von γ und β , vgl. vergrößerter und gedrehter Bildausschnitt) entlang der begrenzenden Fläche, die in der Abbildung vereinfacht nur durch deren begrenzenden Linien dargestellt ist. In Wirklichkeit ist die in der Abbildung rückseitige Fläche gekrümmt, was hier aus Übersichtlichkeitsgründen nicht dargestellt ist.

Nach der Demonstration des implementierten, grundlegenden Verhaltens piezokeramischer Werkstoffe, wird im nächsten Abschnitt ein Simulationsbeispiel vorgestellt.

6.5 Anwendungsbeispiel: Unendlich ausgedehnter Zylinder

In Abbildung 6.19 ist ein piezokeramischer Kreisring dargestellt, der in radiale Richtung gepolt wurde. Aufgrund der nachfolgend beschriebenen Randbedingungen kann dieser als unendlich ausgedehnter Zylinder betrachtet werden. Die Materialeigenschaften sind vergleichbar mit denen von PIC 151 der Firma PI Ceramic und können der Tabelle 6.3. Davon abweichende Materialparameter finden sich in Tabelle 6.4.

Tabelle 6.4: *Materialparameter für die Simulationen*

E-Modul Y [GPa]	60,0
Poissonsche Zahl ν [-]	0,396
Koerzitivspannung σ_c [MPa]	40,0
Sättigungsdehnung ε_{sat} [-]	0,002
Koerzitivfeldstärke E_c [kV/mm]	1,0
Sättigungspolarisation [C/m ²]	0,29
Piezomodul d_{33} [mm/MV]	4,5E-1
Piezomodul d_{31} [mm/MV]	-2,1E-1
Piezomodul d_{15} [mm/MV]	5,8E-1

Das zugehörige axialsymmetrische Finite-Elemente-Modell ist unten in der Abbildung zu sehen. Ausgehend vom ungepolten Zustand wurde ein elektrisches Potenzial auf der Außenseite des Kreisringes aufgebracht, das einem mittleren elektrischen Feld von $3E^c$ entspricht.

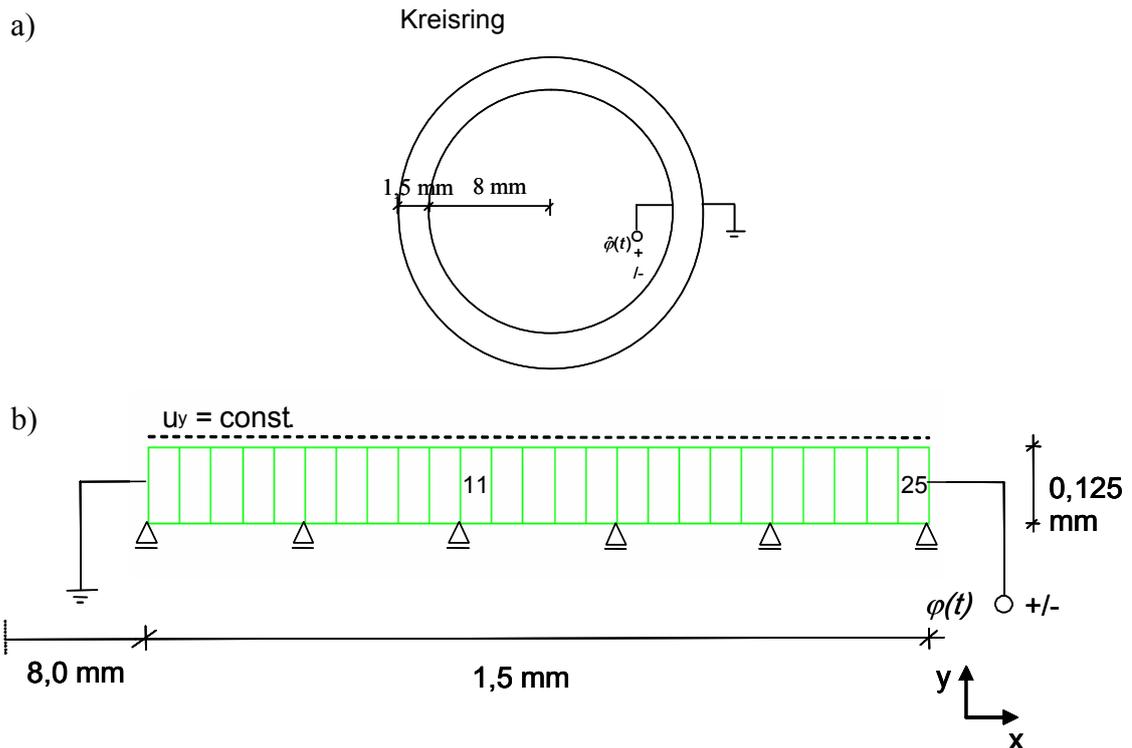


Abbildung 6.19: (a) radial gepolter Kreisring, (b) axialsymmetrische Finite-Elemente-Diskretisierung des Kreisringes

Die Belastungsgeschichte ist in Abbildung 6.20 dargestellt. Wie zuvor schon angedeutet wurde, wurde der Kreisring mit einem elektrischen Potenzial auf der Außenseite belastet und anschließend wieder vollständig entlastet.

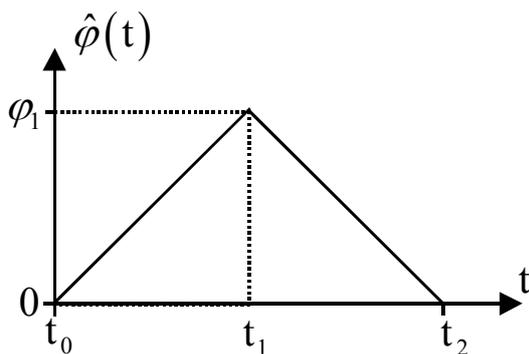


Abbildung 6.20: Belastungsgeschichte für die Polung des Kreisringes

Da das Beispiel ähnlich zu dem aus Abschnitt 5.7 ist, in dem piezokeramische Hohlzylinder mit der Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes berechnet wurden, wurden ähnliche Ergebnisse für die an dieser Stelle vorgestellten Berechnungen mit der

Implementierung des mikromechanisch motivierten Stoffgesetzes in der Mitte der Zylinderlänge des Finite-Elemente-Modells aus Abschnitt 5.7 erwartet.

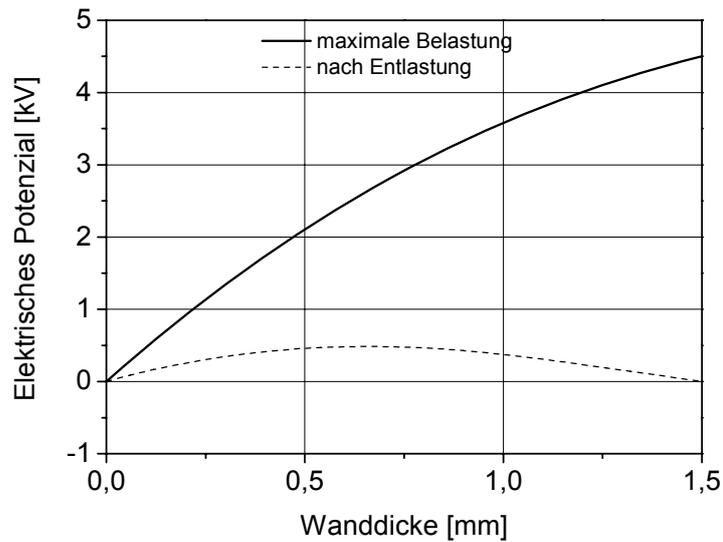
In Abbildung 6.21 sind das undeformierte und das deformierte Finite-Elemente-Netz bei maximaler Belastung gezeigt. Erwartungsgemäß führt die elektrische Belastung zu einer Verkleinerung des Innenradius des Kreisringes, begleitet von einer Verkürzung in vertikale Richtung im Vergleich zum Ausgangszustand.



Abbildung 6.21: *Undeformiertes und deformiertes (bei maximaler Belastung) Finite-Elemente-Netz (Skalierungsfaktor 5,27)*

Abbildung 6.22 zeigt die Verteilung des elektrischen Potentials und des elektrisches Feldes bei maximaler Belastung und nach Entlastung über der Wanddicke des Kreisringes. Wie auch schon bei den piezokeramischen Hohlzylindern und den dielektrischen Berechnungen an einer Kreisringscheibe (vgl. Abschnitt 5.7) ergibt sich eine nichtlineare Verteilung des elektrischen Potentials und des elektrischen Feldes.

a)



b)

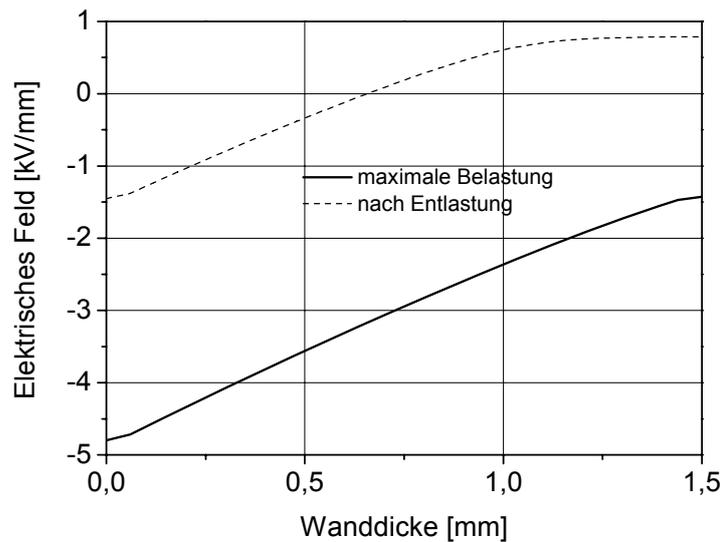


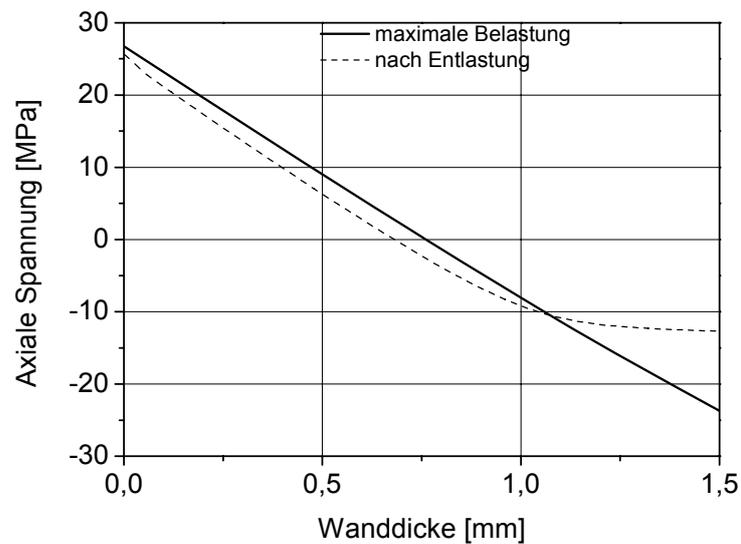
Abbildung 6.22: (a) Elektrisches Potenzial und (b) elektrisches Feld in radialer Richtung bei maximaler Belastung und nach Entlastung über der Wanddicke des Kreisringes

Betrachtet man die Verteilung des elektrischen Feldes bei maximaler Belastung, so ergibt sich an der Innenseite des Ringes ein elektrisches Feld von ungefähr $-4,7 \text{ kV/mm}$ und an der Außenseite von $-1,5 \text{ kV/mm}$, das höher als die Koerzitivfeldstärke von $1,0 \text{ kV/mm}$ ist. Das aufgebrauchte elektrische Potenzial ist damit gerade ausreichend, um Werte für das elektrische Feld größer als die Koerzitivfeldstärke zu erzielen. Nach Entlastung verbleibt ein elektrisches Potenzial von signifikanter Größe in der Kreisringscheibe. Dies hat zur

Folge, dass ebenfalls ein elektrisches Feld im Ring verbleibt, das auf der Innenseite über der Koerzitivfeldstärke liegt und auf der Außenseite positive Werte annimmt.

In Abbildung 6.23 sind die axiale und die Umfangsspannungsverteilung über die Wanddicke bei maximaler Belastung und nach Entlastung dargestellt. Hierbei wurden aufgrund der Extrapolationsprobleme für Randwerte des verwendeten Postprozessors wie auch schon bei den Berechnungen aus Kapitel 5.7 die außen liegenden Punkte auf der Basis der Werte der Gaußpunkte am Rande linear extrapoliert.

a)



b)

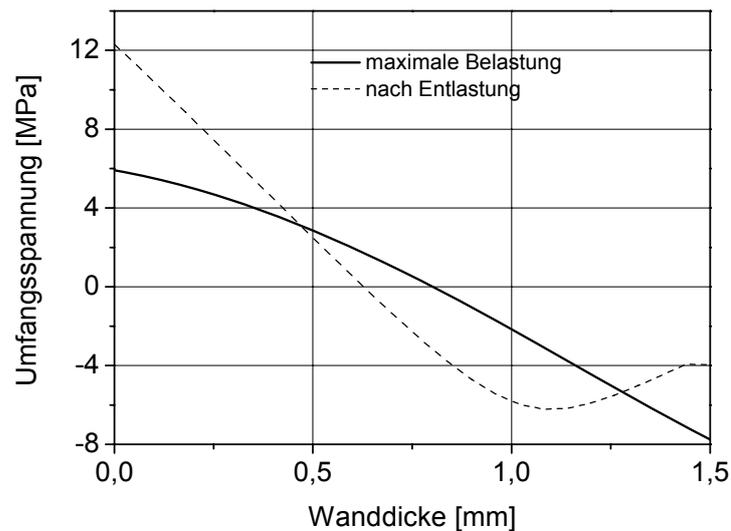


Abbildung 6.23: (a) Axialspannung und (b) Umfangsspannung bei maximaler Belastung und nach Entlastung über der Wanddicke des Kreisringes

Die axiale Spannungsverteilung ist bei maximaler elektrischer Belastung nahezu linear. Auf der Innenseite des Kreisringes sind Zugspannungen und auf der Außenseite Druckspannung zu beobachten. Die Zugspannung ist im Bereich der Zugfestigkeit des Materials und kann somit zu Rissen führen. Nach Entlastung verbleiben die Spannungen im Kreisring, wobei auf der Innenseite kaum eine Reduktion im Vergleich zu den Spannungen bei maximaler Belastung und auf der Innenseite eine Verringerung der Druckspannungen zu verzeichnen ist.

Die Umfangsspannungen zeigen einen stark ausgeprägten nichtlinearen Verlauf. Bei maximaler Belastung sind auf der Innenseite signifikante Zugspannungen und auf der Außenseite Druckspannungen zu beobachten, wobei diese einen nicht stark ausgeprägten nichtlinearen Verlauf zeigen. Nach elektrischer Entlastung verbleiben Umfangsspannungen in der Kreisringscheibe, wenn auch nicht in der Größenordnung wie bei den Axialspannungen.

Die Spannungen in radialer Richtung sind erwartungsgemäß nahezu Null.

An dieser Stelle sei nochmals wie in Abschnitt 5.7 dieser Arbeit eine Erklärung der beobachteten Phänomene im Folgenden angegeben. Durch die inhomogene Verteilung des elektrischen Feldes wird auf der Innenseite die Koerzitivfeldstärke früher als auf der Außenseite erreicht. Dadurch setzen dort die Domänenumklappvorgänge in radiale Richtung früher ein, was zu einer Verkürzung des Ringes in vertikale Richtung führt, während auf der Außenseite die Koerzitivfeldstärke noch nicht erreicht ist. Dies führt zu Druckspannungen in axialer Richtung in diesem Bereich und aufgrund des Gleichgewichtes wiederum zu Zugspannungen auf der Innenseite. Das Gleiche trifft auch auf die Umfangsspannungen zu.

Abbildung 6.24 zeigt die irreversible Polarisation über der Wanddicke bei maximaler Belastung und nach Entlastung.

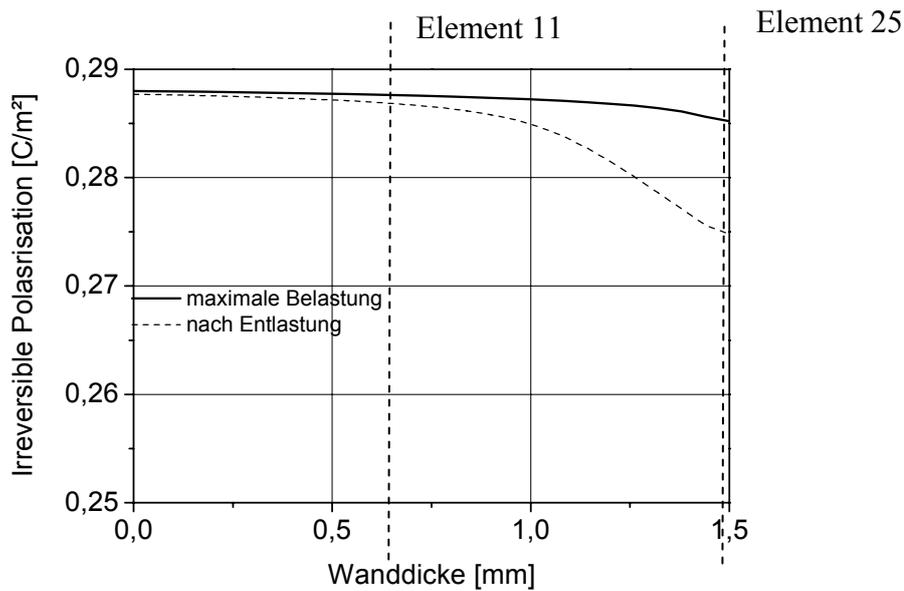


Abbildung 6.24: Irreversible Polarisation über der Wanddicke bei maximaler Belastung und nach Entlastung (die Lage der Elemente 11 und 25 ist angegeben (vgl. Abbildung 6.19))

Die Lage des im nahezu voll gepolten Bereich und auf der Außenseite des Kreisringes liegenden Elementes (vgl. Abbildung 6.19) ist in das Diagramm eingezeichnet. Die Sättigungspolarisation wird bei maximaler elektrischer Belastung beinahe überall im Kreisring erreicht. Lediglich auf der Außenseite findet sich ein leichter Abfall. Aufgrund elektrischer Depolarisation vermindert sich insbesondere auf der Außenseite die irreversible Polarisation signifikant nach Entlastung. Dort hat das elektrische Feld in diesem Lastschritt das umgekehrte Vorzeichen wie zuvor und ist nahe an der Koerzitivfeldstärke.

Zur Verdeutlichung des Effektes der elektrischen Depolarisation findet sich in Abbildung 6.25 die dielektrische Verschiebung über dem elektrischen Feld für die beiden betrachteten Elemente des Kreisringes. Element 11 liegt ungefähr an der Stelle, wo das elektrische Feld im entlasteten Fall nahe Null ist (vgl. Berechnung des Röhrchens aus Kapitel 5.7), wogegen Element 25 das Element auf der Außenseite ist.

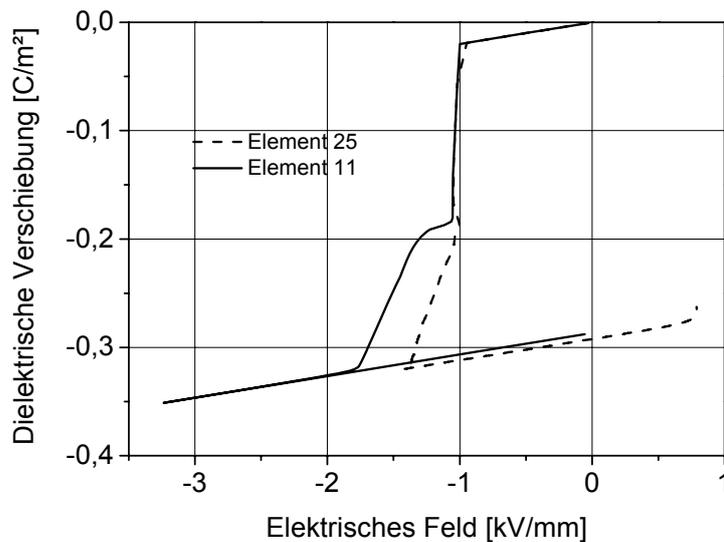


Abbildung 6.25: Dielektrische Verschiebung über dem elektrischen Feld für die beiden außen liegenden Elemente des Kreisringes

Kleine Änderungen des elektrischen Feldes führen aufgrund der großen Steigungen der Polungs- und Depolarisationsteile der Hysterese zu deutlichen Änderungen der irreversiblen Polarisation. Dies ist bei nahezu konstantem elektrischen Feld nach Entlastung nahe des äußeren Randes verbunden mit einer signifikanten Änderung der irreversiblen Polarisation. Der in Abschnitt 5.7 beschriebene „elektrische“ Bauschingereffekt ist für den Kreisring wieder zu beobachten. Die kritische Koerzitivfeldstärke für Domänenenumklappvorgänge ist abhängig von der Belastungsgeschichte. Damit ist eine selbst verhältnismäßig hohe elektrische Spannung nicht in der Lage eine vollständige Polarisation über die Wanddicke hinweg nach Entlastung zu gewährleisten.

Mit diesem Simulationsbeispiel konnte gezeigt werden, dass das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung komplexe Aufgabenstellungen berechnen kann. Im Vergleich der qualitativ und quantitativ gut übereinstimmenden Berechnungen mit dem phänomenologischen Stoffgesetz an piezokeramischen Hohlzylindern zeigt sich – außer dass die globalen Ergebnisse im gleichen Größenordnungsbereich liegen –, dass die vorliegende Implementierung mit dem mikroskopisch motivierten Stoffgesetz das Bauteilverhalten offensichtlich präziser wiedergeben kann, was insbesondere aus Abbildung 6.24, in der die irreversible Polarisation über der Wanddicke aufgetragen ist, hervorgeht. Der ausgeprägte nichtlineare Verlauf der Polarisation – besonders nach Entlastung – ist lokal physikalisch plausibler (aufgrund der besseren Erfassung der

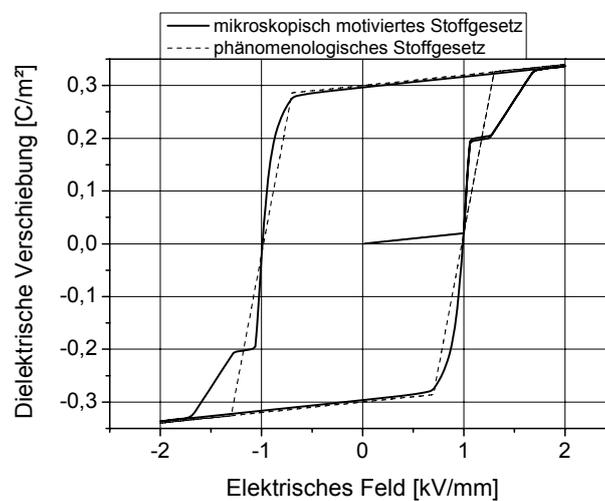
Domänenumklappprozesse), wenn auch die phänomenologische Implementierung das Verhalten global ebenso gut beschreiben kann. In der korrespondierenden Abbildung 5.22 der Simulation mit dem phänomenologischen Stoffgesetz konnte nur ein nahezu lineare Abfall der irreversiblen Polarisierung festgestellt werden, der zwar ebenfalls physikalisch korrekt ist, aber bei Weitem nicht so detailliert dargestellt werden konnte wie mit der Implementierung des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes. Für beliebige dreidimensionale elektromechanische Belastungsgeschichten erwartet man vom mikroskopisch motivierten Stoffgesetz eine physikalisch verlässlichere Beschreibung.

7 Vergleichende Betrachtung beider Stoffgesetze und deren Finite-Elemente-Implementierungen

In diesem Kapitel werden die beiden Stoffgesetze und deren Finite-Elemente-Implementierungen anhand einer einfachen Polungsrechnung miteinander verglichen.

In Abbildung 7.1 sind die dielektrische Hysterese und die Schmetterlingshysterese, jeweils mit dem phänomenologischen und dem mikroskopisch motivierten Stoffgesetz berechnet, dargestellt.

a)



b)

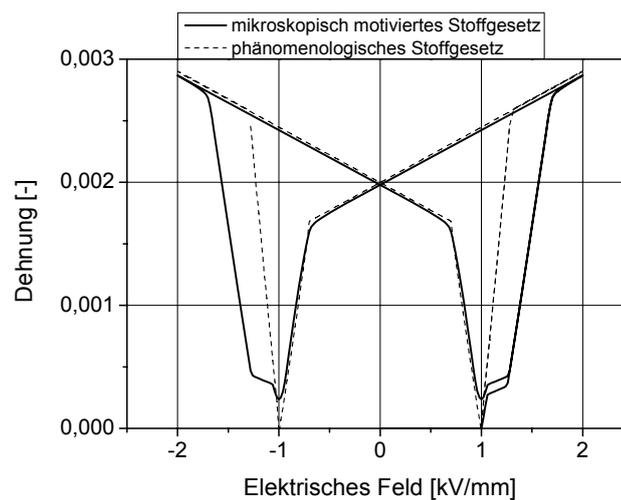


Abbildung 7.1: Vergleichende Betrachtung des phänomenologischen und des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes anhand einer einfachen Polungsrechnung:

- (a) Dielektrische Hysterese
- (b) Schmetterlingshysterese

Deutlich ist zu erkennen, dass bei beiden Stoffgesetzen die Evolution der inneren Variablen beim Erreichen der Koerzitivfeldstärke einsetzt. Danach unterscheidet sich der Verlauf beider Kurven signifikant. Durch die mikroskopisch motivierte Berücksichtigung der 90°- und 180°-Domänenumklappvorgänge beim mikroskopisch motivierten Stoffgesetz, wird die Sättigung später erreicht, was anhand der durchgeführten Versuche aus Kapitel 3 als physikalisch realistischer eingestuft werden kann. Nach Erreichen der Sättigung folgen beide Stoffgesetze dem linearen piezoelektrischen Verlauf bis bei einem genügend großen elektrischen Feld in entgegengesetzte Richtung die Umklappbedingung wieder verletzt wird und eine Reduktion der inneren Variablen beider Stoffgesetze einsetzt. Der weitere Verlauf - bis die Hysteresen geschlossen sind - folgt den vorangegangenen Erläuterungen. Zu bemerken ist, dass beim mikroskopisch motivierten Stoffgesetz im Gegensatz zum phänomenologischen Stoffgesetz die „Spitzen“ der Schmetterlingshysterese nicht Null erreichen. Das bedeutet, dass nicht alle Domänen umklappen und den ungepolten Ausgangszustand wieder herstellen, was nach Betrachtung von Versuchsergebnissen physikalisch richtiger ist.

Ein Vergleich der benötigten Rechenzeiten ist in Tabelle 7.1 dargestellt. Dabei wurde mit dem mikroskopisch motivierten Stoffgesetz zwei Varianten berechnet – mit und ohne numerische, konsistente Tangentenmoduli. Der verwendete Computer war ein AMD 64X2 4200+ mit 4 GB Hauptspeicher.

Tabelle 7.1: *Vergleich der Berechnungszeit der einfachen Polungsrechnung mit dem phänomenologischen und dem mikroskopisch motivierten Stoffgesetz (mit und ohne numerische, konsistente Tangentenmoduli)*

Stoffgesetz	Phänomenologisches Stoffgesetz	Mikroskopisch motiviertes Stoffgesetz (ohne konsistenten Tangentenmoduli)	Mikroskopisch motiviertes Stoffgesetz (mit konsistenten Tangentenmoduli)
Berechnungszeit [sec]	8	80	175
Anzahl Lastschritte	503	1752	1752

Der Vergleich zeigt, dass selbst ohne Verwendung der konsistenten Tangentenmoduli die Berechnungszeit mit dem mikroskopisch motivierten Stoffgesetz 10-mal größer ist als mit

dem phänomenologischen Stoffgesetz. Allerdings sind beim mikroskopisch motivierten Stoffgesetz 7 nichtlineare Gleichungen zu lösen, wogegen beim phänomenologischen Stoffgesetz lediglich jeweils eine algebraische Gleichung zu lösen ist. Werden die konsistenten Tangentenmoduli beim mikroskopisch motivierten Stoffgesetz hinzugeschaltet, bewirkt dies eine weitere Steigerung der Berechnungszeit um den Faktor $\sim 2,2$. Das nichtlineare Gleichungssystem ist in diesem Fall 81 Mal zusätzlich zu lösen (Die Reduzierung von 144 auf 81 Komponenten der numerisch ermittelten konsistenten Tangentenmoduli ist auf die Verwendung der Voigt'schen Notation anstatt der Tensorschreibweise zurückzuführen).

Der Vorteil der physikalisch korrekteren Berechnung wird mit signifikant längeren Rechenzeiten „erkaufte“. Allerdings zeigte sich auch am Simulationsbeispiel des piezokeramischen Kreisringes aus dem vorangegangenen Abschnitt, dass das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz in lokalen Bereichen das Verhalten piezokeramischer Bauteile besser wiedergeben kann als die Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes aus Kapitel 5.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das phänomenologische Stoffgesetz gut geeignet ist, um schnell Näherungen des tatsächlichen Bauteilverhaltens zu simulieren, wobei es darum geht, das globale Verhalten von Bauteilen abzuschätzen. Dagegen hat das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz sein Anwendungsgebiet eindeutig in der lokalen Betrachtung des Verhaltens piezokeramischer Werkstoffe. Durch die zu erwartende Weiterentwicklung der Rechenkapazitäten heutiger Computer sollte aber in naher Zukunft die aus Tabelle 7.1 hervorgehende verhältnismäßig lange Berechnungszeit kein großes Problem mehr darstellen, weswegen dann eine genauere Berechnung mittels des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes zu bevorzugen wäre.

Weitere Möglichkeiten zur Optimierung der Rechenzeit des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes wären bspw. ein effizienterer Algorithmus durch eine Reduzierung der Anzahl der Gleichungen des nichtlinearen Systems oder die analytische Lösung der implementierten Ableitungen anstatt der augenblicklich vorhandenen Differenzenquotienten.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Zunächst wurden im Rahmen dieser Arbeit die Grundlagen der Piezo- und Ferroelektrizität erläutert. Hierzu wurde ausgehend von der Einheitszelle über die Domänen zum Polykristall das makroskopische Verhalten von Ferroelektrika erläutert, um eine Motivation für die Notwendigkeit der Betrachtung des nichtlinearen Verhaltens für die konstitutiven Stoffgesetze zu schaffen.

An die Einführung anschließend findet sich eine Zusammenstellung von experimentellen Untersuchungen unter mehrachsigen, elektromechanischen Beanspruchungen. Danach wurden eigene durchgeführte einachsige, rein elektrische und koaxiale elektromechanische Experimente besprochen. Die koaxialen Versuche wurden in nichtproportionale und proportionale Experimente unterteilt, wobei die Letzteren wie auch die ebenfalls geschilderten mehrachsigen, nichtproportionalen elektrischen Experimente von Zhou et al. [28-30] durchgeführt wurden. Dabei wurden Umklappflächen im Raum der mechanischen Spannungen und des elektrischen Feldes sowie im biaxialen Raum des elektrischen Feldes auf der Basis von Polarisations- und Dehnungsänderungsmessungen gewonnen. Ziel der Betrachtung der experimentellen Untersuchungen war, die im weiteren Verlauf der Arbeit beschriebenen konstitutiven Stoffgesetze und deren Finite-Elemente-Implementierungen mit den experimentellen Ergebnissen verifizieren zu können.

Im Anschluss an die experimentellen Untersuchungen fand eine Literaturstudie zu bereits existierenden phänomenologischen und mikromechanischen Stoffgesetzen statt. Die betrachteten Stoffgesetze wurden dabei erläutert und deren Anwendbarkeit und Fähigkeiten diskutiert.

Danach wurde zunächst das phänomenologische Stoffgesetz, das von Kamlah und Böhle [5,6,8,9] entwickelt wurde, beschrieben und die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Finite-Elemente-Implementierung mit einem Prädiktor-Korrektor-Verfahren vorgestellt. Ursprünglich wurde das Stoffgesetz mit einem Runge-Kutta-Verfahren implementiert, was aber sehr rechenzeitintensiv war. Die „neue“ Methode der Implementierung ist bedeutend schneller und effizienter, so dass auch größere Finite-Elemente-Modelle berechnet werden können. Das Stoffgesetz und die Implementierung wurden anhand der Versuchsergebnisse dieser Arbeit verifiziert und das prinzipielle Verhalten von Ferroelektrika simuliert. Des Weiteren konnte an Simulationsbeispielen (piezokeramische Hohlzylinder,

Stapelaktor, bruchmechanische Experimente) die vielfältigen Verwendungsmöglichkeiten und die Leistungsfähigkeit gezeigt werden.

Dann wurde das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz, das auf die Arbeiten Kamlah et al. [10 – 13] beruht, und dessen Überführung in generalisierte Koordinaten vorgestellt und dessen Finite-Elemente-Implementierung, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurde, beschrieben. Aufgrund von lokalen Konvergenzproblemen wurde verstärkt auf Möglichkeiten zur Konvergenzverbesserung der lokalen Newtoniteration eingegangen und abschließend das Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung anhand der Versuchsergebnisse verifiziert. Zusätzlich wurde noch das prinzipielle Verhalten von Ferroelektrika simuliert, um die Leistungsfähigkeit der Finite-Elemente-Implementierung zu verdeutlichen. Dem gleichen Zweck diente ein Simulationsbeispiel eines unendlich ausgedehnten piezokeramischen Zylinders, das qualitativ die gleichen Tendenzen zeigte wie das unter dem phänomenologischen Stoffgesetz vorgestellte Beispiel mit piezokeramischen Hohlzylindern.

Zum Schluss der Arbeit findet sich eine Gegenüberstellung von Berechnungsergebnissen einfacher Simulationsbeispielen der beiden in dieser Arbeit betrachteten Stoffgesetze hinsichtlich des Verhaltens und der Berechnungszeit. Die Berechnungszeit der Implementierung des phänomenologischen Stoffgesetzes ist erwartungsgemäß deutlich kürzer, da im Gegensatz zum mikroskopisch motivierten Stoffgesetz kein nichtlineares Gleichungssystem sondern jeweils lediglich eine algebraische Gleichung gelöst werden muss.

Als Fazit dieser Arbeit lässt sich sagen, dass es gelungen ist, für die beiden vorgestellten Stoffgesetze wirkungsvolle Finite-Elemente-Implementierungen bereit zu stellen, mit denen praxisrelevante Problemstellungen insbesondere beim Polungsprozess piezokeramischer Bauteile gelöst werden können. Dies konnte an mehreren Simulationsbeispielen gezeigt werden. Das phänomenologische Stoffgesetz und dessen Finite-Elemente-Implementierung bieten eine schnelle Möglichkeit der Berechnung auch komplexer Strukturen unter akzeptablen Berechnungszeiten dank der äußerst effizienten Implementierungsmethode. Das mikroskopisch motivierte Stoffgesetz, welches das physikalische Verhalten von Ferroelektrika besser wiedergibt, ist naturgemäß langsamer in der Berechnung, aber gibt einen präziseren Einblick im lokalen Bereich eines zu polenden Bauteils.

Die vorgenannten und in der Arbeit ausführlich besprochenen Konvergenzprobleme des mikroskopisch motivierten Stoffgesetzes und dessen Finite-Elemente-Implementierung

führen zum Ausblick, in dem eine Reduzierung der Gleichungszahl des zu lösenden nicht-linearen Gleichungssystems eine Möglichkeit darstellt, eine verbesserte Konvergenz verbunden mit einer Rechenzeitbeschleunigung zu erreichen.

Des Weiteren wäre eine Überführung der Implementierung auf ein kommerzielles Finite-Elemente-Programm wünschenswert, da das verwendete Open Source Finite-Elemente-Programm lediglich axialsymmetrische Elemente und Elemente mit ebenem Dehnungszustand für den elektromechanischen Bereich zur Verfügung stellt. Dadurch sind Simulationen auf diese Anwendungsfälle beschränkt und beliebige dreidimensionale Berechnungen nicht möglich. Derzeit existieren aber auch in kommerziellen Finite-Elemente-Programmen keine Schnittstellen, welche die elektromechanischen Größen übergeben könnten, weswegen eine Erweiterung der bestehenden Elementfamilie des Open Source FE-Programms oder die Programmierung eines Volumenelementes in einem kommerziellen Code Möglichkeiten darstellen, das oben angesprochene Problem zu lösen.

9 Literaturverzeichnis

- [1] Jaffe, B., Cook, W.R., Jaffe, H.: *Piezoelectric Ceramics*. Academic press, London and New York (1971)
- [2] Burfoot, J.C.: *Ferroelectrics: An Introduction to the Physical Principles*. D. Van Nostrand Company Ltd., London (1967)
- [3] Valasek, J.: *Piezo-electric and Allied Phenomena in Rochelle Salt*. Physical review, 17(4), 475-481 (1921)
- [4] Jaffe, B., Roth, R.S., Marzullo, S.: *Properties of Piezoelectric Ceramics in the Solid-Solution Series Lead Titanate-Lead Zirconate-Lead Oxide: Tin Oxide and Lead Titanate-Lead Hafnate*. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 55, 239-254 (1955)
- [5] Boehle, U.: *Phänomenologische Modellierung und Finite-Elemente-Simulationen von nichtlinearen elektromechanischen Vorgängen in ferroelektrischen Materialien*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6347 (1999)
- [6] Kamlah, M., Böhle, U.: *Finite Element Analysis of Piezoceramic Components Taking into Account Ferroelectric Hysteresis Behaviour*. International Journal of Solids and Structures, 38, 605-633 (2001)
- [7] *PSU, Open Source Finite Element Code*, Institut für Statik und Dynamik in der Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart
- [8] Kamlah, M.: *Zur Modellierung von nichtlinearen elektromechanischen Koppelphänomenen in Piezokeramiken*. Berichte des Instituts für Mechanik (Bericht 2/2000), Institut für Mechanik, Universität Gesamthochschule Kassel (2000)
- [9] Kamlah, M.: *Ferroelectric and Ferroelastic Piezoceramics- Modeling of Electromechanical Hysteresis Phenomena*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 13, 219-268 (2001)
- [10] Kamlah, M., Jiang, Q.: *A Constitutive Model for Ferroelectric Ceramics under Uniaxial Loading*. Smart Materials and Structures, 9, 441-451 (1999)

- [11] Kamlah, M., Jiang, Q.: *A Thermodynamically and Microscopically Motivated Constitutive Model for Piezoceramics under Uniaxial Loading*. SPIE Conference on Smart Structures and Materials, Active Materials: Behavior and Mechanics, Ed. C.S. Lynch, San Diego, CA, USA, March 18-21, 2002, Bellingham, Wash., SPIE Proceedings Series, 4699, 9-20 (2002)
- [12] Kamlah, M., Wang, Z.: *A Thermodynamically and Microscopically Motivated Constitutive Model for Piezoceramics*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6880 (2003)
- [13] Kamlah, M., Wang, Z.: *A Microscopically Motivated Constitutive Model for Piezoceramics under General Electromechanical Loading*. SPIE Conference on Smart Structures and Materials, Active Materials: Behavior and Mechanics, Ed. D.C. Lagoudas, San Diego, CA, USA, March 14-18, 2004, 390-401 (2004)
- [14] Gerthsen, Ch., Meschede, D.: *Gerthsen Physik*. Springer Verlag, 22. Auflage (2003)
- [15] Ruschmeyer, K. et al.: *Piezokeramik, Grundlagen, Werkstoffe, Applikationen*. Expert Verlag, Kontakt & Studium, Band 460 (1995)
- [16] Feldtkeller, E.: *Dielektrische und magnetische Materialeigenschaften I*. BI-Wissenschaftsverlag, 485 (1973)
- [17] Feldtkeller, E.: *Dielektrische und magnetische Materialeigenschaften II*. BI-Wissenschaftsverlag, 488 (1974)
- [18] Hao, T.H., Gong, X., Suo, Z.: *Fracture Mechanics for the Design of Ceramic Multilayer Actuators*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 44, 23-48 (1996)
- [19] Smolenskij, G.A., Krajnijk, N.N.: *Ferroelektrika und Antiferroelektrika*. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig (1972)
- [20] Härtling, G.H.: *Ferroelectric Ceramics: History and Technology*. Ferroelectrics, 11, 489-492 (1976)
- [21] Tichý, J., Gautschi, G.: *Piezoelektrische Meßtechnik*. Springer-Verlag, Berlin (1980)

- [22] Sonin, A.S., Strukow, B.A.: *Einführung in die Ferroelektrizität*. Akademie-Verlag Berlin (1974)
- [23] Zhou, D.: *Experimental Investigation of Non-linear Constitutive Behavior of PZT Piezoceramics*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6869 (2003)
- [24] Cao, H., Evans, A.G.: *Non-linear Deformation of Ferroelectric Ceramics*. Journal of the American Ceramic Society, 76, 890-896 (1993)
- [25] Schäufele, A., Härdtl, K.H.: *Ferroelastic Properties of Lead Zirconate Titanate Ceramics*. Journal of the American Ceramic Society, 79, 2637-2640 (1996)
- [26] Lynch, C.S.: *The Effect of Uni-axial Stress on the Electromechanical Response of 8/65/35 PLZT*, Acta Materialia, 44, 4137-4148 (1998)
- [27] Fang, D., Li, C.: *Nonlinear Electric-mechanical Behaviour of a Soft PZT-51 Ferroelectric Ceramic*. Journal of Materials Science, 34, 4001-4010 (1999)
- [28] Zhou, D., Kamlah, M.: *High-field Dielectric and Piezoelectric Performance of Soft Lead Zirconate Titanate Piezoceramics under Combined Electromechanical Loading*. Journal of Applied Physics, 96(11), 6634-6641 (2004)
- [29] Zhou, D., Kamlah, M., Munz, D.: *Effects of Bias Electric Fields on the Non-linear Ferroelastic Behavior of Soft Lead Zirconate Titanate Piezoceramics*. Journal of the American Ceramic Society, Including Communications of the Amer. Ceramic Soc, 88(4), 867-874 (2005)
- [30] Zhou, D., Antcliff, E., Kamlah, M.: *Bipolar electric field dependence of the dielectric and piezoelectric response of soft PZT piezoceramics*. to be published
- [31] Shirane, G. und Suzuki, K.: *Crystal Structure of Pb(Zr, Ti)O₃*. Journal of the Physical Society of Japan, 7, 333-336 (1952)
- [32] Reszat, J.-Th.: *Untersuchungen der mikroskopischen feldinduzierten Dehnungsbeiträge in ferroelektrischen PZT-Keramiken mit hochauflösender in-situ Röntgendiffraktometrie*. Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Universität Karlsruhe (TH) (2003)

- [33] Noheda, B., Gonzalo, J.A., Cross, L.E., Guo, R., Park, S.-E., Cox, D.E., Shirane, G.: *Tetragonal-to-monoclinic Phase Transition in a Ferroelectric Perovskite: The Structure of $PbZr_{0.52}Ti_{0.48}O_3$* . *Physical Review B*, 61(13), 8687-8695 (2000)
- [34] Zhou, D., Wang, Z. and Kamlah, M.: *Experimental Investigation of Domain Switching Criterion for Soft Lead Zirconate Titanate Piezoceramics under Coaxial Proportional Electromechanical Loading*. *Journal of Applied Physics* 97(8), 84105 (2005)
- [35] Zhou, D., Kamlah, M., Wang, Z. and Laskewitz, B.: *An Experimental Study of Domain Switching Criterion for Soft PZT Piezoceramics Subjected to Coaxial Proportional Electromechanical Loading*. SPIE Conference on Smart Structures and Materials, Active Materials: Behavior and Mechanics, Ed. William D. Armstrong, San Diego, CA, USA, March 7-10, 2005, Bellingham, Wash., SPIE Proceedings Series; 5761, 327-34 (2005)
- [36] Fett, T., Munz, D., Thun, G.: *Stress-Strain Behaviour of a Soft PZT Ceramic under Tensile and Compression Loading and a Transverse Electric Field*. *Ferroelectrics*, 297: 83-90 (2003)
- [37] Achuthan, A., Sun, C.-T.: *Effect of Residual Stresses on Domain Switching in Ferroelectric Ceramic Materials*. SPIE Conference on Smart Structures and Materials, Active Materials: Behavior and Mechanics, Ed. D.C. Lagoudas, San Diego, CA, USA, 379-389 (2004)
- [38] Achuthan, A., Sun, C.-T.: *Domain Switching Criteria for Ferroelectric Materials Subjected to Electrical and Mechanical Loads*. *Journal of the American Ceramic Society*, 87 (3), 395-400 (2004)
- [39] Fett, T., Munz, D., Thun, G.: *Multi-axial Deformation Behavior of PZT from Torsion Tests*. *Journal of the American Ceramic Society*, 86(8), 1427-29 (2003)
- [40] Chen, W., Lynch, C.S.: *Multi-axial Constitutive Behaviour of Ferroelectric Materials*. *ASME Journal of Engineering Materials and Technology*, 123, 169-175, (2001)
- [41] Huber, J. E., Fleck, N.A.: *Multi-axial Electrical Switching of a Ferroelectric*

- Theory vs. Experiment*. Journal of Mechanics and Physics of Solids, 49, 785-811 (2001)
- [42] Shieh, J., Huber, J.E., Fleck, N.A.: *An Evaluation of Switching Criteria for Ferroelectrics under Stress and Electric Field*. Acta Materialia, 51, 6123-6137 (2003)
- [43] Zhou, D., Kamlah, M., Laskewitz, B.: *Multi-axial Non-proportional Polarization Rotation Tests of Soft PZT Piezoceramics under Electric Field Loading*. SPIE Conference on Smart Structures and Materials, Active Materials: Behavior and Mechanics, Ed. W. D. Armstrong, San Diego, CA, USA, 617009: 1-9, February 27 – March 2, 2006, Bellingham, Wash., SPIE Proceedings Series, 6170 (2006)
- [44] Chen, P.J.: *Three Dimensional Dynamic Electromechanical Constitutive Relations for Ferroelectric Materials*. International Journal of Solids and Structures, 16, 1059-1067 (1980)
- [45] McMeeking, R.M., Landis, C.M.: *A Phenomenological Multi-axial Constitutive Law for Switching in Polycrystalline Ferroelectric Ceramics*. International Journal of Engineering Science, 40, 1553-1577 (2002)
- [46] Landis C.M.: *Fully Coupled, Multi-axial, Symmetric Constitutive Laws for Polycrystalline Ferroelectric Ceramics*. Journal of Mechanics and Physics of Solids, 50, 127-152 (2002)
- [47] Kessler, H., Balke, H.: *On the Local and Average Energy Release in Polarization Switching Phenomena*. Journal of Mechanics and Physics of Solids, 49, 953-978, (2001)
- [48] Schröder, J., Gross, D.: *Invariant Formulation of the Electromechanical Entropy Function of Transversely Isotropic Piezoelectric Materials*. Archive of Applied Mechanics, 73, 533-552 (2004)
- [49] Schröder, J., Romanowski, H.: *A Thermodynamically Consistent Mesoscopic Model for Transversely Isotropic Ferroelectric Ceramics in a Coordinate-invariant Setting*. Archive of Applied Mechanics, 74, 863-877 (2005)

- [50] Belov, A.Yu., Kreher, W.: *Viscoplastic Models for Ferroelectric Ceramics*. Journal of the European Ceramic Society, 25, 12, 2567-2571 (2005)
- [51] Laskewitz, B., Kamlah, M.: *Nonlinear Finite Element Simulations of Poling Processes in Piezoceramic Devices*. GAMM-Tagung Dresden, 21. – 27. März 2004 (2004)
- [52] Elhadrouz, M., Zineb, T.B., Patoor, E.: *Constitutive Law for Ferroelastic and Ferroelectric Piezoceramics*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 16, 221-236 (2005)
- [53] Elhadrouz, M., Zineb, T.B., Patoor, E.: *Finite Element Modeling of Piezoelectric Actuators and Sensors: Local Analysis of the Ferroelectric and Ferroelastic Effects*. MRS Spring Meeting, San Francisco, CA, USA, March 28 – April 1, 2005, Ed.: R.M. McMeeking, M. Kamlah, S. Seelecke, D. Viehland, CC4.7 (2005)
- [54] Klinkel, S.: *A Thermodynamic Consistent 1D Model for Ferroelastic and Ferroelectric Hysteresis Effects in Piezoceramics*. Communications in Numerical Methods in Engineering, 22, 727-739 (2006)
- [55] Hwang, S.C., Lynch, C.S., McMeeking, R.M.: *Ferroelectric/ Ferroelastic Interactions and a Polarization Switching Model*. Acta Metallurgica et Materialia, 43, 2073-2084 (1995)
- [56] Chen, X., Fang, D.N., Hwang, K.C.: *Micromechanics Simulation of Ferroelectric Polarization Switching*. Acta Materialia, 45, 3181-3189 (1997)
- [57] Chen, W., Lynch, C.S.: *A Micro-electro-mechanical Model for Polarization Switching of Ferroelectric Materials*. Acta Materialia, 46: 5303-5311, (1998)
- [58] Hwang, S.C., McMeeking, R.M.: *A Finite Element Model of Ferroelectric Polycrystals*. Ferroelectrics, 211, 177-194 (1998)
- [59] Huber, J.E., Fleck, N.A., Landis, C.M., McMeeking, R.M.: *Constitutive Model of Ferroelectrics*. Journal of Mechanics and Physics of Solids, 47, 1663-1697 (1998)

- [60] Huber, J.E., Fleck, N.A.: *Ferroelectric Switching: a Micromechanics Model versus Measured Behaviour*. European Journal of Mechanics A/Solids, 23, 203-217 (2004)
- [61] Kamlah, M., Liskowsky, A.C., McMeeking, R.M., Balke, H.: *Finite Element Simulation of a Polycrystalline Ferroelectric Based on a Multidomain Single Crystal Switching Model*. International Journal of Solids and Structures, 42, 2949-2964 (2005)
- [62] Seemann, W., Arockiarajan, A., Delibas, B.: *Micromechanical Simulation of Piezoelectric Materials Using Probability Functions*. SPIE Conference on Smart Structures and Materials, Active Materials: Behavior and Mechanics, Ed. D.C. Lagoudas, San Diego, CA, USA, March 14-18 2004, SPIE Proceedings Series 5387, 402-410 (2004)
- [63] Delibas, B., Arockiarajan, A., Seemann, W.: *A Nonlinear Model of Piezoelectric Polycrystalline ceramics under Quasi-Static Electromechanical Loading*. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 16, 507-515 (2005)
- [64] Hwang, S.: *Switching in Ferroelectric Polycrystals*. Journal of Applied Physics, 87, 869-875 (2000)
- [65] Smith, R.C., Seelecke, S., Ounaies, Z., Smith, J.: *A Free Energy Model for Hysteresis in Ferroelectric Materials*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 14, 719-739, (2003)
- [66] Semenov, A.S., Kessler, H., Liskowsky, A., Balke, H.: *On a Vector Potential Formulation for 3D Electromechanical Finite Element Analysis*. Communications in Numerical Methods in Engineering, 22, 357-375 (2006)
- [67] Simo, J.C., Hughes, T.J.R.: *Computational Inelasticity*. Springer-Verlag New York (1997)
- [68] Ortiz, M., Simo, J.: *An Analysis of a New Class of Integration Algorithms for Elastoplastic Constitutive Relations*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 23, 353-366 (1986)
- [69] Allik, H., Hughes, T.J.R.: *Finite Element Method for Piezoelectric Vibration*. International Journal of Numerical Methods in Engineering, 2, 151-157 (1970)

- [70] Hermann, M., *Numerische Mathematik*, Oldenbourg Wissenschaftsverlag (2001)
- [71] Bronstein, I.N., Semendjajew, K.A.: *Taschenbuch der Mathematik*. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart, 25. Auflage (1991)
- [72] Laskewitz, B., Kamlah, M., Chen, C.: *Investigations of the Nonlinear Behavior of Piezoceramic Hollow Cylinders*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 17, 521-532 (2006)
- [73] Westram, I.: *Crack Propagation in $Pb(Zr,Ti)O_3$ under Cyclic Electric Loading*. Dissertation, Shaker Verlag Aachen (2006)
- [74] Westram, I., Laskewitz, B., Lupascu, D., Kamlah, M., Rödel, J.: *Electric-field-induced Crack Initiation from a Notch in a Ferroelectric Ceramic*. Journal of the American Ceramic Society, 90 [9], 2849-2854 (2007)
- [75] Fett, T., Munz, D.: *Stress Intensity Factors and Weight Functions*. Computational Mechanics Publications: Advances in Fractures Series, Southampton UK and Boston USA (1997)
- [76] Coleman, B.D., Noll, W.: *The Thermodynamics of Elastic Materials with Heat Conduction and Viscosity*. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 13, 167-178 (1963)
- [77] Coleman, B.D., Gurtin, M.E.: *Thermodynamics with Internal State Variables*. The Journal of Chemical Physics, 47 (2), 597-613 (1967)
- [78] Bassiouny, E., Ghaleb, A. F., Maugin, G.A.: *Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects - I. Basic equations*. International Journal of Engineering Science, 26(12), 279-295 (1988)
- [79] Bassiouny, E., Ghaleb, A. F., Maugin, G.A.: *Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects - II. Poling of ceramics*. International Journal of Engineering Science, 26(12), 1297-1306 (1988)
- [80] Bassiouny, E., Maugin, G.A.: *Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects - III. Parameter Identification*. International Journal of Engineering Science, 27(8), 975-987 (1989)

- [81] Bassiouny, E., Maugin, G.A.: *Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects - IV. Combined Electromechanical Loading*. International Journal of Engineering Science, 27(8), 989-1000 (1989)
- [82] Cocks, A.C.F., McMeeking, R.M.: *A Phenomenological Constitutive Law for the Behaviour of Ferroelectric Ceramics*. Ferroelectrics, 228, 219-228 (1999)
- [83] Fröhlich, A.: *Mikromechanisches Modell zur Ermittlung effektiver Materialeigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen*. Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6628 (2001)
- [84] Landis, C.M.: *On the Strain Saturation Conditions for Polycrystalline Ferroelectric Materials*. ASME Journal of Applied Mechanics, 70, 470-478 (2003)
- [85] Baerwald, H.G.: *Thermodynamic Theory of Ferroelectric Ceramics*. Physical Review, 105(2), 480-486 (1957)
- [86] Frémond, M.: *Internal Constraints and Constitutive Laws*. Mathematical Models for Phase Change Problems, Editor: Rodriques, J.F., 88, 3-18, Birkhäuser, Basel (1989)
- [87] Hauger, W., Schnell, W, Gross, D.: *Technische Mechanik Bd.3: Kinetik*. Springer Verlag (1993)
- [88] Quarteroni, A., Sacco, R., Saleri, F.: *Numerische Mathematik 2*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (2002)
- [89] Wriggers, P.: *Nichtlineare Finite-Elemente-Methoden*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (2001)
- [90] Engeln-Müllges, G., Niederdrenk, K., Wodicka, R.: *Numerik-Algorithmen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 9. Auflage (2005)
- [91] Baehr, H.D., Kabelac, S.: *Thermodynamik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 13. Auflage (2006)
- [92] Betten, J.: *Kontinuumsmechanik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2. Auflage (1993)

- [93] Gross, D., Hauger, W., Schnell, W., Wriggers, P.: *Technische Mechanik Band 4: Hydromechanik, Elemente der Höheren Mechanik, Numerische Methoden*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1993)
- [94] Louis, D.: *C/C++*. Markt+Technik Verlag (2001)
- [95] Betten, J.: *Tensorrechnung für Ingenieure*. Teubner Verlag (1987)
- [96] Hoffmann, K.: *Eine Einführung in die Technik des Messens mit Dehnungsmessstreifen*. Hottinger Baldwin Messtechnik GmbH, Darmstadt (1987)