

Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 6347

**Phänomenologische Modellierung und
Finite-Elemente-Simulationen von nichtlinearen
elektromechanischen Vorgängen in ferroelektrischen
Materialien**

Ulrich Böhle
Institut für Materialforschung

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
1999

Als Manuskript gedruckt
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

Phänomenologische Modellierung und Finite-Elemente-Simulationen von nichtlinearen elektromechanischen Vorgängen in ferroelektrischen Materialien

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften
von der Fakultät für Maschinenbau der
Universität Karlsruhe

genehmigte
Dissertation
von

Dipl.-Ing. Ulrich Böhle
aus Mosbach

Tag der mündlichen Prüfung:
Hauptreferent:
Korreferent:

02.07.1999
Prof. Dr. rer. nat. D. Munz
Prof. Dr.-Ing. Ch. Tsakmakis

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Doktoranden-Tätigkeit am Institut für Materialforschung II des Forschungszentrums Karlsruhe.

Herrn Prof. Dr. D. Munz danke ich für die Förderung der Arbeit und die Übernahme des Hauptreferats. Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. Ch. Tsakmakis für das Korreferat.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Dr. M. Kamlah für die Betreuung dieser Arbeit. Er hat durch zahlreiche fachliche Diskussionen entscheidende Impulse zum Gelingen dieser Arbeit geliefert.

Weiterhin möchte ich mich an dieser Stelle bei den Mitgliedern des Instituts, insbesondere den Kollegen der Abteilung, bedanken. Sie unterstützten mich bei meiner Arbeit durch fachliche und konstruktive Diskussionen.

Kurzfassung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung eines phänomenologischen Materialmodells für ferroelektrische Materialien, welches in ein Finite-Elemente-Programm implementiert werden kann.

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde die eindimensionale Formulierung eines solchen Modells motiviert und verifiziert. Hierzu wurden, neben Spannung, Dehnung, elektrischem Feld und Polarisation, die remanente Polarisation sowie die remanente Dehnung als innere Variablen eingeführt. Diese inneren Variablen werden durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschrieben, wobei keine Geschwindigkeitseffekte berücksichtigt wurden.

Die Modellantwort auf einachsige elektromechanische Belastungsgeschichten wurde mit bekannten experimentellen Ergebnissen verglichen. Mittels einer bilinearen Approximation können die folgenden charakteristischen Phänomene der makroskopischen Ferroelektrizität dargestellt werden: dielektrische Hysterese, Schmetterlingshysterese, ferroelastische Hysterese, mechanische Depolarisation und feldabhängige Koerzitivspannung.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde die Verallgemeinerung auf eine dreidimensionale tensorielle Formulierung vorgenommen. Damit konnte das Materialmodell in das Finite-Elemente-Programm PSU implementiert werden. Die Finite-Elemente-Analyse erfolgt hierbei in zwei Berechnungsschritten. Zuerst wird aufgrund der elektrischen Belastung das rein dielektrische Randwertproblem für das elektrische Potential gelöst. Im zweiten Schritt wird diese elektrische Potentialverteilung vorgegeben, so daß sich aus der elektromechanisch gekoppelten Spannungsanalyse das mechanische Spannungsfeld ergibt. Damit wurde der Polungsprozeß eines Stapelaktuators simuliert. Hierbei stellt sich nach der Polung im Bereich der Elektrodenspitze ein nichtverschwindendes elektrisches Potential ein, das sich aus der bleibenden remanenten Polarisation ergibt. Im elektrisch passiven Bereich des Aktuators, in dem die sogenannten Polungsrisse auftreten, konnte nach der Polung senkrecht zu den Elektroden ein Zugeigenspannungszustand beobachtet werden. Mit dem entwickelten Finite-Elemente-Werkzeug kann der Einfluß von Geometrie und Materialparametern auf die Spannungen in den kritischen Bereichen von piezokeramischen Bauteilen berücksichtigt werden.

Abstract

Phenomenological Modeling and Finite Element Analysis of the Nonlinear Electromechanical Coupling in Ferroelectrics

The objective is the construction of a phenomenological model for ferroelectric materials, to be implemented in a finite element code.

In the first part of this work, the one dimensional formulation of such a model is motivated and verified. This is done by introducing remanent polarization as well as remanent strain as internal variables besides stress, strain, electric field and polarization. The internal variables are governed by ordinary differential equations. Rate effects are not included.

The model response to uniaxial electromechanical loading histories will be discussed with reference to known experimental results. By means of a bilinear approximation the following characteristic phenomena of macroscopic ferroelectricity are represented: dielectric hysteresis, butterfly hysteresis, ferroelastic hysteresis, mechanical depolarization and field dependent coercitive stress.

The second part deals with the generalization to a three dimensional tensorial formulation, which has been implemented in the finite element code PSU. The finite element analysis is carried out in a two step scheme. First, the purely dielectric boundary value problem is solved for the history of the electric potential. Second, prescribing this electric potential the coupled electromechanical stress analysis yields the mechanical stress field. Hence the poling process of a multilayer actuator is simulated. A non-vanishing distribution of the electric potential remains after poling in the neighbourhood of the electrode tip caused by the remanent polarization. Concerning the residual stresses present after poling, a tensile stress field perpendicular to the direction of the electrodes can be found in the electric passive region of the actuator where so-called poling cracks are known to occur. It is concluded that the finite element tool is suitable for studying the influence of geometry and material parameters on the stresses in critical regions of piezoceramic devices.

Inhaltsverzeichnis

Notation und Operatoren	iii
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	3
2.1 Begriffserläuterungen	3
2.2 Typische Eigenschaften von Ferroelektrika	6
2.2.1 Piezoelektrizität	6
2.2.2 Elektrostriktion	7
2.2.3 Ferroelektrizität	7
2.2.4 Ferroelastizität	8
2.3 Mikroskopische Ausrichtungsprozesse	8
2.3.1 Elektrisch induzierter Umklappprozeß	9
2.3.2 Mechanisch induzierter Umklappprozeß	11
2.4 Typische Phänomene der makroskopischen Ferroelektrizität und Ferroelastizität	12
2.4.1 Dielektrische Hysterese	13
2.4.2 Schmetterlingshysterese	14
2.4.3 Ferroelastische Hysterese	17
2.4.4 Mechanische Druckbelastung parallel zur Polarisierung	19
3 Grundgleichungen für das phänomenologische Materialmodell	22
3.1 Elektromechanische Feldgleichungen	22
3.2 Konstitutive Ausgangsgleichungen	23
3.3 Beschreibung der reversiblen Anteile	24
3.4 Beschreibung der irreversiblen Anteile	28
4 Eindimensionale Formulierung des phänomenologischen Materialmodells	31
4.1 Eindimensionale Darstellung der Ausgangsgleichungen	31
4.2 Modellierung der Ferroelektrizität	33
4.2.1 Dielektrische Hysterese	37

4.2.2	Schmetterlingshysterese	39
4.3	Modellierung der Ferroelastizität	40
4.4	Elektromechanische Kopplung	44
4.4.1	Beschränkung der remanenten ferroelastischen Dehnung	44
4.4.2	Mechanische Depolarisation	45
4.4.3	Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld	47
4.4.4	Allgemeine Darstellung der Evolutionsgleichungen	49
4.5	Diskussion der Modellantwort	52
4.5.1	Numerisches Integrationsverfahren	53
4.5.2	Gestaffelte elektromechanische Belastungsgeschichte	54
4.5.3	Asymmetrische elektrische Belastung	58
4.5.4	Ferroelektrische Hysteresen bei überlagerter mechanischer Druckspannung	59
5	Dreidimensionale Formulierung des Materialmodells	64
5.1	Verallgemeinerung der ferroelektrischen Modellierung	64
5.1.1	Verallgemeinerung der mechanischen Depolarisation	71
5.1.2	Verallgemeinerung der Koerzitivspannung	72
5.2	Verallgemeinerung der ferroelastischen Modellierung	72
6	Finite-Elemente-Berechnungen	77
6.1	Implementierung	77
6.2	Homogene einachsige Simulationen	80
6.3	Modell eines Stapelaktuators	85
6.4	Dielektrische Analyse des Stapelaktuators	88
6.5	Elektromechanische Strukturanalyse	92
6.5.1	Gepolter Bereich I	92
6.5.2	Passiver Bereich II	97
6.5.3	Mehrachsiger Bereich III	99
6.5.4	Eigenspannungszustand	102
7	Zusammenfassung	105
	Literaturverzeichnis	107
A	Zusammengefaßte Darstellung des eindimensionalen Materialmodells	115
B	Zusammengefaßte Darstellung des dreidimensionalen Materialmodells	118

Notation und Operatoren

Tensoren erster Stufe (Vektoren) werden mit aufrechten Buchstaben und mit einem Pfeil z.B. \vec{a}, \vec{A} , deren Komponenten geneigt und ohne Pfeil z.B. a_i, A_i gekennzeichnet. Mit geneigten Fettbuchstaben z.B. \mathbf{a}, \mathbf{A} werden dagegen Tensoren zweiter Stufe und ihre Komponenten mit a_{ij}, A_{ij} bezeichnet. Zusätzlich werden die Tensoren dritter Stufe mit einem senkrechten Strich z.B. \mathbf{d} und die Tensoren vierter Stufe durch kalligrafische Buchstaben z.B. \mathcal{A}, \mathcal{B} dargestellt.

Alle Komponentendarstellungen tensorieller Größen beziehen sich auf ein kartesisches Koordinatensystem mit den Basisvektoren $\vec{e}_i (i = 1, 2, 3)$ und für induzierte Größen gilt die Einsteinsche Summationskonvention. Die verwendeten Rechenregeln können, sofern sie hier nicht angegeben sind, den Lehrbüchern DE BOER [1] und KLINGBEIL [2] entnommen werden.

Notation

Lateinische Buchstaben

$\vec{0}$	Nullvektor
$\mathbf{0}$	Nulltensor zweiter Stufe
$\mathbf{1}$	Einheitstensor zweiter Stufe ($\mathbf{1} = \delta_{ij} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j$)
\mathcal{I}	Einheitstensor vierter Stufe ($\mathcal{I} = \delta_{ik} \delta_{jl} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_k \otimes \vec{e}_j \otimes \vec{e}_l$)
c^F	Nichtnegative Materialkonstante in der Funktion f^F
c^P	Nichtnegative Materialkonstante in der Funktion f^P
\mathcal{C}	Elastizitätstensor vierter Stufe
d	Piezoelektrische Proportionalitätskonstante
d_{\parallel}	Piezomodul parallel zur Polungsrichtung
d_{\perp}	Piezomodul senkrecht zur Polungsrichtung
$d_{=}$	Schub-Piezomodul
d	Piezoelektrischer Modul
\mathbf{d}	Piezoelektrizitätstensor dritter Stufe
D	Dielektrische Verschiebung
\vec{e}_{Pi}	Normierter Einheitsvektor der remanenten Polarisation
E	Elektrisches Feld

E_c	Koerzitivfeldstärke
f^F	Ferroelastische f^F -Funktion
f^P	Ferroelektrische f^P -Funktion
h^F	Ferroelastische h^F -Funktion
h^P	Ferroelektrische h^P -Funktion
m	Positive Materialkonstante in \hat{P}_{sat}
n	Positive Materialkonstante in $\hat{\sigma}_c$
\mathbf{N}^F	Normierter Tensor der f^F -Funktion zweiter Stufe
$\vec{\mathbf{N}}^P$	Normierter Vektor der f^P -Funktion
\vec{p}	elektrisches Dipolmoment
P	Polarisation
P^i	Remanente (irreversible) Polarisation
P^r	Reversible Polarisation
P^{rP}	Reversible ferroelektrische Polarisation
\mathcal{P}^F	Ferroelastischer Projektionstensor vierter Stufe
\mathcal{P}^P	Ferroelektrischer Projektionstensor zweiter Stufe
P_{sat}	Sättigungspolarisation
P_δ	Remanente Restpolarisation
\hat{P}_{sat}	Funktion der Sättigungspolarisation
\mathbf{S}	Dehnungstensor zweiter Stufe
\mathbf{S}^i	Remanenter Anteil des Dehnungstensors \mathbf{S}
\mathbf{S}^{iF}	Remanenter ferroelastischer Dehnungstensor
\mathbf{S}^{iP}	Remanenter Dehnungstensors induziert durch remanente Polarisation
\mathbf{S}^r	Reversibler Anteil des Dehnungstensors \mathbf{S}
\mathbf{S}^{rP}	Reversibler ferroelektrischer Dehnungstensor
\mathbf{T}	Spannungstensor zweiter Stufe
\hat{T}_c	Tensorielle Darstellung der Funktion der Koerzitivspannung
t	Zeit
Δt	Integrationsintervall
\vec{u}	Verschiebungsvektor
Y	Elastizitätsmodul

Griechische Buchstaben

δ_{ij}	Kronecker-Symbol
ε	Dehnung
ε^i	Remanenter Anteil der Dehnung ε
ε^{iF}	Remanente ferroelastische Dehnung
ε^{iP}	Remanente Dehnung induziert durch remanente Polarisation

ε^r	Reversibler Anteil der Dehnung ε
ε^{rP}	Reversible ferroelektrische Dehnung
ε_{sat}	Sättigungsdehnung
ϵ	Dielektrische Konstante
ϵ	Dielektrizitätstensor zweiter Stufe
ε_0	Dielektrische Feldkonstante
λ_f^P	Proportionalitätsfaktor der f^P -Funktion
λ_h^P	Proportionalitätsfaktor der h^P -Funktion
λ_f^F	Proportionalitätsfaktor der f^F -Funktion
λ_h^F	Proportionalitätsfaktor der h^F -Funktion
Λ_f^P	Proportionalitätsfaktor der tensoriellen f^P -Funktion
Λ_h^P	Proportionalitätsfaktor der tensoriellen h^P -Funktion
Λ_f^F	Proportionalitätsfaktor der tensoriellen f^F -Funktion
Λ_h^F	Proportionalitätsfaktor der tensoriellen h^F -Funktion
ν	Querkontraktionszahl
ϱ	Elektrische Ladungsdichte
σ	Spannung
σ_c	Koerzitivspannung
$\hat{\sigma}_c$	Funktion der Koerzitivspannung
φ	Elektrisches Potential
$\hat{\varphi}$	Funktion des elektrischen Potentials über der Zeit

Operatoren

$\operatorname{div} \mathbf{A}$	Divergenz des Tensors \mathbf{A}
$\operatorname{grad} \varphi$	Gradient der skalaren Größe φ
$\operatorname{Sp} \mathbf{A} = A_{ii}$	Spur des Tensors zweiter Stufe \mathbf{A}
$\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\operatorname{Sp} \mathbf{A})\mathbf{1}$	Deviator des Tensors zweiter Stufe \mathbf{A}
\mathbf{A}^T	Transponierte von \mathbf{A}
$d\mathbf{l}^{T_{23}}$	Transponieren eines Tensors dritter Stufe $d\mathbf{l}$ durch Vertauschung des zweiten mit dem dritten Index
$\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} = a_i b_i$	Skalarprodukt zweier Vektoren
$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij}$	Skalarprodukt zweier Tensoren zweiter Stufe
$\mathcal{A} : \mathbf{B} = \mathcal{A}_{ijkl} B_{kl} \vec{\mathbf{e}}_i \otimes \vec{\mathbf{e}}_j$	Anwendung des Tensors vierter Stufe \mathcal{A} auf den Tensor zweiter Stufe \mathbf{B}
$\vec{\mathbf{a}} \otimes \vec{\mathbf{b}} = a_i b_j \vec{\mathbf{e}}_i \otimes \vec{\mathbf{e}}_j$	Dyadisches Produkt zweier Vektoren
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = A_{ij} B_{kl} \vec{\mathbf{e}}_i \otimes \vec{\mathbf{e}}_j \otimes \vec{\mathbf{e}}_k \otimes \vec{\mathbf{e}}_l$	Dyadisches Produkt zweier Tensoren zweiter Stufe
$\ \vec{\mathbf{a}}\ = \sqrt{\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{a}}}$	Norm des Vektors $\vec{\mathbf{a}}$
$\ \mathbf{A}\ = \sqrt{\mathbf{A} : \mathbf{A}}$	Norm des Tensors zweiter Stufe \mathbf{A}
$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{B}} = \frac{\partial A_{ij}}{\partial B_{kl}} \vec{\mathbf{e}}_i \otimes \vec{\mathbf{e}}_j \otimes \vec{\mathbf{e}}_k \otimes \vec{\mathbf{e}}_l$	Partielle Ableitung von \mathbf{A} nach \mathbf{B}
$\dot{\mathbf{A}} = \frac{d}{dt} \mathbf{A} = \frac{d}{dt} A_{ij} \vec{\mathbf{e}}_i \otimes \vec{\mathbf{e}}_j$	Totale Ableitung von \mathbf{A} nach der Zeit t
$\langle \cdot \rangle$	MACCAULEY-Klammer (Föppel-Symbol)
$[\cdot]$	Indikatorfunktion

1 Einleitung

Als Ferroelektrika werden Materialien bezeichnet, die in einem gewissen Temperaturbereich eine polare Struktur und eine spontane Polarisation aufweisen. Sie zeichnen sich hierbei durch eine umorientierbare Polarisationsrichtung aus, wobei der Zusammenhang zwischen Polarisation und elektrischem Feld einer Hysteresekurve folgt. Die besonderen Eigenschaften dieser Stoffklasse stehen in Verbindung mit der spontanen Polarisation.

Erstmals wurden diese Phänomene von PIERRE DE LA SEIGNETTE für das nach ihm benannte Seignettesalz beobachtet und bereits am Ende des vergangenen Jahrhunderts u.a. durch die Gebrüder PIERRE und JAQUES CURIE beschrieben. Sie fanden lineare Zusammenhänge zwischen den elektrischen und mechanischen Eigenschaften dieser Materialien. In den zwanziger Jahren wurde fast gleichzeitig und unabhängig voneinander in der ehemaligen Sowjetunion, in den USA und in Japan die Ferroelektrizität von Bariumtitanat entdeckt. Als Folge dieser Forschungsarbeiten konnten erste technische Anwendungen realisiert werden. Zum Beispiel wurden durch Sintern Kondensatoren mit kleinen Abmessungen und Piezoelemente für die Elektroakustik hergestellt.

Mitte der fünfziger Jahre wurden die ferroelektrischen Eigenschaften und ein starker piezoelektrischer Effekt in gepolten Blei-Zirkonat-Titanat-Keramiken, den sogenannten PZT's, durch JAFFE *et al.* [3] untersucht. Dies hatte weitreichende Fortschritte in der Entwicklung von technischen Komponenten und eine Ausdehnung ihrer Anwendungen zur Folge.

In heutiger Zeit findet die Entwicklung vor allem auf dem Gebiet der Mikrostrukturen statt. Mit der zunehmenden Miniaturisierung von elektromechanischen Bauteilen werden immer höhere Anforderungen an die eingesetzten Materialien gestellt, so daß die Annahme linearer Zusammenhänge für das elektromechanische Materialverhalten nicht mehr ausreicht. Aufgrund der hier herrschenden hohen elektrischen Felder im Material wird lokal der Bereich der Linearität verlassen. Die Zuverlässigkeit von Aktuatoren und Sensoren kann daher mit den zur Verfügung stehenden linearen Berechnungswerkzeugen nicht beurteilt werden.

Bereits Ende der sechziger Jahre formulierten ALLIK und HUGHES [4] ein dreidimensionales Finite-Elemente-Modell zur Beschreibung des makroskopischen elektromechanischen Materialverhaltens. Damit konnte der linear piezoelektrische Effekt simuliert werden. Erstmals wurde von CHEN *et al.* z.B. [5, 6, 7, 8] ein phänomenologisches Materialmodell für makroskopische Eigenschaften von Ferroelektrika aufgestellt. Dabei handelt es sich im wesentlichen um einachsige Beziehungen, die sich auf die Belastung mit einem elektrischen Feld beschränken. BASSIOUNY und MAUGIN [9, 10] motivierten später ein thermodynamisch konsistentes Materialmodell mit 'plastischer' Deformation und remanenter Polarisation als innere Variablen. Allerdings eignet sich die Form des Modells nicht zur Im-

plementierung in ein Berechnungswerkzeug. Einen alternativen Weg beschritten HWANG, LYNCH und MCMEEKING [11, 12, 13, 14, 15], die das makroskopische Materialverhalten der Ferroelektrizität mittels mikroskopischer Umklappprozesse betrachteten. Dabei wurde das nichtlineare makroskopische Verhalten mit Hilfe energetisch begründeter Bedingungen für das Domänenumklappen simuliert. Jedoch ist dieses Vorgehen zur Simulation einer großen komplexen Struktur, z.B. eines Aktuators, ungeeignet. Der Ansatz von HUO und JIANG [16, 17] beruht auf einer Mischungstheoretischen Beschreibung der Domänenprozesse, welcher jedoch eine zu große Anzahl von mikroskopischen Materialparametern erfordert.

In dieser Arbeit soll ein phänomenologisches Materialmodell vorgestellt werden, das die nichtlinearen elektrischen und mechanischen Eigenschaften von Ferroelektrika beschreibt. Insbesondere soll die ferroelektrische sowie ferroelastische Hysterese und die elektromechanischen Kopplungsphänomene der mechanischen Depolarisation sowie der feldabhängigen Koerzitivspannung berücksichtigt werden. Das zu entwickelnde Materialmodell soll in ein Finite-Elemente-Programm implementiert werden. Dabei muß die numerische Berechnung in effektiver Form realisiert werden, um beliebig komplexe makroskopische Strukturen in akzeptabler Rechenzeit simulieren zu können.

Damit soll der Einfluß der Nichtlinearitäten, d.h. insbesondere der remanenten Polarisation und der remanenten Dehnung, durch strukturmechanische Analysen untersucht werden. Von besonderem Interesse sind hierbei die Spannungen in den kritischen Materialbereichen. Auf der Basis dieser Ergebnisse kann das Verständnis bezüglich der Versagensursachen unter kombinierten elektromechanischen Belastungen erweitert werden.

2 Grundlagen

In diesem Kapitel werden fachliche Begriffe sowie prinzipielle Mechanismen erläutert, auf die im Rahmen dieser Arbeit zurückgegriffen wird. Hierbei werden nur jene Grundlagen dargestellt, die für das physikalische Verständnis sowie für die Motivation der Materialmodellierung erforderlich sind.

2.1 Begriffserläuterungen

Zwischen positiv und negativ geladenen Teilchen findet eine Wechselwirkung statt, die im Zustand der Ruhe als Coulomb-Kraft bezeichnet wird. In dem Gebiet, in dem sie auftritt, ist dann ein *elektrisches Feld* vorhanden. Die elektrische Feldstärke \vec{E} , oder auch kurz elektrisches Feld, ist hierbei definiert als:

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

Gleichung (2.1) ist zu verstehen als die Coulomb-Kraft \vec{F} , die eine Ladung auf eine möglichst kleine Probeladung Q_{Probe} ausübt. *Elektrische Feldlinien* stellen hierbei die tangentielle Kurve an die räumliche Verteilung des elektrischen Feldvektors \vec{E} dar.

Befinden sich zwei Ladungen gleichen Betrages Q aber unterschiedlichem Vorzeichen in einem Abstand $|\vec{l}|$, so wird

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

als *elektrisches Dipolmoment* bezeichnet. Beim Übergang dieser diskreten Betrachtung auf das Kontinuum ergibt sich das elektrische Dipolmoment

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

als das Integral über die Dichte des elektrischen Dipolmomentes \vec{P} im Volumen V . \vec{P} wird hierbei auch als *dielektrische Polarisation* bezeichnet. Eine ausführliche und detaillierte Darstellung kann Physiklehrbüchern z.B. von GERTHSEN *et al.* [18], GREINER [19] oder HOFFMANN [20] entnommen werden.

Ein *Dielektrikum* ist ein Isolator oder Nichtleiter, der keine freien Ladungsträger besitzt und somit keinen Stromfluß hindurch läßt. Er enthält polare Bausteine, so daß eine dielektrische Polarisation beobachtet werden kann. Solche dielektrischen Eigenschaften treten in kristallinen Materialien auf. Sie sind periodisch aus Einheitszellen aufgebaut, die wiederum aus positiven und negativen Ionen zusammengesetzt sind. Die Summe der positiven

und negativen Ladungen in der Einheitszelle werden jeweils durch einen positiven und negativen *Ladungsschwerpunkt* repräsentiert. Liegt ohne eine äußere Einwirkung der positive und der negative Ladungsschwerpunkt nicht aufeinander, d.h. es existiert zwischen ihnen ein definierter Abstand, so besitzt die Einheitszelle eine *spontane Polarisation* P_{spontan} . Da die Einheitszelle eine räumlich dreidimensionale Struktur besitzt, wird die spontane Polarisation durch einen Vektor entlang der *polaren Achse* vom negativen zum positiven Ladungsschwerpunkt im Inneren der Einheitszelle beschrieben. Hierbei ist zu beachten, daß unter dem Begriff *Richtung* des Polarisationsvektors nur dessen polare Achse und unter dem Ausdruck *Orientierung* des Polarisationsvektors zusätzlich sein positives Pfeilende zu verstehen ist.

Ferroelektrische Materialien stellen Polykristalle dar, die aus Körnern mit unterschiedlicher Gitterorientierung aufgebaut sind. Ein Korn wiederum besteht aus vielen unterschiedlich ausgerichteten *Domänen*, die jeweils einen Zusammenschluß mehrerer Einheitszellen darstellen. Innerhalb einer Domäne sind die Dipole der Einheitszellen homogen und einheitlich orientiert, so daß ihr ein spontaner Polarisationsvektor zugeordnet werden kann. Somit besitzt eine einzelne Domäne auch ein anisotropes Materialverhalten.

Eine aus Domänen aufgebaute makroskopische Struktur kann jedoch Isotropie aufweisen, wenn die Orientierungen der Domänen gleichmäßig verteilt sind, so daß sich die anisotropen Eigenschaften durch die Mittelung aufheben. Wird der Polykristall durch ein elektrisches Feld oder eine mechanische Spannung hinreichend stark belastet, wird die Orientierung jeder einzelnen Domäne beeinflußt und klappt unter der Belastung um (siehe Abschnitt 2.3). Diese Umklappvorgänge werden als *Domänenprozesse* bezeichnet und führen zu dem makroskopisch beobachtbaren nichtlinearen Materialverhalten. In Abschnitt 2.4 werden die Phänomene des makroskopisch nichtlinearen Materialverhaltens mit entsprechenden Orientierungen der Domänen aufgrund einer elektrischen bzw. mechanischen Belastung ausführlich erläutert.

Perowskitstruktur

In dieser Arbeit werden ferroelektrische Materialien betrachtet, die in Form einer Perowskitstruktur mit der allgemeinen Zusammensetzung ABO_3 kristallisieren. Eine kubische Perowskitstruktur und eine tetragonale Einheitszelle ist in Bild 2.1 dargestellt. Da die grundlegenden Mechanismen sehr anschaulich an Barium-Titanat (BaTiO_3) gezeigt werden können, wird im weiteren das Materialverhalten repräsentativ an dieser Kristallstruktur diskutiert.

BaTiO_3 ist ein rein ionisch gebundener Mischkristall, wobei der A-Platz durch Ba^{2+} -Ionen auf den acht Ecken der kubischen Einheitszelle (Bild 2.1a) besetzt ist. Der B-Platz wird von einem raumzentrierten Ti^{4+} -Ion eingenommen, welches von flächenzentrierten Sauerstoffionen O^{2-} oktaedrisch umgeben ist.

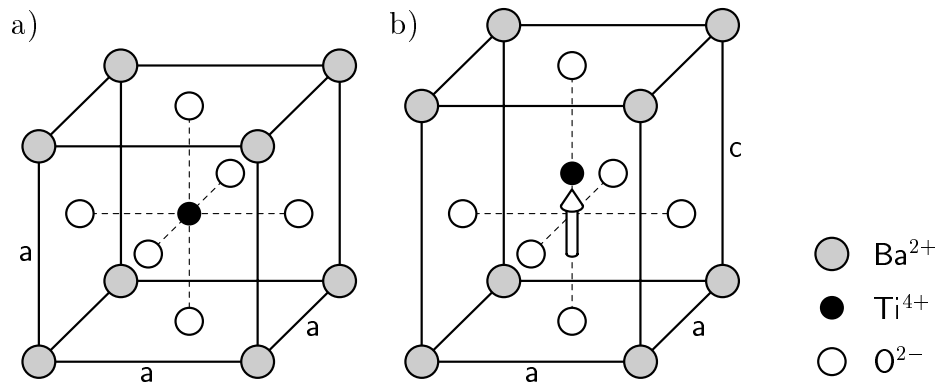


Bild 2.1: Einheitszelle von BaTiO₃ oberhalb und unterhalb der Curietemperatur T_{Curie} :
a) Oberhalb T_{Curie} : Paraelektrische Phase mit kubischer Perowskitstruktur ohne spontane Polarisation.
b) Unterhalb T_{Curie} : Ferroelektrische Phase mit tetragonaler Struktur und spontaner Polarisation (Pfeil).

Oberhalb der Curietemperatur T_{Curie} ist die *paraelektrische Phase* stabil und es liegt eine kubische, nicht polare Einheitszelle mit der Kantenlänge a vor. Da der positive und negative Ladungsschwerpunkt aufeinander liegen, besitzt diese Kristallstruktur keine spontane Polarisation und zeigt daher keine Piezoelektrizität (Abschnitt 2.2.1), sondern nur Elektrostriktion (Abschnitt 2.2.2). Im Gegensatz zu einem elektrischen Feld, mit dem eine reversible Trennung der Ladungsschwerpunkte erreicht werden kann, ist eine rein mechanische Belastung nicht in der Lage, eine Polarisation zu erzeugen.

Die kubische Perowskitstruktur ohne polare Achse wandelt sich beim Unterschreiten der Curietemperatur spontan in die *ferroelektrische Phase* mit tetragonaler Struktur um, wobei sich das Ti⁴⁺-Ion in Richtung eines der flächenzentrierten Sauerstoffionen verschiebt. Hierbei sind sechs verschiedene, gleichwahrscheinliche Richtungen für das Ion möglich. Der positive und der negative Ladungsschwerpunkt der Einheitszelle liegen nun nicht mehr aufeinander, so daß bei diesem Phasenübergang eine spontane Polarisation in der Einheitszelle auftritt. Es ist eine polare Kristallstruktur ohne Symmetriezentrum entstanden, die sowohl einen piezoelektrischen als auch einen elektrostriktiven Effekt zeigt. Die spontane Polarisation ist temperaturabhängig und ohne eine elektrische oder mechanische Belastung bleibend bzw. remanent vorhanden. Mit dem Auftreten einer spontanen Polarisation wird gleichzeitig auch eine entsprechende *spontane Dehnung*

$$\varepsilon_{spontan} := \frac{c - a}{a} \approx 1\% \quad (2.4)$$

der Einheitszelle in Polarisationsrichtung induziert. Da in einem Kristall eine große Anzahl von Einheitszellen vorliegt und die spontanen Ausrichtungen der Polarisationsvektoren beim Abkühlen in alle sechs Raumrichtungen gleich wahrscheinlich sind, heben sich

ihre Wirkungen im Mittel gegenseitig auf. Makroskopisch betrachtet tritt keine spontane bzw. bleibende Polarisierung auf. Das Material ist nun 'thermisch depolarisiert' und besitzt nach dem Herstellungsprozeß durch Sintern einen makroskopisch ungepolten Ausgangszustand. Aufgrund der vorliegenden ferroelektrischen Phase wird es als *Ferroelektrikum* oder *ferroelektrische Keramik* bezeichnet.

2.2 Typische Eigenschaften von Ferroelektrika

Ferroelektrische Keramiken besitzen eine Vielzahl unterschiedlicher Eigenschaften, auf deren Bedeutung hier im einzelnen nicht eingegangen wird. Es werden im folgenden nur einige typische Effekte und deren Mechanismen erläutert, die im Zusammenhang mit der phänomenologischen Modellierung von Interesse sind und dem allgemeinen Verständnis dienen. Für eine ausführliche Darstellung der Effekte siehe z.B. die Bücher von JAFFE *et al.* [21], FELDTKELLER [22, 23] oder TICHÝ und GAUTSCHI [24] sowie beispielsweise die Dissertationen von ENDRISS [25] und HAMMER [26].

2.2.1 Piezoelektrizität

Unter der Piezoelektrizität ist die lineare elektromechanische Wechselwirkung zwischen mechanischen und elektrischen Zustandsgrößen in Kristallen zu verstehen. Mathematisch wird der lineare Zusammenhang zwischen diesen Zustandsgrößen mit dem piezoelektrischen Modul beschrieben.

Der piezoelektrische Effekt wird in Materialien beobachtet, deren Einheitszellen eine oder mehrere polare Achsen, jedoch kein Symmetriezentrum aufweisen und beruht auf einer Verschiebung der Ladungsschwerpunkte entlang der polaren Achse unter mechanischer oder elektrischer Belastung (siehe Bild 2.1b).

Der Begriff *direkter piezoelektrischer Effekt* kennzeichnet jenes Kopplungsphänomen, bei dem eine mechanische Spannung von einer zu ihrer proportionalen Änderung der elektrischen Polarisierung begleitet wird. Die Ursache hierfür ist die mit der mechanischen Spannung induzierten Deformation der Einheitszelle und damit eine Verschiebung der Ladungsschwerpunkte, so daß sich der Abstand der Ladungen zueinander und damit die Polarisierung ändert. Bei diesem Prozeß werden elektrische Ladungen auf den Oberflächen des Körpers erzeugt, die zu hohen elektrischen Spannungen führen.

Der *inverse* oder *reziproke piezoelektrische Effekt* bedeutet das Auftreten einer Deformation, die zum äußeren angelegten elektrischen Feld proportional ist. Ist das elektrische Feld in Richtung der Polarisierung orientiert, werden die Ladungsschwerpunkte auseinander gezogen und damit eine Verlängerung der Einheitszelle beobachtet. Ein gegen die Polarisierung orientiertes elektrisches Feld schiebt die beiden Ladungsschwerpunkte aufeinander zu und bewirkt somit eine Verkürzung.

In Kristallen, die aus Einheitszellen mit einem Symmetriezentrum bestehen, z.B. die kubische Struktur von BaTiO_3 in Bild 2.1a, tritt kein piezoelektrischer Effekt auf, da die mechanische Belastung nicht in der Lage ist, die aufeinanderliegenden Ladungsschwerpunkte zu trennen. Dies ist nicht zu verwechseln mit dem makroskopischen Verhalten eines ferroelektrischen Materials mit einer tetragonalen Einheitszellenstruktur, welches unter speziellen Voraussetzungen ebenso keinen piezoelektrischen Effekt zeigt. Ein solcher Materialzustand liegt nach dem Herstellungsprozeß (thermisch depolarisiert) oder nach einer vollständigen mechanischen Depolarisation vor (siehe Abschnitt 2.4.4; Bild 2.8). Es handelt sich hier um den Sonderfall, daß sich durch die makroskopische Mittelung die einzelnen piezoelektrischen Effekte der Einheitszellen gegenseitig aufheben. Daher führt nur die besondere Ausrichtung der Einheitszellen im Polykristall zu piezoelektrischem Materialverhalten.

2.2.2 Elektrostriktion

Erfolgt aufgrund einer Belastung durch ein elektrisches Feld unabhängig vom inversen piezoelektrischen Effekt eine Deformation, so wird dies als *elektrostriktiver Effekt* bezeichnet. Elektrostriktion tritt in allen Dielektrika unabhängig von der Symmetrie der Einheitszelle auf, ist jedoch aufgrund der sehr geringen induzierten Dehnung bezüglich der Piezoelektrizität vernachlässigbar. Oberhalb der Curietemperatur liegt keine Piezoelektrizität vor, so daß hier nur elektrostriktives Verhalten beobachtet werden kann.

In der paraelektrischen Phase von Barium-Titanat (Bild 2.1a) liegen die Ladungsschwerpunkte der Einheitszelle aufeinander. Die Belastung durch ein elektrisches Feld verschiebt nun die Ladungsschwerpunkte, so daß eine Änderung der Polarisation sowie begleitend eine Dehnung induziert wird. Die Polarisation verhält sich hierbei in einem großen Bereich linear zum elektrischen Feld. Für die Dehnung stellt sich ein zum Quadrat des elektrischen Feldes proportionaler Wert ein, der unabhängig vom Vorzeichen von E ist. Für höhere elektrische Felder gehen die Polarisation sowie die Dehnung in einen Sättigungszustand über (HAO *et al.* [27]). Unter dem Einfluß einer rein mechanischen Belastung wird ein linear elastisches Materialverhalten beobachtet, ohne daß hierbei eine Ladungstrennung induziert wird. Experimentelle Untersuchungen elektrostriktiver Eigenschaften wurden von BROWN *et al.* [28] durchgeführt und konnte mit einem Materialmodell von SUO *et al.* [29] sowie HOM und SHANKAR [30] mathematisch beschrieben werden.

2.2.3 Ferroelektrizität

Der *ferroelektrische Effekt* tritt in Kristallen auf, bei denen die Richtung der spontanen Polarisation durch ein hinreichend starkes elektrisches Feld bleibend verändert werden kann. Hierbei orientieren sich die Domänen in Richtung der Wirkung des elektrischen Feldes um, so daß sich bleibend ein veränderter Materialzustand einstellt. Das Materialverhal-

ten zeigt hierbei Hystereseeffekte mit einer remanenten Polarisation sowie remanenten Dehnung. In der *dielektrischen Hysterese* wird die Polarisation über dem wirkenden elektrischen Feld (Abschnitt 2.4.1; Bild 2.5) und in der *Schmetterlingshysterese* die zugehörige Dehnung (Abschnitt 2.4.2; Bild 2.6) dargestellt.

2.2.4 Ferroelastizität

Neben der Ferroelektrizität tritt auch häufig die *Ferroelastizität* auf, die das mechanische Analogon dazu darstellt. Voraussetzung für das Auftreten dieses Effektes ist die Eigenschaft, daß in einem Kristall ohne elektrisches Feld und ohne mechanische Spannung mehrere stabile Orientierungszustände der Domänen vorhanden sind. Eine hinreichend starke mechanische Belastung ist dann in der Lage, die Orientierung der Domänen eines Zustandes bleibend zu ändern. Hierbei kommt es zu der Ausbildung einer Hysterese bezüglich der mechanischen Belastung durch die Spannung und der induzierten Deformation (siehe das Hystereseverhalten in Abschnitt 2.4.3; Bild 2.7).

2.3 Mikroskopische Ausrichtungsprozesse

Innerhalb einer Domäne sind die einzelnen spontanen Polarisationsvektoren der Einheitszellen einheitlich orientiert und die spontanen Polarisationen verschiedener Domänen weisen in verschiedene Richtungen. Die Ursache der Domänenbildung ist in der Feldenergie der Domänen selbst begründet. Bei einer Aufspaltung von wenigen großen in viele kleine Domänen wird die räumliche Ausdehnung des elektrischen Feldes der Domänen und damit ihre Feldenergie erniedrigt (TICHÝ und GAUTSCHI [24] sowie SONIN und STRUKOW [31]). Dies führt zu einer sogenannten 'Kopf-zu-Fuß' Anordnung der spontanen Polarisationsvektoren der Domänen und damit am Beispiel von Barium-Titanat in der tetragonalen Phase zur Bildung einer 90°- und 180°-Domänenstruktur. In SMOLENSKIJ und KRAJNIK [32] sind schematische Darstellungen und grundlegende Vorstellungen über die Domänenstruktur von Barium-Titanat zu finden und FATUZZO und MERZ [33] zeigen angeätzte Schliffbilder mit zugehöriger Domänenstruktur.

Das Verhalten einer Domäne wird durch das kollektive Verhalten aller darin befindlichen Einheitszellen bestimmt und kann anhand des Studiums über das prinzipielle Verhalten einer einzelnen Einheitszelle (hier am Beispiel von BaTiO_3) am einfachsten verstanden werden. Barium-Titanat besitzt in seiner ferroelektrischen Phase eine tetragonale Struktur mit sechs polaren Richtungen (siehe z.B. JIANG [34] und HAO *et al.* [27]). Unter der Wirkung einer hinreichenden elektrischen oder einer hinreichenden mechanischen Belastung kann die polare Ausrichtung der Einheitszelle geändert werden.

2.3.1 Elektrisch induzierter Umklapprozeß

Erst ein hinreichend starkes elektrisches Feld ist in der Lage, einen Umklapprozeß auszulösen. Hierbei klappt die Einheitszelle immer in Richtung der Orientierung des elektrischen Feldes um, so daß sich der spontane Polarisationsvektor in Feld- bzw. Wirkungsrichtung orientiert. In Bild 2.2a ist die Auswirkung eines parallel der Polarisationsrichtung entgegengerichteten elektrischen Feldes E dargestellt.

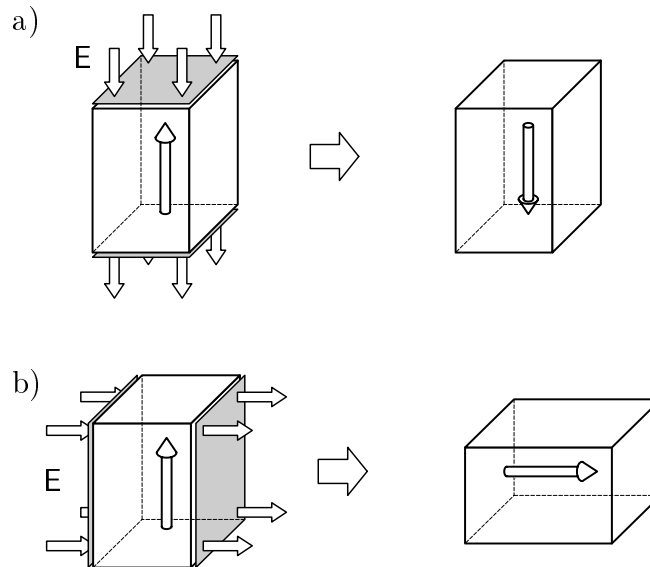


Bild 2.2: Umklappvorgang induziert durch ein elektrisches Feld.

- a) Elektrisches Feld E parallel, aber der Polarisationsrichtung entgegengesetzt.
- b) Elektrisches Feld E senkrecht zur Polarisationsrichtung.

Der Pfeil in der Einheitszelle symbolisiert die Ausrichtung der spontanen Polarisation der tetragonalen Zelle vom negativen zum positiven Ladungsschwerpunkt. Bei einem entgegen der spontanen Polarisation ausgerichteten elektrischen Feld findet ein 180°-Umklapprozeß statt (siehe Bild 2.2a), bei dem in Feldrichtung eine irreversible Änderung der Polarisation, jedoch keine Verzerrung der Einheitszelle stattfindet.

Bild 2.2b zeigt ein senkrecht zur spontanen Polarisation der Einheitszelle orientiertes elektrisches Feld. Ist E hinreichend stark, klappt die Polarisation um und orientiert sich hierbei in Feldrichtung. Bei diesem 90°-Umklappvorgang tritt sowohl eine bleibende Änderung im Polarisationszustand als auch eine entsprechende remanente Verzerrung der Einheitszelle in Feldrichtung auf.

Polungsprozeß

Nach dem Herstellungsprozeß liegt in einer ferroelektrischen Keramik makroskopisch eine

statistisch gleichverteilte Domänenstruktur vor. In diesem Zustand verhält sich das Material makroskopisch isotrop und besitzt erst nach einem *Polungsprozeß*, d.h. nach der Umorientierung der Domänen in Feldrichtung, piezoelektrische Eigenschaften.

In Bild 2.3a ist schematisch ein nach dem Herstellungsprozeß vorliegender Gefügebau dargestellt. Vor der Polung besteht er aus Körnern mit unterschiedlich orientierten Domänen, die spontan polarisiert sind. Eine 90° - und 180° -Domänenstruktur ist zu erkennen.

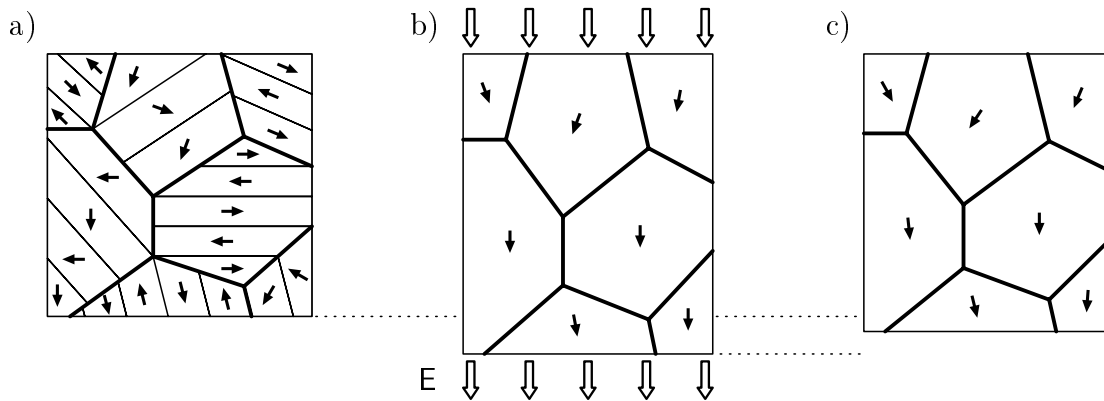


Bild 2.3: Schematische Darstellung der Veränderungen der Domänenstruktur während eines Polungsprozesses.

- a) Ausgangszustand mit Körnern und Domänen.
- b) Elektrisches Feld E induziert eine makroskopische Dehnung sowie makroskopische Polarisation.
- c) Verbleibende remanente Dehnung ε_{sat} und remanente Polarisation P_{sat} nach der Entlastung.

Durch ein hinreichend starkes elektrisches Feld klappen nahezu alle Domänen in Richtung E um, so daß deren spontane Polarisationsvektoren möglichst parallel zum elektrischen Feld verlaufen (Bild 2.3b). Hierbei finden 90° - sowie 180° -Umklappprozesse statt. Unter der elektrischen Belastung bildet sich eine maximal mögliche, makroskopische remanente Polarisation (*Sättigungspolarisation* P_{sat}) sowie eine makroskopische remanente Dehnung (*Sättigungsdehnung* ε_{sat}) aus. Im Fall einer vollständigen und idealen Orientierung aller Domänen würde die Sättigungspolarisation den Wert der spontanen Polarisation der einzelnen Domänen erreichen und die Sättigungsdehnung einen oberen Grenzwert annehmen. Dies ist jedoch in einer realen Struktur nie erreichbar, so daß stets für die Sättigungspolarisation

$$P_{sat} \leq P_{spontan} \quad (2.5)$$

und für die Sättigungsdehnung

$$\varepsilon_{sat} \leq \varepsilon_{spontan} \quad (2.6)$$

gilt.

Nach Entfernung des elektrischen Feldes behalten die Domänen in Bild 2.3c weitestgehend die aufgeprägte Orientierung bei und eine irreversible Polarisation sowie eine irreversible Dehnung bleibt zurück. Als *remanente Polarisation* P^i wird die verbleibende irreversible Polarisation und als *remanente Dehnung* ε^{iP} die zugehörige, verbleibende irreversible Dehnung bezeichnet.

2.3.2 Mechanisch induzierter Umklappprozeß

Umklappprozesse können nicht nur elektrisch, sondern auch mechanisch ausgelöst werden. Das Umklappverhalten in Bild 2.4 zeigt am Beispiel von Barium-Titanat eine repräsentative Einheitszelle, die mit einer hinreichenden mechanischen Druck- bzw. Zugspannung belastet wird. Nur Druckspannungen parallel und nur Zugspannungen senkrecht zur Richtung der spontanen Polarisation können Umklappprozesse auslösen. Das dabei beobachtete nichtlineare Materialverhalten wird als Ferroelastizität (Abschnitt 2.2.4) bezeichnet.

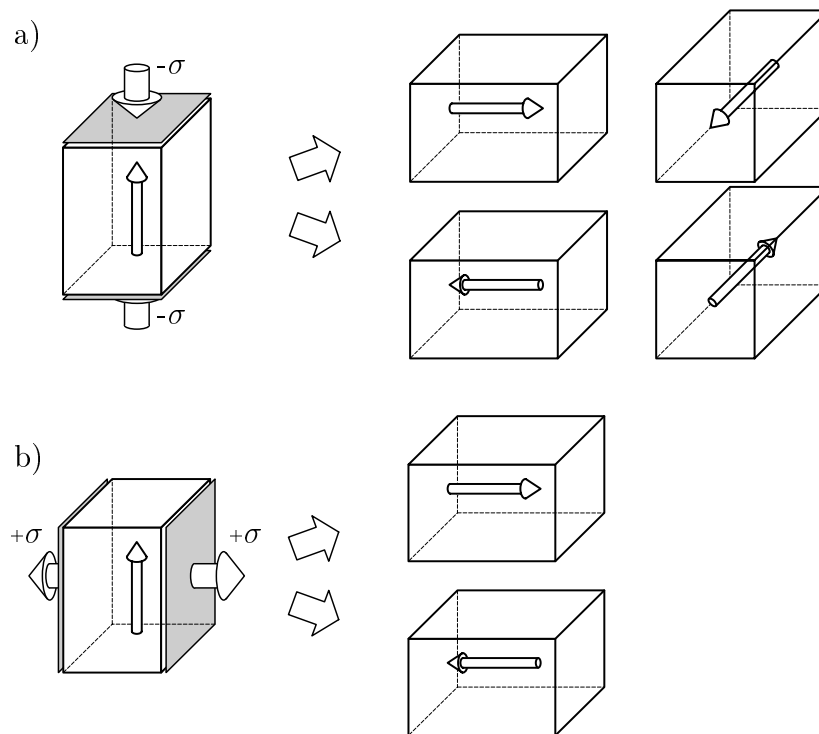


Bild 2.4: Umklappvorgang durch mechanische Belastung, bei dem nur 90°-Umklappprozesse induziert werden können.

- a) Druckspannung $-\sigma$ in Polarisationsrichtung.
- b) Zugspannung $+\sigma$ senkrecht zur Polarisationsrichtung.

In Bild 2.4a ist eine Druckspannung $-\sigma$ parallel zur Richtung der spontanen Polarisierung aufgebracht. Ist die mechanische Belastung hinreichend groß, klappt die Einheitszelle und damit die spontane Polarisierung um 90° um. Hierbei nimmt sie eine von vier Positionen in einer Ebene senkrecht zur Richtung der Druckspannung ein (rechte Seite des Bildes 2.4a). Ist keine weitere mechanische und elektrische Belastung vorhanden, ist die Ausrichtung der spontanen Polarisierung rein zufällig und kann nicht vorherbestimmt werden. Damit ist makroskopisch keine Polung induzierbar, so daß der ferroelastische Effekt niemals eine remanente Polarisierung erzeugen kann. Lediglich eine vorhandene remanente Polarisierung kann eliminiert werden (siehe ergänzend Bild 2.8).

Erfährt ein makroskopisch gepoltes Material eine hinreichend große mechanische Druckspannung in Polarisationsrichtung, klappen alle Domänen und mit ihnen die spontane Polarisierung gleichmäßig in eine dazu senkrecht liegende Ebene um. Dabei heben sich aufgrund der makroskopischen Mittelung die zuvor gleich ausgerichteten spontanen Polarisierungen der einzelnen Domänen gegenseitig auf, so daß jetzt makroskopisch keine Polarisierung mehr vorhanden ist. Dieser Prozeß wird als *mechanische Depolarisation* bezeichnet.

Der Umklappprozeß, induziert durch eine Zugspannung $+\sigma$ senkrecht zur Polarisationsrichtung, ist in Bild 2.4b dargestellt. Überschreitet die Zugspannung einen kritischen Wert, klappt die spontane Polarisierung der Einheitszelle in Richtung der Wirkung der mechanischen Spannung um. Hierbei gibt es zwei gleichberechtigte Positionen, in die sich die spontane Polarisierung orientieren kann (rechte Seite des Bild 2.4b). In Spannungsrichtung ist eine entsprechende Verlängerung und senkrecht hierzu eine Querkontraktion zu beobachten.

Ein makroskopisch gepoltes Material, das senkrecht zu seiner remanenten Polarisierung mit einer Zugspannung belastet wird, erfährt ebenfalls eine mechanische Depolarisation. Hierbei klappen statistisch betrachtet gleich viele spontane Polarisationsvektoren in die eine als auch in die andere Richtung um und ihre Wirkungen heben sich gegenseitig auf.

Mit einer rein mechanischen Belastung wird eine bleibende, irreversible Dehnung induziert, die aufgrund ihres mechanischen Ursprungs als *remanente ferroelastische Dehnung* ε^{IF} bezeichnet wird.

2.4 Typische Phänomene der makroskopischen Ferroelektrizität und Ferroelastizität

Die aus der Mittelung der mikroskopischen Eigenschaften makroskopisch resultierenden nichtlinearen Phänomene werden durch Umklappprozesse induziert. Die Umklappbarkeit der spontanen Polarisierung hängt in ferroelektrischen Polykristallen mit dem Auftreten der Domänen zusammen und wird als *Domänenprozeß* bezeichnet.

Nach dem Herstellungsprozeß heben sich im makroskopischen Mittel die Beiträge der mikroskopischen spontanen Polarisation und die damit zusammenhängenden mikroskopischen piezoelektrischen Eigenschaften aus den unterschiedlich orientierten Domänen gegenseitig auf. Das Material verhält sich in diesem Zustand makroskopisch isotrop und stellt für die im folgenden betrachteten, typischen Phänomene den isotropen Ausgangszustand dar.

Anhand vier repräsentativer Domänen werden typische Materialzustände im Kurvenverlauf explizit betrachtet. Hierbei charakterisieren die Pfeile die Orientierung der spontanen Polarisation der Domänen, die sich im Laufe der Belastungsgeschichte durch Umklappprozesse entsprechend ändern kann.

2.4.1 Dielektrische Hysterese

Unter Ferroelektrizität ist das Umklappen von Domänen unter der Wirkung eines hinreichend starken elektrischen Feldes zu verstehen. Die elektrischen Veränderungen werden in der dielektrischen Hysterese in Bild 2.5 dargestellt und zeigen die sich einstellende Polarisation P , induziert durch ein zyklisches elektrisches Feld E .

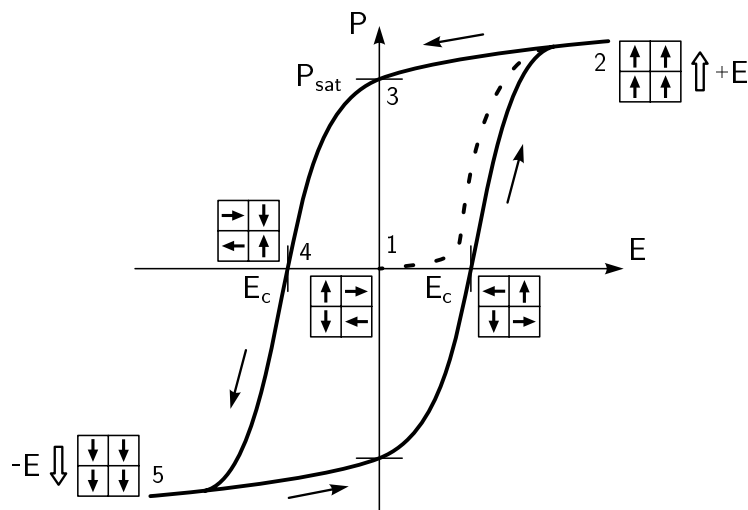


Bild 2.5: Schematische Darstellung der dielektrischen Hysterese mit der aus einem ungepolteten Zustand beginnenden Neukurve (gestrichelte Linie). Die Zustände der vier betrachteten repräsentativen Domänen sind an ausgewählten Punkten skizziert.

Von dem ungepolteten Zustand in Punkt 1 ausgehend, sind kleine Änderungen des elektrischen Feldes nicht in der Lage, die Orientierung der Domänen zu verändern. Damit heben sich die anisotropen dielektrischen Eigenschaften gegenseitig auf, so daß sich in diesem Anfangsbereich die Polarisation proportional zum elektrischen Feld verhält. Ein reversibles sowie linear dielektrisches Materialverhalten ist zu beobachten.

Wächst die elektrische Feldstärke weiter an und überschreitet einen kritischen Wert, klappen die Domänen zunehmend in Feldrichtung um und induzieren hierbei einen zusätzlichen Beitrag zur Polarisierung. Dieser Prozeß ist irreversibel und von nichtlinearem Materialverhalten begleitet. Sind alle Domänen einheitlich in Feldrichtung orientiert, ist das Reservoir aller umklappbaren Domänen erschöpft. Ein Sättigungszustand ist erreicht und ein erneutes reversibles, nahezu linear dielektrisches Verhalten stellt sich ein (Punkt 2). Die erste Belastung aus dem ungepolten Ausgangszustand (gestrichelte Linie) wird als *Neukurve* bezeichnet.

Verringert sich nun die Feldstärke und verschwindet sie im Punkt 3 völlig, so wird bis zu diesem Punkt eine näherungsweise reversible dielektrische Reduktion von P beobachtet. Da in diesem Entlastungsbereich praktisch keine Umklappprozesse stattfinden, bleiben die Domänen in Feldrichtung orientiert und erzeugen damit für $E = 0$ eine bleibende remanente Polarisierung P^i . Diese verbleibende makroskopische Polarisierung nimmt bei vollständiger Ausrichtung aller Domänen in Richtung von E den maximalen Wert der *Sättigungspolarisation* P_{sat} an. Eine im schematischen Kurvenverlauf zu erkennende geringe Abweichung vom linearen Verhalten ist auf mikroskopische Veränderungen der Domänenstruktur (siehe Bild 2.3) zurückzuführen.

Findet eine weitere Belastung durch das elektrische Feld in entgegengesetzter Richtung statt, so werden erneut Umklappprozesse von Domänen ausgelöst. Hierbei verringert sich die remanente Polarisierung P^i in Feldrichtung, so daß makroskopisch im Punkt 4 für $E = E_c$ ein elektrisch depolarisierter Zustand erreicht wird ($P = 0$). Die *Koerzitivfeldstärke* E_c ist hierbei definiert als dasjenige elektrische Feld, bei dem die Polarisierung vollständig verschwunden ist.

Eine weitere Erhöhung der Belastung induziert ein erneutes Ausrichten der Domänenstruktur in Feldrichtung, bis im Punkt 5 abermals eine Sättigung erreicht ist. Jetzt liegt jedoch eine im Vergleich zu Punkt 2 vollständig entgegengesetzte Orientierung der Domänen vor.

Wird nun die Feldstärke in umgekehrter Richtung bis zum Punkt 2 erhöht, stellt sich ein qualitativ gleiches Materialverhalten ein (jedoch mit umgekehrten Vorzeichen) und es resultiert eine vollständig geschlossene Hysterese.

2.4.2 Schmetterlingshysterese

Ein elektrisches Feld beeinflusst nicht nur den Polarisationszustand im Material, sondern es wird begleitend dazu eine Änderung im Dehnungszustand beobachtet. Der Zusammenhang zwischen der in Polungsrichtung auftretenden Dehnung ε und dem elektrischen Feld E wird in der Schmetterlingshysterese Bild 2.6 dargestellt.

Nach dem Sintern liegt im Punkt 1 ein makroskopisch ungepolt und isotroper Materialzustand vor (alle Pfeile weisen in verschiedene Richtungen), so daß sich die anisotropen piezoelektrischen Eigenschaften der spontanen Polarisierung der Domänen im makrosko-

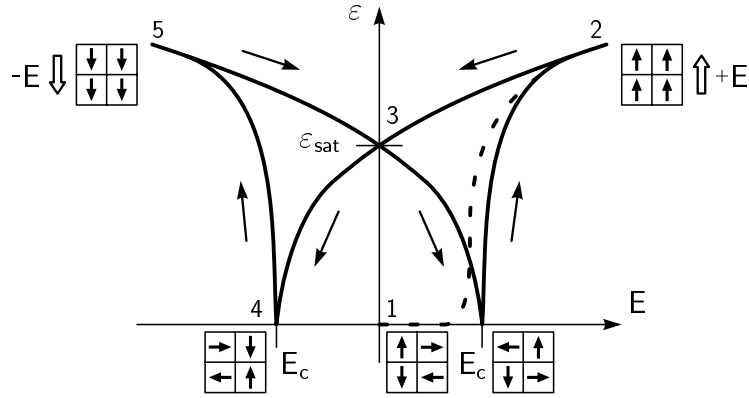


Bild 2.6: Schematische Darstellung der Schmetterlingshysterese für zyklische elektrische Belastung sowie der Neukurve (gestrichelte Linie).

piezoelektrischen Mittel aufheben. Die Belastung durch ein hinreichend kleines elektrisches Feld ist nicht in der Lage, Umklappprozesse auszulösen. Da weder eine makroskopische Piezoelektrizität noch Domänenprozesse auftreten, kann das elektrische Feld keine Dehnung induzieren. Es liegt ein von E entkoppeltes Dehnungsverhalten vor, so daß in dieser Anfangsphase ein horizontaler Kurvenverlauf aus dem Ursprung zu beobachten ist.

Elektrische Feldstärken oberhalb eines kritischen Wertes lösen Umklappprozesse der Domänen aus. Es bildet sich in Richtung von E eine positive Dehnung (Verlängerung) aus, die sich aus zwei Anteilen zusammensetzt. Ein Dehnungsanteil repräsentiert das irreversible Umklappen und parallele Ausrichten der Domänen und die dabei induzierte spontane Zunahme der Verzerrung ε^{iP} in Feldrichtung. Der andere Anteil resultiert aus dem piezoelektrischen Effekt. Aufgrund der mikroskopischen Umorientierung wird makroskopisch eine zunehmend stärkere piezoelektrische Kopplung zwischen dem elektrischen Feld und der Dehnung aufgebaut. Dieser zweite Anteil nimmt stetig zu und induziert damit über den inversen piezoelektrischen Effekt eine entsprechende Dehnung. Haben sich alle Domänen in Richtung des elektrischen Feldes orientiert, ist im Punkt 2 der Sättigungszustand erreicht und alle spontanen Polarisationsvektoren der Domänen zeigen in dieselbe Richtung ($\varepsilon^{iP} = \varepsilon_{sat}$). Weiteres Umklappen kann nun nicht mehr stattfinden, so daß damit auch kein weiterer spontaner Dehnungsanteil mehr induziert wird und die maximal mögliche piezoelektrische Kopplung erreicht ist. Jetzt liegt ein linearer Zusammenhang zwischen dem wirkenden elektrischen Feld und der Dehnung vor (inverser piezoelektrischer Effekt).

Reduziert sich nun die Belastung durch das elektrische Feld, werden auch die reversiblen Dehnungsanteile kleiner und das Materialverhalten ist nahezu linear reversibel. Bis zur vollständigen Entlastung im Punkt 3 werden kaum weitere irreversible Umklappprozesse beobachtet, so daß der Domänenzustand aus Punkt 2 erhalten bleibt. Für $E = 0$ haben sich alle reversiblen Anteile abgebaut und die makroskopische Dehnung besteht nun noch aus ihrem remanenten Anteil ε^{iP} . Da ε^{iP} seinen Sättigungswert erreicht hat, nimmt

ε im Punkt 3 den Wert der remanenten Sättigungsdehnung ε_{sat} an. Bis zu diesem Punkt 3 wird der Be- und Entlastungsprozeß als *Polungsprozeß* bezeichnet. Der damit erzeugte Zustand dient aufgrund des jetzt vorliegenden nahezu linearen Zusammenhangs zwischen der Dehnung und dem elektrischen Feld als Ausgangszustand für technische Anwendungen.

Nimmt das elektrische Feld nun negative Werte an, setzen erneut Umklappprozesse ein, die die einheitliche Ausrichtung der Domänenstruktur verringern. Erreicht im Punkt 4 das elektrische Feld die Koerzitivfeldstärke ($|E| = E_c$), ist der elektrisch depolarisierte Zustand erreicht. Die Vektoren der spontanen Polarisation der Domänen zeigen nun wieder in verschiedene Richtungen, so daß die Dehnung einen minimalen Wert einnimmt ($\varepsilon = 0$) und der piezoelektrische Effekt verschwindet. Hierbei liegt im Punkt 4 nicht zwangsläufig derselbe Ausrichtungszustand der Domänen wie im Punkt 1 vor. Dies ist auch der Grund für die im Experiment (z.B. CHEN und TUCKER [7]) beobachtete vertikale Verschiebung der beiden spitz zulaufenden Minima bezüglich des Startpunktes der Neukurve in der Schmetterlingshysterese.

Eine weitere Belastung induziert eine erneute Ausrichtung der Domänen in Richtung des anliegenden elektrischen Feldes und damit irreversible spontane Dehnungen. Somit entwickelt sich makroskopisch erneut eine zunehmende piezoelektrische Kopplung, die ebenfalls zu einem Dehnungsanteil in Feldrichtung führt. Im Punkt 5 ist schließlich der vollständig orientierte Domänenzustand erreicht (bezüglich des Punktes 2 in Gegenrichtung orientiert) und es liegt ausschließlich linear piezoelektrisches Materialverhalten mit einem negativen piezoelektrischen Modul vor.

Ein wiederum verschwindendes elektrisches Feld ($E = 0$) läßt eine bleibende Verzerrung in Höhe der Sättigungsdehnung ε_{sat} zurück. Wird das elektrische Feld erneut über die Koerzitivfeldstärke bis zum Punkt 2 gesteigert, läßt sich das bereits beschriebene nichtlineare Materialverhalten beobachten, und eine vollständig geschlossene Schmetterlingshysterese bildet sich aus.

Bei diesem Prozeß stellt sich eine bezüglich $E = 0$ symmetrische Hysterese ein. Der Grund ist die vorzeichenunabhängige Eigenschaft der beim Umklappprozeß induzierten Dehnung, die einzig von der Ausrichtung der spontanen Polarisationsvektoren der Domänen und nicht von ihrer Orientierung abhängt. Es stellt sich immer eine vom Vorzeichen des elektrischen Feldes unabhängige Verlängerung in Feldrichtung ein.

Senkrecht zum elektrischen Feld wird ein der Dehnung zugeordneter Quereffekt beobachtet. Hierbei entwickelt sich makroskopisch eine negative Verzerrung, die den Verlauf einer gestauchten Schmetterlingshysterese einnimmt. Nach experimentellen Untersuchungen von CAO und EVANS [35] sowie LYNCH [36] entsprechen diese Quereffekte volumen-treuen Dehnungsänderungen. Dieses inkompressible Materialverhalten ist sehr gut mit den Vorstellungen über die mikroskopischen Umklappprozesse (Abschnitt 2.3) im Einklang.

2.4.3 Ferroelastische Hysterese

Das nichtlineare Materialverhalten unter einer rein mechanischen Belastung wird in der ferroelastischen Hysterese dargestellt. Hierbei wird ausgehend von einem thermisch depolarisierten Materialzustand eine mechanische Druck- und anschließend eine Zugspannung aufgebracht und die Spannung σ über der Dehnung ε aufgetragen. In Bild 2.7 ist das Materialverhalten schematisch dargestellt und die Orientierung der Domänenstruktur für verschiedene Belastungszustände mit ihren spontanen Polarisationsvektoren symbolisch angedeutet.

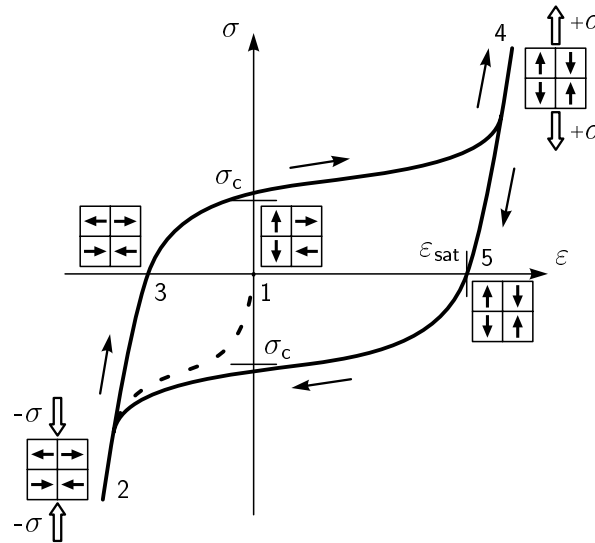


Bild 2.7: Schematische Darstellung der ferroelastischen Hysterese. Aufgrund fehlender experimenteller Informationen über das Kurvenverhalten im Zugspannungsbereich wurde der symbolische Hystereseverlauf mittels prinzipieller Überlegungen über die Umklappprozesse der Domänen vervollständigt.

Zu Beginn heben sich im Punkt 1 die mikroskopisch anisotropen Anteile der Domänen auf, die spontane Polarisierung ist statistisch in jede Richtung gleichmäßig verteilt und ein isotroper Materialzustand liegt vor. Hinreichend kleine mechanische Belastungen können keine irreversiblen Umklappprozesse auslösen, so daß in dieser Phase linear elastisches Materialverhalten auftritt.

Ist die mechanische Druckbelastung hinreichend groß und überschreitet den Grenzwert der *Koerzitivspannung* σ_c , werden Domänenprozesse ausgelöst ($|\sigma| > \sigma_c$). Unter der anliegenden Druckspannung klappen die parallel der Druckspannung ausgerichteten Domänen um 90° in eine Ebene, die senkrecht zur Wirkungslinie der Spannung steht und verursachen damit das beobachtete nichtlinear irreversible Materialverhalten. Liegt keine zusätzlich überlagerte mechanische oder elektrische Belastung vor, gibt es hierbei für die spontanen Polarisationsvektoren keine bevorzugte Orientierungsrichtung in der betrachteten Ebene (siehe Abschnitt 2.3.2). Da sich in jede Richtung gleich viele Domänen orientieren, wird

bei diesen Umklappprozessen keine makroskopische Polarisation, sondern nur eine remanente ferroelastische Dehnung ε^{iF} induziert. Die gesamte Dehnung setzt sich in diesem nichtlinearen Bereich additiv aus einem linear reversiblen Dehnungsanteil sowie der remanenten ferroelastischen Umklappdehnung zusammen. Im Punkt 2 ist die Domänenstruktur vollständig senkrecht zur Druckspannung ausgerichtet (die mikroskopischen Polarisationsanteile der einzelnen Domänen heben sich auf) und ε^{iF} hat einen maximalen Wert erreicht. Weiteres Umklappen findet in diesem gesättigten Zustand nicht mehr statt und ein erneut reversibler Bereich mit nahezu linear elastischem Materialverhalten stellt sich ein.

Während der mechanischen Entlastung bleibt die im Punkt 2 erhaltene Domänenordnung weitestgehend erhalten und reversibles elastisches Verhalten ist zu beobachten. Sind alle reversiblen Dehnungsanteile im Punkt 3 verschwunden, bleibt eine remanente Verzerrung zurück.

Aufgrund der Vorstellungen über das mikroskopische Verhalten der Domänen des Abschnittes 2.3.2 ist unter Zugspannungen das im folgenden erläuterte, nichtlineare Materialverhalten zu erwarten. Solange die mechanische Belastung durch die jetzt einsetzende Zugspannung hinreichend klein ist, bleibt die Domänenordnung aus Punkt 3 erhalten und ein näherungsweise reversibles Verhalten stellt sich ein. Erreicht die Zugbelastung dann einen Grenzwert, beginnen sich Domänen neu auszurichten und induzieren zusätzlich eine entsprechende remanente Verzerrung. Bei diesem Umklappprozeß bildet sich in Wirkungsrichtung der Spannung eine spontane Umklappdehnung, jedoch aufgrund der gleichverteilten Orientierung der Domänen entlang der Zugachse keine makroskopische Polarisation. Im Punkt 4 ist ein Materialzustand erreicht, der durch eine in Zugspannungsrichtung vollständig ausgerichtete und gesättigte Domänenstruktur gekennzeichnet ist. Eine weitere Steigerung der Belastung löst keine weiteren Umklappprozesse aus, so daß wieder nahezu linear elastisches Materialverhalten zu beobachten ist.

Reduziert sich die mechanische Belastung auf einen Spannungswert von null, bleibt im Punkt 5 die Domänenordnung aus Punkt 4 erhalten. Während der Entlastung wurden nur die reversiblen Dehnungsanteile abgebaut, so daß sich im Punkt 5 eine Dehnung einstellt, die der Sättigungsdehnung ε_{sat} entspricht. Mittels einer erneuten Druckbelastung kann dann eine vollständig geschlossene Hysterese erhalten werden.

Auffällig ist, daß es sich bei der ferroelastischen Hysterese um eine horizontal verschobene Hysterese handelt. Mittels prinzipieller Überlegungen über die Umklappprozesse der Domänen ist dieser Effekt erklärbar und kann mittels eines 'Gedankenexperimentes' diskutiert werden (vgl. auch z.B. KAMLAH [37]). Hierzu wird das Verhalten der dreidimensionalen Ausrichtungszustände der Domänenstruktur am Beispiel dreier repräsentativer Domänen betrachtet. Im thermisch depolarisierten und makroskopisch isotropen Ausgangszustand sind die spontanen Polarisationsvektoren der drei Domänen in jede der drei Raumrichtungen orientiert. Bei einer Druckbelastung klappt nun diejenige Domäne in eine Lage senkrecht zur Spannung um, die vorher parallel dazu ausgerichtet war. Damit

wird in Belastungsrichtung ein Anteil an spontaner Umklappdehnung reduziert, die zu einer Verkürzung (negative Dehnung) führt. Wird vom Ausgangszustand aus eine Zugbelastung aufgebracht, ist das Reservoir der umklappbaren Domänen doppelt so groß als bei der Druckbelastung. In diesem Belastungsfall richten sich zwei von drei Domänen parallel zur Zugspannungsrichtung aus und induzieren dabei zwei Anteile an positiver spontaner Umklappdehnung, so daß sich eine Verlängerung einstellt.

Auch in der Schmetterlingshysterese ist, beginnend vom ungepolten Ausgangszustand (Punkt 1 in Bild 2.6), ein Umklappprozeß zu beobachten, bei dem sich zwei von drei Anteilen der Domänen in Belastungsrichtung ausrichten. Rein elektrisch wird hierbei eine makroskopische remanente Umklappdehnung in Höhe der Sättigungsdehnung ε_{sat} (Punkt 3 der Schmetterlingshysterese in Bild 2.6) induziert. Zwischen diesen beiden Ausrichtungszuständen der Domänen in der Schmetterlingshysterese und zwischen den Punkten 1 und 5 in der ferroelastischen Hysterese, wird derselbe Beitrag an makroskopischer Verzerrung geleistet. Daher muß sich im Punkt 5 der ferroelastischen Hysterese eine bleibende Dehnung in Höhe der Sättigungsdehnung ε_{sat} einstellen. Aufgrund dieser Vorstellungen bezüglich des mikroskopischen Umklappverhaltens der Domänen ist eine verschobene ferroelastische Hysterese, wie sie in Bild 2.7 schematisch dargestellt ist, zu erwarten.

In Experimenten kann das bis zum Punkt 3 in Bild 2.7 dargestellte ferroelastische Materialverhalten festgestellt werden. Von SCHÄUFELE [38] sowie ALATSATHIANOS [39] wurde an ungepolten Hart- und Weich-PZT-Keramikproben¹ das Materialverhalten unter rein mechanischer Druckspannung untersucht. Zugexperimente sind aufgrund der geringen Zugfestigkeit sehr schwer durchführbar und wurden von FETT *et al.* [40, 41, 42] an ungepolten sowie gepolten PZT's vorgenommen. Hierbei zerbrachen die Polykristalle weit bevor sie ihren Sättigungszustand erreicht hatten. Kristallographische Untersuchungen zur Anordnung der Domänenstruktur von Materialien in ihrer ferroelastischen Phase sowie die temperaturabhängige Beschreibung der ferroelastischen Eigenschaften sind in SALJE [43] dargestellt.

Die Umklappprozesse der Domänen induzieren beim hier betrachteten ferroelastischen Materialverhalten auch eine Querdehnung, die von LYNCH [36] als eine inkompressible Deformation identifiziert wurde.

2.4.4 Mechanische Druckbelastung parallel zur Polarisation

Ein typischer Belastungsfall eines im Betrieb befindlichen Aktuators ist ein uniaxialer Druck in Polungsrichtung. Bei dieser Art der Belastung ist aufgrund des maximal zur Verfügung stehenden Reservoirs an Umklappprozesse eine größtmögliche Abweichung vom

¹Hart- und Weich-PZT's unterscheiden sich darin, daß Hart-PZT eine höhere Koerzitivspannung als Weich-PZT aufweist. Ebenso zeigt Hart-PZT im linear elastischen Anfangsbereich ein wesentlich steiferes Materialverhalten als Weich-PZT aufgrund eines höheren Elastizitätsmoduls.

linearen Materialverhalten zu erwarten.

Nach einem vollständigen Polungsprozeß (siehe Punkt 3 der dielektrischen Hysterese in Bild 2.5) liegt ohne ein vorhandenes elektrisches Feld eine nahezu einheitliche Orientierung aller spontanen Polarisationsvektoren der Domänen mit einer Sättigungspolarisation P_{sat} und einer Sättigungsdehnung ε_{sat} vor. Diese Domänenanordnung dient als Ausgangszustand für die nun parallel zur Polungsrichtung angreifende Belastung durch eine entsprechende Druckspannung. Bild 2.8 zeigt die Spannung $-\sigma$ über der Änderung der Polarisation P und der Dehnung ε während der Belastungsgeschichte.

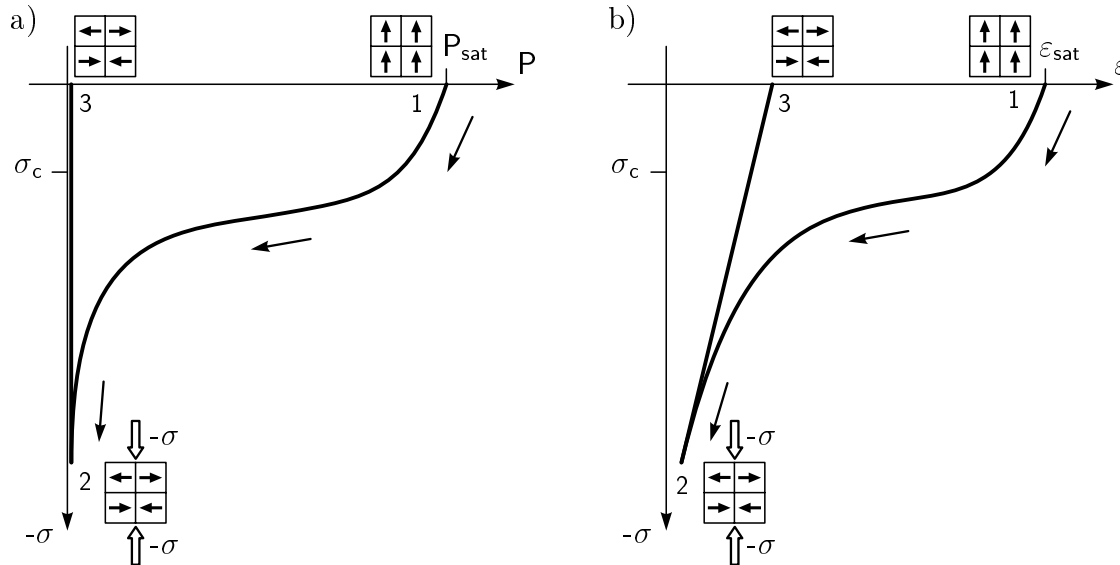


Bild 2.8: Schematischer Kurvenverlauf bei mechanisch induzierten Domänenprozessen für ein in Druckrichtung gepoltes Material.

a) Druckspannung $-\sigma$ über Polarisation P .

b) Druckspannung $-\sigma$ über Dehnung ε .

Solange die angelegte Druckspannung hinreichend klein ist, werden keine Domänenprozesse ausgelöst und der gepolte Ausgangszustand im Punkt 1 des Bildes 2.8a bleibt erhalten. Aufgrund der vorhandenen remanenten Polarisation P_{sat} zeigt sich in dieser Anfangsphase ein nahezu linear reversibles Verhalten der Polarisation bezüglich der Spannung, das durch den direkten piezoelektrischen Effekt hervorgerufen wird.

Erreicht die Druckspannung Werte um die Koerzitivspannung σ_c , beginnen Domänen unter der Last umzuklappen. Hierbei richten sie sich statistisch gleichmäßig in eine Ebene senkrecht zur Druckspannung aus (siehe Abschnitt 2.3.2). Damit reduziert sich die makroskopische Polarisation in Druckspannungsrichtung und somit auch die Wirkung des direkten piezoelektrischen Effektes, so daß sich ein nichtlinearer P - σ -Verlauf einstellt. Sind im Punkt 2 alle Domänen in die senkrechte Lage umgeklappt, heben sich die spontanen Polarisationsvektoren gegenseitig auf. Jetzt ist die piezoelektrische Kopplung zwischen der

Polarisation und der mechanischen Spannung vollständig abgebaut worden und ein von P entkoppeltes Materialverhalten liegt vor. Dieser elektromechanische Prozeß, der makroskopisch die vorhandene remanente Polarisation durch eine hinreichend hohe mechanische Druckspannung bleibend eliminiert, wird als *mechanische Depolarisation* bezeichnet.

Wird nun die anliegende mechanische Druckspannung auf null zurückgenommen, bleibt der in Punkt 2 erreichte Domänenzustand erhalten, da kein elektrisches Feld vorhanden ist, in dessen Richtung sich die Domänen orientieren könnten. Somit bleibt bis zum Erreichen des Punktes 3 die makroskopische Polarisation näherungsweise unverändert null.

Der bei diesem mechanischen Depolarisationsprozeß auftretende nichtlineare Verlauf der Dehnung ist in Bild 2.8b dargestellt. Solange in der Anfangsphase keine Umklappprozesse ausgelöst werden, stellt sich aus dem Punkt 1 kommend ein linear reversibles und elastisches Materialverhalten zwischen der Dehnung und der Spannung ein, das über die Proportionalitätskonstante des Elastizitätsmoduls gekoppelt ist. Erst mit dem Einsetzen der Domänenprozesse durch die hinreichend hohe Druckspannung wird zum elastischen Dehnungsanteil eine remanente Verzerrung in Spannungsrichtung überlagert. Die Verringerung der remanenten Dehnung in Druckrichtung setzt sich hierbei aus zwei Dehnungsanteilen zusammen. Zum einen aus einem rein ferroelastischen Dehnungsanteil ε^{iF} , der zu einer remanenten negativen Verzerrung führt und zum anderen aus der spontanen Umklappdehnung ε^{iP} durch Umklappprozesse der Domänen. Letzterer Dehnungsanteil wird mit steigender Druckspannung immer kleiner und sein Einfluß verschwindet schließlich im Punkt 2 bei maximaler Druckbelastung. Der Kurvenverlauf nähert sich hierbei asymptotisch einer elastischen Gerade mit der Steigung des Elastizitätsmoduls.

Da bei mechanischer Entlastung keine Domänen mehr umklappen, ist bis zum Erreichen des Punktes 3 ein elastisches Materialverhalten zu beobachten. Gekoppelt über den Elastizitätsmodul nimmt hierbei die Dehnung nahezu linear mit der Spannung zu.

Experimentell wurde das in den Bildern 2.8a und 2.8b schematisch dargestellte elektromechanische Materialverhalten von CAO und EVANS [35], LYNCH [36], SCHÄUFELE und HÄRDTL [44, 38] sowie ALATSATHIANOS [39] untersucht. Es wurden parallel zur Polarisation kompakte PZT- bzw. PLZT-Proben mit einer hinreichend hohen Druckspannung belastet und die bleibende Reduktion der remanenten Polarisation beobachtet. SCHÄUFELE und HÄRDTL [44, 38] überlagerten dem Prozeß der mechanischen Depolarisation zusätzlich konstante, positive sowie negative elektrische Felder und konnten einen linearen Zusammenhang zwischen der Koerzitivspannung und dem konstant überlagerten elektrischen Feld feststellen.

Ergänzend wurden von CAO und EVANS [35] sowie SCHÄUFELE [38] eine mechanische Druckspannung senkrecht zur Polarisationsrichtung gepolter PZT-Proben aufgebracht. Sie konnten hierbei in Lastrichtung nahezu linear elastisches Verhalten feststellen.

3 Grundgleichungen für das phänomenologische Materialmodell

Zur mathematischen Beschreibung eines materiellen Körpers wird ein System von Gleichungen, die sogenannten Feldgleichungen, benötigt, welche zu gegebenen Randbedingungen gelöst werden müssen. Damit geben sie Informationen über den Materialzustand im Inneren wieder. Diese Feldgleichungen können als System von Differentialgleichungen formuliert werden und sind unabhängig von den Eigenschaften des zu betrachtenden materiellen Körpers. Erst durch die sogenannten Stoffgleichungen werden die besonderen Eigenschaften und das Verhalten des Materials berücksichtigt und das Gleichungssystem mathematisch vollständig.

3.1 Elektromechanische Feldgleichungen

Unter der Annahme, daß der Körper sich im statischen Gleichgewicht befindet und Volumenkräfte vernachlässigt werden können, ergibt sich aus der Impulsbilanz die Gleichgewichtsbedingung

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = \vec{0} \quad (3.1)$$

mit dem *Spannungstensor* \mathbf{T} und aus dem Erhaltungssatz des Drehimpulses die Symmetrie des Spannungstensors:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (3.2)$$

Die Deformation des Körpers kann durch den *Verschiebungsvektor* \vec{u} beschrieben werden, der i.a. eine Funktion des Ortes ist. Der *Dehnungstensor* \mathbf{S} wird definiert als symmetrischer Anteil des Verschiebungsgradienten

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\operatorname{grad} \vec{u} + (\operatorname{grad} \vec{u})^T \right) \quad (3.3)$$

und entspricht dem linearisierten Green'schen Verzerrungstensor. Für eine ausführliche Herleitung der mechanischen Feldtheorie siehe z.B. HAUPT [45].

Auf der anderen Seite beschreibt das Gauß'sche Gesetz

$$\operatorname{div} \vec{D} = 0 \quad (3.4)$$

die Feldgleichung der Elektrostatik. Hierbei werden Fremdladungen im Nichtleiter vernachlässigt. Der *dielektrische Verschiebungsvektor* \vec{D} ist definiert als

$$\vec{D} := \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (3.5)$$

In (3.5) bezeichnen ε_0 die *dielektrische Feldkonstante des Vakuums*, \vec{E} den *elektrischen Feldvektor* und \vec{P} den *Polarisationsvektor*. In den Grundlagenlehrbüchern von GREINER [19], GERTHSEN *et al.* [18] oder FLIESSBACH [46] ist eine detaillierte Herleitung der Feldgleichung der Elektrostatik zu finden.

Da es sich bei dem hier betrachtenden Material um einen idealen Nichtleiter handelt, ist das elektrische Feld rotationsfrei ($\text{rot } \vec{E} = 0$) und kann daher als Gradient des sogenannten *elektrischen Potentials* φ bestimmt werden:

$$\vec{E} = -\text{grad } \varphi \quad . \quad (3.6)$$

3.2 Konstitutive Ausgangsgleichungen

Um das System der Differentialgleichungen eindeutig lösen zu können, sind weitere sogenannte Materialgleichungen erforderlich. Hierbei handelt es sich um phänomenologische Gesetzmäßigkeiten, die die Eigenschaften des Materials makroskopisch gemittelt wiedergeben. Diese konstitutiven Gleichungen sind gekoppelte Beziehungen, die die Spannung, die dielektrische Verschiebung, die Dehnung und das elektrische Feld miteinander verknüpfen¹:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(t) &= \mathcal{F}_{\tau \leq t}[\mathbf{S}(\tau), \vec{E}(\tau)] \\ \vec{D}(t) &= \mathcal{G}_{\tau \leq t}[\mathbf{S}(\tau), \vec{E}(\tau)] \quad . \end{aligned} \quad (3.7)$$

Da der Zugang zur Modellierung mittels (3.5) über den Zusammenhang

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(t) &= \mathcal{H}_{\tau \leq t}[\mathbf{T}(\tau), \vec{E}(\tau)] \\ \vec{P}(t) &= \mathcal{J}_{\tau \leq t}[\mathbf{T}(\tau), \vec{E}(\tau)] \end{aligned} \quad (3.8)$$

anstatt (3.7) besser motiviert werden kann, wird im weiteren von einer Struktur der Materialgleichungen wie (3.8) ausgegangen.

In Abschnitt 2.4 wurde das Materialverhalten aufgrund der äußeren Belastung durch ein elektrisches Feld bzw. eine mechanische Spannung diskutiert. Dabei zeigten sich Hysteresekurven, d.h. reversibles und irreversibles Materialverhalten. Um diese nichtlinearen Eigenschaften des Materials zu berücksichtigen, werden sogenannte innere Variablen und ihre Abhängigkeit von der Belastungsgeschichte eingeführt. In Analogie zur Plastizität in der Kontinuumsmechanik, in der die Dehnung in einen elastischen und einen plastischen Anteil zerlegt wird, findet auch hier eine additive Aufspaltung der Dehnung

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^r + \mathbf{S}^i \quad (3.9)$$

¹Siehe hierzu auch Ansätze von CHEN *et al.* [5, 7].

sowie der Polarisation

$$\vec{\mathbf{P}} = \vec{\mathbf{P}}^r + \vec{\mathbf{P}}^i \quad (3.10)$$

in *reversible* und *irreversible* sogenannte *remanente* Anteile statt. Diese grundlegende Annahme wurde schon in einem thermodynamisch motivierten Zugang von BASSIOUNY und MAUGIN *et al.* [9, 10, 47] verwendet.

Analog dem elastischen Dehnungsanteil in der Plastizitätstheorie verschwinden die beiden reversiblen Anteile \mathbf{S}^r und $\vec{\mathbf{P}}^r$ mit den äußeren Belastungen.

Die remanente Dehnung \mathbf{S}^i gibt das nichtlineare elektrische und mechanische Dehnungsverhalten des Materials wieder und ist als makroskopischer Mittelwert der mikroskopischen spontanen Dehnungen zu verstehen, während die remanente Polarisation $\vec{\mathbf{P}}^i$ die makroskopisch gemittelte Größe der spontanen Polarisation repräsentiert.

3.3 Beschreibung der reversiblen Anteile

Die *reversible Dehnung* \mathbf{S}^r und die *reversible Polarisation* $\vec{\mathbf{P}}^r$ repräsentieren bei einer homogenen Deformation hierbei jene Anteile des Materialverhaltens, die bei Entlastung, d.h. bei verschwindender Spannung sowie verschwindendem elektrischen Feld, vollständig wieder zurückgehen. Es liegt daher nahe, dieses reversible Verhalten in Anlehnung an die Struktur der Gleichungen der linearen Piezoelektrizität

$$\mathbf{S}^r = \mathbf{C}^{-1} : \mathbf{T} + \mathbf{d}^T \cdot \vec{\mathbf{E}} \quad (3.11)$$

$$\vec{\mathbf{P}}^r = \mathbf{d} : \mathbf{T} + \epsilon \cdot \vec{\mathbf{E}} \quad (3.12)$$

zu beschreiben. Hierbei bezeichnet \mathbf{d} den *Piezoelektrizitätstensor* dritter Stufe, ϵ den *Dielektrizitätstensor* zweiter Stufe und \mathbf{C} den *Elastizitätstensor* vierter Stufe.

Die materialabhängigen Tensoren \mathbf{d} , ϵ und \mathbf{C} sind im allgemeinen Fall keine Konstanten und besitzen in der Regel eine anisotrope Struktur. Um die Formulierung des Materialmodells so einfach und die Anzahl der Materialparameter so gering wie möglich zu halten, wird für die beiden Tensoren ϵ und \mathbf{C} Isotropie in der Form

$$\epsilon = \epsilon \mathbf{1} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{C} = \frac{Y}{(1+\nu)} \left(\mathcal{I} + \frac{\nu}{(1-2\nu)} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \quad (3.14)$$

angenommen², wobei $\mathbf{1}$ und \mathcal{I} die Einheitstensoren zweiter bzw. vierter Stufe bezeichnen. Das dielektrische Verhalten wird durch die nichtnegative *dielektrischen Konstante* ϵ beschrieben. Analog zur klassischen Elastizitätstheorie in ESCHENAUER und SCHNELL [51]

²Detaillierte experimentelle Untersuchungen der Elastizitätskonstanten wurden von FETT und MUNZ [48] an PZT-Keramiken erst in neuerer Zeit durchgeführt. In PAK [49] sowie in Datenblättern [50] weichen die Konstanten zwischen der Polungsrichtung und senkrecht dazu meist nur um weniger als 10% ab.

wird für den elastischen Anteil ein isotroper Ansatz mit dem *Elastizitätsmodul* Y und der *Querkontraktionszahl* ν gewählt.

Struktur des dreidimensionalen Piezoelektrizitätstensors

Im weiteren verbleibt noch die Formulierung des Piezoelektrizitätstensors. Eine vereinfachende Annahme, daß er ebenfalls von isotroper Struktur sei und einfach mit Hilfe einer Materialkonstante angegeben werden könne, ist hier nicht mehr möglich.

Mit dem Piezoelektrizitätstensor werden elektrische und mechanische Größen miteinander verknüpft. Liegt in einem Material makroskopisch keine Polarisation vor, so ist für eine kleine Änderung des elektrischen Feldes keine Dehnung induzierbar. Erst mit dem Auftreten einer remanenten Polarisation $\vec{P}^i \neq \vec{0}$ ist eine Kopplung zwischen elektrischen und mechanischen Größen vorhanden.³

Daraus kann geschlossen werden, daß der Piezoelektrizitätstensor eine Funktion der remanenten Polarisation und damit auch ein Funktional der Belastungsgeschichte sein muß. Aufgrund der makroskopischen Betrachtung und der damit verbundenen globalen Mittelung der mikroskopischen Eigenschaften kann der Tensor als transversal isotrop angenommen werden.

Zur Motivation der Struktur des Piezoelektrizitätstensors wird im folgenden zunächst der lineare, inverse piezoelektrische Effekt, d.h. die Wirkung eines elektrischen Feldes auf die dabei induzierte reversible Dehnung

$$S_{ij}^{\text{rP}} = d_{ijk}^T E_k \quad (3.15)$$

untersucht.

In den beiden Bildern 3.1 sind, ausgehend von einem in x_3 -Richtung gepolten Material (Richtung des remanenten Polarisationsvektors \vec{P}^i), die verschiedenen linear piezoelektrischen Effekte dargestellt.

Es wird deutlich, daß eine parallel zur Polungsrichtung wirkende Komponente des elektrischen Feldes E_3 über den *parallelen Piezomodul* d_{\parallel} die Dehnungskomponente

$$S_{33}^{\text{rP}} = d_{\parallel} E_3 \quad (3.16)$$

erzeugt.

Senkrecht zu dieser Belastung findet gleichzeitig eine Querkontraktion des Materials statt. Die beiden Verzerrungskomponenten

$$S_{11}^{\text{rP}} = d_{\perp} E_3 \quad , \quad S_{22}^{\text{rP}} = d_{\perp} E_3 \quad (3.17)$$

liefern damit einen entsprechenden Beitrag in x_1 - und x_2 -Richtung im Dehnungstensor \mathbf{S}^{rP} . Da die beiden Dehnungskomponenten in (3.17) ein negatives Vorzeichen besitzen müssen, muß der *senkrechte Piezomodul* d_{\perp} ein negativer Materialparameter sein.

³Siehe hierzu die Schmetterlingshysterese Bild 2.6.

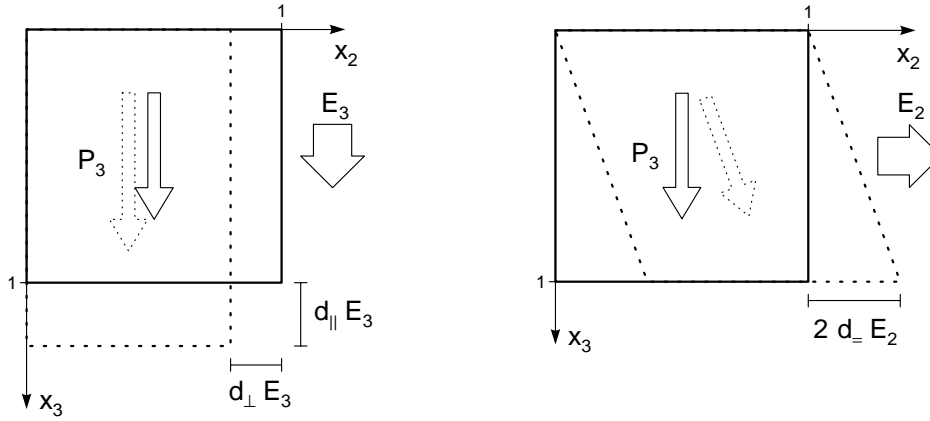


Bild 3.1: Ein in x_3 -Richtung gepoltes Material erfährt je nach Richtung eines wirkenden elektrischen Feldes entsprechende Verzerrungen (*inverser piezoelektrischer Effekt*). Sie sind linear über die piezoelektrischen Konstanten d_{\parallel} , d_{\perp} und $d_{=}$ mit dem elektrischen Feld gekoppelt.

Es verbleibt die fehlenden Schubkomponenten anzugeben. Aus dem rechten Bild 3.1 wird ersichtlich, daß die Wirkung der elektrischen Feldkomponente E_2 ebenso wie eine E_1 -Komponente eine entsprechende Schubverzerrung

$$S_{23}^{\text{rP}} = d_{=} E_2 \quad , \quad S_{13}^{\text{rP}} = d_{=} E_1 \quad (3.18)$$

über den *Schub-Piezomodul* $d_{=}$ des Materials erzeugt.

Lediglich die Dehnungskomponente S_{12}^{rP} kann in diesem Beispiel durch ein angreifendes elektrisches Feld nicht verändert werden. Somit gilt

$$S_{12}^{\text{rP}} = 0 \quad . \quad (3.19)$$

Die in den Gleichungen (3.16), (3.17) und (3.18) angegebenen Piezomodule

$$\begin{aligned} d_{\parallel} &= d_{333} = d_{33} && \text{(Parallel)} \\ d_{\perp} &= d_{311} = d_{31} && \text{(Senkrecht)} \\ d_{=} &= d_{131} = \frac{1}{2} d_{15} && \text{(Schub)} \end{aligned} \quad (3.20)$$

entsprechen hierbei den aus der Literatur bekannten Piezoelektrizitätskonstanten für ein in x_3 -Richtung gepoltes Material.

Mit der komponentenweisen Herleitung und unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften läßt sich ein reversibler, elektrisch induzierter Verzerrungstensor für ein in x_3 -Richtung gepoltes Material

$$\mathbf{S}^{\text{rP}} = \begin{pmatrix} d_{\perp} E_3 & 0 & d_{=} E_1 \\ 0 & d_{\perp} E_3 & d_{=} E_2 \\ d_{=} E_1 & d_{=} E_2 & d_{\parallel} E_3 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

ermitteln.

Durch die Einführung des *normierten Einheitsvektors der remanenten Polarisation*

$$\vec{e}_{\text{Pi}} := \frac{\vec{P}^i}{\|\vec{P}^i\|} \quad (3.22)$$

läßt sich ein *transponierter piezoelektrischer Tensor* dritter Stufe

$$\begin{aligned} \mathbf{d}^T &= d_{\parallel} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{\text{sat}}} \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \quad + \\ & d_{\perp} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{\text{sat}}} (\mathbf{1} - \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}}) \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \quad + \\ & d_{=} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{\text{sat}}} \left((\mathbf{1} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}})^{T_{23}} + (\vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \mathbf{1}) - 2\vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

angeben, der für $\vec{e}_{\text{Pi}} = (001)^T$ verknüpft mit einem elektrischen Feldvektor die entsprechende Besetzung (3.21) des Dehnungstensors \mathbf{S}^{rP} im Fall eines vollständig gepolten Zustandes liefert. Der Ausdruck $\|\vec{P}^i\|/P_{\text{sat}}$ repräsentiert hierbei den Grad der maximal möglichen makroskopischen Polarisation des Materials und erreicht im voll gepolten Zustand den Wert eins, wenn der Betrag der remanenten Polarisation gegen die *Sättigungspolarisation* P_{sat} strebt. Unter dem Ausdruck $(\cdot)^{T_{23}}$ ist die Transponierung des Tensors (\cdot) durch Vertauschung des zweiten mit dem dritten Index zu verstehen (DE BOER [1]).

Analog zu den obigen Betrachtungen ist eine mechanische Spannung in der Lage, über den Piezoelektrizitätstensor eine entsprechende reversible Polarisation

$$P_i^{\text{r}} = d_{ijk} T_{jk} \quad (3.24)$$

zu erzeugen (siehe hierzu den ersten Summanden in Gleichung (3.12)).

In Bild 3.2 ist ein in x_3 -Richtung gepoltes Material und der aufgrund der Wirkung einer mechanischen Spannung induzierte reversible Polarisationsanteil dargestellt.

Verschiedene in paralleler, senkrechter und in Schub-Richtung orientierte mechanische Spannungskomponenten induzieren über die drei Piezomodule d_{\parallel} , d_{\perp} und $d_{=}$ den direkten piezoelektrischen Effekt. Der reversible Polarisationsvektor für einen vollständig gepolten Zustand ergibt sich somit zu

$$\vec{P}^{\text{r}} = \begin{pmatrix} d_{=} T_{12} \\ d_{=} T_{23} \\ d_{\perp} T_{11} + d_{\perp} T_{22} + d_{\parallel} T_{33} \end{pmatrix} . \quad (3.25)$$

Daraus resultiert die tensorielle Schreibweise des *piezoelektrischen Tensors*

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= d_{\parallel} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{\text{sat}}} \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \quad + \\ & d_{\perp} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{\text{sat}}} \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes (\mathbf{1} - \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}}) \quad + \\ & d_{=} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{\text{sat}}} \left((\mathbf{1} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}}) + (\mathbf{1} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}})^{T_{23}} - 2\vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \right) . \end{aligned} \quad (3.26)$$

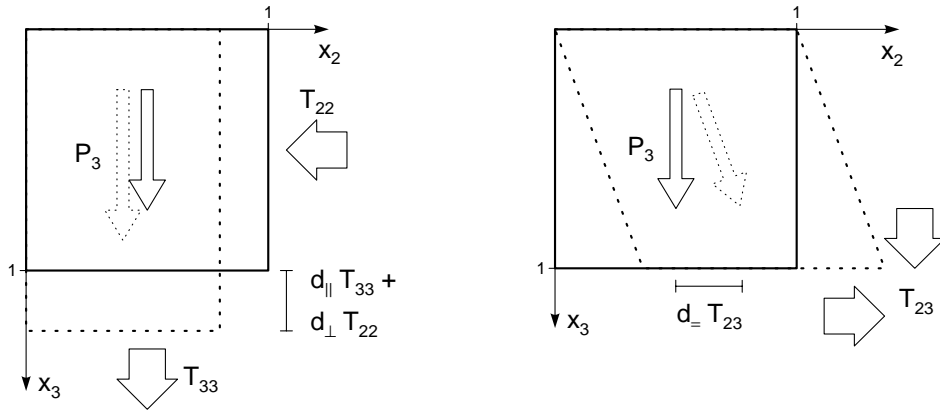


Bild 3.2: Eine reversible Polarisation kann durch eine mechanische Spannung induziert werden (*direkter piezoelektrischer Effekt*). Am Beispiel eines in x_3 -Richtung gepoltes Materials lassen sich die unterschiedlichen Einflüsse verschieden orientierter mechanischer Spannungskomponenten auf den reversiblen Polarisationsvektor untersuchen. Die Materialkonstanten d_{\parallel} , d_{\perp} und $d_{=}$ sind die Proportionalitätsfaktoren dieser Kopplung.

Die Bedeutung der Piezoelektrizitätskonstanten d_{\parallel} , d_{\perp} und $d_{=}$ entspricht (3.20).

3.4 Beschreibung der irreversiblen Anteile

Unter irreversiblen Veränderungen werden hier jene Prozesse in einem Material verstanden, die nach einer homogenen Belastung und einer anschließenden Entlastung vom gleichen Betrag remanent im materiellen Körper verbleiben. Eine solche Veränderung resultiert aus einer mikroskopischen Umorientierung der Domänen, da sie eine Änderung der makroskopisch beobachtbaren remanenten Dehnung bewirkt. Wie in Bild 3.3 dargestellt, lassen sich, ausgehend von einem makroskopisch ungepolten Materialzustand (mittleres Bild), ein solcher Prozeß durch eine rein elektrische, aber auch durch eine rein mechanische Belastung induzieren, und damit werden irreversible Veränderungen im Material erzeugt.

Ein äußeres elektrisches Feld \vec{E} ist in der Lage, die Domänen mit ihren spontanen Polarisationsvektoren in Belastungsrichtung neu auszurichten (linkes Bild). Dabei entsteht eine makroskopisch remanente Polarisation ($\vec{P}^i \neq \vec{0}$) sowie eine ihr zugehörige, makroskopische remanente Dehnung \mathbf{S}^{iP} .

Zum anderen ist eine mechanische Belastung \mathbf{T} in der Lage, die Domänen so umzuorientieren, daß eine makroskopisch remanente Dehnung \mathbf{S}^{iF} verbleibt (rechtes Bild). Bei diesem Prozeß ändert sich jedoch der makroskopisch ungepolter Materialzustand nicht ($\vec{P}^i = \vec{0}$).

In beiden Belastungsfällen stellt sich eine Dehnung ein, die nach Entlastung remanent im

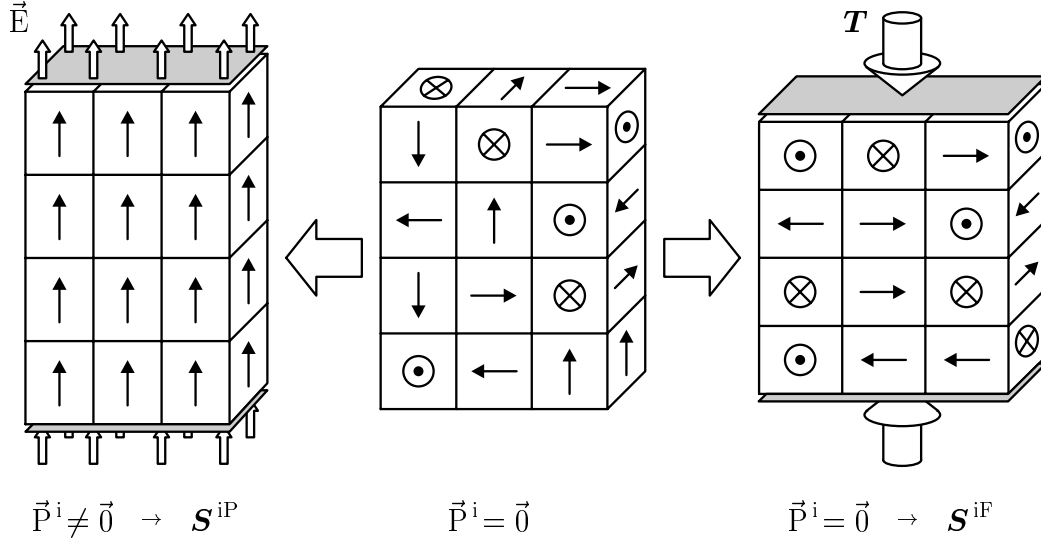


Bild 3.3: Ausgehend von einem makroskopisch ungepolten Zustand (mittleres Bild) kann durch ein elektrisches Feld eine makroskopisch remanente Polarisation sowie eine damit verknüpfte bleibende Dehnung \mathbf{S}^{iP} induziert werden (linkes Bild). Dagegen kann eine mechanische Belastung eine remanente Dehnung \mathbf{S}^{iF} , aber keine makroskopische Polarisation erzeugen (rechtes Bild).

Material verbleibt. Dies motiviert die weitere additive Zerlegung der remanenten Dehnung

$$\mathbf{S}^i = \mathbf{S}^{iP} + \mathbf{S}^{iF} \quad (3.27)$$

in einen Anteil \mathbf{S}^{iP} , der durch makroskopische Polarisationsänderung induziert wird (hochgestelltes P) und einen ferroelastischen Anteil \mathbf{S}^{iF} , der durch die mechanische Belastung hervorgerufen wird (hochgestelltes F).

Für den Dehnungsanteil \mathbf{S}^{iP} ist noch eine entsprechende Funktion in Abhängigkeit der remanenten Polarisation anzugeben. Aufgrund der beiden Mechanismen in Bild 3.3 können die remanente Polarisation \vec{P}^i und die ferroelastische Dehnung \mathbf{S}^{iF} als voneinander unabhängige Größen betrachtet werden. Um das System der Materialgleichungen zu vervollständigen, müssen noch Entwicklungsgesetze für diese beiden inneren Variablen angegeben werden.

Durch remanente Polarisation induzierte Dehnung

Die Wirkung eines äußeren elektrischen Feldes führt über die Entwicklung einer makroskopisch remanenten Polarisation zu einer entsprechenden makroskopisch remanenten Dehnung, für die die folgende Beziehung angenommen wird:

$$\mathbf{S}^{iP} = \frac{3}{2} \varepsilon_{sat} \frac{\|\vec{P}^i\|}{P_{sat}} \left(\vec{e}_{P^i} \otimes \vec{e}_{P^i} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \right) \quad (3.28)$$

Hierbei ist nach Gleichung (3.22) \vec{e}_{P^i} der Einheitsvektor der remanenten Polarisation und der Tensor $\vec{e}_{P^i} \otimes \vec{e}_{P^i}$ repräsentiert die makroskopische Polungsrichtung des Materials.

In Richtung der remanenten Polarisation stellt sich hierbei die remanente Dehnungskomponente

$$S_{\parallel}^{\text{iP}} = \varepsilon_{\text{sat}} \frac{\|\vec{P}^{\text{i}}\|}{P_{\text{sat}}} \quad (3.29)$$

ein, die sich proportional zur Größe des remanenten Polarisationsvektors entwickelt. Im vollständig gepolten Zustand

$$\|\vec{P}^{\text{i}}\| = P_{\text{sat}} \quad (3.30)$$

erreicht der Betrag der remanenten Polarisation die *Sättigungspolarisation* P_{sat} . Damit ergibt sich die *Sättigungsdehnung* ε_{sat} in Richtung des wirkenden elektrischen Feldes.

Bei der Entstehung von \vec{P}^{i} wird eine entsprechende remanente Dehnung in Polarisationsrichtung, aber auch senkrecht hierzu, hervorgerufen. Aus (3.28) ergibt sich eine Querdehnung von

$$S_{\perp}^{\text{iP}} = -\frac{1}{2} \varepsilon_{\text{sat}} \frac{\|\vec{P}^{\text{i}}\|}{P_{\text{sat}}} = -\frac{1}{2} S_{\parallel}^{\text{iP}} \quad (3.31)$$

Dies entspricht einer rein volumentreuen Deformation, wie sie auch von CAO und EVANS [35] sowie LYNCH [36] experimentell beobachtet wurde.

4 Eindimensionale Formulierung des phänomenologischen Materialmodells

Im vorigen Kapitel wurden die Grundgleichungen zur Modellierung in allgemeiner dreidimensionaler Form erläutert. In der Literatur sind viele experimentelle Untersuchungen zum eindimensionalen Verhalten von Ferroelektrika zu finden, an denen das phänomenologische Materialverhalten studiert wurde. Es ist notwendig, die Materialmodellierung daran zu orientieren. In diesem Kapitel wird daher ein eindimensionales Materialmodell vorgestellt, dessen Struktur sich durch die aus der Literatur bekannten eindimensionalen Experimente motivieren läßt (z.B. SCHÄUFELE und HÄRDTL [44, 38], LYNCH [36], CAO und EVANS [35], CHEN und TUCKER [7] oder beispielsweise aus den Lehrbüchern von FELDTKELLER [22, 23], SONIN und STRUKOW [31] sowie SACHSE [52]).

In der klassischen Plastizitätstheorie werden zur Beschreibung von Hysteresen im Materialverhalten spezielle Konzepte herangezogen. Einen ausführlichen Überblick über grundlegende Literatur zur Modellierung in der Plastizitätstheorie ist beispielsweise in der Einleitung von TSAKMAKIS [53] und den dort zitierten Veröffentlichungen dargestellt. Die Grenze zwischen dem sogenannten elastischen und plastischen Bereich wird durch die Einführung einer Fließfunktion beschrieben und der plastische Anteil unter Verwendung innerer Variablen und deren Abhängigkeit von der Belastungsgeschichte formuliert. Diese Konzepte sowie der mathematische Formalismus findet auch hier, bei der Formulierung des ferroelektrischen Materialmodells, seine Anwendung und wurde erstmals von KAMLAH und TSAKMAKIS [54] zur phänomenologischen Modellierung des nichtlinearen elektromechanischen Verhaltens von Ferroelektrika angewendet.

4.1 Eindimensionale Darstellung der Ausgangsgleichungen

Da in diesem Kapitel eine vollständige eindimensionale Formulierung des phänomenologischen Materialmodells motiviert werden soll, werden zunächst die konstitutiven Ausgangsgleichungen des letzten Kapitels in ihrer eindimensionalen Form dargestellt. Bei der Formulierung werden im weiteren einachsige Spannungszustände sowie ein dazu parallel wirkendes elektrisches Feld in x_3 -Richtung betrachtet. Für die einzigen nichtverschwin-

denden Komponenten der Vektoren

$$\begin{aligned}
\vec{E} &\mapsto E := E_3 \\
\vec{P} &\mapsto P := P_3 \\
\vec{P}^r &\mapsto P^r := P_3^r \\
\vec{P}^i &\mapsto P^i := P_3^i
\end{aligned} \tag{4.1}$$

sowie für die Tensoren

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &\mapsto \sigma := T_{33} \\
\mathbf{S} &\mapsto \varepsilon := S_{33} \\
\mathbf{S}^r &\mapsto \varepsilon^r := S_{33}^r \\
\mathbf{S}^i &\mapsto \varepsilon^i := S_{33}^i \\
\mathbf{S}^{iF} &\mapsto \varepsilon^{iF} := S_{33}^{iF} \\
\mathbf{S}^{iP} &\mapsto \varepsilon^{iP} := S_{33}^{iP}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

wird im folgenden die angegebene Schreibweise verwendet, wobei Quereffekte in den Dehnungstensoren nicht betrachtet werden.

Um ein vollständiges System zur Lösung der Feldgleichungen angeben zu können, sind konstitutive Beziehungen zwischen der *Dehnung* ε und der *Polarisation* P einerseits und der *Spannung* σ und dem *elektrischem Feld* E andererseits notwendig. Ausgangspunkt ist die additive Zerlegung der Dehnung

$$\varepsilon = \varepsilon^r + \varepsilon^i \tag{4.3}$$

und der Polarisation

$$P = P^r + P^i \tag{4.4}$$

in *reversible* (ε^r, P^r) und *irreversible* sogenannte *remanente* (ε^i, P^i) Anteile gemäß Gleichung (3.9) und (3.10).

Aus (3.11) und (3.12) können die piezoelektrischen Grundgleichungen

$$\varepsilon^r = \frac{1}{Y} \sigma + d E \tag{4.5}$$

$$P^r = d \sigma + \epsilon E \tag{4.6}$$

gewonnen werden, mit denen die *reversible Dehnung* ε^r und die *reversible Polarisation* P^r zu berechnen sind. Hierbei entspricht ϵ der *dielektrischen Konstanten* und Y dem *Elastizitätsmodul*. Aus der dreidimensionalen Formulierung (3.26) ergibt sich für den ein-dimensionalen *piezoelektrischen Modul* d die Form:

$$d = d \frac{P^i}{P_{sat}} \quad . \tag{4.7}$$

Der Materialparameter d entspricht hierbei gerade d_{\parallel} (siehe Bild 3.1 und Bild 3.2).

Da eine remanente Dehnung ε^i durch zwei unabhängige Mechanismen induziert werden kann (siehe hierzu Bild 3.3), läßt sie sich additiv in einen Anteil induziert durch Polarisationsänderung ε^{iP} und einen Anteil aufgrund ferroelastischer Belastung ε^{iF} zerlegen:

$$\varepsilon^i = \varepsilon^{iP} + \varepsilon^{iF} \quad . \quad (4.8)$$

Gemäß Gleichung (3.28) induziert die remanente Polarisation P^i eine ihr zugehörige remanente Dehnung

$$\varepsilon^{iP} = \varepsilon_{sat} \frac{|P^i|}{P_{sat}} \quad . \quad (4.9)$$

Für einen vollständigen Satz von Feldgleichungen und damit zu einer vollständigen Beschreibung des Materialverhaltens ist zusätzlich die Entwicklung der remanenten Polarisation P^i und der remanenten ferroelastischen Dehnung ε^{iF} anzugeben. Hierzu müssen noch Evolutionsgleichungen formuliert werden, die die Belastungsgeschichte des Materials berücksichtigen.

4.2 Modellierung der Ferroelektrizität

In diesem Abschnitt wird das Materialverhalten modelliert, welches sich bei reiner elektrischer Belastung ergibt. Eine eventuell vorhandene, überlagerte mechanische Spannung ist so gewählt, daß sie keine irreversiblen Prozesse und auch keine mechanische Depolarisation auslöst. Sie übt daher nur einen 'moderaten' Einfluß auf das ferroelektrische Materialverhalten aus.

Wird an eine ungepolte ferroelektrische Keramik ein elektrisches Feld angelegt, so ist zu Beginn ein rein reversibles Materialverhalten zu beobachten. Erst nachdem das elektrische Feld einen Grenzwert überschritten hat, treten irreversible Veränderungen auf.

Dies motiviert die Vorstellung, daß ein reversibler Bereich existiert, in dem das angreifende elektrische Feld nicht in der Lage ist eine bleibende, remanente Polarisation zu induzieren. Daran schließt sich ein nichtreversibler Bereich an, in dem sich dann aufgrund der Wirkung des elektrischen Feldes eine remanente Polarisation P^i entwickeln kann. Durch die Einführung der f^P -Funktion

$$f^P(E, P^i) = |E - c^P P^i| - E_c \quad , \quad (4.10)$$

können diese beiden Bereiche zum Zweck einer getrennten Formulierung voneinander separiert werden. Hierbei sind die *Koerzitivfeldstärke* E_c und c^P nichtnegative Materialparameter. Zur Motivation der f^P -Funktion ist in Bild 4.1 das Verhalten der remanenten Polarisation P^i aufgrund einer Belastung durch das elektrische Feld E dargestellt.

Solange das elektrische Feld kleiner als der Grenzwert E_c ist (Bereich **A**→**B**), stellt sich für f^P ein Wert kleiner Null ein, so daß reversibles Materialverhalten durch die Bedingung

$$f^P(E, P^i) < 0 \quad \vee \quad \left. \frac{d}{dt} f^P(E, P^i) \right|_{\dot{P}^i = 0} < 0 \quad (4.11)$$

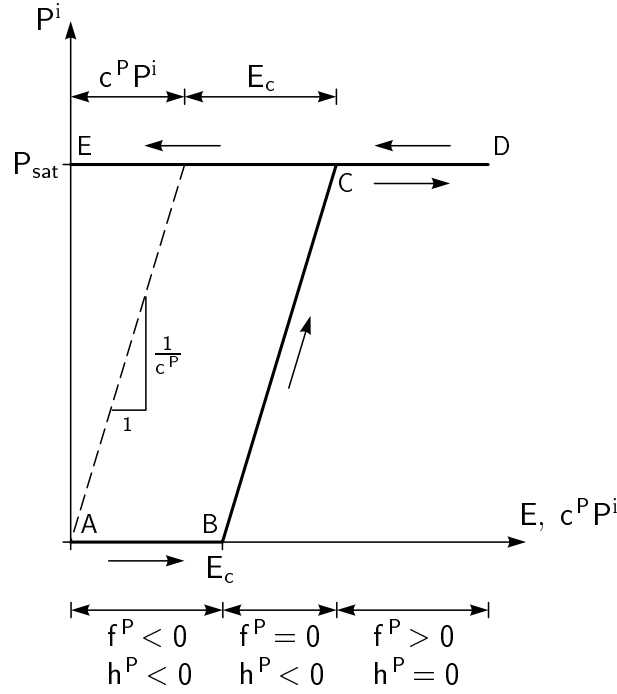


Bild 4.1: Entwicklung der remanenten Polarisation P^i aufgrund der Belastung durch ein elektrisches Feld E . Es sind drei Bereiche, ein reversibler Bereich $A \rightarrow B$, ein irreversibler Bereich $B \rightarrow C$ sowie ein gesättigter Bereich $C \rightarrow D \rightarrow E$, unterscheidbar, die mittels der beiden Funktion f^P und h^P voneinander separiert werden.

gegeben ist. Ist (4.11) erfüllt, wird dies im folgenden mit *Fall 1* bezeichnet, der dadurch gekennzeichnet ist, daß sich keine remanente Polarisation

$$\dot{P}^i = 0 \quad (4.12)$$

entwickeln kann.

Wächst das angreifende elektrische Feld über den reversiblen Bereich hinaus ($B \rightarrow C$), entwickelt sich eine remanente Polarisation, die sich in Richtung zunehmenden elektrischen Feldes, gekennzeichnet durch die Richtung der äußeren Belastung $\partial f^P / \partial E$, verändert. Das entspricht einem Polungsprozeß, bei dem sich die Domänen in Richtung der Wirkung des elektrischen Feldes umorientieren. Die Entwicklung von \dot{P}^i wird daher gemäß der Normalenregel

$$\dot{P}^i = \lambda_f^P \left(\frac{\partial f^P}{\partial E} \right) \quad (4.13)$$

angenommen. Den zugehörigen *Proportionalitätsfaktor* λ_f^P liefert die Auswertung der Konsistenzbedingung

$$\frac{d}{dt} f^P(E, P^i) = \frac{E - c^P P^i}{|E - c^P P^i|} (\dot{E} - c^P \dot{P}^i) = 0 \quad (4.14)$$

nach Elimination von \dot{P}^i mit (4.13). Somit ergibt sich bei Erfüllung der Belastungsbedingung

$$f^P(E, P^i) = 0 \quad \wedge \quad \left. \frac{d}{dt} f^P(E, P^i) \right|_{\dot{P}^i = 0} \geq 0 \quad , \quad (4.15)$$

die auch als *Fall 2* oder als gültiges f^P -Kriterium bezeichnet wird, die Evolutionsgleichung

$$\dot{P}^i = \frac{1}{c^P} \dot{E} \quad . \quad (4.16)$$

Im irreversiblen Bereich entwickelt sich daher ein Anteil $c^P P^i$, so daß sich aus $f^P = 0$ im Bereich $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{C}$ in Bild 4.1 der Zusammenhang $E = c^P P^i + E_c$ ergibt. Bei (4.16) handelt es sich um eine homogene Differentialgleichung ersten Grades in den Geschwindigkeiten, so daß die Entwicklung von P^i geschwindigkeitsunabhängig ist.

Die Erhöhung der Belastung durch das elektrische Feld induziert eine ständige Zunahme der remanenten Polarisation. Dies wird durch Umklappprozesse und der damit verbundenen Umorientierung der einzelnen Domänen bewirkt und endet, sobald sich alle Domänen in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet haben. Das Material befindet sich dann in einem vollständig gepolten Zustand. Dies entspricht in Bild 4.1 dem Punkt C. Eine weitere Zunahme der remanenten Polarisation über den Sättigungswert $|P^i| = P_{sat}$ hinaus ist nicht möglich.

Diese Begrenzung motiviert die Einführung einer zweiten Funktion

$$h^P(P^i) = |P^i| - P_{sat} \quad . \quad (4.17)$$

Mit der für den *Fall 3* gültigen Bedingung bzw. dem h^P -Kriterium

$$h^P(P^i) = 0 \quad \wedge \quad \left. \frac{d}{dt} h^P(P^i) \right|_{\dot{P}^i = \dot{E}/c^P} > 0 \quad (4.18)$$

wird P^i durch P_{sat} begrenzt und die Entwicklung von P^i durch die Evolutionsgleichung

$$\dot{P}^i = 0 \quad (4.19)$$

gestoppt.

Mit der Normalenregel

$$\dot{P}^i = \lambda_h^P \left(\frac{\partial h^P}{\partial P^i} \right) \quad (4.20)$$

für die h^P -Funktion (4.17) und der Auswertung der Konsistenzbedingung

$$\frac{d}{dt} h^P(P^i) = \frac{P^i}{|P^i|} \dot{P}^i = 0 \quad (4.21)$$

läßt sich nach Eliminierung von \dot{P}^i gemäß (4.20), der zugehörige *Proportionalitätsfaktor* λ_h^P bestimmen. Dabei ergibt sich gerade die in (4.19) angegebene Evolutionsgleichung für die remanente Polarisation.

Die Entwicklung der remanenten Polarisation wird durch das f^P -Kriterium (4.15) und das h^P -Kriterium (4.18) kontrolliert. Im Bereich $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{C}$ entwickelt sich P^i nach (4.16) in Richtung des belastenden elektrischen Feldes und ist für $|P^i| = P_{sat}$ (Bereich $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{D} \rightarrow \mathbf{E}$) gesättigt. Nach der Entlastung ($E = 0$ im Punkt \mathbf{E} in Bild 4.1) bleibt eine remanente Polarisation vom Wert P_{sat} zurück.

Es ist zu berücksichtigen, daß das h^P -Kriterium gegenüber dem f^P -Kriterium eine höhere Priorität besitzen muß. Ist die remanente Polarisation gesättigt $|P^i| = P_{sat}$, ist das h^P -Kriterium erfüllt, das f^P -Kriterium jedoch nicht mehr. Es muß nun 'verletzt' werden, so daß die f^P -Funktion dabei Werte größer Null annimmt ($\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{D}$ in Bild 4.1). Liegt die Situation $f^P > 0$ vor, muß gewährleistet sein, daß die Konsistenzbedingung für die h^P -Funktion weiterhin erfüllt bleibt.

Aus (4.12), (4.13) und (4.20) läßt sich eine Fließregel für die Entwicklung der remanenten Polarisation aufstellen:

$$\dot{P}^i = \begin{cases} 0 & : & \text{Fall 1} \\ \lambda_f^P \left(\frac{\partial f^P}{\partial E} \right) & : & \text{Fall 2} \\ \lambda_h^P \left(\frac{\partial h^P}{\partial P^i} \right) & : & \text{Fall 3} \end{cases} \quad (4.22)$$

Um eine geschlossene mathematische Darstellung der Evolutionsgleichung für \dot{P}^i mit ihren unterschiedlichen Belastungsfällen angeben zu können, werden folgende Definitionen eingeführt:

$$[x] = \begin{cases} 1 & : & x \geq 0 \\ 0 & : & x < 0 \end{cases} \quad (4.23)$$

und

$$f^*P = \left. \frac{d}{dt} f^P \right|_{\dot{P}^i = 0}, \quad h^*P = \left. \frac{d}{dt} h^P \right|_{\dot{P}^i = F^P \dot{E}/c^P} \quad (4.24)$$

sowie die logischen Vorfaktoren

$$F^P := [f^P][f^*P] = \begin{cases} 1 & : & \text{Fall 2} \\ 0 & : & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.25)$$

und

$$H^P := \left[[-h^*P] - [h^P] \right] [-f^P] = \begin{cases} 1 & : & \text{sonst} \\ 0 & : & \text{Fall 3} \vee f^P > 0 \end{cases} \quad (4.26)$$

Für die Entwicklung der remanenten Polarisation können somit die Gleichungen (4.12), (4.16) und (4.19) zu

$$\dot{P}^i = F^P H^P \frac{1}{c^P} \dot{E} \quad (4.27)$$

zusammengefaßt werden.

Der Ausdruck F^P in (4.25) repräsentiert den Fall einsetzender remanenter Polarisation und ergibt nur im Fall der gültigen Belastungskriterien nach Gleichung (4.15) den Wert eins. Damit schaltet er für alle Zustände, die dem f^P -Kriterium widersprechen (im Fall 1 oder Fall 3), die rechte Seite der Evolutionsgleichung für \dot{P}^i aus.

Mittels des Terms H^P in (4.26) wird das Einsetzen des h^P -Kriteriums gesteuert. Nur wenn der Fall 3 vorliegt, wird H^P null und schaltet damit die Weiterentwicklung von \dot{P}^i aus.

Die komplexe Formulierung der Fallunterscheidung in (4.27) erweckt den Eindruck, als ob hier die beiden Vorfaktoren F^P und H^P dieselben Ziele verfolgen. In einem gültigen Fall 3 wird die rechte Seite der Evolutionsgleichung gleichzeitig durch F^P , aber auch durch H^P zu Null gesetzt. Im Hinblick auf spätere Erweiterungen der Evolutionsgleichungen für \dot{P}^i ist diese Vorgehensweise jedoch durchaus sinnvoll, da H^P das Einsetzen des h^P -Kriteriums und damit jenen Grenzwert, den die remanente Polarisation maximal erreichen kann, steuert.

Für die im weiteren vorgestellten eindimensionalen Simulationen sind die zugehörigen Materialparameter der Tabelle 4.1 zu entnehmen.

Parameter	Einheit	Wert	Parameter	Einheit	Wert
E_c	kV/mm	1.0	σ_c	MPa	50.0
P_{sat}	mC/m ²	300.0	ε_{sat}	%	0.2
d	pm/V	1000.0	Y	GPa	100.0
ϵ	mC/kVm	0.01	c^F	GPa	5.3
c^P	kVm/mC	2.0	m	MPa	50.0
P_δ	mC/m ²	100.0	n	MPa	30.0

Tabelle 4.1: Verwendete Materialparameter für die numerische Simulation des eindimensionalen Materialmodells. Einige Parameter werden erst in den nächsten Abschnitten eingeführt.

4.2.1 Dielektrische Hysterese

Das Antwortverhalten der bisher eingeführten Materialgleichungen mit den Materialparametern aus Tabelle 4.1 ist in Bild 4.2 dargestellt. Die bilineare Approximation der dielektrischen Hysterese in Bild 4.2a zeigt, ausgehend von einem ungepolten Materialzustand, den Zusammenhang zwischen einem angelegten, zyklisch sich veränderndem elektrischen Feld und der damit induzierten Polarisation.

Zu Beginn zeigt sich ein linear dielektrisches Verhalten, in dem $f^P < 0$ ist. Erst wenn

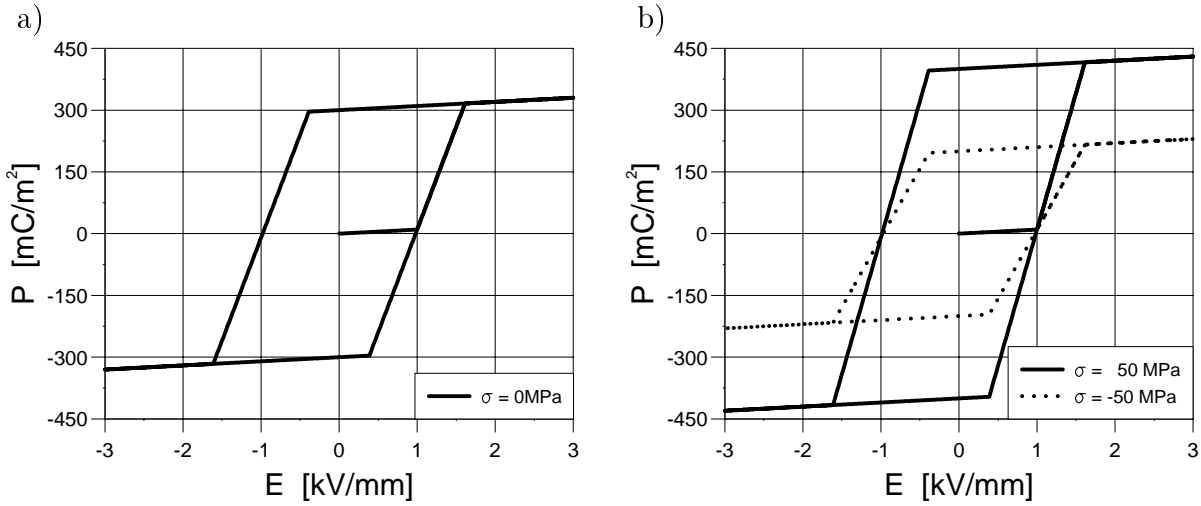


Bild 4.2: a) Bilineare Approximation der dielektrischen Hysterese.
b) Dielektrische Hysterese bei überlagerter konstanter mechanischer Spannung.

das elektrische Feld die Koerzitivfeldstärke E_c überschreitet, ist das f^P -Kriterium erfüllt ($f^P = 0$) und es kann sich nach Gleichung (4.16) eine remanente Polarisation entwickeln. Dieses irreversible Verhalten endet, sobald die Sättigung der remanenten Polarisation eingetreten ist ($|P^i| = P_{sat}$). In diesem erneut linear dielektrischen Bereich ist nun das h^P -Kriterium erfüllt ($h^P = 0$), das f^P -Kriterium ist jedoch verletzt ($f^P > 0$). Nach Entlastung ergibt sich der Wert P_{sat} als bleibende Polarisation.

Die Steigungen der Kurve im ersten und dritten Bereich sind identisch und entsprechen dem Wert ϵ , während sich die Polarisation in der Zwischenphase proportional zum elektrischen Feld mit der Steigung $(1 + c^P \epsilon)/\epsilon$ verhält.

Der Effekt einer zusätzlich überlagerten mechanischen Spannung σ auf die dielektrische Hysterese ist in Bild 4.2b dargestellt. Die konstante mechanische Spannung ist hierbei moderat, d.h. so klein gewählt, daß sie im Experiment noch zu keinen irreversiblen Prozessen führen würde. Aus Gleichung (4.4) und (4.6) und mittels Gleichung (4.7) läßt sich die gesamte Polarisation

$$P = \epsilon E + P^i + d \frac{P^i}{P_{sat}} \sigma \quad (4.28)$$

in Abhängigkeit des elektrischen Feldes E , der remanenten Polarisation P^i und der mechanischen Spannung σ ausdrücken.

Die Hysteresen zeigen hierbei den *direkten piezoelektrischen Effekt*: Eine überlagerte Zugspannung führt zu einer größeren maximalen Polarisation, während eine überlagerte Druckspannung diese verkleinert. Im vollständig gepolten Zustand ist die Differenz der gesamten Polarisation mit und ohne überlagerte Spannung aus Gleichung (4.28) ersichtlich und ergibt sich zu $d(P^i/P_{sat})\sigma$.

4.2.2 Schmetterlingshysterese

Mit den bisher eingeführten Materialgleichungen wird auch das Dehnungsverhalten, aufgrund einer Belastung durch das elektrische Feld in einer ferroelektrischen Keramik beschrieben. Das elektrische Feld induziert eine remanente Polarisation, die nach (4.9) eine ihr zugehörige, proportionale Dehnung ε^{iP} hervorruft. Dem ist ein zweiter Dehnungsanteil überlagert. Er ergibt sich aus der Kopplung des elektrischen Feldes mit dem piezoelektrischen Modul d und wird als *inverser piezoelektrischer Effekt* bezeichnet. Zusätzlich ist ein linear elastischer Dehnungsanteil σ/Y vorhanden.

Mit diesen Dehnungsanteilen nach (4.3) läßt sich die gesamte Dehnung

$$\varepsilon = \varepsilon_{sat} \frac{|P^i|}{P_{sat}} + d \frac{P^i}{P_{sat}} E + \frac{1}{Y} \sigma \quad (4.29)$$

in Abhängigkeit der remanenten Polarisation P^i , des elektrischen Feldes E und der mechanischen Spannung σ angeben.

Die Schmetterlingshysterese in Bild 4.3a beschreibt das Verhalten der induzierten Dehnung in Abhängigkeit des angelegten elektrischen Feldes bei einer mechanischen Spannung $\sigma = 0$ MPa. Ausgehend von einem ungepolten Materialzustand ist anfangs keine elektrisch induzierte Dehnung zu beobachten. Da im Material keine remanente Polarisation vorliegt ($P^i = 0$ mC/m²), liegt ein entkoppelter Zustand vor. Erst wenn das Feld die Koerzitivfeldstärke überschreitet ($E_c < E < E_c + c^P P_{sat}$) entwickelt sich die remanente Polarisation und die Dehnung ändert sich quadratisch mit dem elektrischen Feld. Ist die remanente Polarisation gesättigt (h^P -Kriterium ist erfüllt), stellt sich ein linear piezoelektrischer Bereich mit der Steigung d ein. Nach Entlastung des elektrischen Feldes verbleibt eine

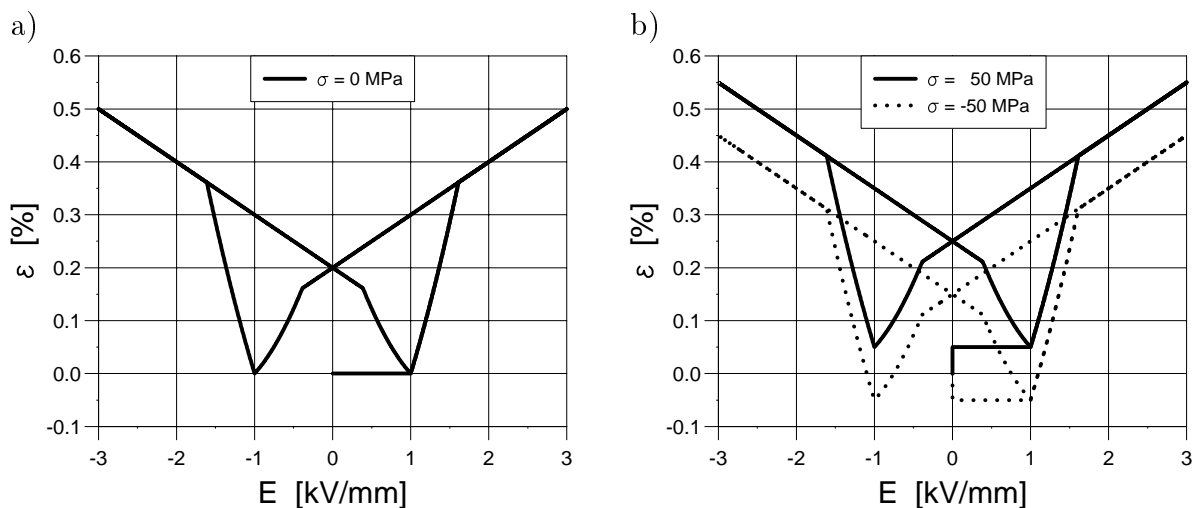


Bild 4.3: a) Bilineare Approximation der Schmetterlingshysterese.

b) Schmetterlingshysterese bei überlagerter konstanter mechanischer Spannung.

remanente Dehnung ($\varepsilon = \varepsilon_{sat}$).

Wird der elektrischen Belastung eine konstante mechanische Spannung von moderatem Betrag überlagert, ist ein zusätzlicher konstanter Beitrag σ/Y zur gesamten Dehnung in (4.29) vorhanden. In Bild 4.3b ist dieser Beitrag als vertikale Verschiebung der Schmetterlingshysterese, entsprechend dem Vorzeichen der überlagerten Spannung, zu erkennen.

4.3 Modellierung der Ferroelastizität

In diesem Abschnitt wird die Modellierung des Materialverhaltens unter rein mechanischer Belastung ($E \equiv 0$) motiviert. Neben einer rein elektrischen Belastung, ist auch eine rein mechanische Belastung in der Lage, Umklappprozesse von Domänen in einer ferroelektrischen Keramik auszulösen (vgl. Abschnitt 2.4.3 sowie Bild 3.3). Die bei diesen Prozessen induzierten irreversiblen Veränderungen im Material unterscheiden sich in ihrem Charakter von denen bei elektrischer Belastung.

Durch eine mechanische Belastung kann das Umklappen von Domänen induziert werden, wodurch irreversible ferroelastische Verzerrungen ε^{iF} im Material entstehen. Jedoch kann hierbei keine eindeutige Ausrichtung der Domänen erreicht werden, so daß keine remanente Polarisation erzeugt werden kann ($P^i \equiv 0$). Deshalb kann das rein ferroelastische Materialverhalten als völlig von den dielektrischen Eigenschaften entkoppelt betrachtet und eigenständig modelliert werden. Zu experimentellen Untersuchungen der irreversiblen Verzerrung unter mechanischer Zug- und Druckspannung siehe FETT *et al.* [40, 55].

Aus den Gleichungen (4.3), (4.5) und (4.8) ergibt sich, bei nicht vorhandenem elektrischen Feld und unter der Voraussetzung daß kein Dehnungsanteil ε^{iP} durch remanente Polarisation induziert wird, die gesamte Dehnung zu:

$$\varepsilon = \varepsilon^r + \varepsilon^{iF} \quad . \quad (4.30)$$

Sie ist für das ferroelastische Materialverhalten in einen reversiblen Anteil $\varepsilon^r = \sigma/Y$ und einen irreversiblen bzw. remanenten ferroelastischen Anteil ε^{iF} darstellbar.

Analog der ferroelektrischen Modellierung kann das Materialverhalten in drei Bereiche unterteilt werden. Zu Beginn einer monoton ansteigenden mechanischen Belastung stellt sich ein linear elastischer Bereich ein, in dem keine bleibenden Dehnungen induziert werden können. Daran schließt sich die irreversible Umklappphase und somit die Entwicklung der remanenten ferroelastischen Dehnung ε^{iF} an. Sind alle Domänen ausgerichtet, stellt sich erneut linear elastisches Materialverhalten ein.

Der elastisch-inelastische Übergang läßt sich mittels der f^F -Funktion

$$f^F(\sigma, \varepsilon^{iF}) = |\sigma - c^F \varepsilon^{iF}| - \sigma_c \quad (4.31)$$

beschreiben, wobei die *Koerzitivspannung* σ_c und c^F nichtnegative Materialparameter sind.

In Anlehnung an die Koerzitivfeldstärke E_c charakterisiert σ_c diejenige Druck- bzw. Zugspannung, ab der Umklappprozesse einsetzen.

Im elastischen Anfangsbereich finden keine irreversiblen Prozesse statt, so daß für die remanente Dehnung

$$\dot{\varepsilon}^{\text{iF}} = 0 \quad (4.32)$$

unter der Bedingung des reversiblen elastischen *Fall 1*

$$f^{\text{F}}(\sigma, \varepsilon^{\text{iF}}) < 0 \quad \vee \quad \left. \frac{d}{dt} f^{\text{F}}(\sigma, \varepsilon^{\text{iF}}) \right|_{\dot{\varepsilon}^{\text{iF}} = 0} < 0 \quad (4.33)$$

gilt.

Für Belastung, d.h. *Fall 2* gilt unter der Belastungsbedingung

$$f^{\text{F}}(\sigma, \varepsilon^{\text{iF}}) = 0 \quad \wedge \quad \left. \frac{d}{dt} f^{\text{F}}(\sigma, \varepsilon^{\text{iF}}) \right|_{\dot{\varepsilon}^{\text{iF}} = 0} \geq 0 \quad , \quad (4.34)$$

soll sich ε^{iF} in Richtung von $\partial f^{\text{F}}/\partial \sigma$ entwickeln, so daß die Normalenregel

$$\dot{\varepsilon}^{\text{iF}} = \lambda_f^{\text{F}} \left(\frac{\partial f^{\text{F}}}{\partial \sigma} \right) \quad (4.35)$$

angenommen werden kann. Ist die Belastungsbedingung des ferroelastischen, zweiten Falles (4.34) erfüllt, wird dieser Zustand auch als die Gültigkeit des f^{F} -Kriteriums bezeichnet. Den zugehörigen *Proportionalitätsfaktor* λ_f^{F} zur Bestimmung von $\dot{\varepsilon}^{\text{iF}}$ liefert die Auswertung der Konsistenzbedingung

$$\frac{d}{dt} f^{\text{F}}(\sigma, \varepsilon^{\text{iF}}) = \frac{\sigma - c^{\text{F}} \varepsilon^{\text{iF}}}{|\sigma - c^{\text{F}} \varepsilon^{\text{iF}}|} (\dot{\sigma} - c^{\text{F}} \dot{\varepsilon}^{\text{iF}}) = 0 \quad . \quad (4.36)$$

Unter Berücksichtigung des Ansatzes (4.35) für $\dot{\varepsilon}^{\text{iF}}$ ergibt sich die Evolutionsgleichung für die remanente ferroelastische Dehnung zu

$$\dot{\varepsilon}^{\text{iF}} = \frac{\dot{\sigma}}{c^{\text{F}}} \quad , \quad (4.37)$$

die homogen vom Grad eins ist und somit ε^{iF} in geschwindigkeitsunabhängiger Form beschreibt.

Das Reservoir der induzierten ferroelastischen Dehnung ist durch die Anzahl der vorhandenen umklappbaren Domänen begrenzt. Damit kann ε^{iF} einen oberen Grenzwert nicht überschreiten. Mittels der h^{F} -Funktion

$$h^{\text{F}}(\varepsilon^{\text{iF}}) = |\varepsilon^{\text{iF}}| - \varepsilon_{\text{sat}} \quad (4.38)$$

wird der Betrag von ε^{iF} nach oben durch die *Sättigungsdehnung* ε_{sat} beschränkt. Es gilt dann die Evolutionsgleichung

$$\dot{\varepsilon}^{\text{iF}} = 0 \quad (4.39)$$

unter der Belastungsbedingung

$$h^F(\varepsilon^{iF}) = 0 \quad \wedge \quad \left. \frac{d}{dt} h^F(\varepsilon^{iF}) \right|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = \dot{\sigma}/c^F} > 0 \quad , \quad (4.40)$$

was im folgenden als *Fall 3* oder auch als erfülltes h^F -Kriterium bezeichnet wird.

Mittels des Ansatzes der Normalenregel

$$\dot{\varepsilon}^{iF} = \lambda_h^F \left(\frac{\partial h^F}{\partial \varepsilon^{iF}} \right) \quad (4.41)$$

und der Auswertung der Konsistenzbedingung aus der h^F -Funktion

$$\frac{d}{dt} h^F(\varepsilon^{iF}) = \frac{\varepsilon^{iF}}{|\varepsilon^{iF}|} \dot{\varepsilon}^{iF} = 0 \quad (4.42)$$

läßt sich der Parameter λ_h^F bestimmt. Es ergibt sich in diesem Fall $\lambda_h^F = 0$ und somit die Evolutionsgleichung (4.39).

Aus den Überlegungen des Abschnittes 2.4.3 ist zu erwarten, daß das Reservoir der umklappbaren Domänen einer ungepolten ferroelektrischen Keramik im Zugspannungsbereich etwa doppelt so groß wie im Druckspannungsbereich ist. Diese Eigenschaft würde sich in einer unsymmetrischen ferroelastischen Hysterese widerspiegeln (siehe Bild 2.7). Im Rahmen einer vereinfachten Formulierung wurde dieser Effekt vernachlässigt.¹

Aus (4.32), (4.35) und (4.41) läßt sich eine Fließregel für die remanente ferroelastische Dehnung

$$\dot{\varepsilon}^{iF} = \begin{cases} 0 & : \quad \text{Fall 1} \\ \lambda_f^F \left(\frac{\partial f^F}{\partial \sigma} \right) & : \quad \text{Fall 2} \\ \lambda_h^F \left(\frac{\partial h^F}{\partial \varepsilon^{iF}} \right) & : \quad \text{Fall 3} \end{cases} \quad (4.43)$$

aufstellen.

Um eine Schreibweise analog der Gleichung (4.27) anzugeben, müssen die Definitionen

$$f^{*F} = \left. \frac{d}{dt} f^F \right|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = 0} \quad , \quad h^{*F} = \left. \frac{d}{dt} h^F \right|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = F^F \dot{\sigma}/c^F} \quad (4.44)$$

sowie mittels der Eigenschaften der Sprungfunktion $[\cdot]$ nach (4.23) die logischen Vorfaktoren

$$F^F := [f^F][f^{*F}] = \begin{cases} 1 & : \quad \text{Fall 2} \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (4.45)$$

¹Bei einer etwaigen Berücksichtigung dieses Effektes müßte die h^F -Funktion (4.38) modifiziert werden. Ein möglicher Ansatz könnte lauten: $h^F(\varepsilon^{iF}) = |\varepsilon^{iF}| - \frac{1}{2} \varepsilon_{sat} \left(1 + \left[\varepsilon^{iF} / |\varepsilon^{iF}| \right] \right)$. Jedoch kann der Ausdruck nicht ohne weiteres in tensorieller Form verallgemeinert werden.

und

$$H^F := \left[[-h^{*F}] - [h^F] \right] [-f^F] = \begin{cases} 1 & : \text{sonst} \\ 0 & : \text{Fall 3} \vee f^F > 0 \end{cases} \quad (4.46)$$

eingeführt werden. Mit ihrer Hilfe kann nun

$$\dot{\varepsilon}^{iF} = F^F H^F \frac{\dot{\sigma}}{c^F}, \quad (4.47)$$

die geschlossene Form für die Evolutionsgleichung der remanenten ferroelastischen Dehnung angegeben werden.

In Bild 4.4 ist die bilineare Approximation der ferroelastischen Hysterese mit den hier eingeführten Materialgleichungen und den zugehörigen Materialparametern aus Tabelle 4.1 dargestellt.

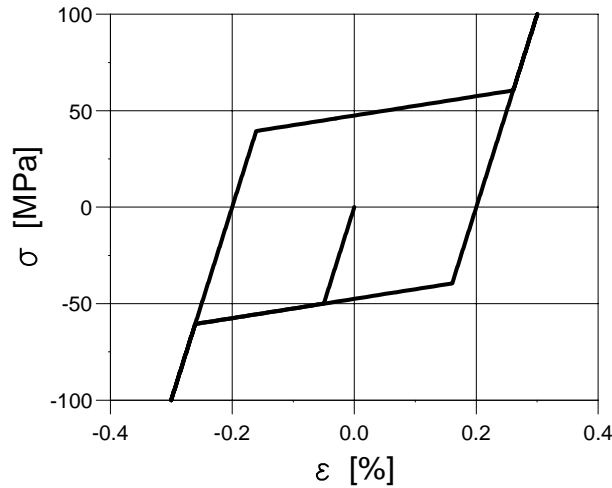


Bild 4.4: Durch numerische Integration des eindimensionalen Materialmodells ergibt sich die bilineare Approximation der ferroelastischen Hysterese.

Ausgehend von einem ungepolten Materialzustand ist zu Beginn für eine Druckbelastung ein linear elastischer Bereich zu erkennen ($|\sigma| < \sigma_c$). Erst wenn die angreifende Druckspannung die Koerzitivspannung σ_c überschreitet, setzt der irreversible Prozeß, d.h. die Bildung von remanenter ferroelastischer Dehnung ε^{iF} , ein. Dieser Dehnungsanteil entwickelt sich solange, bis die Sättigung $|\varepsilon^{iF}| = \varepsilon_{sat}$ erreicht ist. Das entspricht dann einem im Sättigungszustand vollständig erschöpften Reservoir an umklappbaren Domänen. Im weiteren stellt sich dann linear elastisches Materialverhalten ein. Bei Entlastung der Spannung bleibt im Material nun eine bleibende Dehnung ε_{sat} zurück.

Die Steigung des anfänglichen und gesättigten linear elastischen Bereiches ist aufgrund der Isotropie des Elastizitätstensors (3.14) identisch und entspricht dem Elastizitätsmodul Y . Im inelastischen Zwischenbereich stellt sich die Steigung $1/(1/Y + 1/c^F)$ ein.

4.4 Elektromechanische Kopplung

Bisher wurden zwei voneinander getrennte Materialmodelle betrachtet, zum einen für rein elektrische und zum anderen für rein mechanische Belastungen. Bei der Kopplung des rein ferroelektrischen und des rein ferroelastischen Teilmodells zu einem gemeinsamen elektromechanischen Materialmodell sind zusätzliche Gleichungen notwendig.

4.4.1 Beschränkung der remanenten ferroelastischen Dehnung

Aufgrund einer gekoppelten elektromechanischen Belastung kann folgende Situation eintreten: Ein elektrisches Feld ruft eine zugehörige remanente ferroelektrische Dehnung in Feldrichtung hervor ($\varepsilon^{\text{iP}} = \varepsilon_{\text{sat}}$). Desweiteren könnte gleichzeitig auch eine mechanische Belastung vorhanden sein, die, ebenfalls in Feldrichtung orientiert, ihrerseits eine remanente ferroelastische Dehnung induziert ($\varepsilon^{\text{iF}} = \varepsilon_{\text{sat}}$). Nach Gleichung (4.8) ergibt sich dann eine gesamte remanente Dehnung

$$\varepsilon^{\text{i}} = \varepsilon^{\text{iP}} + \varepsilon^{\text{iF}} = 2\varepsilon_{\text{sat}} \quad (4.48)$$

in Höhe von $2\varepsilon_{\text{sat}}$.

Da die remanente Dehnung ε^{i} ein Maß für die Verzerrung durch umorientierte Domänen ist, stellt dies ein Widerspruch zu den Vorstellungen über die Domänenprozesse dar. Das Reservoir aller umklappbaren Domänen kann sich nicht verändern und ist unabhängig von der Art der Belastung. Es muß daher also für alle Arten von Belastungen zu jeder Zeit die Nebenbedingung

$$|\varepsilon^{\text{i}}(t)| \leq \varepsilon_{\text{sat}} \quad (4.49)$$

gelten. Aufgrund der Dreiecksungleichung (BRONSTEIN und SEMENDJAJEW [56]) gilt

$$|\varepsilon^{\text{i}}| = |\varepsilon^{\text{iP}} + \varepsilon^{\text{iF}}| \leq |\varepsilon^{\text{iP}}| + |\varepsilon^{\text{iF}}| \quad , \quad (4.50)$$

so daß die Nebenbedingung (4.49) prinzipiell durch die Beschränkung einer der beiden Dehnungsanteile ε^{iP} oder ε^{iF} in die Modellgleichungen eingebaut werden kann.

Um die richtige Wahl motivieren zu können, wird die folgende phänomenologische Betrachtung eines Domänenprozesses durchgeführt: Es wird davon ausgegangen, daß die Nebenbedingung durch eine Beschränkung auf der ferroelektrischen Seite, also ε^{iP} , erzwungen wird. Eine hinreichend große mechanische Zugspannung bewirkt eine komplette Orientierung aller Domänen in Belastungsrichtung und damit die Bildung einer remanenten Verzerrung bis zur ihrer Sättigung ($\varepsilon^{\text{i}} = \varepsilon^{\text{iF}} = \varepsilon_{\text{sat}}$). Bei diesem Prozeß bildet sich keine makroskopisch remanente Polarisation. Wird jetzt, um das Material bleibend zu polen, ein elektrisches Feld angelegt, so würden die Materialgleichungen, unter Berücksichtigung der hier eingebrachten Nebenbedingung (4.49), dieses nicht zulassen. Grund hierfür ist, daß mit der Bildung einer remanenten Polarisation P^{i} eine zugehörige remanente Dehnung

ε^{iP} induziert wird. ε^{iP} kann sich aber nicht entwickeln, da bereits die gesamte remanente Dehnung $\varepsilon^{\text{i}} = \varepsilon^{\text{iF}}$ gesättigt ist. Physikalisch ist in dieser mechanischen Belastungssituation jedoch eine Polung des Polykristalls durch ein hinreichend starkes elektrisches Feld zu erwarten.

Dieses Gedankenexperiment liefert die Motivation, die Nebenbedingung (4.49) nicht auf der ferroelektrischen, sondern auf der ferroelastischen Seite zu berücksichtigen. Durch die Bedingung

$$|\varepsilon^{\text{iF}}| \leq \varepsilon_{\text{sat}}^{\text{iF}} = \varepsilon_{\text{sat}} - |\varepsilon^{\text{iP}}| \quad (4.51)$$

wird dem Betrag der ferroelastisch induzierten Dehnung $|\varepsilon^{\text{iF}}|$ nur jener Freiraum $\varepsilon_{\text{sat}}^{\text{iF}}$ gegeben, den die ferroelektrische remanente Dehnung $|\varepsilon^{\text{iP}}|$ bis zur Sättigung ε_{sat} zur Verfügung stellt.

Aufgrund (4.51) muß die h^{F} -Funktion (4.38) angepaßt und das vorhandene konstante Reservoir ε_{sat} der induzierten ferroelastischen Dehnung in (4.38) durch $\varepsilon_{\text{sat}}^{\text{iF}}$ ersetzt werden:

$$h^{\text{F}}(\varepsilon^{\text{iF}}, P^{\text{i}}) = |\varepsilon^{\text{iF}}| - (\varepsilon_{\text{sat}} - |\varepsilon^{\text{iP}}|) = |\varepsilon^{\text{iF}}| - \varepsilon_{\text{sat}} \left(1 - \frac{|P^{\text{i}}|}{P_{\text{sat}}}\right) \quad (4.52)$$

In (4.52) wurde ε^{iP} durch P^{i} nach Gleichung (4.9) ersetzt.

Die Modifikation der h^{F} -Funktion ändert auch die bisher angegebene Konsistenzbedingung (4.42) insofern ab, daß sie nun über die remanente Polarisation P^{i} an eine elektrische Größe gekoppelt ist. Damit treten weitere Terme in der Evolutionsgleichung für die remanente ferroelastische Dehnung $\dot{\varepsilon}^{\text{iF}}$ auf, die in Abschnitt 4.4.4 zusammen mit weiteren Effekten in einer zusammengefaßten Darstellung der Evolutionsgleichung $\dot{\varepsilon}^{\text{iF}}$ angeben und diskutiert werden.

4.4.2 Mechanische Depolarisation

Ein wichtiges nichtlineares elektromechanisches Kopplungsphänomen ist der Zusammenhang zwischen der Polarisation und der mechanischen Spannung. Aus experimentellen Untersuchungen von z.B. SCHÄUFELE und HÄRDTL [44, 38] ist bekannt, daß eine hinreichend große mechanische Druckspannung in der Lage ist, die makroskopisch remanente Polarisation zu reduzieren. Damit verliert das Material seine piezoelektrischen Eigenschaften und die Möglichkeit, seine vorgesehenen Aufgaben zu erfüllen.

Mittels der Sättigungspolarisation P_{sat} in der h^{P} -Funktion wird jene obere Schranke festgelegt, die der Betrag der remanenten Polarisation maximal erreichen kann. Es liegt nun nahe, diesen Grenzwert so zu modifizieren, daß er in allgemeiner Form von den beiden äußeren Größen Spannung σ und elektrischem Feld E sowie über die remanente Polarisation P^{i} von der Belastungsgeschichte abhängt. Daher wird der konstante Materialparameter P_{sat} durch eine Funktion \hat{P}_{sat} ersetzt und aus (4.17) ergibt sich eine neue, allgemeine Form

$$h^{\text{P}}(\sigma, E, P^{\text{i}}) = |P^{\text{i}}| - \hat{P}_{\text{sat}}(\sigma, E, P^{\text{i}}) \quad (4.53)$$

Für die Größe \hat{P}_{sat} muß zusätzlich die Randbedingung

$$\hat{P}_{sat}(\sigma, 0, P^i) = P_{sat} \quad \text{für} \quad \sigma \geq -\sigma_c \quad (4.54)$$

gelten, da nur Druckspannungen unterhalb des Grenzwertes der Koerzitivspannung $-\sigma_c$ mechanisch depolarisierende Eigenschaften besitzen sollen.

Für \hat{P}_{sat} werden im folgenden zwei einfache Funktionen, ein *exponentieller Ansatz*

$$\hat{P}_{sat}(\sigma) = P_{sat} e^{-\frac{1}{m}\langle -\sigma - \sigma_c \rangle} \quad (4.55)$$

sowie ein *linearer Ansatz*

$$\hat{P}_{sat}(\sigma) = (P_{sat} - P_\delta) \left\langle 1 - \frac{1}{m}\langle -\sigma - \sigma_c \rangle \right\rangle + P_\delta \quad (4.56)$$

vorge stellt. Für die MACCAULEY-Klammer gilt hierbei die Eigenschaft

$$\langle x \rangle = \begin{cases} x & : x \geq 0 \\ 0 & : x < 0 \end{cases} . \quad (4.57)$$

Die beiden Ansätze (4.55) und (4.56) sind unabhängig vom elektrischen Feld und der remanenten Polarisation gewählt und erfüllen die Randbedingung (4.54). Es entspricht P_{sat} der zuvor eingeführten *Sättigungspolarisation* und σ_c der *Koerzitivspannung*. Der positive Materialparameter m ist ein Maß für die Stärke des Einflusses, mit der die remanente Polarisation reduziert wird.

Ein entscheidender Unterschied zwischen den beiden Ansätzen liegt darin, daß eine hinreichend große Druckspannung im exponentiellen Ansatz (4.55) die remanente Polarisation nahezu eliminiert, während im linearen Ansatz (4.56) immer eine *remanente Restpolarisation* P_δ verbleibt.

Die Erweiterung des h^P -Kriterium um den mechanischen Depolarisationsprozeß führt zu Änderungen in der Evolutionsgleichung der remanenten Polarisation. Diese werden ebenso in Abschnitt 4.4.4 zusammen mit anderen Effekten in einer allgemeinen Darstellung für \dot{P}^i angegeben.

In Bild 4.5 ist der mechanische Depolarisationsprozeß für die beiden Ansätze (4.55) und (4.56) dargestellt. Ausgehend von einem vollständig gepolten und unbelasteten Materialzustand wird in dessen Polarisationsrichtung eine hinreichend große mechanische Druckspannung aufgebracht und die sich einstellende Entwicklung der Polarisation betrachtet. Die verwendeten Materialparameter können Tabelle 4.1 entnommen werden.

Aufgrund des Polungsprozesses bleibt eine Sättigungspolarisation vom Wert $P_{sat} = 300 \text{ mC/m}^2$ zurück (horizontaler Kurvenverlauf bis $(\sigma, P) = (0, P_{sat})$). Die einsetzende monoton anwachsende Druckspannung in Polarisationsrichtung führt zu Beginn zu einem linear piezoelektrischen Verhalten proportional $1/d$. Unterschreitet die Druckspannung die Koerzitivspannung ($\sigma < -\sigma_c$) setzt eine Reduktion der remanenten Polarisation ein.

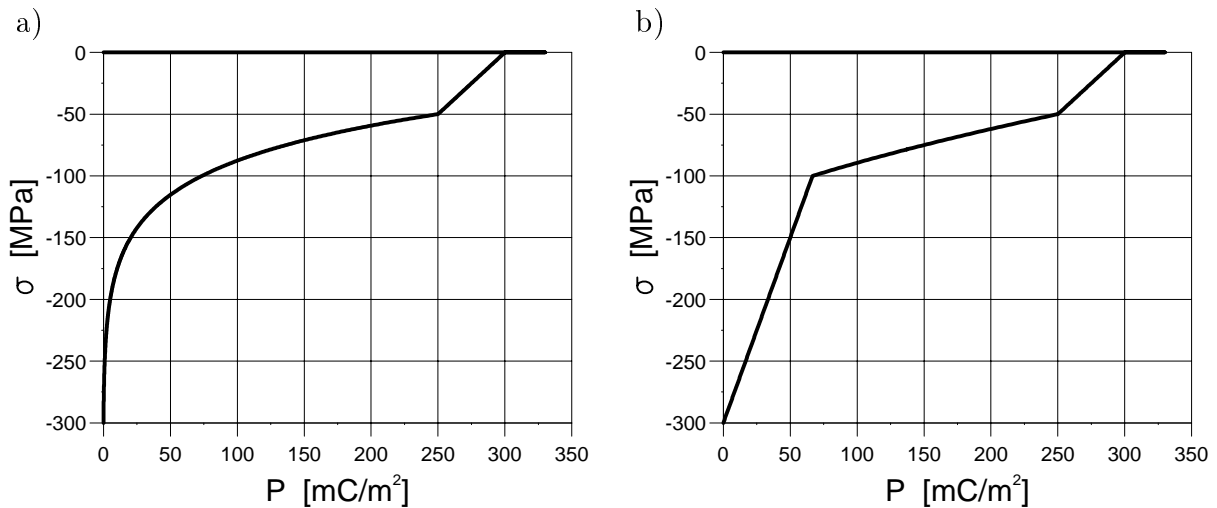


Bild 4.5: Mechanische Depolarisation eines vollständig gepolten Materials durch eine in Polungsrichtung wirkende mechanische Druckspannung:

a) Exponentieller Ansatz nach Gleichung (4.55): Die gesamte remanente Polarisation wird nahezu eliminiert.

b) Linearer Ansatz nach Gleichung (4.56): Aufgrund von P_δ verbleibt eine remanente Polarisation, die bei weiterer Spannungszunahme einen von Null verschiedenen, linear piezoelektrischen Effekt bewirkt.

Für den exponentiellen Ansatz (Bild 4.5a) strebt für hohe Druckspannungen die remanente Polarisation gegen Null. Dies entspricht praktisch einem vollständig depolarisierten Material, das keine piezoelektrischen Eigenschaften mehr besitzt und somit ein elektromechanisch entkoppeltes Verhalten zeigt.

Das Verhalten mit linearem Ansatz weist einen anderen Verlauf auf (Bild 4.5b). Zwar wird ebenfalls für hohe Druckspannungen die remanente Polarisation reduziert, doch aufgrund des positiven Parameters P_δ bleibt eine remanente Restpolarisation P_δ im Material zurück. Diese kann auch für noch höhere Druckspannungen nicht mehr verändert werden und führt im weiteren zu einem linear piezoelektrischen Verhalten proportional $(P_\delta/P_{sat}) d$.

4.4.3 Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld

Der Einfluß des elektrischen Feldes auf das Verhalten bei mechanischer Depolarisation, ist ein weiteres elektromechanisches Kopplungsphänomen. Experimentelle Untersuchungen von SCHÄUFELE und HÄRDTL [44] haben gezeigt, daß überlagerte elektrische Felder das Einsetzen mechanischer Depolarisation beeinflussen. So unterstützen elektrische Felder in Polungsrichtung den Ausgangszustand, während entgegengesetzt orientierte elektrische Felder ein früheres Umklappen der Domänen bei mechanischer Depolarisation bewirken.

Die Grenze zwischen piezoelektrischem Verhalten und einsetzender Depolarisation, beschrieben durch die Koerzitivspannung, verschiebt sich in Abhängigkeit der Orientierung und der Größe des elektrischen Feldes. Dieser Effekt kann nach SCHÄUFELE und HÄRDTL als linear betrachtet werden.

Die Koerzitivspannung wird im weiteren nicht mehr als ein konstanter Materialparameter angesehen, sondern hängt vom elektrischen Feld E und der remanenten Polarisation P^i ab. Aus diesem Grund wird die Konstante σ_c in der f^F -Funktion (4.31) und in der \hat{P}_{sat} -Funktion (4.55) bzw. (4.56) durch die Materialfunktion

$$\hat{\sigma}_c(E, P^i) = \left\langle \sigma_c + n \frac{E}{E_c} \frac{P^i}{|P^i|} \right\rangle \quad (4.58)$$

ersetzt. σ_c beschreibt hierbei die kritische Umklappspannung ohne überlagertes elektrisches Feld und der nichtnegative Materialparameter n gewichtet den Einfluß des elektrischen Feldes auf den Beginn einsetzender mechanischer Depolarisation. Die Funktion $\langle \cdot \rangle$ (siehe Definition (4.57)) gewährleistet, daß $\hat{\sigma}_c$ niemals negative Spannungswerte bei Einsetzen der mechanisch induzierten Umklappprozesse annehmen kann.

Die Erweiterung durch die Materialfunktion (4.58) führt über die beiden modifizierten Fließkriterien $f^F(\sigma, E, P^i, \varepsilon^{iF})$ und $h^P(\sigma, E, P^i)$ zu weiteren Termen in der Evolutionsgleichung der inneren Variablen \dot{P}^i und $\dot{\varepsilon}^{iF}$. Diese Terme müssen über die Auswertung der Konsistenzbedingung und der zugehörigen Normalenregel bestimmt werden. Eine Zusammenfassung der sich somit ergebenden Evolutionsgleichungen für \dot{P}^i und $\dot{\varepsilon}^{iF}$ ist in Abschnitt 4.4.4 angegeben.

Mittels der Materialparameter aus Tabelle 4.1 wurde in Bild 4.6 der Einfluß von überlagertem elektrischem Feld auf das Einsetzen des Umklappprozesses bei mechanischer Depolarisation untersucht. Ausgehend von einem vollständig gepolten Zustand ($P = P_{sat}$) wird das elektrische Feld auf die verschiedenen angegebenen Werte gebracht (horizontale Linie bei $\sigma = 0$ MPa) und im weiteren dem Depolarisationsprozeß konstant überlagert. Danach setzt die Belastung durch die mechanische Druckspannung ein. In Bild 4.6 sind die entsprechenden Spannungs-Dehnungs-Verläufe für den exponentiellen Ansatz (4.55) dargestellt.

Aus dem Verlauf der verschiedenen Kurven sind zwei Effekte unterscheidbar: Ein elektrisches Feld, das in Richtung der Polarisation orientiert ist, wirkt der mechanischen Depolarisation entgegen. Der Ausdruck EP^i in Gleichung (4.58) ist für diesen Fall stets größer null ($EP^i > 0$) und erhöht somit die Koerzitivspannung $\hat{\sigma}_c$, die für das Einsetzen der Umklappprozesse verantwortlich ist. Dagegen unterstützt ein elektrisches Feld, das gegen die Polarisationsrichtung orientiert ist ($EP^i < 0$) die Depolarisation, da es die Koerzitivspannung $\hat{\sigma}_c$ erniedrigt.

Für hohe mechanische Druckspannungen nähern sich alle Verläufe der σ - ε -Kurven in Bild 4.6 asymptotisch einer Geraden. Sie ist gekennzeichnet durch eine gesättigte ferroelastische Dehnung ($\varepsilon^i = \varepsilon^{iF} = -\varepsilon_{sat}$) und einen vollständig depolarisierten Zustand

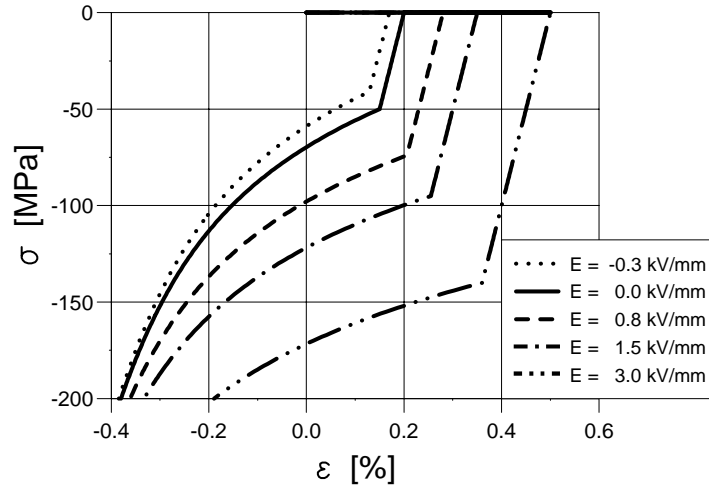


Bild 4.6: Untersuchung des Einflusses von konstantem überlagertem elektrischen Feld auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten bei mechanischer Depolarisation. Die Reduktion der remanenten Polarisation wird hierbei durch den exponentiellen Ansatz (4.55) beschrieben.

($P^i = 0 \text{ mC/m}^2$). Aus den Gleichungen (4.3) und (4.5) ergibt sich die reversible Gerade mit der Steigung Y sowie dem Achsenabschnitt $\sigma = Y\varepsilon_{sat}$ für $\varepsilon = 0 \%$.

4.4.4 Allgemeine Darstellung der Evolutionsgleichungen

Für das Zusammenführen des ferroelektrischen und des ferroelastischen Teilmodells zu einem Gesamtmodell wurden drei elektromechanische Ergänzungen vorgenommen: Die Beschränkung der remanenten ferroelastischen Dehnung ε^{iF} , die mechanische Depolarisation und schließlich die Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld. Alle drei Modifikationen beeinflussen die Fließfunktionen und nehmen damit Einfluß auf die Evolutionsgleichungen der remanenten Polarisation \dot{P}^i und der remanenten ferroelastischen Dehnung ε^{iF} , die in diesem Abschnitt zusammenfassend angegeben und diskutiert werden sollen.

Im folgenden wird zunächst der Einfluß der elektromechanischen Kopplung auf die Evolutionsgleichung der remanente Polarisation berücksichtigt.

Die bisherige f^P -Funktion wurde durch das Verschmelzen der beiden Teilmodelle nicht berührt, so daß für f^P weiterhin (4.10) mit den Evolutionsgleichungen (4.12) und (4.16) sowie den Belastungsbedingungen (4.11) und (4.15) gilt.

Die h^P -Funktion wurde aufgrund der Erweiterung durch den mechanischen Depolarisationsprozeß und den Einfluß der vom elektrischen Feld abhängigen Koerzitivspannung

modifiziert und lautet nun:

$$h^P(\sigma, E, P^i) = |P^i| - \hat{P}_{sat}(\sigma, E, P^i) \quad . \quad (4.59)$$

An Stelle der ursprünglichen Konsistenzbedingung (4.21) tritt nun die erweiterte Form

$$\frac{d}{dt} h^P(\sigma, E, P^i) = - \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \sigma} \dot{\sigma} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial E} \dot{E} \right) + \left(\frac{P^i}{|P^i|} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial P^i} \right) \dot{P}^i = 0 \quad , \quad (4.60)$$

wodurch weitere von der Spannungsgeschwindigkeit $\dot{\sigma}$ und der Geschwindigkeit des elektrischen Feldes \dot{E} abhängige Terme auftreten. Mit (4.60) und der Normalenregel des Falles 3 für \dot{P}^i (4.20) läßt sich ein neuer Proportionalitätsfaktor λ_h^P ermitteln. Damit kann die Evolutionsgleichung für die remanente Polarisation mit

$$\dot{P}^i = \left(\frac{P^i}{|P^i|} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial P^i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \sigma} \dot{\sigma} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial E} \dot{E} \right) \quad (4.61)$$

angegeben werden, die unter der Voraussetzung

$$h^P(\sigma, E, P^i) = 0 \quad \wedge \quad h^{*P} = \left. \frac{d}{dt} h^P \right|_{\dot{P}^i = F^P \dot{E}/c^P} > 0 \quad (4.62)$$

des dritten Falles gültig ist.

Die Differentialgleichungen (4.12), (4.16) und (4.61) lassen sich nun in eine allgemein gültige Darstellung der Evolutionsgleichung für die remanente Polarisation

$$\begin{aligned} \dot{P}^i &= F^P H^P \frac{1}{c^P} \dot{E} \\ &+ (1 - H^P) \left(\frac{P^i}{|P^i|} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial P^i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \sigma} \dot{\sigma} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial E} \dot{E} \right) \end{aligned} \quad (4.63)$$

zusammenfassen. Zu den Eigenschaften der Vorfaktoren F^P bzw. H^P siehe die Definitionen (4.25) bzw. (4.26). Mittels des Ausdruckes

$$F^P H^P = \begin{cases} 1 & : \text{ Fall 2} \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (4.64)$$

wird der Fall 2 vom Fall 3

$$(1 - H^P) = \begin{cases} 1 & : \text{ Fall 3} \vee f^P > 0 \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (4.65)$$

separiert.

Die Eigenschaften des ersten zu \dot{E} proportionalen Vorfaktors $F^P H^P$ in (4.63) wurden bereits bei seiner Einführung erläutert (siehe Diskussion nach Gleichung (4.27)). Mit ihm entwickelt sich \dot{P}^i unter der Belastungsbedingung (4.15) eines gültigen zweiten Falls.

Durch den zweiten Term in (4.63) wird der Einfluß sowohl der mechanischen Depolarisation als auch der feldabhängigen Koerzitivspannung auf die Entwicklung von \dot{P}^i berücksichtigt. Dieser Effekt ist immer dann wirksam, wenn der erste Term gerade deaktiviert

wurde, d.h. wenn die Voraussetzungen (4.62) für die h^P -Funktion (Fall 3) vorliegen. Aber erst eine Änderung der mechanischen Spannung zu einem Wert kleiner als die Koerzitivspannung ($\sigma < -\sigma_c$) hat Einfluß auf die Entwicklung der remanente Polarisation \dot{P}^i .

Die Evolutionsgleichung der remanenten ferroelastischen Dehnung $\dot{\varepsilon}^{iF}$ wird durch die beiden Kopplungsmechanismen, die Beschränkung der ferroelastischen Dehnung sowie die feldabhängige Koerzitivspannung, ergänzt. Durch die Berücksichtigung der Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld ergibt sich die modifizierte Form von (4.31)

$$f^F(\sigma, E, \varepsilon^{iF}, P^i) = |\sigma - c^F \varepsilon^{iF}| - \hat{\sigma}_c(E, P^i) \quad . \quad (4.66)$$

Die ursprüngliche Konsistenzbedingung (4.36) muß durch die Beziehung

$$\frac{d}{dt} f^F(\sigma, E, \varepsilon^{iF}, P^i) = \frac{\sigma - c^F \varepsilon^{iF}}{|\sigma - c^F \varepsilon^{iF}|} (\dot{\sigma} - c^F \dot{\varepsilon}^{iF}) - \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial E} \dot{E} + \frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial P^i} \dot{P}^i \right) = 0 \quad (4.67)$$

ersetzt werden, in der nun zusätzlich die Geschwindigkeit des elektrischen Feldes \dot{E} und der remanenten Polarisation \dot{P}^i auftaucht. Mittels der Normalenregel (4.35) wird ein neuer Proportionalitätsfaktor λ_f^F bestimmt, aus dem sich die Evolutionsgleichung im Fall 2 für die remanente ferroelastische Dehnung

$$\dot{\varepsilon}^{iF} = \frac{1}{c^F} \left(\dot{\sigma} - \frac{\sigma - c^F \varepsilon^{iF}}{|\sigma - c^F \varepsilon^{iF}|} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial E} \dot{E} + \frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial P^i} \dot{P}^i \right) \right) \quad (4.68)$$

ergibt. Sie ist unter der Voraussetzung

$$f^F(\sigma, E, \varepsilon^{iF}, P^i) = 0 \quad \wedge \quad f^{F*} = \frac{d}{dt} f^F \Big|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = 0} \geq 0 \quad (4.69)$$

gültig. Erwähnt sei, daß $\dot{\varepsilon}^{iF}$ in (4.68) noch eine Funktion von \dot{P}^i ist, so daß die Evolutionsgleichung der remanenten Polarisation (4.63) noch eingesetzt werden muß.

Mit der elektromechanischen Kopplung wird durch eine Modifikation der h^F -Funktion die Entwicklung der remanenten ferroelastischen Dehnung beschränkt. Nach (4.52) lautet die modifizierte h^F -Funktion

$$h^F(\varepsilon^{iF}, P^i) = |\varepsilon^{iF}| - \varepsilon_{sat} \left(1 - \frac{|P^i|}{P_{sat}} \right) \quad . \quad (4.70)$$

Aufgrund der Beschränkung in (4.70) ergibt sich eine neue Konsistenzbedingung zu

$$\frac{d}{dt} h^F(\varepsilon^{iF}, P^i) = \frac{\varepsilon^{iF}}{|\varepsilon^{iF}|} \dot{\varepsilon}^{iF} + \frac{\varepsilon_{sat}}{P_{sat}} \frac{P^i}{|P^i|} \dot{P}^i = 0 \quad , \quad (4.71)$$

die nun über die remanente Polarisation an eine elektrische Größe gekoppelt ist. Entsprechend muß ein neuer λ_h^F -Faktor für die Normalenregel (4.41) bestimmt werden, der im Fall 3 zu einer neuen Evolutionsgleichung für die remanente ferroelastische Dehnung

$$\dot{\varepsilon}^{iF} = - \frac{\varepsilon_{sat}}{P_{sat}} \frac{P^i}{|P^i|} \frac{\varepsilon^{iF}}{|\varepsilon^{iF}|} \dot{P}^i \quad (4.72)$$

unter der Belastungsbedingung

$$h^F(\varepsilon^{iF}, P^i) = 0 \quad \wedge \quad h^F = \left. \frac{d}{dt} h^F \right|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = F^F \dot{\sigma}/c^F} > 0 \quad (4.73)$$

an Stelle der Beziehung (4.39) und (4.40) tritt.

Die Evolutionsgleichungen (4.32), (4.68) und (4.72) können in der gemeinsamen Form

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}^{iF} &= F^F H^F \frac{1}{c^F} \left(\dot{\sigma} - \frac{\sigma - c^F \varepsilon^{iF}}{|\sigma - c^F \varepsilon^{iF}|} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial E} \dot{E} + \frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial P^i} \dot{P}^i \right) \right) \\ &- \left(1 - H^F \right) \frac{\varepsilon_{sat}}{P_{sat}} \frac{P^i}{|P^i|} \frac{\varepsilon^{iF}}{|\varepsilon^{iF}|} \dot{P}^i \end{aligned} \quad (4.74)$$

angegeben werden, wobei die Bedeutung des Vorfaktors F^F aus (4.45) und H^F aus (4.46) entnommen werden kann. Der Ausdruck

$$F^F H^F = \begin{cases} 1 & : \quad \text{Fall 2} \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (4.75)$$

ergibt sich im Fall 2 zu einem Wert eins, während

$$\left(1 - H^F \right) = \begin{cases} 1 & : \quad \text{Fall 3} \vee f^F > 0 \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (4.76)$$

Fall 3 berücksichtigt.

Der Ein- bzw. Ausschaltmechanismus des ersten Vorfaktors $F^F H^F$ in (4.74) ist unverändert geblieben. Der hintere Term von (4.74) ist nur dann aktiv, wenn gerade Fall 2 nicht gilt, d.h. wenn die Belastungsbedingung in (4.73) für die h^F -Funktion gegeben ist. Für \dot{P}^i muß selbst noch die eigene Evolutionsgleichung (4.63) in die Beziehung (4.74) für $\dot{\varepsilon}^{iF}$ eingesetzt werden.

Mit den hier motivierten Ergänzungen konnte das ferroelektrische und ferroelastische Teilmodell zu einem geschwindigkeitsunabhängigen, elektromechanischen Gesamtmodell gekoppelt werden. Die beiden Evolutionsgleichung (4.63) und (4.74) sind positiv homogen vom Grade eins in der Zeit und sonst nur von den Zustandsvariablen $(\sigma, E, \varepsilon^{iF}, P^i)$ abhängig. Auf diese Weise hängen sie indirekt über die beiden Fließregeln (4.22) und (4.43) von der Bedingung für Belastung und den jeweiligen elektrischen und mechanischen Fällen ab. Eine zusammenfassende Darstellung aller Gleichungen des eindimensionalen Materialmodells ist im Anhang A in übersichtlicher Form dargestellt.

4.5 Diskussion der Modellantwort

Mit der Herleitung der beiden Differentialgleichungen, der remanenten Polarisation \dot{P}^i und der remanenten ferroelastischen Dehnung $\dot{\varepsilon}^{iF}$ ist das Materialverhalten für beliebige Belastungen $\dot{\sigma}$ und \dot{E} eindeutig bestimmbar. Leider können die Evolutionsgleichungen

aufgrund ihrer Komplexität nicht analytisch gelöst werden. Um die Modellantwort für eine beliebig vorgegebene Geschwindigkeit der Spannung und des elektrischen Feldes zu erhalten, ist ein numerisches Integrationsverfahren heranzuziehen.

4.5.1 Numerisches Integrationsverfahren

Die beiden Evolutionsgleichungen stellen ein Differentialgleichungssystem dar, das positiv homogen vom Grad eins in der ersten Ableitung nach der Zeit ist. Mittels einer numerischen Integration der Differentialgleichungen kann für das System von Gleichungen eine Näherungslösung angegeben werden. Bei der numerischen Lösung handelt es sich jedoch immer um eine Näherung an das theoretisch exakte Ergebnis, die einen – wenn auch kleinen – Fehler besitzt. Diese Ungenauigkeit in den beiden zu bestimmenden inneren Variablen überträgt sich auf die Bestimmung der vier Funktionswerte f^P , h^P , f^F und h^F , aus denen wiederum die Vorfaktoren F^P , H^P , F^F und H^F für die Evolutionsgleichungen berechnet werden. Bei der Berechnung dieser Vorfaktoren werden die Fließfunktionen auf den Wert Null hin überprüft. Eine noch so kleine Ungenauigkeit kann zu einem falschen Vorfaktor und damit zu einer falschen Entwicklung der inneren Variablen \dot{P}^i und $\dot{\varepsilon}^{iF}$ führen. Für die numerische Realisierung ist die Einführung von Toleranzschranken bei der Bestimmung der vier Indikatorfunktionen $[f^P]$, $[h^P]$, $[f^F]$ und $[h^F]$ notwendig, aus denen der jeweils gültige Fall ermittelt wird.

Standardroutinen von ENGELN-MÜLLGES und REUTTER [57, 58] oder HARWELL [59] können aufgrund der vier Fließfunktionen und ihrer Einhaltung nicht verwendet werden. Es muß ein geeignetes Verfahren entwickelt werden, mit dem die hier vorliegende Problematik bewältigt und ein nahezu exaktes Ergebnis ermittelt werden kann.

Das in Kapitel 4.4 hergeleitete Differentialgleichungssystem stellt ein Anfangswertproblem aus zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung dar. Es kann allgemein als

$$\dot{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} \dot{P}^i(\sigma, E, P^i, \dot{\sigma}, \dot{E}) \\ \dot{\varepsilon}^{iF}(\sigma, E, \varepsilon^{iF}, P^i, \dot{\sigma}, \dot{E}, \dot{P}^i) \end{pmatrix} \quad (4.77)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} P^i(\sigma_0, E_0, P_0^i) \\ \varepsilon^{iF}(\sigma_0, E_0, \varepsilon_0^{iF}, P_0^i) \end{pmatrix} \quad (4.78)$$

im Integrationsintervall Δt mit $t \in [t_0, t_1]$ für $t_1 > t_0$ beschrieben werden.

In der Literatur ist eine Vielzahl von Verfahren zur numerischen Integration exemplarisch in TÖRNIG und SPELLUCCI [60] sowie HAIRER *et al.* [61] zu finden. Das hier vorliegende Anfangswertproblem wurde mit expliziten sowie impliziten Verfahren verschiedenster Ordnung gelöst. Eine ausführliche Angabe von RUNGE-KUTTA-FORMELN erster, zweiter und n -ter Ordnung ist bei FEHLBERG in [62, 63, 64] zu finden. Hierbei zeigte das explizite

KUTTA–MERSON–VERFAHREN vergleichsweise eine akzeptable Rechenzeit bei hoher Genauigkeit.

Die prinzipielle Vorgehensweise dieses Verfahrens ist es, ausgehend von bekannten Startgrößen \mathbf{y}_0 , eine Lösung am Ende des Zeitschrittes $t_1 = t_0 + \Delta t$ zu approximieren. Hierzu wird der Wert von $\dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}_0, t)$ an mehreren festgelegten Zwischenpunkten

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_1(t_0) &= \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}_0, t_0) \\
 \mathbf{K}_2(t_0 + \frac{1}{3}\Delta t) &= \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}_0 + \frac{1}{3}\Delta t \mathbf{K}_1, t_0 + \frac{1}{3}\Delta t) \\
 \mathbf{K}_3(t_0 + \frac{1}{3}\Delta t) &= \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}_0 + \frac{1}{6}\Delta t \mathbf{K}_1 + \frac{1}{6}\Delta t \mathbf{K}_2, t_0 + \frac{1}{3}\Delta t) \\
 \mathbf{K}_4(t_0 + \frac{1}{2}\Delta t) &= \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}_0 + \frac{1}{8}\Delta t \mathbf{K}_1 + \frac{3}{8}\Delta t \mathbf{K}_3, t_0 + \frac{1}{2}\Delta t) \\
 \mathbf{K}_5(t_0 + \Delta t) &= \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}_0 + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_1 - \frac{3}{2}\Delta t \mathbf{K}_3 + 2\Delta t \mathbf{K}_4, t_0 + \Delta t)
 \end{aligned} \tag{4.79}$$

im Zeitintervall $[t_0, t_1]$ berechnet (siehe BJÖRCK und DAHLQUIST [65]). Beim hier verwendeten Verfahren liegen die Stützpunkte bei t_0 , $t_0 + \frac{1}{3}\Delta t$, $t_0 + \frac{1}{2}\Delta t$ und $t_0 + \Delta t$. Eine entsprechend gewichtete Kombination dieser Zwischenergebnisse (4.79)

$$\mathbf{y}(t_0 + \Delta t) = \mathbf{y}_0 + \frac{1}{6}\Delta t \mathbf{K}_1 + \frac{2}{3}\Delta t \mathbf{K}_4 + \frac{1}{6}\Delta t \mathbf{K}_5 \tag{4.80}$$

wird dazu verwendet, eine gute Übereinstimmung mit der exakten Lösung am Intervallende t_1 zu erhalten. Der dabei auftretende Fehler ist von vierter Ordnung.

Bei der hier angewendeten Lösungsmethode wird eine Wahl des Zeitinkrementes benutzt, die sich an dem vorliegenden speziellen Problem orientiert. Aufgrund der bilinearen Approximation der realen Kurvenverläufe mittels dreier Bereiche wurden Ein- und Ausschaltmechanismen verwendet, die die rechte Seite der Evolutionsgleichungen entsprechend den Werten der Vorfaktoren F^P , H^P , F^F und H^F vorgeben.

Bei einem Belastungsprozeß tritt nun unvermeidlich der Fall ein, daß sich einer der vier Faktoren so ändert, daß die rechte Seite einer Evolutionsgleichung zu Beginn und am Ende des Intervalls nicht mehr dieselbe ist. Eine nicht speziell angepaßte Integration würde in diesem Fall zu riesigen numerischen Fehlern führen. Tritt diese Situation ein, so muß das Integrationsintervall soweit unterteilt werden, bis entweder kein Sprung auf der rechten Seite mehr auftritt oder bis eine vorgegebene Toleranz im Inkrement der Spannung bzw. des elektrischen Feldes unterschritten ist. Im letzteren Fall wird dann trotz eines Sprungs auf der rechten Seite der Evolutionsgleichung über das vorgegebene Intervall integriert. Damit wird das vorliegende Anfangswertproblem trotz Unstetigkeiten auf der rechten Seite der Differentialgleichung hinreichend genau berechnet.

4.5.2 Gestaffelte elektromechanische Belastungsgeschichte

Mittels des numerischen Integrationsverfahren ist die Möglichkeit gegeben, das Verhalten des eindimensionalen Materialmodells für beliebige, elektromechanische Belastungspfade

zu simulieren. Damit sind die sich ergebenden Kurvenverläufe auf ihre physikalische Plausibilität hin überprüfbar und können mit den Mechanismen der Domänenprozesse verglichen werden.

Am Beispiel einer komplexen elektromechanischen Belastungsgeschichte soll die Antwort der eindimensionalen Materialgleichungen einschließlich der Ergänzungen aufgrund der elektromechanischen Kopplung (Beschränkung der remanenten ferroelastischen Dehnung, mechanische Depolarisation sowie feldabhängige Koerzitivspannung) diskutiert werden (siehe auch BÖHLE *et al.* [66] sowie KAMLAH [37]). Für die auftretende mechanische Depolarisation wurde der exponentielle Ansatz (4.55) verwendet. Das Antwortverhalten des eindimensionalen Materialmodells auf dieselbe elektromechanische Belastungsgeschichte, jedoch ohne die Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld, ist in KAMLAH *et al.* [67, 54] diskutiert. Die zur Simulation notwendigen Materialparameter sind Tabelle 4.1 zu entnehmen.

In Bild 4.7a ist der komplette Belastungspfad des elektrischen Feldes sowie der mechanischen Spannung dargestellt und in fünf einzelne Schritte (A bis E) unterteilt.

Zu Beginn wird das elektrische Feld monoton erhöht, so daß eine vollständige Polung in Feldrichtung stattfinden kann (\rightarrow A). Bei konstant gehaltenem elektrischen Feld wird eine Druckspannung aufgebracht (\rightarrow B), die die Polung reduzieren soll. Im dritten Schritt (\rightarrow C) nimmt, während die mechanische Belastung weiter anliegt, das elektrische Feld auf die Hälfte seines ursprünglichen Wertes ab. Durch die komplette Wegnahme der Spannung (\rightarrow D) bei weiter anliegendem Feld findet eine mechanische Entlastung statt. Abschließend wird auch das elektrische Feld auf Null zurückgefahren (\rightarrow E).

Durch die Belastung des elektrischen Feldes im ersten Schritt (\rightarrow A) wird ein Polungsvorgang ausgelöst. Das Materialmodell zeigt bei diesem Prozeß eine Gesamtdehnung, die als horizontale Gerade aus dem Ursprung in Bild 4.7c zu erkennen ist. Die Dehnung ε setzt sich in diesem Fall aus einem rein linear piezoelektrische Anteil ε^r und einen Anteil ε^{iP} , induziert durch die entstehende remanente Polarisation, zusammen

$$\varepsilon = \varepsilon^r + \varepsilon^{iP} = d \frac{P^i}{P_{sat}} E + \varepsilon_{sat} \frac{|P^i|}{P_{sat}} . \quad (4.81)$$

Dies entspricht einem Materialverhalten, bei dem sich die Domänen remanent in Feldrichtung ausrichten, sobald das elektrische Feld die Koerzitivfeldstärke überschreitet. Dabei wird eine bleibende makroskopische Polarisation erzeugt. Ist diese gesättigt, können keine weiteren Umklappprozesse mehr stattfinden, und es schließt sich ein linear piezoelektrisches Verhalten an (vergleiche hierzu den numerischen Kurvenverlauf im oberen Ast in Bild 4.7b).

Die nun vorliegende remanente Polarisation P^i wird im zweiten Schritt durch mechanische Depolarisation (\rightarrow B) reduziert. Solange die angelegte Druckspannung σ dabei kleiner als die Koerzitivspannung ist, zeigt die numerische Simulation eine rein reversible Dehnungs-

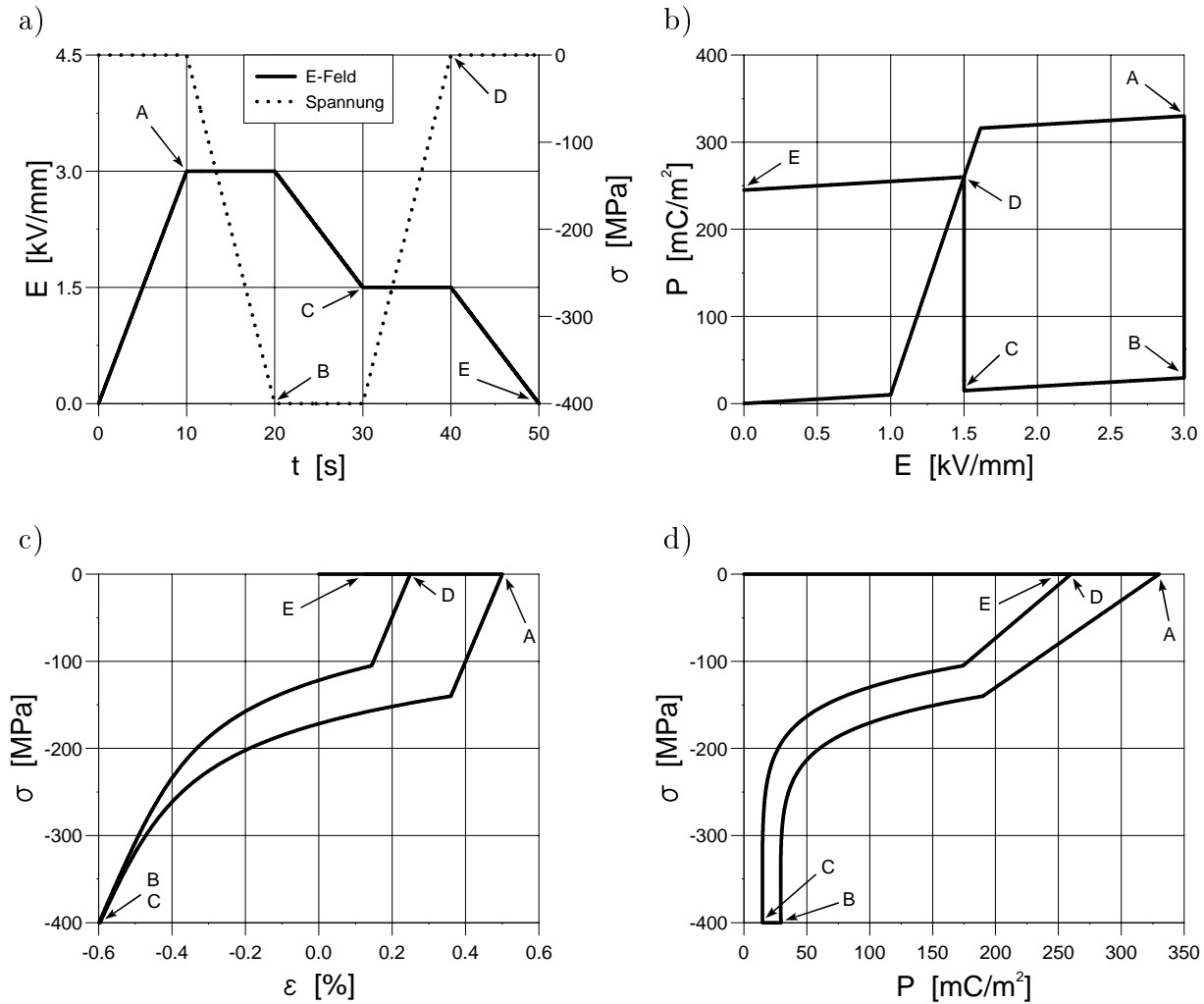


Bild 4.7: Verhalten des eindimensionalen Materialmodells für eine komplexe elektromechanische Belastungsgeschichte (Schritte A bis E):

- Belastungsablauf des elektrischen Feldes E sowie der mechanischen Spannung σ über der Zeit t .
- Ferroelektrisches Verhalten: Polarisation P über elektrischem Feld E .
- Ferroelastisches Verhalten: Spannung σ über Dehnung ε .
- Elektromechanische Kopplungsantwort: Spannung σ über Polarisation P .

und Polarisationsänderung. Hierbei ist ein linearer Kurvenverlauf in den beiden Bildern 4.7c und 4.7d mit der Steigung des Elastizitätsmodul Y bzw. mit $1/d$ zu erkennen. Dies entspricht einem linear piezoelektrischen Materialverhalten.

Die weitere Erhöhung der mechanischen Druckbelastung σ induziert in der Modellantwort einen exponentiellen Abfall der Polarisation in Lastrichtung. Dieser Kurvenverlauf ist in den beiden Bildern 4.7c und 4.7d deutlich zu erkennen. In Bild 4.7c nähert sich hierbei der Verlauf der Kurve asymptotisch einer Gerade mit dem Elastizitätsmodul als Steigung

und dem Achsenabschnitt $\varepsilon = -\varepsilon_{sat}$ für $\sigma = 0$ MPa. Am Ende dieses Schrittes (\rightarrow B) bleibt aufgrund des noch immer wirkenden elektrischen Feldes ein reversibler dielektrischer Polarisationsanteil εE zurück (Bild 4.7d). Physikalisch bedeutet dieser Prozeß, daß die angelegte mechanische Druckspannung gegen die fixierende Wirkung des elektrischen Feldes die Domänen zum Umklappen veranlassen kann. Dabei verteilen und orientieren sich die Domänen gleichmäßig in einer Ebene senkrecht zur Belastung, so daß sich dabei keine remanente Polarisation bilden kann. Das Umklappverhalten stellt sich hierbei erst beim Erreichen eines Grenzwertes ein, der aufgrund des überlagerten elektrischen Feldes größer als die Koerzitivspannung ist.

Der verbleibende reversible Anteil der Polarisation wird nun im nächsten Schritt (\rightarrow C) durch eine Reduktion des immer noch anliegenden elektrischen Feldes linear auf die Hälfte verringert. Da die mechanische Druckspannung die gesamte remanente Polarisation P^i eliminiert hat, ist die Dehnung vom elektrischen Feld entkoppelt (in Bild 4.7c liegen die Punkt B und C aufeinander). Dies entspricht einem linear dielektrischen Materialverhalten.

Im vierten Belastungsschritt (\rightarrow D) wird die mechanische Druckspannung bei anliegendem elektrischen Feld vollständig entfernt. Überschreitet die Druckspannung dabei einen kritischen Grenzwert (Knick im Kurvenverlauf in Bild 4.7c), zeigt die Modellantwort erneut ein linear piezoelektrischen Kurvenverlauf. Dieser Grenzwert ist aufgrund des jetzt geringeren überlagerten elektrischen Feldes vom Betrag her kleiner als bei der mechanischen Druckbelastung (\rightarrow B).

Dies entspricht einem Materialverhalten, bei dem es aufgrund der Überlagerung eines elektrischen Feldes erneut zur Ausrichtung von Domänen kommt. Ein erneuter Orientierungsprozeß tritt ein, da der Einfluß der mechanischen Last auf die Orientierung der Domänen senkrecht zur Druckspannungsrichtung kleiner als die Wirkung zur erneuten Ausrichtung nach dem elektrischen Feld ist. In Richtung des wirkenden elektrischen Feldes wird eine remanente Polarisation induziert. Da das elektrische Feld nur halb so groß wie beim ersten Polungsprozeß ist, können nicht mehr alle Domänen in Feldrichtung orientiert werden. Damit kann sich die remanente Polarisation nicht mehr bis zu ihrer Sättigung entwickeln. Dies zeigt sich in der numerischen Simulation im Punkt D in Bild 4.7b, bei dem der Kurvenverlauf auf dem Schnittpunkt mit der Neukurve zum Stehen kommt.

Abschließend verschwindet nun auch das elektrische Feld (\rightarrow E) und mit ihm alle reversiblen Polarisations- und Dehnungsanteile. Einzig die beiden remanenten Anteile, die remanente Polarisation P^i und die remanente Dehnung ε^i verbleiben im Punkt E.

Das zugehörige experimentelle Materialverhalten unter einer vergleichbaren elektromechanischen Belastungsgeschichte wurde von ALATSATHIANOS [39] an kompakten PZT-Proben untersucht. Er konnte das in Bild 4.7 dargestellte komplexe Verhalten qualitativ bestätigen.

4.5.3 Asymmetrische elektrische Belastung

In Experimenten, bei denen ungepolte ferroelektrische Keramiken erstmals einem elektrischen Feld ausgesetzt werden, tritt unter Umständen ein unsymmetrischer Kurvenverlauf der dielektrischen Hysterese sowie der Schmetterlingshysterese auf. Diese Unsymmetrie bei PZT's wurde von ALATSATHIANOS [39] und MÜLLER [68] experimentell beobachtet. Von GHANDI und HAGOOD [69] ist eine horizontale Verschiebung der dielektrischen Hysterese und von YANG und PAYNE [70] sowie PAN *et al.* [71] jeweils eine vertikale Verschiebung der Schmetterlingshysterese mit einem verkümmerten Flügel beobachtet worden.

Ausgehend von einem ungepolten Materialzustand wird die Keramik im Experiment mit einem zyklischen elektrischen Feld symmetrisch um seinen Nullpunkt belastet. Es stellen sich Hysteresen ein, die nicht mehr punktsymmetrisch zum Achsenursprung orientiert sind. Ein Ast der Hysterese ist nicht voll ausgebildet und der Schwerpunkt der Hysterese fällt nicht mehr mit dem Achsenursprung zusammen. Dieser Effekt könnte so verstanden werden: Der Polykristall zeigt eine Art 'Gedächtniseffekt', kann sich also an den ersten Polungsprozeß und dessen Richtung erinnern. Bei dieser ersten Belastung prägen die Domänen ihre Umgebung, so daß ihnen bei weiterer zyklischer Belastung zusätzlich ein inneres, konstantes elektrisches Feld überlagert ist (siehe CARL und HÄRDTL [72] sowie NEUMANN [73]).

Obwohl das phänomenologische Materialmodell solche Effekte nicht voraussagt, ist eine Untersuchung dieses Phänomens interessant. Durch die zyklische Belastung mit einem asymmetrischen elektrischen Feld soll das Verhalten des Materialmodells untersucht werden. Die sich dabei einstellende dielektrische Hysterese sowie die zugehörige Schmetterlingshysterese sind in Bild 4.8 dargestellt.

Das elektrische Feld wurde zyklisch vorgegeben: $\{0.0, -3.0, 1.3, -3.0\}$ kV/mm, so daß dem Lastzyklus ein konstantes negatives elektrisches Feld in Höhe von $E_{Mittel} = -0.85$ kV/mm überlagert ist. Der Betrag des überlagerten Feldes ist hierbei geringfügig unter der Koerzitivfeldstärke gewählt worden ($|E_{Mittel}| < E_c$), damit in positiver sowie in negativer Feldrichtung eine remanente Polarisation aufgebaut werden kann. Die zugehörigen Materialparameter für die Simulation können aus Tabelle 4.1 entnommen werden.

In Bild 4.8a ist die sich einstellende dielektrische Hysterese dargestellt. Es zeigt sich in positiver Feldrichtung eine nicht voll ausgebildete Hysterese. Vor Erreichen des Sättigungszustandes wurde die Wirkung des elektrischen Feldes wieder zurückgenommen. Würde bei diesem Kurvenverlauf der Ursprung des P - E -Koordinatensystems in den Schwerpunkt S der Hysterese gelegt werden (Kreuzungspunkt der beiden gepunkteten Linien), so wäre festzustellen, daß sich der Schwerpunkt in Richtung negativer elektrischer Felder verschiebt (nach links in Richtung von E_{Mittel}). Die Ermittlung der Kenngrößen P_{sat} aus der Form der Hysterese würde jetzt eine Sättigungspolarisation von ca. 225 mC/m² ergeben. Dies entspricht nur noch etwa zwei Drittel des tatsächlichen Wertes P_{sat} in Tabelle 4.1.

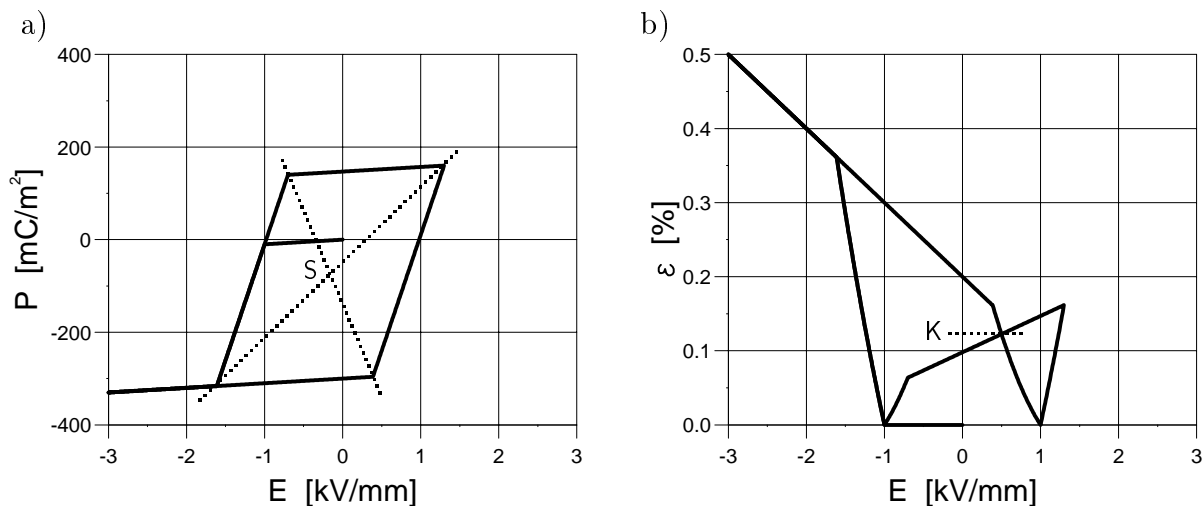


Bild 4.8: Antwortverhalten des Materialmodells bei einer zyklischen Belastung mit einem asymmetrischen elektrischen Feld:

- a) Dielektrische Hysterese mit eingezeichnetem Schwerpunkt S (gepunktete Linien).
- b) Schmetterlingshysterese.

In einem vergleichbaren Experiment, das von solchen Bedingungen ausgeht, erscheint die maximal mögliche Polung der ferroelektrischen Keramik kleiner als sie in Wirklichkeit ist. Bei der Ermittlung der Koerzitivfeldstärke aus den Kurvenverläufen ist eine Verschiebung des Wertes nicht festzustellen, so daß der unsymmetrische Kurvenverlauf auf ihn keinen Einfluß ausübt.

Die zugehörige Schmetterlingshysterese bei dieser asymmetrischen Belastung ist in Bild 4.8b dargestellt. Sie zeigt einen so stark verkümmerten rechten Flügel, daß im Bereich positiver elektrischer Feldstärke kein linear piezoelektrischer Kurvenverlauf zu beobachten ist. Würde die Sättigungsdehnung als Kreuzungspunkt K zwischen dem rechten und linken Flügel gesetzt werden, so ergäbe sich nur noch einen Wert von ca. 0.12 %. Gegenüber 0.2 % Sättigungsdehnung in der Simulation, entspricht dies weniger als zwei Drittel des ursprünglichen Wertes.

4.5.4 Ferroelektrische Hysteresen bei überlagerter mechanischer Druckspannung

Häufig werden in Anwendungen ferroelektrische Aktuatoren elektrisch betrieben, wobei sie einer mechanischen Last in Polungsrichtung unterworfen sind. Aufgrund der überlagerten mechanischen Belastung zeigen die Aktuatoren eine Verschlechterung des piezoelektrischen Effektes. LYNCH [36] untersuchte an gepolten PLZT's das elektromechanische Verhalten unter zyklischer Belastung durch ein elektrisches Feld mit gleichzeitig überlagerter

Druckspannung parallel zur Polungsrichtung.

Das Antwortverhalten des eindimensionalen Materialmodells soll in diesem Abschnitt mit den aus der Literatur bekannten Experimenten verglichen werden. Für das Materialmodell wurden die kompletten eindimensionalen Beziehungen sowie für die mechanische Depolarisation der exponentielle Ansatz (4.55) verwendet. Aus Tabelle 4.1 können die entsprechenden Materialparameter entnommen werden. Da keine experimentelle Bestimmung der Materialparameter für das vorgestellte Modell durchgeführt wurde, ist nur der qualitative Vergleich der Modellantwort mit den experimentellen Kurven möglich.

Die gekoppelte Belastungsgeschichte ist in der numerischen Simulation in drei Schritte aufgeteilt. Ausgehend von einem ungepolten Zustand wird zu Beginn ein elektrisches Feld angelegt, bis sich eine gesättigte Polarisation eingestellt hat. Nach der anschließenden Entlastung liegt ein gepolter und unbelasteter Zustand vor.

Im zweiten Schritt wird eine mechanische Druckspannung in Polungsrichtung bis zu einem definierten Wert aufgebracht und der weiteren Lastgeschichte konstant überlagert. Die Höhe des Spannungsendwertes variiert für die verschiedenen Simulationen. Exemplarisch wurden für die Endwerte zwei Haltepunkte gewählt: Ein moderater sowie ein sehr hoher Wert. Bild 4.9a zeigt die Druckspannungs-Dehnungs-Kurve mit den eingezeichneten Haltepunkte F und H für die experimentellen Untersuchungen Haltepunkte A und B der

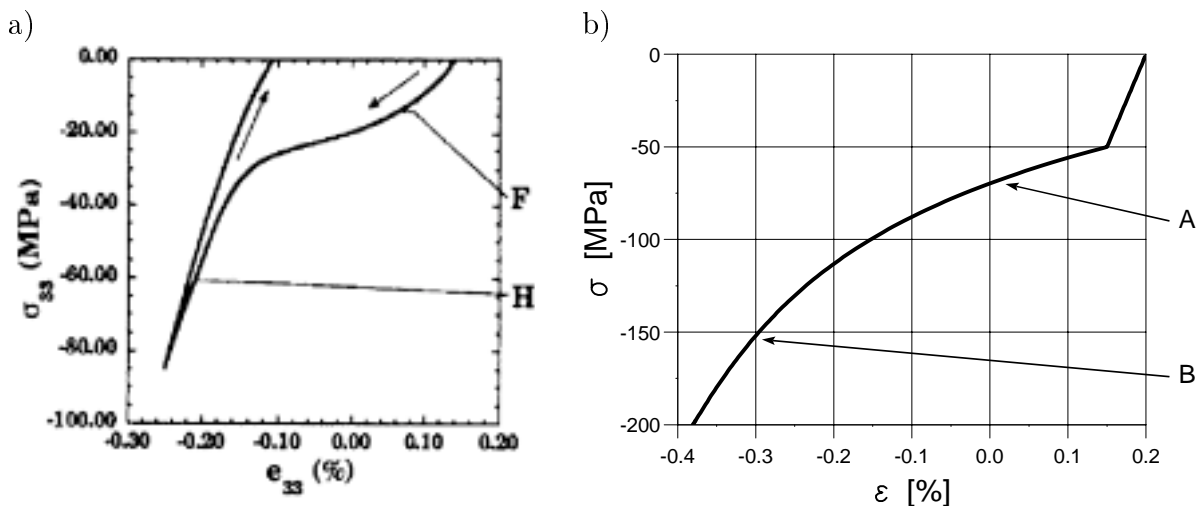


Bild 4.9: Druckspannungs-Dehnungs-Kurven mit eingezeichneten Haltepunkten, an denen die Spannung konstant gehalten und anschließend das elektrische Feld zyklert wird. Der erste Haltepunkt entspricht hierbei einer moderaten mechanischen Belastung, während der zweite Haltepunkt hohen mechanischen Einfluß auf das weitere Materialverhalten repräsentieren soll.

a) Haltepunkte F und H der Druckspannung der experimentellen Untersuchungen von LYNCH [36].

b) Haltepunkte A und B der Druckspannung für die numerische Simulation.

numerischen Simulation.

Im dritten Schritt findet die zyklische Belastung durch das elektrische Feld statt, um den Einfluß der überlagerten mechanischen Druckspannung auf die sich einstellenden ferroelektrischen Hysteresen zu untersuchen.

In Bild 4.10 sind die dielektrischen Hysteresen für unterschiedlich überlagerte mechanische Druckspannung zum Vergleich zwischen der experimentellen Beobachtung und der Modellantwort dargestellt.

Bild 4.10a und Bild 4.10b zeigen das dielektrische Hystereseverhalten unter einer moderaten mechanischen Druckspannung. Liegt eine hohe überlagerte Druckspannung vor, so ist ihr Einfluß auf die dielektrische Hysterese in Bild 4.10c und 4.10d entsprechend größer.

Aus dem Verlauf der experimentellen und der numerisch simulierten Hysteresen kann folgendes festgestellt werden. Die remanent im Material verbleibende Polarisation (an der Stelle $E = 0 \text{ kV/mm}$) nimmt für höhere überlagerte Druckspannungen kontinuierlich ab. Bereits bei elektrischer Entlastung zeigt das Materialmodell nicht mehr nur ein rein linear dielektrisches Verhalten. Eine moderate überlagerte Druckspannung löst während der elektrischen Entlastung den Prozeß der mechanischen Depolarisation aus. Damit bleibt nach Entlastung eine kleinere Polarisation ($P < P_{sat}$ für $E = 0 \text{ kV/mm}$) zurück.

Das Experiment sowie die Modellantwort zeigen im Scheitelpunkt der elektrischen Belastung, daß die maximal erreichbare Polarisation durch höhere mechanische Druckspannungen deutlich reduziert wird. Unter der Wirkung einer hohen Druckspannung können sich im Polykristall kaum noch Domänen in Richtung des elektrischen Feldes ausrichten, so daß damit keine vollständige Polung mehr erreicht werden kann.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß für zunehmende überlagerte mechanische Druckspannungen die dielektrische Hysterese gestaucht und flacher orientiert wird. Unter extremer mechanischer Last kann sie sogar völlig verschwinden.

In Bild 4.11 sind die zugehörigen Schmetterlingshysteresen der experimentellen sowie der numerisch ermittelten Kurven dargestellt. Es symbolisieren die Bilder 4.11a und 4.11b das charakteristische Verhalten unter einer moderaten Druckspannung, während Bild 4.11c und Bild 4.11d den Verlauf unter dem Einfluß großer mechanischer Last zeigt.

Die physikalischen Mechanismen, die hier das Verhalten beeinflussen, sind dieselben wie gerade beschrieben, so daß im weiteren nur auf die entsprechenden Unterschiede in den Kurvenverläufen hingewiesen wird.

Aus den vier Hysteresen ist erkennbar, daß mit zunehmenden überlagerten mechanischen Druckspannungen der verbleibende Dehnungswert an der Stelle $E = 0 \text{ kV/mm}$ immer mehr abnimmt. Dies ist im Kurvenverlauf der numerischen Simulation (Bild 4.11b) daran erkennbar, daß sich bei elektrischer Entlastung nach dem linear piezoelektrischen Verlauf ein nichtlinearer Bereich mit mechanischer Depolarisation anschließt.

Da sich die Gesamtdehnung des Materialmodells aus elektrisch induzierten sowie mechanisch induzierten Dehnungsanteilen zusammensetzt, verschiebt sich die Hysterese unter

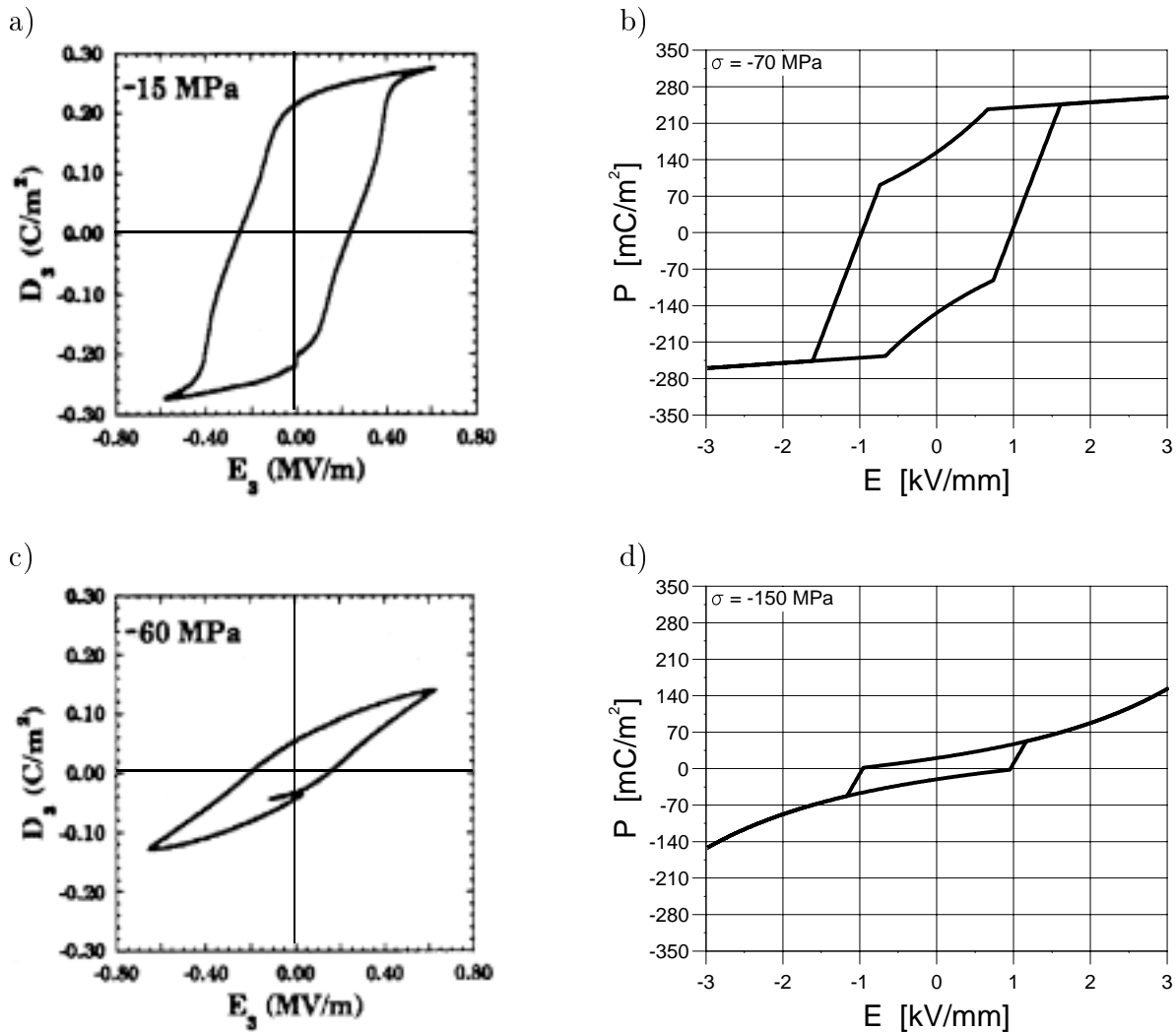


Bild 4.10: Qualitativer Vergleich zwischen experimentellen Beobachtungen nach LYNCH [36] und dem Verhalten des Materialmodells am Beispiel der dielektrischen Hysterese bei überlagerter mechanischer Druckspannung:

- a) Experimentelles Verhalten bei moderater überlagerter Druckspannung (Haltepunkt F).
- b) Modellantwort bei moderat überlagerter Druckspannung (Haltepunkt A).
- c) Experimentelles Verhalten unter hoher Druckspannung (Haltepunkt H).
- d) Modellantwort unter hoher Druckspannung (Haltepunkt B).

Druckspannung entsprechend nach unten. Damit ergibt sich zum einen die Reduktion der maximalen Dehnung bei maximaler elektrischer Last, zum anderen kann die verbleibende Dehnung im elektrisch entlasteten Zustand sogar negative Werte annehmen.

Abschließend läßt sich bemerken, daß eine hohe, dem elektrischen Feld überlagerte Druckspannung die Dehnungsamplitude so verringert, daß keine Hysterese mehr beobachtet werden kann. Es hat sich ein Zustand im Polykristall eingestellt, bei dem die depolarisier-

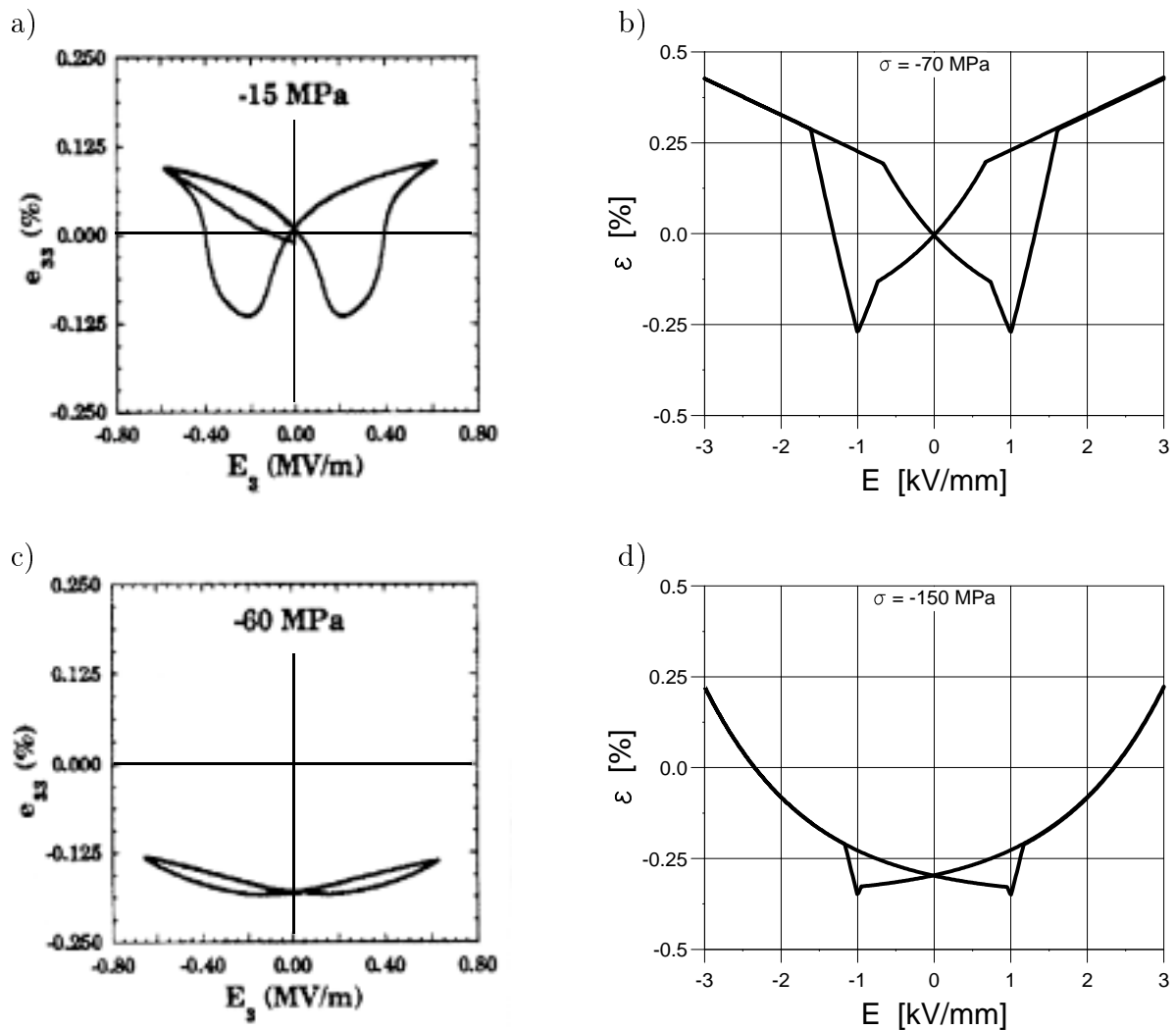


Bild 4.11: Qualitativer Vergleich zwischen experimentellen Beobachtungen nach LYNCH [36] und dem Antwortverhalten des Materialmodells am Beispiel der Schmetterlingshysterese bei überlagerter mechanischer Druckspannung:

- a) Experimentelles Verhalten bei moderater überlagerter Druckspannung (Haltepunkt F).
- b) Modellantwort bei moderater überlagerter Druckspannung (Haltepunkt A).
- c) Experimentelles Verhalten unter hoher Druckspannung (Haltepunkt H).
- b) Modellantwort unter hoher Druckspannung (Haltepunkt B).

rende Wirkung der Druckspannung eine Orientierung der Domänen aufgrund des äußeren elektrischen Feldes vollständig verhindert.

5 Dreidimensionale Formulierung des Materialmodells

Um mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode Aussagen über den Materialzustand eines Kontinuums, d.h. eines zusammenhängenden Gebietes beliebiger Geometrie, angeben zu können, sind elektromechanische Feldgleichungen zusammen mit einer dreidimensionalen Formulierung von Materialgleichungen erforderlich. Diese sollen hier in Anlehnung an die eindimensionalen konstitutiven Beziehungen des vorangehenden Kapitels motiviert werden. Die dreidimensionalen Gleichungen werden in tensorieller Schreibweise angegeben und sollen sich mit den mikrostrukturellen Vorstellungen von Domänenprozessen der Abschnitte 2.2 und 2.3 in Einklang befinden. Des weiteren soll das eindimensionale Materialverhalten als Sonderfall der verallgemeinerten dreidimensionalen Formulierung enthalten sein.

Die konstitutiven Ausgangsgleichungen in tensorieller Form wurden bereits in Kapitel 3 hergeleitet und ausführlich diskutiert. Diese sind die additive Zerlegung von Polarisation \vec{P} (3.10), Dehnung \mathbf{S} (3.9) und remanenter Dehnung \mathbf{S}^i (3.27), die Angabe der linearen piezoelektrischen Beziehungen (3.11) und (3.12) sowie der Zusammenhang zwischen dem Dehnungsanteil \mathbf{S}^{iP} und der remanenten Polarisation (3.28). Es müssen daher noch die beiden ferroelektrischen sowie die beiden ferroelastischen Funktionen in tensorieller Schreibweise angegeben werden, so daß daraus die entsprechende verallgemeinerte Formulierung der Evolutionsgleichung der beiden inneren Variablen \vec{P}^i und $\dot{\mathbf{S}}^{iP}$ bestimmt werden kann.

5.1 Verallgemeinerung der ferroelektrischen Modellierung

Die Grenze zwischen anfänglich reversiblen dielektrischem und daran anschließend irreversiblen Materialverhalten, wird durch die f^P -Funktion beschrieben. Neben der Verallgemeinerung der beiden skalaren Größen, dem elektrischen Feld und der remanenten Polarisation durch die entsprechenden Vektoren ($E \rightarrow \vec{E}$ und $P^i \rightarrow \vec{P}^i$), kann die eindimensionale f^P -Funktion (4.10) in ihrer Struktur übernommen werden:

$$f^P(\vec{E}, \vec{P}^i) = \left\| \vec{E} - c^P \vec{P}^i \right\| - E_c \quad . \quad (5.1)$$

Hierbei wurde der skalare Betrag durch die Vektornorm $\|\cdot\|$ ersetzt. Die Bedeutung des nichtnegativen Materialparameters c^P und der Koerzitivfeldstärke E_c bleibt erhalten.

Analog (5.1) kann auch die erweiterte eindimensionale h^P -Funktion (4.59), die die zweite Grenze zwischen dem irreversiblen und dem reversiblen Materialverhalten einschließt

der mechanischen Depolarisation charakterisiert, in eine verallgemeinerte dreidimensionale Formulierung der Form

$$h^P(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \|\vec{\mathbf{P}}^i\| - \hat{P}_{sat}(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) \quad (5.2)$$

überführt werden. Die Sättigung der remanenten Polarisation wird durch den Funktionswert \hat{P}_{sat} beschrieben, der von dem Spannungstensor \mathbf{T} , dem elektrischen Feldvektor $\vec{\mathbf{E}}$ und dem remanenten Polarisationsvektor $\vec{\mathbf{P}}^i$ abhängt.

Für die Entwicklung der remanenten Polarisation wird eine Fließregel der Form

$$\dot{\vec{\mathbf{P}}}^i = \begin{cases} \vec{\mathbf{0}} & : & \text{Fall 1} \\ \Lambda_f^P \left(\frac{\partial f^P}{\partial \vec{\mathbf{E}}} \right) & : & \text{Fall 2} \\ \Lambda_h^P \left(\frac{\partial h^P}{\partial \vec{\mathbf{P}}^i} \right) & : & \text{Fall 3} \end{cases} \quad (5.3)$$

verwendet, in der für den Fall 2 und Fall 3 je eine entsprechende Normalenregel angenommen wird und die sich aus der eindimensionalen Fließregel (4.22) ergibt. Eine formale Analogie zur Fließregel in der klassischen Plastizitätstheorie (z.B. in TSAKMAKIS [53]) ist zu erkennen, so daß auch die dort angewendete Methodik verwendet werden kann.

Die drei zu unterscheidenden Fälle charakterisieren jene drei Entwicklungszustände, die durch die beiden Funktionen f^P und h^P definiert werden. Der triviale Fall 1 tritt immer dann ein, wenn weder Fall 2 noch Fall 3 gültig ist.

Fall 2 wird durch die verallgemeinerte Belastungsbedingung

$$f^P(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = 0 \quad \wedge \quad f^{*P} = \frac{d}{dt} f^P \Big|_{\dot{\vec{\mathbf{P}}}^i = \vec{\mathbf{0}}} \geq 0 \quad (5.4)$$

beschrieben, die sich aus der eindimensionalen Form (4.15) ergibt. Unter Verwendung der Definition (4.25) kann die Aussage (5.4) durch den logischen Vorfaktor F^P in verkürzender Weise wiedergegeben werden.

Fall 3 gilt, wenn das h^P -Kriterium erfüllt ist. Aus der eindimensionalen Beziehung (4.62) ergibt sie sich zu

$$h^P(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = 0 \quad \wedge \quad h^{*P} = \frac{d}{dt} h^P \Big|_{\dot{\vec{\mathbf{P}}}^i = F^P \Lambda_f^P (\partial f^P / \partial \vec{\mathbf{E}})} > 0 \quad (5.5)$$

Mit Hilfe der Definition H^P (4.26) kann diese verallgemeinerte Form in abkürzender Weise dargestellt werden.

Mittels Gleichung (5.3) ist die Richtung des Vektors $\dot{\vec{\mathbf{P}}}^i$ eindeutig bestimmt, lediglich sein Betrag Λ_f^P bzw. Λ_h^P muß noch bestimmt werden. Unter Berücksichtigung der Definition des normierten Vektors

$$\vec{\mathbf{N}}^P := \frac{\vec{\mathbf{E}} - c^P \vec{\mathbf{P}}^i}{\|\vec{\mathbf{E}} - c^P \vec{\mathbf{P}}^i\|} \quad (5.6)$$

läßt sich aus der Konsistenzbedingung

$$\frac{d}{dt} f^P(\vec{E}, \vec{P}^i) = \vec{N}^P \cdot \left(\dot{\vec{E}} - c^P \dot{\vec{P}}^i \right) = 0 \quad (5.7)$$

und unter Verwendung der im Fall 2 gültigen Normalenregel (5.3)₂, der Betrag

$$\Lambda_f^P = \frac{1}{c^P} \vec{N}^P \cdot \dot{\vec{E}} \quad (5.8)$$

bestimmen.

Analog resultiert für Fall 3 aus der Konsistenzbedingung

$$\frac{d}{dt} h^P(\mathbf{T}, \vec{E}, \vec{P}^i) = - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \mathbf{T}} : \dot{\mathbf{T}} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} + \left(\vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right) \cdot \dot{\vec{P}}^i = 0 \quad (5.9)$$

und nach Eliminierung von $\dot{\vec{P}}^i$ durch die Normalenregel des dritten Falles (5.3)₃

$$\Lambda_h^P = \left\| \vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right\|^{-2} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \mathbf{T}} : \dot{\mathbf{T}} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} \right) \quad (5.10)$$

Nachdem die Richtung des Vektors $\dot{\vec{P}}^i$ durch die Normalenregel und dessen Betrag durch die Faktoren Λ_f^P bzw. Λ_h^P bestimmt ist, läßt sich als tensorielle Verallgemeinerung von Gleichung (4.63) die geschlossene dreidimensionale Evolutionsgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\vec{P}}^i &= F^P H^P \left(\vec{N}^P \otimes \vec{N}^P \right) \cdot \frac{\dot{\vec{E}}}{c^P} \\ &+ (1 - H^P) \left\| \vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right\|^{-2} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \mathbf{T}} : \dot{\mathbf{T}} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} \right) \left(\vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right) \end{aligned} \quad (5.11)$$

für die Entwicklung des remanenten Polarisationsvektors angegeben. Es handelt sich hierbei um eine Differentialgleichung homogen vom Grade eins in der Zeit, womit eine Geschwindigkeitsunabhängigkeit von \vec{P}^i erzielt wird.

Der Ein- und Ausschaltmechanismus der beiden Vorfaktoren $F^P H^P$ und $(1 - H^P)$ steuert die rechte Seite von (5.11), so daß sie entsprechend dem augenblicklichen Materialzustand einem der drei Fälle zugeordnet wird. Für eine ausführliche Diskussion der Mechanismen der Vorfaktoren siehe die Erläuterungen zu der eindimensionalen Darstellung der Evolutionsgleichung nach Gleichung (4.27) und (4.63).

Rotation des remanenten Polarisationsvektors

Mit der Verallgemeinerung der eindimensionalen konstitutiven Materialgleichungen in eine dreidimensionale Formulierung sollten nun auch mehrachsige Belastungen behandelt werden können. Daher soll in diesem Abschnitt der folgende spezielle Prozeß diskutiert werden: Es ist z.B. vorstellbar, daß der Polarisationszustand eines in einer bestimmten Richtung remanent polarisierten Materials durch eine aus der Polungsachse herausrotierenden

elektrischen Feldkomponente beeinflusst wird. Hierbei ist zu erwarten, daß sich die remanente Polarisation, beschrieben durch den remanenten Polarisationsvektor, durch eine hinreichend starke Wirkung des elektrischen Feldes umorientiert und hierbei eine Rotation vollzieht.

Für eine solche Belastungsgeschichte liefert die bisherige Version des Materialmodells folgende Antwort: Nach der vollständig gesättigten Polung beginnt das elektrische Feld sich soweit zu drehen, bis es entgegen der ursprünglichen Richtung orientiert ist. In der ursprünglichen Richtung liegt eine gesättigte remanente Polarisation vor, auf die gleichzeitig in Gegenrichtung ein weit über der Koerzitivspannung vorhandenes elektrisches Feld wirkt. Der Orientierungszustand des remanenten Polarisationsvektors wäre nicht beeinflusst worden. Dies ist jedoch mit den Vorstellungen über das Verhalten von Domänenprozessen nicht in Einklang zu bringen.

Der hier diskutierte mehrachsige Prozeß soll daher die Entwicklung des remanenten Polarisationsvektors $\dot{\vec{P}}^i$ beeinflussen. Um mit den bisherigen Materialgleichungen keine Widersprüche zu erhalten, soll ausgehend von einem gepolten und gesättigten Zustand die Konsistenzbedingung

$$\frac{d}{dt}h^P(\mathbf{T}, \vec{E}, \vec{P}^i) = 0 \quad (5.12)$$

für alle Zeiten t weiter erfüllt bleiben. Mit der Definition

$$\vec{a} := \left(\frac{\partial h^P}{\partial \vec{P}^i} \right) , \quad b := \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \mathbf{T}} : \dot{\mathbf{T}} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} \right) \quad (5.13)$$

läßt sich (5.12) bzw. (5.9) auch in verkürzender Schreibweise als

$$\vec{a} \cdot \dot{\vec{P}}^i - b = 0 \quad (5.14)$$

darstellen. Mit der Einführung eines Einheitsvektors \vec{e}_a gemäß

$$\vec{e}_a := \frac{\vec{a}}{\|\vec{a}\|} = \frac{\partial h^P / \partial \vec{P}^i}{\|\partial h^P / \partial \vec{P}^i\|} \quad (5.15)$$

und unter der Voraussetzung $\|\vec{a}\| \neq 0$, läßt sich (5.14) auch als das skalare Vektorprodukt

$$\vec{e}_a \cdot \dot{\vec{P}}^i = \frac{b}{\|\vec{a}\|} \quad (5.16)$$

darstellen. Die geometrische Deutung dieses Ausdruckes ist in Bild 5.1 dargestellt.

Gleichung (5.16) kann als die Projektion von $\dot{\vec{P}}^i$ auf den Einheitsvektor \vec{e}_a mit der Länge $\frac{b}{\|\vec{a}\|}$ interpretiert und damit im Dreieck 'BCD' veranschaulicht werden. $\dot{\vec{P}}^i$ läßt sich im Dreieck 'BCD' auch als die Addition aus zwei Vektoren darstellen:

$$\dot{\vec{P}}^i = \frac{b}{\|\vec{a}\|} \vec{e}_a + \vec{V}_\perp . \quad (5.17)$$

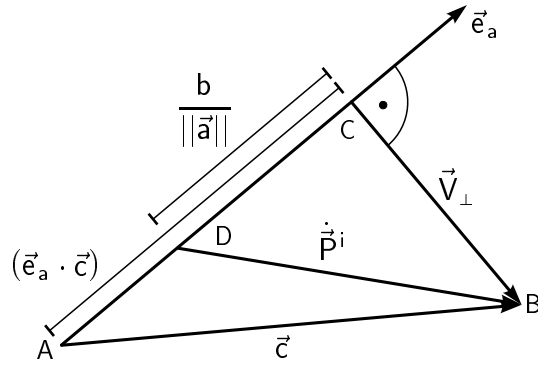


Bild 5.1: Aus der Konsistenzbedingung der h^P -Funktion läßt sich die Entwicklung des remanenten Polarisationsvektors $\dot{\vec{P}}^i$ geometrisch deuten. Er kann im Dreieck 'BCD' additiv aus den beiden Vektoren $b/||\vec{a}|| \vec{e}_a$ und \vec{V}_\perp gebildet werden. \vec{V}_\perp selbst läßt sich im Dreieck 'ABC' durch einen beliebigen Vektor \vec{c} und seinem Anteil in Richtung \vec{e}_a darstellen.

Zum einen ist dies ein Vektor mit dem Betrag $\frac{b}{||\vec{a}||}$ und seiner Richtung \vec{e}_a und zum anderen ein beliebiger, jedoch zu \vec{e}_a orthogonaler Vektor \vec{V}_\perp . Damit gilt

$$\vec{e}_a \cdot \vec{V}_\perp = 0 \quad , \quad (5.18)$$

so daß \vec{V}_\perp im Ansatz (5.17) für $\dot{\vec{P}}^i$ auf die Anforderung (5.16) keinen Einfluß hat. Die Konsistenzbedingung (5.12) bleibt somit weiter für alle Zeiten t identisch erfüllt. \vec{V}_\perp kann mit dem Ansatz

$$\vec{V}_\perp := \mathbf{P}^P \cdot \vec{c} \quad (5.19)$$

dargestellt werden. Der *ferroelektrische Projektionstensor* \mathbf{P}^P besitzt hierbei die Eigenschaft, beliebige Vektoren \vec{c} senkrecht zu \vec{e}_a zu projektieren.

Mit Hilfe des Dreiecks 'ABC' läßt sich der Vektor

$$\vec{V}_\perp = \vec{c} - (\vec{e}_a \cdot \vec{c}) \vec{e}_a = (\mathbf{1} - \vec{e}_a \otimes \vec{e}_a) \cdot \vec{c} \quad (5.20)$$

auch durch \vec{c} und seine Projektion in Richtung des Einheitsvektor \vec{e}_a ausdrücken.

Durch Koeffizientenvergleich zwischen (5.19) und (5.20) erhält man den ferroelektrischen Projektionstensor

$$\mathbf{P}^P = \mathbf{1} - \vec{e}_a \otimes \vec{e}_a = \mathbf{1} - \frac{\partial h^P / \partial \vec{P}^i}{||\partial h^P / \partial \vec{P}^i||} \otimes \frac{\partial h^P / \partial \vec{P}^i}{||\partial h^P / \partial \vec{P}^i||} \quad , \quad (5.21)$$

der auch mit der Definition für \vec{e}_a (5.15) dargestellt werden kann.

Mit der Einführung des Vektors \vec{V}_\perp kann der oben diskutierte mehrachsige Prozeß einer Belastung durch ein sich drehendes elektrisches Feld in der Entwicklung von $\dot{\vec{P}}^i$ (5.17)

berücksichtigt werden. Dieser zusätzliche Anteil in der Evolutionsgleichung des remanenten Polarisationsvektors wird im weiteren als

$$\dot{\vec{P}}_{\text{Projektion}}^i = \vec{V}_{\perp} = \mathbf{P}^P \cdot \vec{c} \quad (5.22)$$

bezeichnet und kann als Projektion eines beliebigen Vektors \vec{c} durch den Tensor \mathbf{P}^P dargestellt werden.

Es verbleibt nun, eine geeignete Wahl für \vec{c} anzugeben. Da beliebige Vektoren zulässig sind, wird der Ansatz

$$\vec{c} := K^P \Lambda_f^P \left(\frac{\partial f^P}{\partial \vec{E}} \right) \quad (5.23)$$

gewählt. Dadurch wird erreicht, daß $\dot{\vec{P}}_{\text{Projektion}}^i$ und damit $\dot{\vec{P}}^i$ sich auch in diesem mehrachsigen Prozeß nach den gleichen Gesetzmäßigkeiten ($\sim \Lambda_f^P (\partial f^P / \partial \vec{E})$) entwickelt, wie es im Fall 2 einer gültigen Belastungsbedingung der f^P -Funktion gegeben ist. Allerdings wird derjenige Anteil, der der Konsistenzbedingung aus der h^P -Funktion widerspricht, mittels des Projektionstensor \mathbf{P}^P ausgeblendet¹

$$\dot{\vec{P}}_{\text{Projektion}}^i = K^P \Lambda_f^P \mathbf{P}^P \cdot \left(\frac{\partial f^P}{\partial \vec{E}} \right) \quad (5.24)$$

Der hier betrachtete mehrdimensionale Belastungsprozeß soll sich nur für ein vollständig gepoltes Material einstellen dürfen. Die remanente Polarisation ist gesättigt und die f^P -Funktion nimmt in diesem Fall Werte größer Null an:

$$f^P > 0 \quad (5.25)$$

Erst für den Fall

$$f^{P*} > 0 \quad (5.26)$$

soll eine mehrachsige elektrische Belastung eine Rotation des remanenten Polarisationsvektors auslösen.

Im allgemeinen bedeutet physikalisch die Aussage (5.26), daß um die Polungsachse ein Bereich existiert, in dem kleine Störungen des elektrischen Feldes keine Veränderung von $\dot{\vec{P}}^i$ bewirken. Erst hinreichend große Drehungen des elektrischen Feldes sind in der Lage, irreversible Prozesse auszulösen. Dies läßt sich mit dem Prozeß der Polung eines Materials vergleichen. Hierbei ist das elektrische Feld erst beim Überschreiten der Koerzitivfeldstärke in der Lage, irreversible Umklappprozesse auszulösen.

Die beiden Zustände (5.25) und (5.26) lassen sich mit Hilfe der Definition (4.23) in abkürzender Schreibweise zu einem weiteren logischen Vorfaktor

$$K^P := \left[-[-f^P] - [-f^{P*}] \right] = \begin{cases} 1 & : f^P > 0 \wedge f^{P*} > 0 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (5.27)$$

¹Eine alternative Motivation von $\dot{\vec{P}}_{\text{Projektion}}^i$ ist in KAMLAH [37] dargestellt.

zusammenfassen, der den Anteil $\dot{\vec{P}}^i_{\text{Projektion}}$ ein- bzw. ausblendet.

Damit kann die Beziehung für \vec{P}^i (5.11) mit $\vec{P}^i_{\text{Projektion}}$ (5.24) erweitert werden. Als abschließende Formulierung ergibt sich somit die verallgemeinerte dreidimensionale Evolutionsgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\vec{P}}^i = & \left(F^P H^P \mathbf{1} + K^P \mathbf{P}^P \right) \cdot \left(\vec{N}^P \otimes \vec{N}^P \right) \cdot \frac{\dot{\vec{E}}}{c^P} \\ & + \left(1 - H^P \right) \left\| \vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right\|^{-2} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \mathbf{T}} : \dot{\mathbf{T}} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} \right) \left(\vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right) \end{aligned} \quad (5.28)$$

des remanenten Polarisationsvektors.

Bild 5.2 zeigt den Einfluß eines sich drehenden elektrischen Feldes auf die Entwicklung der remanenten Polarisation.

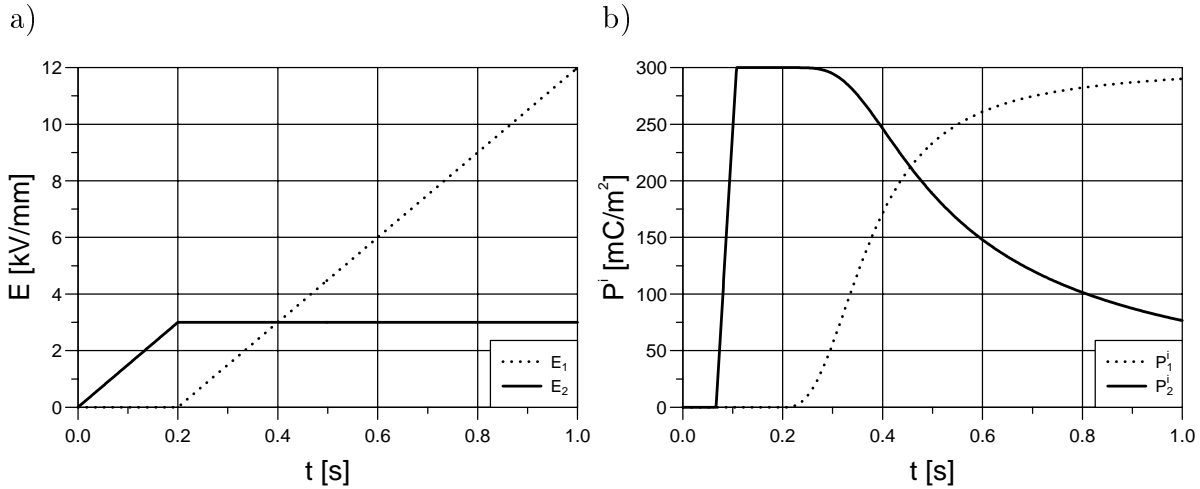


Bild 5.2: Die Belastung eines in x_2 -Richtung vollständig gepolten Materials durch ein sich drehendes elektrisches Feld induziert eine Drehung des remanenten Polarisationsvektors \vec{P}^i .

a) Belastungsgeschichte des elektrischen Feldvektors für seine Komponenten E_1 und E_2 .

b) Entwicklung der Komponenten P_1^i und P_2^i des remanenten Polarisationsvektors über der Zeit t .

Ausgehend von einem ungepolten Zustand induziert in x_2 -Richtung die monoton ansteigende elektrische Feldkomponente E_2 eine remanente Polarisation P_2^i . Erreicht der remanente Polarisationsvektor seine Sättigung ($\|\vec{P}^i\| = P_{sat}$), liegt ein vollständig gepolter Zustand vor. In diesem Fall ist $f^P > 0$.

Ab dem Zeitpunkt $t = 0.2\text{s}$ bleibt die Komponente E_2 auf einem konstanten Wert. Jetzt findet eine Drehung des elektrischen Vektors statt, in dem sich zu E_2 eine zusätzliche Komponente E_1 in x_1 -Richtung monoton steigend aufbaut.

Ist nun zusätzlich die Voraussetzung $f^P > 0$ gegeben, d.h. der logische Vorfaktor K^P (5.27) wird eins, wird die Rotation des remanenten Polarisationsvektors eingeleitet. Die Komponente P_1^i baut sich in dem Maße in Richtung E_1 auf, wie P_2^i abnimmt und es die h^P -Funktion zuläßt. Sie sorgt für Einhaltung der Bedingung

$$\|\vec{P}^i\| = \sqrt{(P_1^i)^2 + (P_2^i)^2 + (P_3^i)^2} = P_{sat} = konst \quad , \quad (5.29)$$

in der die Bildung der Norm von \vec{P}^i eingeht und führt dazu, daß P_1^i schneller zunimmt als P_2^i abnimmt ($P_3^i \equiv 0$).

5.1.1 Verallgemeinerung der mechanischen Depolarisation

Mittels der \hat{P}_{sat} -Funktion wird der Prozeß der mechanischen Depolarisation, die Reduktion der remanenten Polarisation durch eine hinreichend große Druckspannung, beschrieben. In der Formulierung der eindimensionalen Materialgleichungen wurde ein exponentieller Ansatz (4.55) sowie ein linearer Ansatz (4.56) für \hat{P}_{sat} vorgestellt. Als tensorielle Verallgemeinerung dieser beiden Gleichungen wird für den exponentiellen Ansatz

$$\hat{P}_{sat}(\mathbf{T}, \vec{E}, \vec{P}^i) = P_{sat} e^{-\frac{1}{m} \left\langle -\frac{3}{2} \vec{e}_{P^i} \cdot \mathbf{T}^D \cdot \vec{e}_{P^i} - \hat{T}_c(\vec{E}, \vec{P}^i) \right\rangle} \quad (5.30)$$

und für den linearen Ansatz

$$\hat{P}_{sat}(\mathbf{T}, \vec{E}, \vec{P}^i) = (P_{sat} - P_\delta) \left\langle 1 - \frac{1}{m} \left\langle -\frac{3}{2} \vec{e}_{P^i} \cdot \mathbf{T}^D \cdot \vec{e}_{P^i} - \hat{T}_c(\vec{E}, \vec{P}^i) \right\rangle \right\rangle + P_\delta \quad (5.31)$$

gewählt.

Der Faktor $\frac{3}{2}$ dient lediglich einer Normierung aufgrund der Deviatorbildung und gewährleistet, daß der eindimensionale Sonderfall in der dreidimensionalen Formulierung enthalten ist. Da der mechanische Depolarisationsprozeß als eine inkompressible Deformation betrachtet wird (formändernde Umklappprozesse) wird nur der deviatorische Anteil des Spannungstensors \mathbf{T}^D berücksichtigt. Die verallgemeinerte Darstellung von $\hat{T}_c(\vec{E}, \vec{P}^i)$ ist im folgenden Abschnitt 5.1.2 angegeben.

Zum besseren Verständnis der dreidimensionalen Formulierung von \hat{P}_{sat} wird das Argument in der MACCAULEY-Klammer $\langle \cdot \rangle$ (siehe Definition (4.57)) näher betrachtet. Unter der Voraussetzung eines in positiver x_3 -Richtung gepolten Zustandes $\vec{e}_{P^i} = (0 \ 0 \ 1)^T$ sowie $\vec{E} = \vec{0}$, ist $\hat{T}_c = \sigma_c$. Es ergibt sich dann für das Argument

$$\left\langle -\frac{3}{2} \vec{e}_{P^i} \cdot \mathbf{T}^D \cdot \vec{e}_{P^i} - \hat{T}_c(\vec{E}, \vec{P}^i) \right\rangle = \left\langle -T_{33} + \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) - \sigma_c \right\rangle \quad . \quad (5.32)$$

Damit sind hinreichend große Druckspannungen T_{33} in Polungsrichtung aber auch hinreichend große Zugspannungen (T_{11} und T_{22}) senkrecht hierzu in der Lage, das Argument (5.32) in der \hat{P}_{sat} -Funktion (5.30) bzw. (5.31) zu aktivieren und eine Reduktion

von \widehat{P}_{sat} einzuleiten. Diese Spannungskomponenten können somit mechanisch induzierte Umklappprozesse und damit eine Depolarisation auslösen.²

5.1.2 Verallgemeinerung der Koerzitivspannung

Mit Hilfe des nach (3.22) eingeführten Einheitsvektors der remanenten Polarisation \vec{e}_{Pi} läßt sich die eindimensionale Materialfunktion (4.58) zu

$$\widehat{T}_c(\vec{E}, \vec{P}^i) = \left\langle \sigma_c + n \frac{\vec{E}}{E_c} \cdot \vec{e}_{Pi} \right\rangle \quad (5.33)$$

verallgemeinern.

Die Koerzitivspannung σ_c , die Koerzitivfeldstärke E_c und der Materialparameter n behalten die in der eindimensionalen Modellformulierung bereits diskutierte Bedeutung: σ_c beschreibt die kritische Umklappspannung ohne überlagertes elektrisches Feld bei mechanischer Belastung und E_c dasjenige elektrische Feld, ab dem elektrisch induzierte Domänenprozesse eintreten. Der nichtnegative Materialparameter n gewichtet den Einfluß des elektrischen Feldes auf den Beginn einsetzender mechanischer Depolarisation.

Die Materialfunktion (5.33) übt über \widehat{P}_{sat} einen Einfluß in der h^P -Funktion (5.2) sowie direkt in der f^F -Funktion (5.34) im nächsten Abschnitt aus, so daß die Abhängigkeit von \vec{E} und \vec{P}^i bei der Bestimmung der Λ -Faktoren berücksichtigt werden muß.

5.2 Verallgemeinerung der ferroelastischen Modellierung

Das Ziel in diesem Abschnitt ist die tensorielle Formulierung der Evolutionsgleichung der remanenten ferroelastischen Dehnung $\dot{\mathbf{S}}^{iF}$. Ausgehend von der eindimensionalen Form der f^F -Funktion (4.66) läßt sich mit Hilfe der VON-MISES-NORM und der Verwendung tensorieller statt skalarer Größen ($\sigma \rightarrow \mathbf{T}$ und $\varepsilon^{iF} \rightarrow \mathbf{S}^{iF}$) die Darstellung zu

$$f^F(\mathbf{T}, \vec{E}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{P}^i) = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| (\mathbf{T} - c^F \mathbf{S}^{iF})^D \right\| - \widehat{T}_c(\vec{E}, \vec{P}^i) \quad (5.34)$$

verallgemeinern. Der Materialparameter c^F ist bereits in der einachsigen Formulierung der f^F -Funktion eingeführt worden. Da ferroelastische Domänenprozesse eine inkompressible Deformationen darstellen, ist die Verwendung des deviatorischen Anteils im Argument von (5.34) erforderlich (siehe LYNCH [36] sowie ergänzend die Diskussion der elektrisch induzierten Umklappprozesse gegen Ende des Abschnittes 3.4). Der Faktor $\sqrt{\frac{3}{2}}$ dient lediglich einer Normierung aufgrund der Deviatorbildung und führt auf den eindimensionalen

²Gepolte sowie ungepolte PZT's wurden von FETT *et al.* [41, 42, 74] mechanisch belastet und der Einfluß von Druck- sowie Zugspannungen auf die remanente Dehnung untersucht.

Ansatz als Sonderfall. Die tensorielle Darstellung der Materialfunktion $\widehat{T}_c(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i)$ wurde bereits in (5.33) angegeben.

Als tensorielles Gegenstück zur eindimensionalen Form der h^F -Funktion (4.52), die die Beschränkung der remanenten ferroelastischen Dehnung beinhaltet, läßt sich die Form

$$h^F(\mathbf{S}^{iF}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\mathbf{S}^{iF}\| - \left(\varepsilon_{sat} - \sqrt{\frac{2}{3}} \|\mathbf{S}^{iP}\| \right) \quad (5.35)$$

angeben. Die Verwendung des Normierungsfaktors $\sqrt{\frac{2}{3}}$ in (5.35) führt dazu, daß ε_{sat} dieselbe Bedeutung wie in der eindimensionalen Formulierung des Materialmodells besitzt. Erwähnt sei, daß die beiden remanenten Dehnungen \mathbf{S}^{iF} sowie \mathbf{S}^{iP} jeweils eine inkompressible Deformation charakterisieren und daher deviatorische Tensoren sind.

Die eindimensionale Formulierung der Normalenregel (4.43) für die drei Belastungsfälle zur Entwicklung der remanenten ferroelastischen Dehnung läßt sich zu

$$\dot{\mathbf{S}}^{iF} = \begin{cases} \mathbf{0} & : & \text{Fall 1} \\ \Lambda_f^F \left(\frac{\partial f^F}{\partial \mathbf{T}} \right) & : & \text{Fall 2} \\ \Lambda_h^F \left(\frac{\partial h^F}{\partial \mathbf{S}^{iF}} \right) & : & \text{Fall 3} \end{cases} \quad (5.36)$$

verallgemeinern. Fall 2 wird durch

$$f^F(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{\mathbf{P}}^i) = 0 \quad \wedge \quad f^{*F} = \frac{d}{dt} f^F \Big|_{\dot{\mathbf{S}}^{iF} = \mathbf{0}} \geq 0 \quad (5.37)$$

charakterisiert, der sich aus der eindimensionalen Form (4.34) ergibt und durch den logischen Vorfaktor F^F (4.45) repräsentiert wird. Für (4.73) läßt sich die tensorielle Darstellung

$$h^F(\mathbf{S}^{iF}, \vec{\mathbf{P}}^i) = 0 \quad \wedge \quad h^{*F} = \frac{d}{dt} h^F \Big|_{\dot{\mathbf{S}}^{iF} = F^F \Lambda_f^F (\partial f^F / \partial \mathbf{T})} > 0 \quad (5.38)$$

im Fall 3 angeben und mittels H^F (4.46) in abkürzender Weise wiedergeben.

Die beiden Faktoren Λ_f^F und Λ_h^F müssen mittels der Konsistenzbedingung noch bestimmt werden. Mit der Einführung eines normierten Tensors

$$\mathbf{N}^F := \frac{(\mathbf{T} - c^F \mathbf{S}^{iF})^D}{\|(\mathbf{T} - c^F \mathbf{S}^{iF})^D\|} \quad (5.39)$$

und der Auswertung der Konsistenzbedingung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f^F(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{\mathbf{P}}^i) &= \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{N}^F : (\dot{\mathbf{T}} - c^F \dot{\mathbf{S}}^{iF})^D \\ &- \left(\frac{\partial \widehat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{E}}} \cdot \dot{\vec{\mathbf{E}}} + \frac{\partial \widehat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{P}}^i} \cdot \dot{\vec{\mathbf{P}}^i} \right) = 0 \end{aligned} \quad (5.40)$$

aus der f^F -Funktion unter Berücksichtigung von (5.36)₂ ergibt sich schließlich der Faktor

$$\Lambda_f^F = \frac{1}{c^F} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \mathbf{N}^F : \dot{\mathbf{T}}^D - \left(\frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{E}}} \cdot \dot{\vec{\mathbf{E}}} + \frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{P}}^i} \cdot \dot{\vec{\mathbf{P}}^i} \right) \right) . \quad (5.41)$$

Analoges ist für den Fall 3 anwendbar, bei dem sich aus der Konsistenzbedingung der h^F -Funktion

$$\frac{d}{dt} h^F(\mathbf{S}^{iF}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{\mathbf{S}^{iF}}{\|\mathbf{S}^{iF}\|} : \dot{\mathbf{S}}^{iF} + \frac{\mathbf{S}^{iP}}{\|\mathbf{S}^{iP}\|} : \dot{\mathbf{S}}^{iP} \right) = 0 \quad (5.42)$$

und mit (5.36)₃ der zweite Faktor

$$\Lambda_h^F = - \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{S}^{iP}}{\|\mathbf{S}^{iP}\|} : \dot{\mathbf{S}}^{iP}(\vec{\mathbf{P}}^i, \dot{\vec{\mathbf{P}}^i}) \quad (5.43)$$

bestimmen läßt.

Für $\dot{\mathbf{S}}^{iP}(\vec{\mathbf{P}}^i, \dot{\vec{\mathbf{P}}^i})$ muß selbst noch die Ableitung nach der Zeit (vgl. Gleichung (3.28))

$$\dot{\mathbf{S}}^{iP}(\vec{\mathbf{P}}^i, \dot{\vec{\mathbf{P}}^i}) = \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{sat}}{P_{sat}} \left(\vec{\mathbf{e}}_{P^i} \otimes \dot{\vec{\mathbf{P}}^i} + \dot{\vec{\mathbf{P}}^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{P^i} - \vec{\mathbf{e}}_{P^i} \cdot \dot{\vec{\mathbf{P}}^i} (\vec{\mathbf{e}}_{P^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{P^i} + \frac{1}{3} \mathbf{1}) \right) \quad (5.44)$$

berücksichtigt werden, in der die Evolutionsgleichung (5.28) des remanenten Polarisationsvektors $\vec{\mathbf{P}}^i$ auftritt.

Da die Richtung von $\dot{\mathbf{S}}^{iF}$ durch die Fließregel und die entsprechenden Faktoren durch Auswertung der Konsistenzbedingung bestimmt sind, kann die geschlossene dreidimensionale Evolutionsgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}^{iF} &= F^F H^F \times \\ &\frac{1}{c^F} \left\{ \left(\mathbf{N}^F \otimes \mathbf{N}^F \right) : \dot{\mathbf{T}}^D - \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{N}^F \left(\frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{E}}} \cdot \dot{\vec{\mathbf{E}}} + \frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{P}}^i} \cdot \dot{\vec{\mathbf{P}}^i} \right) \right\} \\ &- \left(1 - H^F \right) \left(\frac{\mathbf{S}^{iP}}{\|\mathbf{S}^{iP}\|} \otimes \frac{\mathbf{S}^{iF}}{\|\mathbf{S}^{iF}\|} \right) : \dot{\mathbf{S}}^{iP} \end{aligned} \quad (5.45)$$

für die Entwicklung des remanenten ferroelastischen Dehnungstensors angegeben werden. Sie ist als verallgemeinerte Darstellung der eindimensionalen Form (4.74) zu betrachten und entspricht einer Differentialgleichung, die homogen ersten Grades in der Zeit und daher geschwindigkeitsunabhängig ist.

Rotation des remanenten ferroelastischen Dehnungstensors

Analog Abschnitt 5.1, in dem die Rotation des remanenten Polarisationsvektors formuliert wurde, ist auch für das hier betrachtete ferroelastische Verhalten ein solcher mehrachsiger Prozeß vorstellbar. Unter der Wirkung einer sich drehenden äußeren mechanischen Belastung kann sich der Ausrichtungszustand der Domänen im Material verändern. Beispielsweise führt eine hinreichend hohe Druckspannung dazu, daß sich Domänen in einer

Ebene senkrecht zur Lastrichtung orientieren. Diese orthogonale Ausrichtung müßte auch bei einer Drehung der äußeren Belastungsrichtung wiederzufinden sein.

Der Einfluß auf die Evolutionsgleichung für $\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}}$ soll in analoger Weise zu $\dot{\vec{\mathbf{P}}}^{\text{i}}$ erfolgen. Ausgehend von einem vollständig ausgerichteten Zustand soll zur widerspruchsfreien Berücksichtigung dieses Prozesses für alle Zeiten t die Konsistenzbedingung der h^{F} -Funktion

$$\frac{d}{dt}h^{\text{F}}(\mathbf{S}^{\text{iF}}, \vec{\mathbf{P}}^{\text{i}}) = 0 \quad (5.46)$$

weiter erfüllt bleiben.

Die mathematische Beschreibung des Effektes in der ferroelektrischen Situation wird analog auf den hier vorliegenden Fall angewendet. Aus einer geometrischen Darstellung der Konsistenzbedingung in ähnlicher Weise wie in Bild (5.1), läßt sich ein Tensor $\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}}_{\text{Projektion}}$ einführen, der in die Evolutionsgleichung zusätzlich eingebracht werden kann. Er besitzt hierbei die Eigenschaft, der Konsistenzbedingung (5.46) nicht zu widersprechen.

Mittels des *ferroelastischen Projektionstensors* vierter Stufe

$$\mathcal{P}^{\text{F}} = \mathcal{I} - \frac{\partial h^{\text{F}}/\partial \mathbf{S}^{\text{iF}}}{\|\partial h^{\text{F}}/\partial \mathbf{S}^{\text{iF}}\|} \otimes \frac{\partial h^{\text{F}}/\partial \mathbf{S}^{\text{iF}}}{\|\partial h^{\text{F}}/\partial \mathbf{S}^{\text{iF}}\|} \quad (5.47)$$

und eines beliebigen Tensors \mathbf{c} zweiter Stufe, kann der remanente ferroelastische Dehnungsanteil

$$\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}}_{\text{Projektion}} = \mathcal{P}^{\text{F}} : \mathbf{c} \quad (5.48)$$

in gleicher Weise zu $\dot{\vec{\mathbf{P}}}^{\text{i}}_{\text{Projektion}}$ (5.22) angegeben werden.

Wiederum sind beliebige Tensoren eine zulässige Wahl für \mathbf{c} , wobei die Wahl

$$\mathbf{c} := K^{\text{F}} \Lambda_f^{\text{F}} \left(\frac{\partial f^{\text{F}}}{\partial \mathbf{T}} \right) \quad (5.49)$$

aus den selben Gründen wie zuvor für $\vec{\mathbf{c}}$ bevorzugt wird. Der logische Vorfaktor K^{F} ist hierbei definiert als

$$K^{\text{F}} := \left[-[-f^{\text{F}}] - [-f^{\text{F}*}] \right] = \begin{cases} 1 & : f^{\text{F}} > 0 \quad \wedge \quad f^{\text{F}*} > 0 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (5.50)$$

und blendet erst unter der Voraussetzung $f^{\text{F}} > 0$ und $f^{\text{F}*} > 0$ den Dehnungsanteil $\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}}_{\text{Projektion}}$ ein.

Damit ergibt sich abschließend aus (5.45) eine erweiterte Evolutionsgleichung für die remanente ferroelastische Dehnung, die sich in tensorieller Schreibweise zu

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}} &= \left(F^{\text{F}} H^{\text{F}} \mathcal{I} + K^{\text{F}} \mathcal{P}^{\text{F}} \right) : \\ &\quad \frac{1}{c^{\text{F}}} \left\{ \left(\mathbf{N}^{\text{F}} \otimes \mathbf{N}^{\text{F}} \right) : \dot{\mathbf{T}}^{\text{D}} - \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{N}^{\text{F}} \left(\frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{E}}} \cdot \dot{\vec{\mathbf{E}}} + \frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \vec{\mathbf{P}}^{\text{i}}} \cdot \dot{\vec{\mathbf{P}}^{\text{i}}} \right) \right\} \\ &\quad - \left(1 - H^{\text{F}} \right) \left(\frac{\mathbf{S}^{\text{iP}}}{\|\mathbf{S}^{\text{iP}}\|} \otimes \frac{\mathbf{S}^{\text{iF}}}{\|\mathbf{S}^{\text{iF}}\|} \right) : \dot{\mathbf{S}}^{\text{iP}} \end{aligned} \quad (5.51)$$

angeben läßt.

Bei dem hier dargestellten dreidimensionalen Materialmodell zur Beschreibung von nicht-linearem, elektromechanischem Materialverhalten handelt es sich um eine geschwindigkeitsunabhängige Formulierung. Es sei erwähnt, daß die tensorielle Verallgemeinerung das eindimensionale Modell als Sonderfall beinhaltet, ohne daß zusätzliche Materialparameter eingeführt werden mußten.

Eine zusammenfassende Darstellung aller Gleichungen des dreidimensionalen Materialmodells ist in Anhang B in übersichtlicher Form angegeben.

6 Finite-Elemente-Berechnungen

Für die numerische Lösung von elektromechanischen Randwertproblemen mit der Finite-Elemente-Methode werden schwache Formulierungen der Impulsbilanz (3.1) sowie des Gauß'schen Gesetzes (3.4) benötigt (siehe z.B. GHANDI und HAGOOD [69], HOM und SHANKAR [75, 76], GAUDENZI und BATHE [77], CHEN und LYNCH [78] oder WANG [79]). Eine Finite-Elemente-Formulierung der klassischen piezoelektrischen Grundgleichung ist in ALLIK und HUGHES [4] dargestellt. Grundlegende Prinzipien zur allgemeinen Finite-Elemente-Methode werden z.B. in HUGHES [80] erläutert.

Die oben genannten Feldgleichungen stellen ein System von Differentialgleichungen dar, die durch die Materialgleichungen vervollständigt werden. In den letzten Kapiteln wurden diese konstitutiven Beziehungen anhand einer phänomenologischen Betrachtung der Eigenschaften von Ferroelektrika motiviert und in dreidimensionaler Form dargestellt.

6.1 Implementierung

Die Modellierung der Materialgleichungen erfolgte über den Zusammenhang der Beziehung (3.8): Mechanische Spannung und elektrisches Feld werden vorgegeben und daraus die zugehörige Dehnung und Polarisierung bestimmt. Für die Implementierung in ein Finite-Elemente-Programm ist jedoch die Darstellung der konstitutiven Gleichungen in Form von (3.7) notwendig: Dehnung und elektrisches Feld werden vorgegeben, mechanische Spannung und dielektrische Verschiebung werden daraus ermittelt. Die Evolutionsgleichungen der beiden inneren Variablen

$$\begin{aligned}\dot{\vec{P}}^i &= g(\mathbf{T}, \vec{E}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{P}^i, \dot{\mathbf{T}}, \dot{\vec{E}}) \\ \dot{\mathbf{S}}^{iF} &= k(\mathbf{T}, \vec{E}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{P}^i, \dot{\mathbf{T}}, \dot{\vec{E}}, \dot{\vec{P}}^i)\end{aligned}\tag{6.1}$$

müssen deshalb so umgeschrieben werden, daß sie nicht mehr eine Funktion von $\mathbf{T}, \dot{\mathbf{T}}$ sondern von $\mathbf{S}, \dot{\mathbf{S}}$ sind:

$$\begin{aligned}\dot{\vec{P}}^i &= \tilde{g}(\mathbf{S}, \vec{E}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{P}^i, \dot{\mathbf{S}}, \dot{\vec{E}}) \\ \dot{\mathbf{S}}^{iF} &= \tilde{k}(\mathbf{S}, \vec{E}, \mathbf{S}^{iF}, \vec{P}^i, \dot{\mathbf{S}}, \dot{\vec{E}}, \dot{\vec{P}}^i) .\end{aligned}\tag{6.2}$$

Diese Umformungen ziehen jedoch eine neue Bestimmung der Vorfaktoren ($\Lambda_f^P, \Lambda_h^P, \Lambda_f^F, \Lambda_h^F$) in der Fließregel mit sich, die zu erheblich komplexeren Materialgleichungen führen. Dies liegt unter anderem auch daran, daß $\dot{\mathbf{S}}^{iF}$ selbst eine Funktion von $\dot{\vec{P}}^i$ ist und damit $\dot{\vec{P}}^i$ in die Evolutionsgleichung für $\dot{\mathbf{S}}^{iF}$ eingesetzt werden muß. Auf eine Angabe dieser Form der Darstellung der konstitutiven Beziehungen nach (6.2) wird hier verzichtet.

Die Materialgleichungen wurden in das Finite-Elemente-Programm PSU¹ implementiert, da es folgende Vorteile bietet:

- Das Programm ist als *Public-Domain-Programm* erhältlich und liegt in seinem Quellcode (FORTRAN und C) vor.
- Eine einfache Dokumentation mit wissenschaftlichem Hintergrund wird in einem Manual [81] bereitgestellt.
- Es bietet dem Nutzer bereits ein von LÜBBING [82] implementiertes thermo-elektromechanisches Element mit einem linearen thermo-elektro-mechanischen Materialgesetz an.
- Mit der nichtlinearen Finite-Elemente-Formulierung können die Feldgleichungen mit einem iterativen Gleichungslöser mit integrierter Schrittweitensteuerung gelöst werden.
- Ein modulhafter und einfacher Einbau eigener konstitutiver Materialgesetze ist möglich. Dem Materialmodul wird das Inkrement der Dehnung und des elektrischen Feldes übergeben und liefert den zugehörigen Wert der Spannung sowie den Wert der dielektrischen Verschiebung zurück.

Aus dem in Kapitel 3 erläuterten dreidimensionalen Materialmodell mit den zugehörigen Evolutionsgleichungen der inneren Variablen aus Kapitel 5 wurde das Materialmodul M_NL FERRO_EM entwickelt und in das FE-Programm PSU integriert. Zusammen mit den bereits vorhandenen vier Knoten Elemente für ebene Verzerrungszustände (E_QUAD4_TEM) sowie axialsymmetrische Probleme (E_QUAX4_TEM) steht nun ein Finite-Elemente-Werkzeug zur Verfügung, mit dem eine nichtlineare elektromechanische Simulationsrechnung in zwei Berechnungsschritten (vgl. KAMLAH und BÖHLE [83]) durchgeführt werden kann.

In einem ersten Schritt wird eine rein dielektrische Berechnung durchgeführt. Aufgrund einer elektrischen Belastung über der Zeit durch die Vorgabe eines Potentials auf einem Randstück des modellierten Körpers wird nur die Feldgleichung der Elektrostatik (Gauß'sches Gesetz) gelöst. Daraus resultiert für jeden Knoten die Information des elektrischen Potentials über der Belastungszeit.

Anschließend erfolgt der zweite Berechnungsschritt, eine gekoppelte, elektromechanische Spannungsrechnung. Derselbe modellierte Körper wird nun elektrisch durch die Vorgabe

¹Der Name des Programms PSU steht für *Prozeßsimulation in der Umformtechnik*. Es wurde hauptsächlich am Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen (ISD) an der Universität Stuttgart entwickelt. Mit dem durch die Volkswagenstiftung 1988 bis 1993 in Leben gerufenen und finanzierten Projekt wurde ein Finite-Elemente-Programm für den wissenschaftlichen, nicht kommerziellen Bereich zur Verfügung gestellt.

des Potentials der Knoten über der Zeit belastet und gleichzeitig werden die mechanischen Randbedingungen sowie die mechanische Belastungen vorgegeben. In dieser zweiten Finite-Elemente-Simulationsrechnung werden die beiden Feldgleichungen, Gauß'sches Gesetz sowie Impulsbilanz, gelöst und die mechanischen sowie die elektrischen Größen $(\mathbf{T}, \mathbf{S}, \vec{E}, \vec{D}, \mathbf{S}^{\text{iF}}, \vec{P}^{\text{i}})$ ermittelt.

Diese Vorgehensweise ist in der Thermomechanik üblich und kann mit der dort angewendeten Methode verglichen werden. Es wird in einem ersten Schritt aufgrund der gewählten Randbedingungen eine Temperaturverteilung des modellierten Körpers bestimmt und in einem daran anschließenden zweiten Berechnungsschritt der Einfluß dieser thermischen Belastung auf die mechanischen Spannungen ermittelt (siehe z.B. RITTER [84]).

Zur Beschreibung des Prozesses der mechanischen Depolarisation wurde ein exponentieller sowie ein linearer Ansatz vorgeschlagen. In Experimenten (z.B. SCHÄUFELE [38]) ist zu beobachten, daß trotz einer hohen mechanischen Druckspannung niemals ein vollständig depolarisierter Zustand erreicht werden kann. Für die hier vorgestellten Finite-Elemente-Rechnungen wird daher der lineare Ansatz (5.31) verwendet, der für hohe Druckspannungen immer einen Rest an remanenter Polarisation P_δ gewährleistet.

Die Werte der für die FE-Rechnungen notwendigen Materialparameter sind in Tabelle (6.1) übersichtlich angegeben und werden für alle weiteren in diesem Kapitel vorgestellten numerischen Simulationen verwendet.

Parameter	Einheit	Wert	Parameter	Einheit	Wert
E_c	kV/mm	1.0	σ_c	MPa	50.0
P_{sat}	mC/m ²	300.0	ε_{sat}	%	0.2
d_{\parallel}	pm/V	350.0	Y	GPa	80.0
d_{\perp}	pm/V	-140.0	ν	-	0.35
$d_{=}$	pm/V	260.0	c^{F}	GPa	5.3
ϵ	mC/kVm	0.015	m	MPa	150.0
c^{P}	kVm/mC	2.0	n	MPa	50.0
P_δ	mC/m ²	100.0			

Tabelle 6.1: Verwendete Materialparameter für die numerischen Finite-Elemente-Simulationen.

Die Materialparameter wurden hierbei möglichst realistisch gewählt. Insbesondere stützt sich die Wahl der Parameter auf die sogenannten PZT's, deren durchschnittliche Kennwerte aus Datenblättern der Firma PI-Ceramic [50] sowie aus Tabellen über verschiedene PZT's in BERLINCOURT *et al.* [85] ermittelt wurden.

6.2 Homogene einachsige Simulationen

Anhand eines einfachen Finite-Elemente-Modells soll das dreidimensionale Materialverhalten mit den hier gewählten Materialparametern aus Tabelle 6.1 verifiziert werden. Aufgrund der gewählten axialsymmetrischen Modellierung sowie einer homogenen Belastung müssen diese Simulationen mit dem einachsigen Verhalten übereinstimmen. Damit ist ein qualitativer Vergleich mit den RUNGE-KUTTA-Rechnungen des eindimensionalen Modells aus Kapitel 4 möglich.

In Bild 6.1 ist ein einfacher zylindrischer Körper dargestellt, der durch ein einzelnes axialsymmetrisches Element mit vier Knoten modelliert wurde.

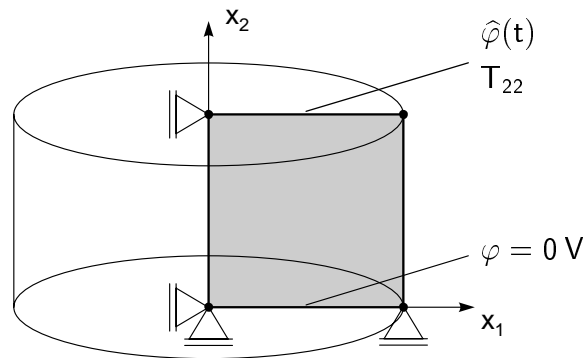


Bild 6.1: Axialsymmetrisches Finite-Elemente-Modell bestehend aus einem Element zur Berechnung des einachsigen elektromechanischen Verhaltens.

Für die rein elektrischen Simulationen wurde als Randbedingung das Potential der unteren Kante des Elements zu null gesetzt ($\varphi = 0 \text{ V}$) und auf die Oberkante ein zyklisch veränderndes Potential $\hat{\varphi}(t)$ aufgebracht.

Aus Symmetriegründen reicht es für die mechanischen Randbedingungen aus, die linke Elementkante in x_1 -Richtung und die Unterkante in x_2 -Richtung zu fixieren. Die obere Kante des Elements kann mittels einer zyklischen Spannung T_{22} mechanisch belastet werden.

Aufgrund der elektrischen Randbedingung ist für jeden der vier Knoten das elektrische Potential eindeutig bestimmt. Daher entfällt in diesem Fall der erste Schritt, so daß sofort der zweite Berechnungsschritt, die gekoppelte elektromechanische Simulation, durchgeführt werden kann.

Da bei diesen Finite-Elemente-Simulationen einachsige Belastungen sowie ein homogener Materialzustand vorliegen, repräsentieren die im folgenden betrachteten Kurvenverläufe den Materialzustand jedes materiellen Punktes des modellierten Bereiches.

In Bild 6.2 ist die dielektrische Hysterese dargestellt, die sich bei einer rein elektrischen Belastung einstellt.

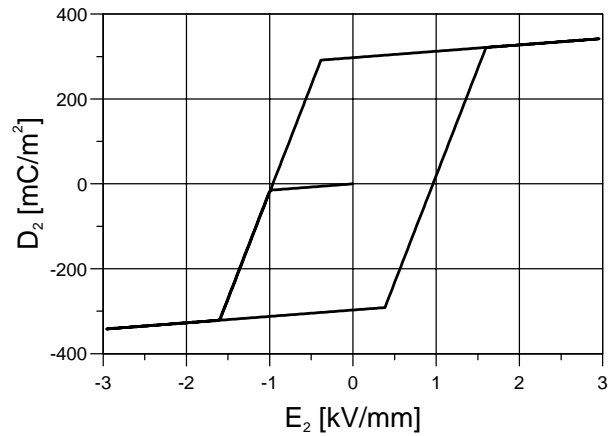


Bild 6.2: Antwortverhalten des dreidimensionalen Materialmodells auf eine einfache homogene rein elektrische Belastung E_2 (dielektrische Hysterese: D_2 über E_2).

Durch ein sich zyklisch veränderndes elektrisches Potential $\hat{\varphi}(t)$ wird ein elektrisches Feld in x_2 -Richtung induziert. Die Hysterese zeigt die bekannten Merkmale, die auch bei den numerischen RUNGE-KUTTA-Rechnungen des eindimensionalen Materialmodells (vgl. Bild 4.2) beobachtet wurden.

Ausgehend von einem ungeladenen Zustand stellt sich zu Beginn linear dielektrisches Kurvenverhalten ein. Überschreitet das belastende elektrische Feld die Koerzitivfeldstärke, setzen irreversible Prozesse und damit die Entwicklung des remanenten Polarisationsanteils P_2^i ein. Nach der vollständigen Sättigung von \vec{P}^i ist wieder ein linearer Verlauf zu beobachten. Dies entspricht einem reversiblen, linear dielektrischen Materialverhalten. Ein jetzt verschwindendes elektrisches Feld läßt eine bleibende dielektrische Verschiebung von $D_2 = P_{sat}$ zurück.

Die bei diesem Prozeß zugehörige Dehnung S_{22} in Belastungsrichtung E_2 ist in Bild 6.3a dargestellt. Sie zeigt die bekannte Schmetterlingshysterese (vgl. Bild 4.3) mit einem linear piezoelektrischen Kurvenverhalten im oberen Ast der Hysterese. In diesem Bereich wird der Verlauf durch die Steigung des Piezomoduls $d_{||}$ und der remanenten Dehnung $S_{22} = \varepsilon_{sat}$ für $E_2 = 0$ kV/mm bestimmt.

Aufgrund einer Dehnung in x_2 -Richtung stellt sich eine Querkontraktion senkrecht zur Belastungsrichtung (S_{11} und S_{33}) ein. Die induzierte Querdehnung S_{11} über der elektrischen Feldkomponente E_2 ist in Bild 6.3b dargestellt. Wegen der volumentreuen Eigenschaft der elektrisch induzierten remanenten Dehnung ist im Vergleich zu Bild 6.3a eine gestauchte Schmetterlingshysterese zu erkennen. Für $E_2 = 0$ kV/mm ist eine Querkontraktion von 0.5 zu erkennen, so daß sich eine nur halb so große remanente Dehnung senkrecht zur x_2 -Richtung einstellt. Im oberen Ast der gestauchten Schmetterlingshysterese entspricht die Steigung der Geraden dem senkrechten Piezomodul d_{\perp} .

Das Verhalten eines materiellen Punktes bei einer rein mechanischen Belastung durch

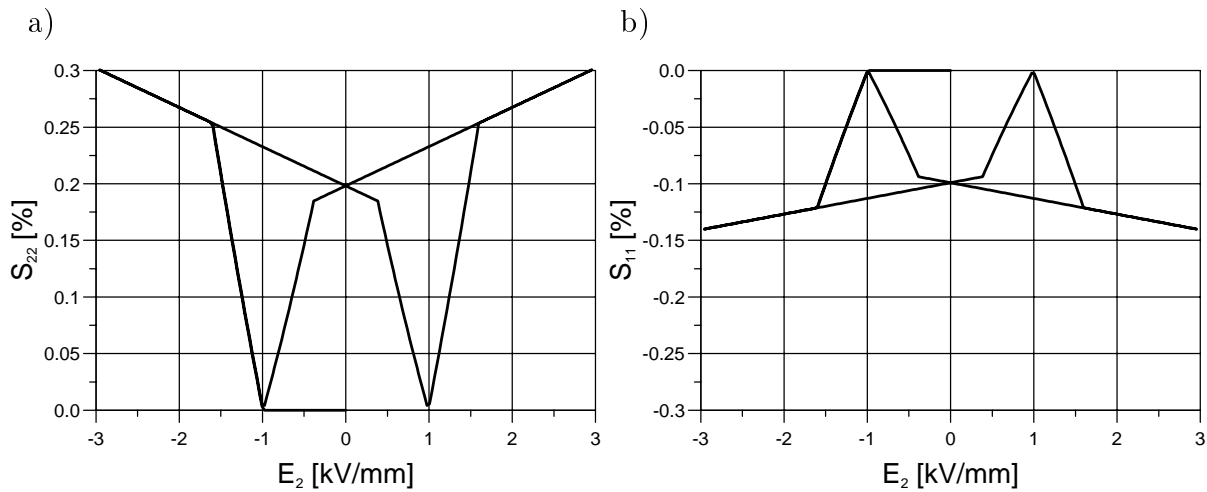


Bild 6.3: Antwortverhalten des dreidimensionalen Materialmodells auf eine einfache homogene rein elektrische Belastung E_2 :

a) Längsdehnung: S_{22} über E_2 .

b) Querdehnung: S_{11} über E_2 .

eine zyklische mechanische Spannung T_{22} ist in Bild 6.4 dargestellt. Die Hysterese stimmt qualitativ mit dem eindimensional beobachteten Kurvenverlauf überein (vgl. Bild 4.4). Für eine detaillierte Beschreibung des Bildes wird auf Abschnitt 4.3 verwiesen.

Das Antwortverhalten des dreidimensionalen Materialmodells auf eine einfache, kombinierte elektromechanische Belastung wird exemplarisch an folgendem Beispiel diskutiert. Von einem ungepolten Zustand ausgehend, wird eine mechanische Zug- bzw. Druckspannung in x_2 -Richtung aufgebracht ($T_{22} = \pm 50$ MPa) und dem weiteren Belastungsprozess konstant überlagert. Dieser besteht aus einer elektrischen Belastung mittels eines sich

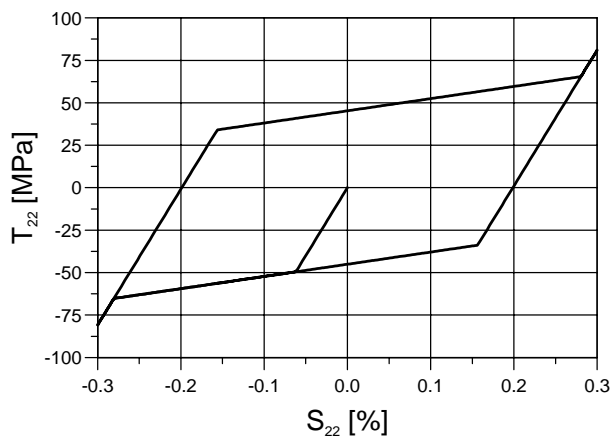


Bild 6.4: Antwortverhalten des dreidimensionalen Materialmodells auf eine einfache homogene rein mechanische Belastung T_{22} (ferroelastische Hysterese: T_{22} über S_{22}).

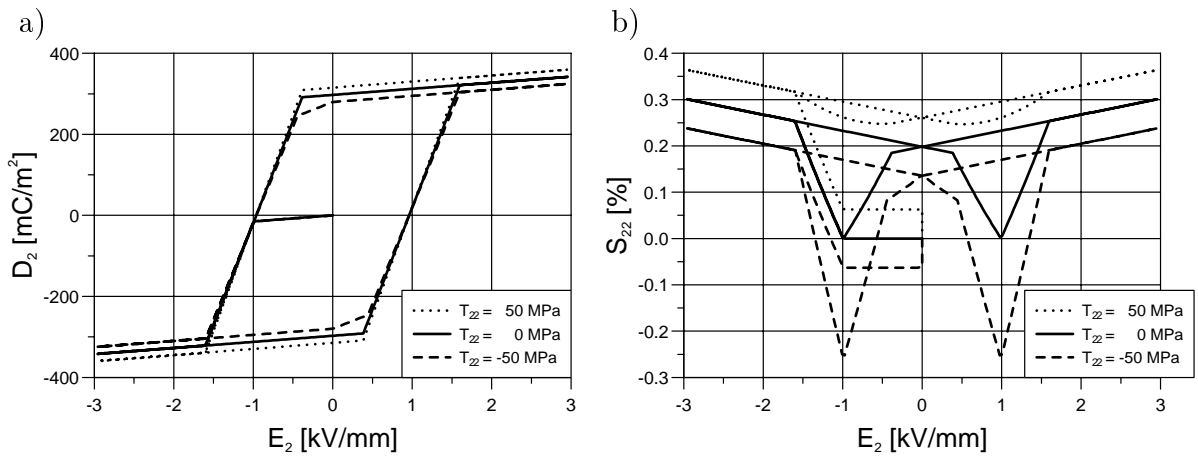


Bild 6.5: Am Beispiel einer einfachen, homogenen elektromechanischen Belastungsgeschichte wird der Einfluß einer konstant überlagerten mechanischen Zug- oder Druckspannung ($T_{22} = \pm 50$ MPa) auf die ferroelektrischen Hysteresen demonstriert:

- a) Dielektrische Hysterese: D_2 über E_2 .
- b) Schmetterlingshysterese: T_{22} über S_{22} .

zyklisch verändernden Potentials $\hat{\varphi}(t)$. Die sich bei diesen Simulationen einstellenden ferroelektrischen Hysteresen sind in Bild 6.5 dargestellt.

Bild 6.5a zeigt zwei dielektrische Hysteresen mit einer überlagerten Zug- bzw. Druckspannung sowie eine Referenzkurve, bei der keine mechanische Spannung überlagert ist. In den drei Hysteresen ist der *direkte piezoelektrische Effekt* zu erkennen. Eine überlagerte Zugspannung (gepunktete Linie) bewirkt eine größere maximal erreichbare dielektrische Verschiebung, während eine überlagerte Druckspannung (gestrichelte Linie) diese verkleinert (siehe auch Abschnitt 4.2.1). Die Differenz zwischen den Kurven im oberen dielektrischen Ast kann aus den Grundgleichungen des Kapitels 3 ermittelt werden und bestimmt sich anhand der zweiten Komponente des Ausdrucks $d\mathbf{l} : \mathbf{T}$.

Die dielektrische Hysterese mit einer überlagerten Druckspannung von $T_{22} = -50$ MPa zeigt einen weiteren interessanter Effekt. Erreicht das elektrische Feld nach einem Polungsprozeß in positiver aber auch in negativer x_2 -Richtung den Wert null, wurde eine bleibende remanente Polarisation induziert. Richtet sich nun das elektrische Feld in entgegengesetzter Richtung aus, setzt der Prozeß der mechanischen Depolarisation ein. Grund für dieses Verhalten ist die Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld und der remanenten Polarisation (vgl. Abschnitt 4.4.3 sowie 5.1.2). Diese Eigenschaft führt unter der jetzt vorliegenden Voraussetzung, daß das elektrische Feld entgegen der remanenten Polarisation orientiert ist ($\vec{E} \cdot \vec{e}_{Pi} < 0$), zu einer Herabsetzung der Koerzitivspannung. Damit ist die überlagerte mechanische Druckspannung in der Lage, den Prozeß der mechanischen Depolarisation auszulösen. Erreicht die Kurve der mechanischen Depo-

larisation die Flanke der Hysterese, so endet dieser Prozeß. Die Wirkung des elektrischen Feldes, remanente Polarisation auszurichten, überwiegt nun die mechanisch depolarisierende Wirkung der überlagerten Spannung. Damit setzt die Entwicklung der remanenten Polarisation in Richtung des elektrischen Feldes ein.

In Bild 6.5b ist die Schmetterlingshysterese der sich bei diesen Prozessen einstellenden Dehnung S_{22} über dem elektrischen Feld E_2 dargestellt. Zum Vergleich ist auch hier die Hysterese ohne eine überlagerte mechanische Spannung eingezeichnet.

Aufgrund der anfänglich aufgebrauchten Zug- bzw. Druckspannung stellt sich für $E_2 = 0$ kV/mm ein vertikaler Verlauf der Kurve aus dem Ursprung ein. Aus den tensoriellen Grundgleichungen des Kapitels 3 bestimmt sich diese Verschiebung aus der 2-2-Komponente des Ausdrucks $\mathbf{C}^{-1} : \mathbf{T}$. Dieser zusätzlich überlagerte Anteil führt für das sich aufbauende elektrische Feld zu einem vertikal verschobenen Startpunkt der Schmetterlingshysterese. Im oberen linear piezoelektrischen Ast der Hysterese ist dieser Beitrag als Differenz zur Kurve mit $T_{22} = 0$ MPa erkennbar.

Die Überlagerung einer mechanischen Zugspannung (gepunktete Linie mit $T_{22} = 50$ MPa) führt zu einer starken Stauchung der Schmetterlingshysterese. Die Beeinflussung der Koerzitivspannung durch das elektrische Feld und die remanente Polarisation bewirken eine Herabsetzung des Grenzwertes für das Einsetzen remanenter ferroelastischer Dehnung. Eine überlagerte Zugspannung kann dann im Verlauf des elektrischen Belastungszyklusses eine positive, remanente ferroelastische Dehnung in x_2 -Richtung induzieren. Dabei wird der durch Abbau remanenter Polarisation 'freigegebene' ferroelektrische Dehnungsanteil von der ferroelastischen Dehnung aufgezehrt. Bei diesem Prozeß muß $h^F(\mathbf{S}^{iF}, \mathbf{S}^{iP}) \leq 0$ eingehalten werden, so daß nach (5.35) weiterhin $\|\mathbf{S}^{iF}\| + \|\mathbf{S}^{iP}\| \leq \sqrt{\frac{3}{2}} \varepsilon_{sat}$ erfüllt bleibt. Der sich entwickelnde ferroelastische Dehnungsanteil ist der gesamten Dehnung überlagert und führt in diesem Fall zu dieser starken Stauchung der Schmetterlingshysterese.

Unter Zuhilfenahme der Mechanismen der Domänenprozesse kann dieser phänomenologische Kurvenverlauf mikroskopisch begründet werden. Erreicht das angreifende elektrische Feld seinen Maximalwert, ist ein vollständig gepolter Zustand erreicht. Bei diesem Polungsprozeß werden alle Domänen in Belastungsrichtung orientiert und hierbei die remanenten Polarisationsvektoren der Domänen in Richtung des elektrischen Feldes vollständig ausgerichtet. In Bild 6.5a ist zu erkennen, daß in dieser vorliegenden Situation die zyklische Belastung durch das elektrische Feld den remanenten Polarisationsvektor vollständig abbaut und dann erneut in Feldrichtung ausrichtet. Bei dieser Umorientierung findet, wie in Bild 6.5b gezeigt, nahezu keine Änderung der gesamten Dehnung in Feldrichtung statt. Die Ursache ist in der überlagerten Zugspannung T_{22} zu sehen. Sie fixiert die Orientierung der Domänen in x_2 -Richtung durch die Bildung remanenter ferroelastischer Dehnung und läßt kaum elektrisch induzierte 90°-Umklappprozesse aus dieser Richtung zu. Aus dem Antwortverhalten des Materialmodells läßt sich schließen, daß nur 180°-Umklappprozesse durch das elektrische Feld hervorgerufen werden und sich somit zwar die gesamte Pola-

risation des Materials, kaum jedoch seine gesamte Dehnung ändert. Zur Bedeutung der Mechanismen von 90° - und 180° -Umklappprozessen siehe ergänzend Abschnitt 2.3.

Wird eine mechanische Druckspannung (gestrichelte Linie mit $T_{22} = -50$ MPa) einem sich zyklisch verändernden elektrischen Feld in x_2 -Richtung überlagert, so können zwei Effekte beobachtet werden. Zum einen tritt bei Richtungsumkehr des elektrischen Feldes der bereits diskutierte Prozeß der mechanischen Depolarisation ein (siehe Knick im Kurvenverlauf bei $S_{22} = 0.13\%$). Zum anderen wird auch hier die Koerzitivspannung im Verlauf der elektrischen Belastung soweit herabgesetzt, daß die überlagerte Druckspannung in der Lage ist, diesmal negative, remanente ferroelastische Dehnungen in x_2 -Richtung zu induzieren. Dies führt zu einem zusätzlichen Beitrag in der gesamten Dehnung in x_2 -Richtung und damit zu einer Streckung des Flügels der Schmetterlingshysterese.

6.3 Modell eines Stapelaktuator

Nachdem an einfachen Finite-Elemente-Simulationen das dreidimensionale Materialmodell verifiziert wurde, sollen anhand einer Finite-Elemente-Analyse eines Stapelaktuator die dort auftretenden komplexen elektromechanischen Effekte studiert werden. Der typische Aufbau eines solchen Multilayer-Aktuator ist in Bild 6.6 dargestellt.

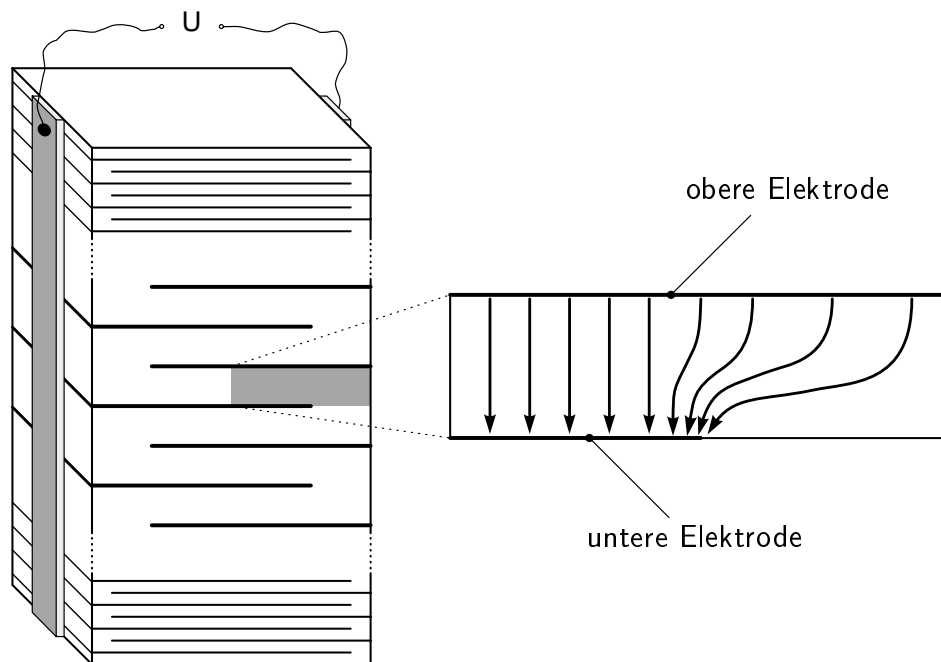


Bild 6.6: Prinzipieller Aufbau eines Stapelaktuator. Im vergrößerten und modellierten Bereich sind symbolisch die sich einstellenden elektrischen Feldlinien eingezeichnet.

Er besteht aus hunderten von keramischen Schichten, zwischen denen sich eine dünne

Metallschicht, die sogenannte Elektrode befindet. Diese werden alternierend auf die Außenseite des Aktuators geführt und mit den dort befindlichen externen Elektrodenbändern verbunden. An den Bändern selbst wird über eine Spannungsquelle U ein Potential φ aufgebracht, so daß sich in den keramischen Zwischenschichten ein elektrisches Feld bildet. Hierbei stellt sich in der Mitte des Aktuators ein homogenes und in den beiden Randbereichen ein stark inhomogenes elektrisches Feld ein (siehe vergrößerten Bereich in Bild 6.6).

Aufgrund der inhomogenen Verteilung der Feldlinien im Bereich des rechten Endes der unteren Elektrode, der sogenannten Elektrodenspitze, bildet sich dort ein Bereich erhöhter Belastung aus. In einem realen Aktuator bilden sich in der Umgebung der Elektrodenspitze oftmals Risse, die sich im Laufe der Belastung ausbreiten und zu einem globalen Versagen führen (siehe ZICKGRAF [86]). Experimentelle Untersuchungen zur Ausbreitung von Rissen und deren Mechanismen in ferroelektrischen Keramiken wurden beispielsweise von ABURATANI *et al.* [87] an Aktuatoren, von METHTA und VIRKAR [88] sowie von LYNCH *et al.* [89] an kompakten PZT- bzw. PLZT-Keramiken durchgeführt. Daher muß wegen der starken Inhomogenität um die Elektrodenspitze dieser Bereich im Finite-Elemente-Modell feiner vernetzt werden, für eine detaillierte und quantitative Aussage im Nahbereich der Elektrodenspitze ist es jedoch zu grob. In Bild 6.7 ist das zugehörige Finite-Element-Netz dargestellt.

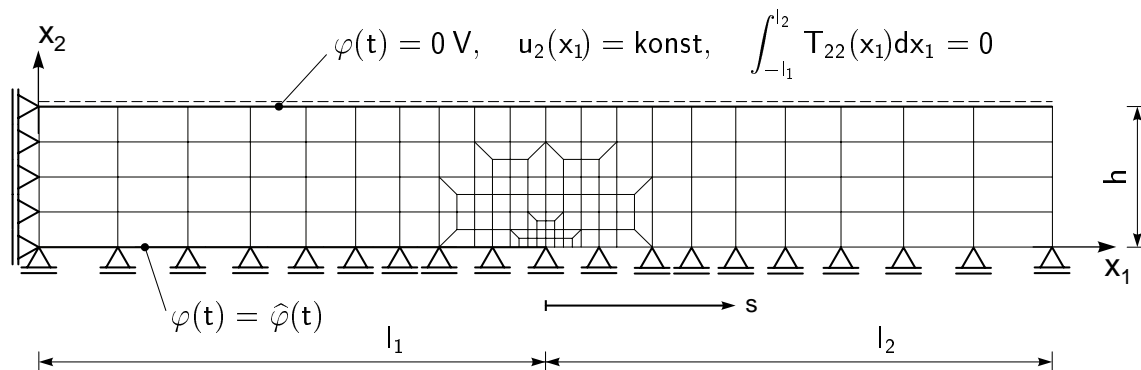


Bild 6.7: Finite-Elemente-Modell des in Bild 6.6 grau unterlegten Bereichs mit den elektrischen und mechanischen Randbedingungen.

Aus Symmetriegründen reicht es aus, nur den grau unterlegten Bereich in Bild 6.6 für die Finite-Elemente-Analyse zu modellieren, wobei es sich hier um ein ebenes Problem handelt, so daß hinsichtlich des Dehnungszustandes der ebene Verzerrungszustand angenommen werden kann. Mit dem Finite-Elemente-Modell läßt sich der Materialzustand des gesamten Stapelaktuators durch entsprechende Spiegelung erfassen. Dafür werden alle Knoten der unteren Kante der modellierten Struktur in x_2 -Richtung fixiert, während sie in x_1 -Richtung frei beweglich bleiben. Entsprechend wird die linke Kante nur in x_1 -Richtung festgehalten. Damit der modellierte Bereich um die x_1 -Achse spiegelbar bleibt, darf die obere Kante nicht rotieren oder sich in x_2 -Richtung deformieren. Nur eine Be-

wegung parallel zur x_1 -Achse ist erlaubt, so daß die zusätzliche Zwangsbedingung, alle dort befindlichen Knoten müssen dieselbe Verschiebung $u_2(x_1) = konst$ über der Zeit t besitzen, vorgeschrieben wird.

Die Abmessungen des modellierten Bereichs wurden in Anlehnung an HOM und SHANKAR [75, 76] gewählt. Nach GONG und SUO [90] sollten für eine repräsentative Struktur die beiden Abmessungen l_1 und l_2 sehr viel größer als h sein. Daher wurde die von HOM und SHANKAR angegebene Höhe h auf die Hälfte reduziert ($h = 57.5 \mu\text{m}$) und in Anlehnung an GONG und SUO l_1 und l_2 gleich groß gewählt ($l_1 = l_2 = 205 \mu\text{m}$).

Zur Simulation des Polungsvorganges eines Aktuators wurde als elektrische Belastungsgeschichte die obere Elektrode auf *Masse* gelegt $\varphi(t) = 0 \text{ V}$ und die untere mit einem Potential $\varphi(t) = \hat{\varphi}(t)$ beaufschlagt. Der Verlauf des Potentials $\hat{\varphi}$ über der Zeit t ist in Bild 6.8 dargestellt.

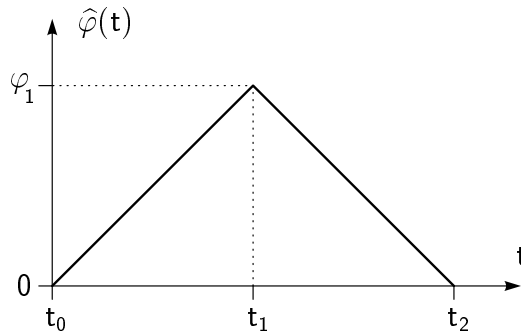


Bild 6.8: Verlauf des Potentials $\hat{\varphi}(t)$ der unteren Elektrode des Stapelaktuators über der Zeit t .

Das Potential der unteren Elektrode steigt in der Belastungsphase bis zum Zeitpunkt $t_1 = 100 \text{ s}$ monoton an, erreicht dabei sein Maximum von $\varphi_1 = -170 \text{ V}$ und fällt während der Entlastung kontinuierlich wieder auf Null ab ($t_2 = 200 \text{ s}$). Bei maximaler elektrischer Belastung ($t = t_1$) wird ein elektrisches Feld in Höhe von -3 kV/mm induziert, so daß mit den hier gewählten Materialparametern (Tabelle 6.1) für den einachsigen homogenen Fall eine vollständige Polung im Material induziert werden kann.

Wie zuvor erläutert, teilt sich die elektromechanische Finite-Elemente-Simulation des Polungsprozesses in eine rein dielektrische und eine elektromechanisch gekoppelte Berechnung auf. Bei dieser Vorgehensweise wird die Kopplung elektrisch \rightarrow mechanisch, nicht jedoch die Rückkopplung mechanisch \rightarrow elektrisch berücksichtigt, d.h. mechanische Spannungen bewirken keine Änderung des vorgegebenen elektrischen Feldes. Nach GONG *et al.* [91] ist die Kopplung zwischen den elektrischen und mechanischen Größen nur im Nahbereich der Elektrodenspitze zu beachten. Unter der Voraussetzung, daß die dielektrische Verschiebung limitiert ist und damit auch die Dehnung sowie die Spannung, kann der Kopplungseffekt sogar vernachlässigt werden. Mit den hier durchgeführten FE-

Simulationen soll der Einfluß der nichtlinearen Materialeigenschaften auf das Verhalten eines Stapelaktuators untersucht werden, wobei auf die Analyse einer realen Struktur nicht in jeder Einzelheit eingegangen wird. Trotzdem ist eine quantitative Aussage über den Eigenspannungszustand während und nach dem Polungsprozeß möglich.

6.4 Dielektrische Analyse des Stapelaktuators

In diesem Abschnitt wird der erste Berechnungsschritt, die rein dielektrische Simulation, durchgeführt und dabei das Potential $\hat{\varphi}(t)$ auf die untere Elektrode aufgebracht. Bild 6.9 stellt den Verlauf des Potentials $\varphi(x_1, x_2)$ bei maximaler Belastung ($t = t_1$) für ein linear und nichtlinear dielektrisches Materialverhalten gegenüber. Das lineare dielektrische Materialverhalten wurde hierbei als Sonderfall (für $E_c \rightarrow \infty$) mit den nichtlinearen dielektrischen Materialroutinen berechnet.

Da mit diesen Ergebnissen nur qualitative Aussagen getroffen werden sollen, wurde auf die Angabe der Zahlenwerte in den Konturplots verzichtet. Die Grenze zwischen zwei grauschattierten Bereichen zeigt Werte konstanten Potentials. Je dunkler die Kontur, desto negativer der Potentialwert (aufgrund der Belastung liegt an der unteren Elektrode ein negatives Potential von -170 V an).

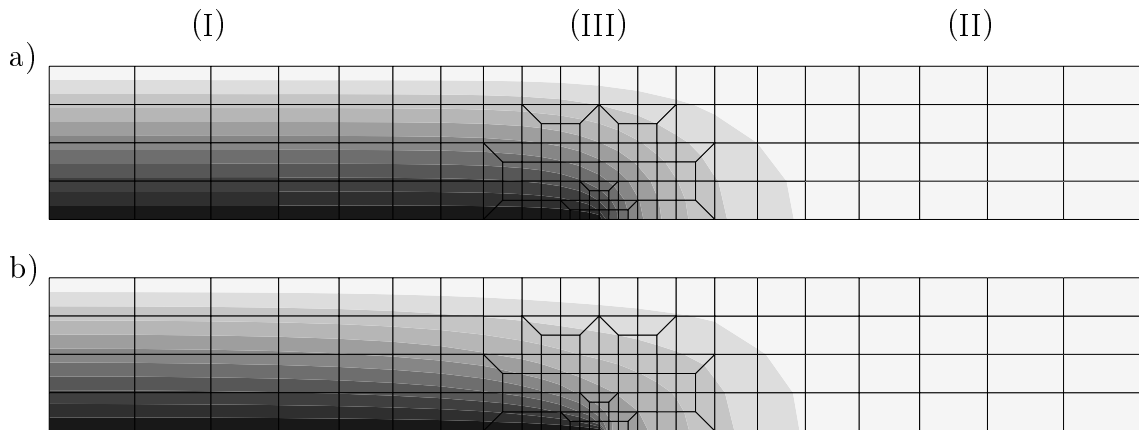


Bild 6.9: Konturplot des sich einstellenden elektrischen Potentials zum Zeitpunkt der maximalen, rein dielektrischen Belastung φ_1 ($t = t_1$).

a) Lineare Dielektrizität.

b) Nichtlineare Dielektrizität.

Die beiden Konturbilder lassen sich in drei charakteristische Bereiche unterteilen: Ein linker Bereich I, der durch äquidistante Potentiallinien ausgezeichnet ist und in dem das Material einer homogenen elektrischen Belastung unterworfen wird. In einen rechten Bereich II, in dem fast kein Potential vorhanden ist und der als elektrisch passiv betrachtet

werden kann und schließlich in einen Übergangsbereich III, der zwischen diesen beiden vermittelt.

Zwischen Bild 6.9a und Bild 6.9b ist ein sichtbarer Unterschied im Verlauf der Potentiallinien zu erkennen. Im Fall der nichtlinear dielektrischen Simulation ist ein flacherer Einfall der Linien konstanten Potentials in den Bereich der Elektrodenspitze zu erkennen. Finite-Elemente-Berechnungen von HOM und SHANKAR [76] für elektrostriktive Keramiken weisen ebenfalls einen flacheren Einfall der Potentiallinien in das Ende der Elektrode auf.

Nach der elektrischen Entlastung ($t = t_2$) zeigen sich besonders deutliche Unterschiede im Potentialverlauf zwischen linearem und nichtlinearem dielektrischen Materialverhalten. Aus der FE-Simulation mit linearer Dielektrizität resultiert ein komplett verschwindendes elektrisches Potential (auf den entsprechenden trivialen Konturplot wurde hier verzichtet). Im Gegensatz dazu ist in Bild 6.10 bei Berücksichtigung des nichtlinearen dielektrischen Materialverhaltens nach der Belastung eine bleibende Potentialverteilung im Bereich der Elektrodenspitze zu erkennen.

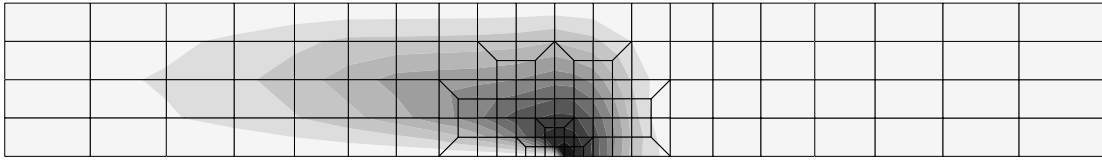


Bild 6.10: Elektrische Potentialverteilung am Ende der nichtlinearen, rein dielektrischen Finite-Elemente-Simulation zum Zeitpunkt $t = t_2$. Zur besseren Darstellung wurden die Graustufen invertiert, so daß hier dunklere schattierte Felder positiven Potentialwerten entsprechen.

Die Existenz dieser Potentialverteilung nach der Belastung läßt sich anhand der konstitutiven Gleichungen plausibel machen.

Ausgehend von der Definition der dielektrischen Verschiebung (3.5), der additiven Zerlegung der Polarisierung in reversible und remanente Anteile (3.10) und der linearen Grundgleichung der Ferroelektrizität (3.12) ergibt sich

$$\vec{D} = (\varepsilon_0 + \epsilon) \vec{E} + \vec{P}^i . \quad (6.3)$$

Berücksichtigt wurde in (6.3) weiterhin der isotrope Dielektrizitätstensor (3.13) sowie die Abwesenheit einer mechanischen Spannung.

Da das elektrische Feld als negativer Gradient des Potentials definiert wird (3.6), läßt sich mittels der Verwendung des *Laplace-Operators* $\Delta(\cdot) = \text{div grad}(\cdot)$ die Differentialgleichung

zweiter Ordnung

$$\Delta\varphi = \frac{1}{\varepsilon_0 + \epsilon} \operatorname{div} \vec{P}^i \quad (6.4)$$

bestimmen. Ein Vergleich von (6.4) mit der *Poissongleichung*

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\varepsilon_0} \varrho \quad (6.5)$$

des elektrostatischen Feldes (z.B. aus GERTHSEN [18] oder WUNSCH [92]) liefert

$$\varrho = -\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0 + \epsilon} \operatorname{div} \vec{P}^i \quad (6.6)$$

Die Divergenz des remanenten Polarisationsvektors \vec{P}^i entspricht hierbei also einer *elektrischen Ladungsdichte* ϱ .

Die vorhandene Ladungsverteilung nach der Entlastung ($t = t_2$) wird maßgeblich von der räumlichen Veränderung von \vec{P}^i bestimmt. In Bild 6.11 ist hierzu der Vektor der

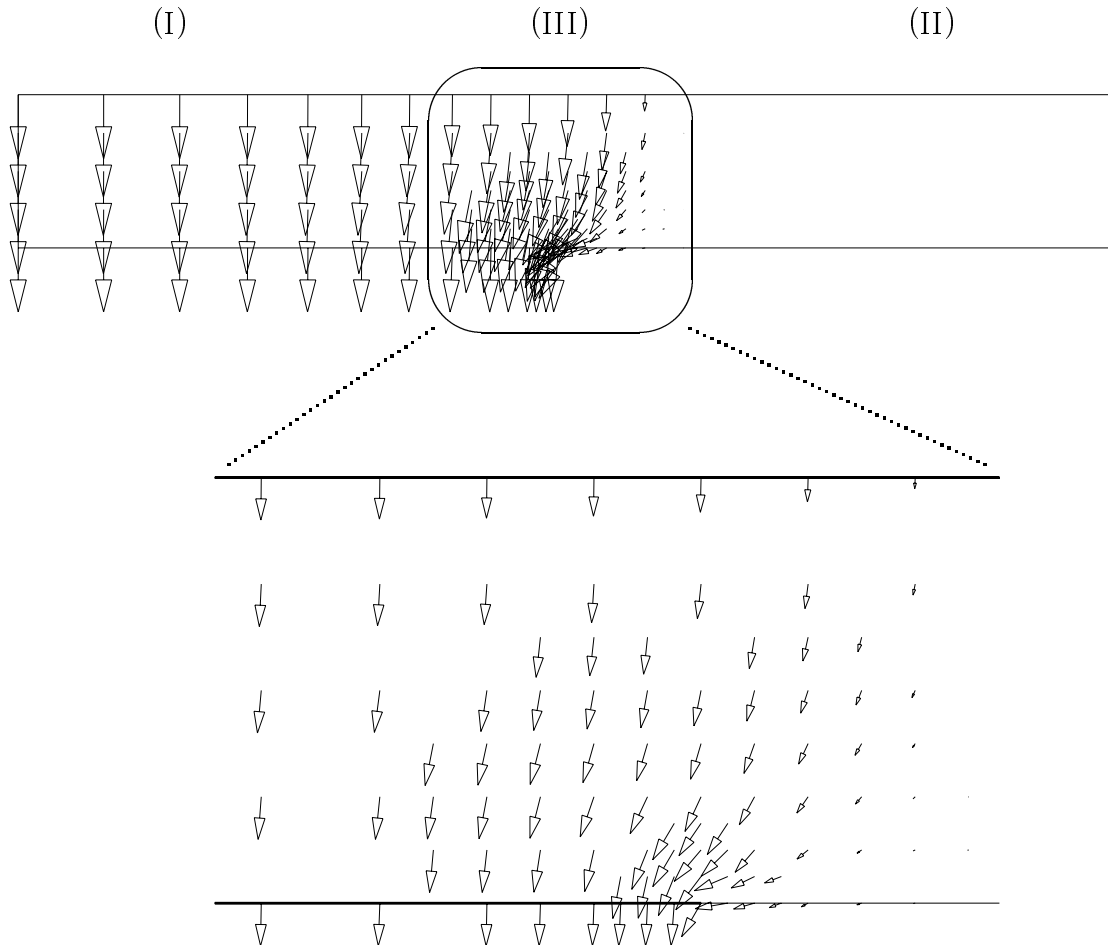


Bild 6.11: Darstellung des induzierten remanenten Polarisationsvektor \vec{P}^i am Ende der nichtlinearen dielektrischen Berechnung ($t = t_2$). Der Bereich um das rechte Ende der unteren Elektrode mit stark veränderlichem remanenten Polarisationsvektor wurde zur Verdeutlichung vergrößert.

remanenten Polarisation \vec{P}^i und ein um die Elektrodenspitze vergrößerter Bereich zur Verdeutlichung dargestellt. Auch hier sind die drei charakteristischen Bereiche wiederzufinden: Der linke, homogene Bereich I, in dem eine vollständige Polung stattgefunden hat ($||\vec{P}^i|| = P_{sat}$), der rechte, homogene Bereich II, der nur linear dielektrisch belastet wurde und daher ungepolt blieb ($\vec{P}^i = \vec{0}$) und schließlich der mittlere, inhomogene Bereich III, mit stark veränderlichem \vec{P}^i .

Nur in diesem mittleren Bereich mit einer inhomogenen Verteilung von \vec{P}^i gilt $\text{div } \vec{P}^i \neq 0$, so daß nach (6.6) eine zugehörige Ladungsdichte ϱ vorhanden sein kann (vergleiche hierzu den Ort des verbleibenden Potentials in Bild 6.10).

Um eine quantitative Aussage über die Größe des Potentials anzugeben, ist in Bild 6.12 der Potentialverlauf $\varphi(x_1 = s, x_2 = 0)$ entlang der unteren Kante des modellierten Bereiches dargestellt.

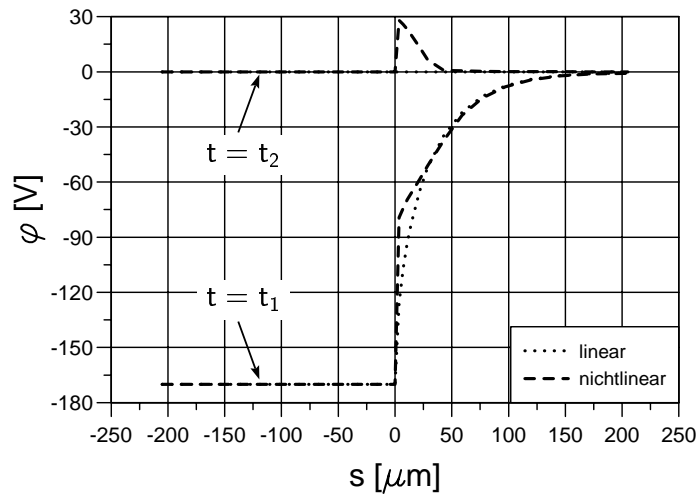


Bild 6.12: Potentialverlauf $\varphi(x_1 = s, x_2 = 0)$ entlang der unteren Kante des modellierten Bereiches für die Zeitpunkte bei maximalem elektrischen Feld ($t = t_1$) und nach Entlastung ($t = t_2$) für eine Simulation mit linearer und nichtlinearer Dielektrizität.

Bei maximaler Belastung ($t = t_1$) ist ein ähnlicher Verlauf zwischen der gepunkteten Linie (lineare Dielektrizität) und der gestrichelten Linie (nichtlineare Dielektrizität) zu erkennen. Aufgrund der Belastungsbedingung liegt für $s < 0$ an der Elektrode ein Potential in Höhe von -170 V an. Vor der Elektrode ($s > 0$) klingen beide Potentialverläufe schnell ab und erreichen am Ende der rechten Seite den Wert null. Die Steigung des Abfalls mit nichtlinearem Materialverhalten ist größer als die mit dem linearen Materialgesetz berechnete.

Ein signifikanter Unterschied tritt nach der Entlastung ($t = t_2$) auf. Im Fall der linearen Dielektrizität verschwindet das Potential völlig. Dagegen verbleibt bei nichtlinearem

Materialverhalten ein Potential vor der Elektrode, das für $s > 0$ schnell auf einen Wert von 30 V ansteigt, dann aber wieder auf den Wert null abklingt. Dieses verbleibende elektrische Potential von 30 V ist im Vergleich zum Maximalwert von -170 V nicht zu vernachlässigen.

6.5 Elektromechanische Strukturanalyse

Aus der ersten, rein dielektrischen FE-Berechnung resultiert der Verlauf des Potentials über der Zeit, der nun als elektrische Belastung vorgegeben wird. Mit ihm wird die elektromechanische Strukturanalyse durchgeführt. Aufgrund der jetzt berücksichtigten elektromechanischen Kopplung im Materialmodell stellen sich gegenüber der rein dielektrischen Berechnung für die elektrischen Größen quantitative andere Werte ein. Beispielsweise beeinflussen nun die zusätzlich vorhandenen mechanischen Größen die Entwicklung der remanenten Polarisation.

Wie bereits aus der rein dielektrischen Analyse ersichtlich wurde, lassen sich auch hier wieder drei charakteristische Bereiche unterscheiden: Ein linker, homogener gepolter Bereich I sowie ein rechter, elektromechanisch passiver Bereich II und eine dazwischenliegende, mehrachsige Zone III. Für jeden dieser drei Bereiche sollen die Resultate exemplarisch an einem mit \otimes gekennzeichneten Materialpunkt während des Polungsprozesses analysiert und das Verhalten in den folgenden Diagrammen diskutiert werden.

6.5.1 Gepolter Bereich I

Bild 6.13 zeigt das im elektromechanischen Berechnungsschritt resultierende Vektorfeld der remanenten Polarisation nach der Entlastung ($t = t_2$). Charakteristisch für den linken, gepolten Bereich I wird das Verhalten des mit \otimes gekennzeichneten Materialpunktes im weiteren genauer betrachtet.

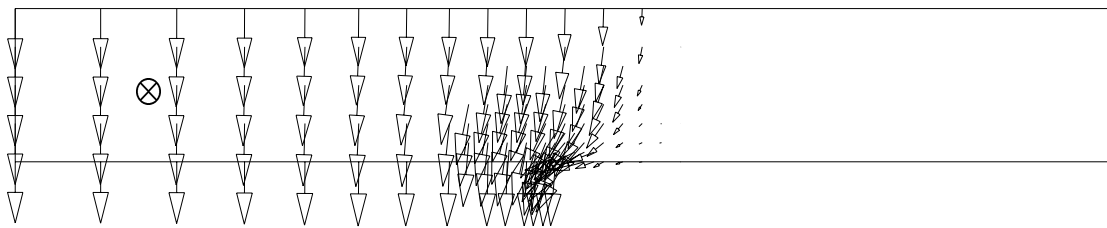


Bild 6.13: Verbleibender remanenter Polarisationsvektor \vec{P}^i nach der elektromechanischen Simulation ($t = t_2$). Der linke gepolte Bereich wird durch den exemplarisch eingezeichneten Materialpunkt \otimes in den folgenden Diagrammen detailliert betrachtet.

Aus dem \vec{P}^i -Vektorbild läßt sich auf der linken Seite eine in Betrag und Richtung

gleichmäßige remanente Polarisierung erkennen, die durch eine weitgehend homogene Belastung in x_2 -Richtung induziert wurde. In Bild 6.14a ist daher in Belastungsrichtung die remanente Polarisierung P_2^i über dem angreifenden elektrischen Feld E_2 dargestellt. Ausgehend von einem ungepolten Zustand im Punkt A ($|\vec{P}^i| = 0$) entwickelt sich eine remanente Polarisierung erst, wenn das elektrische Feld die Koerzitivfeldstärke überschreitet ($|E_2| > E_c$). Erreicht im Punkt B^I dann $|\vec{P}^i| = |P_2^i|$ den Wert der Sättigungspolarisation von $P_{sat} = 300 \text{ mC/m}^2$, ist die remanente Polarisierung gesättigt und bleibt auf ihrem erreichten Maximalwert stehen (\rightarrow C).

Während bei der Entlastungsphase (C \rightarrow D) E_2 monoton abnimmt, bleibt P_2^i anfangs konstant, fällt aber für $E_2 > -0.7 \text{ kV/mm}$ wieder ab. Aus dem Spannungsverlauf T_{22} über dem elektrischen Feld E_2 in Bild 6.15a ist während des Polungsvorganges eine sich aufbauende Druckspannung zu erkennen. Bei elektrischer Entlastung kann sie den Prozeß der mechanischen Depolarisation auslösen $|T_{22}| > \sigma_c$ und bewirkt somit die Reduktion der vorhandenen remanenten Polarisierung. Dies führt zum Knick im Kurvenverlauf (C \rightarrow D) in Bild 6.14a für $E_2 > -0.7 \text{ kV/mm}$.

Ein zu Bild 6.14a ähnlicher Verlauf ist auch für das Verhalten der dielektrischen Verschiebung D_2 über dem elektrischen Feld E_2 in Bild 6.14b zu erkennen. Das Verhalten der dielektrischen Verschiebung wird hierbei von zwei Effekten beeinflusst. Bei Entlastung (C \rightarrow D) tritt der bereits erwähnte Prozeß der mechanischen Depolarisation auf, der zu einem Knick im Verlauf der Kurve führt. Zum anderen ist zu beobachten, daß im Bereich der Sättigung die dielektrische Verschiebung einen kleineren Wert als die remanente Polarisierung aufweist ($|D_2| < |P_2^i|$). Dies ist auf den *direkten piezoelektrischen Effekt* zurückzuführen, aufgrund dessen eine überlagerte Druckspannung in der Lage ist, die Hysterese der dielektrischen Verschiebung reversibel zu stauchen. Dieser Effekt wurde bereits bei der ferroelektrischen Modellierung des eindimensionalen Materialmodells beobachtet (Abschnitt 4.2.1, Bild 4.2b) und dort ausführlich diskutiert.

Mit dem Auftreten remanenter Polarisierung wird auch eine ihr zugehörige remanente ferroelektrische Dehnung induziert. Die Normalkomponente S_{22}^{iP} dieser Dehnung ist in Bild 6.14c über dem elektrischen Feld E_2 dargestellt und zeigt einen betragsmäßig analogen Verlauf zu Bild 6.14a. Während des Polungsvorganges entwickelt sich eine positive Dehnung in x_2 -Richtung (A \rightarrow B^I \rightarrow C), die ebenso bei der Entlastung (C \rightarrow D) durch den Prozeß der mechanischen Depolarisation reduziert wird.

Die vorhandene und überlagerte Druckspannung T_{22} beeinflusst ebenso das in Bild 6.14d dargestellte Verhalten der gesamten Dehnung S_{22} über dem elektrischen Feld E_2 . Da in die gesamte Dehnung der reversible Anteil $\mathbf{C}^{-1}:\mathbf{T}$ additiv eingeht, führt die in x_2 -Richtung aufbauende Druckspannung zu einer Stauchung der S_{22} - E_2 -Trajektorie. Der hier beobachtete Effekt ist vergleichbar mit dem einer konstant überlagerten Spannung bei der ferroelektrischen Modellierung des eindimensionalen Materialmodells (Abschnitt 4.2.2;

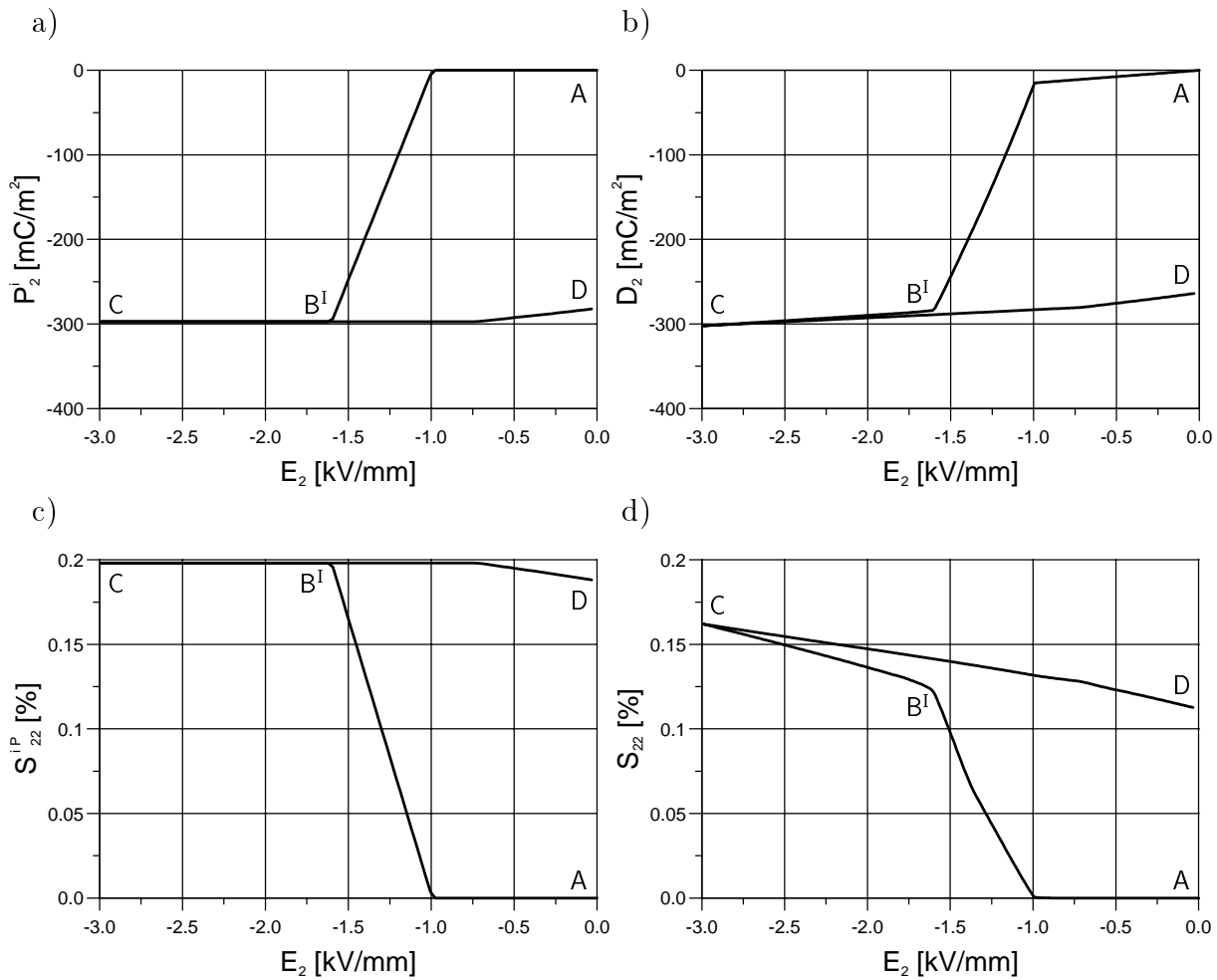


Bild 6.14: Darstellung induzierter elektrischer Größen und Dehnungen in x_2 -Richtung während des Polungsprozesses:

- Remanente Polarisation P_2^i über dem elektrischen Feld E_2 .
- Dielektrische Verschiebung D_2 über dem elektrischen Feld E_2 .
- Der remanenten Polarisation zugehörige Dehnung S_{22}^{iP} über dem elektrischen Feld E_2 .
- Gesamte Dehnung S_{22} über dem elektrischen Feld E_2 .

Bild 4.3b). Dort wurde ein elastischer Dehnungsanteil vor der zyklischen Belastung durch das elektrische Feld konstant überlagert, was zu einer vertikalen Verschiebung der gesamten Schmetterlingshysterese führte. Hier jedoch baut sich eine kontinuierlich zunehmende Druckspannung während der Entwicklung der remanenten Polarisation auf, die damit während des gesamten Polungsprozesses ($A \rightarrow B^I \rightarrow C \rightarrow D$) stets zu einer deutlich kleineren Dehnung für S_{22} gegenüber S_{22}^{iP} führt.

Die Öffnung im linken, gesättigten Ast der S_{22} - E_2 -Kurve in Bild 6.14d ist durch den

Verlauf der mechanischen Spannung T_{22} über dem elektrischen Feld E_2 in Bild 6.15a erklärbar.

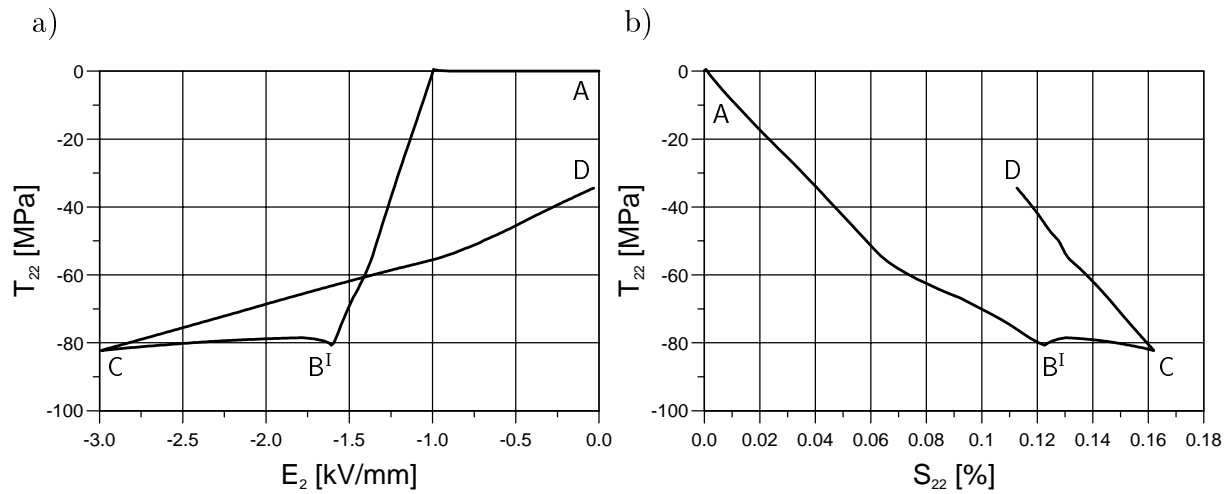


Bild 6.15: Normalkomponente der mechanischen Spannung im linken gepolten Bereich bei der elektromechanischen Simulation:

- a) Spannung T_{22} über dem elektrischen Feld E_2 .
- b) Spannung T_{22} über der gesamten Dehnung S_{22} .

Während des Polungsvorganges baut sich für $|E_2| > E_c$ eine Druckspannung im gepolten Bereich in x_2 -Richtung auf. Die Ursachen dafür werden ausführlich in Abschnitt 6.5.4 erläutert. Erreicht das elektrische Feld Werte kleiner als -1.6 kV/mm ($B^I \rightarrow C$), wird keine weitere remanente Dehnung mehr induziert (\vec{P}^i und damit \mathbf{S}^{iP} sind gesättigt), so daß auch die mechanische Spannung im weiteren nahezu unverändert bleibt (siehe Bild 6.15a).

Trotz konstanter mechanischer Spannung T_{22} von B^I nach C nimmt die gesamte Dehnung S_{22} aufgrund des vorhandenen elektrischen Feldes weiter zu (Bild 6.15b). In diesem Bereich liegt eine lineare Kopplung zwischen dem elektrischen Feld und dem reversiblen Dehnungsanteil ($\mathbf{S}^{rP} = \mathbf{d}^T \cdot \vec{E}$) vor, der als *inverser piezoelektrischer Effekt* charakterisiert ist.

Aufgrund der piezoelektrischen Entlastung tritt eine nahezu lineare Reduktion der mechanischen Druckspannung T_{22} im Bereich von C nach D auf. Der Verlauf der Entlastungskurve in den beiden Bildern 6.15a und 6.15b verläuft hier aber oberhalb der Belastungskurve, da es zuvor den Bereich ($B^I \rightarrow C$) gab, in dem zwar das elektrische Feld bzw. die Dehnung, nicht aber die Spannung zunahm. Damit ist während der Entlastungsphase im Gegensatz zur Belastungsphase eine kleinere elastische Dehnung überlagert, so daß sich die Öffnung im Kurvenverlauf der S_{22} - E_2 -Trajektorie in Bild 6.14d einstellt.

Die Belastung des elektrischen Feldes induziert für den hier betrachteten linken Bereich

eine Druckspannung in x_2 -Richtung, die bei Entlastung teilweise wieder abgebaut wird. Für den hier exemplarisch betrachteten Materialpunkt kann nach dem Polungsprozeß im Punkt D eine verbleibende Druckeigenspannung von -34 MPa festgestellt werden (Bild 6.15).

In Bild 6.16 sind senkrecht zur Polungsrichtung die Quereffekte, die Querdehnung S_{11} sowie die Querspannung T_{33} über dem elektrischen Feld E_2 , dargestellt.

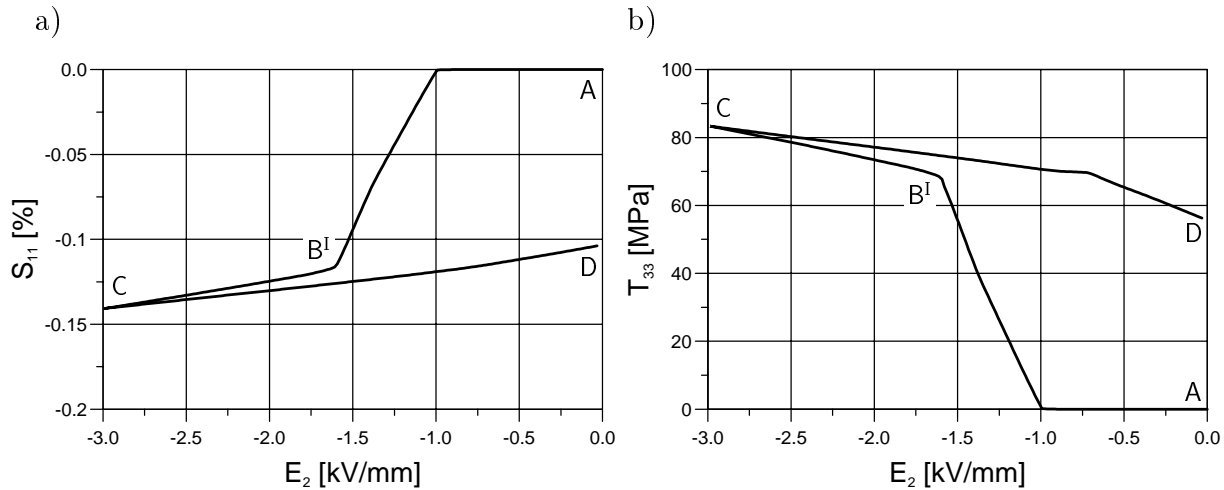


Bild 6.16: Quereffekte in x_1 - und x_3 -Richtung (senkrecht zur Polungsrichtung):

- a) Querdehnung S_{11} über dem elektrischen Feld E_2 .
- b) Querspannung T_{33} über dem elektrischen Feld E_2 .

In x_1 -Richtung stellt sich eine Kontraktion der Struktur ein. Die dabei auftretende Querdehnung S_{11} in Bild 6.16a nimmt negative Werte an und erreicht nach dem Polungsprozeß im Punkt D den halben Wert der Sättigungsdehnung ($\frac{1}{2}\varepsilon_{sat} = 0.1\%$). Aufgrund des frei beweglichen rechten Randes der modellierten Struktur, bildet sich keine Spannung in x_1 -Richtung aus (auf eine Darstellung wird hier verzichtet).

Hinsichtlich der Modellierung des Aktuators wurde der ebene Verzerrungszustand angenommen, so daß in x_3 -Richtung keine Dehnung zugelassen wird. Diese Einschränkung führt jedoch zu einer erheblichen Zugspannung T_{33} , deren Verlauf (A→B^I→C→D) in Bild 6.16b über dem elektrischen Feld E_2 dargestellt ist. Sie muß den durch die Polung induzierten Quereffekt in x_3 -Richtung durch die Bildung remanenter ferroelastischer Dehnung kompensieren.

6.5.2 Passiver Bereich II

Eine detaillierte Diskussion des elektromechanischen Materialverhaltens für den passiven Bereich II findet exemplarisch an dem in Bild 6.17 dargestellten Materialpunkt \otimes statt.

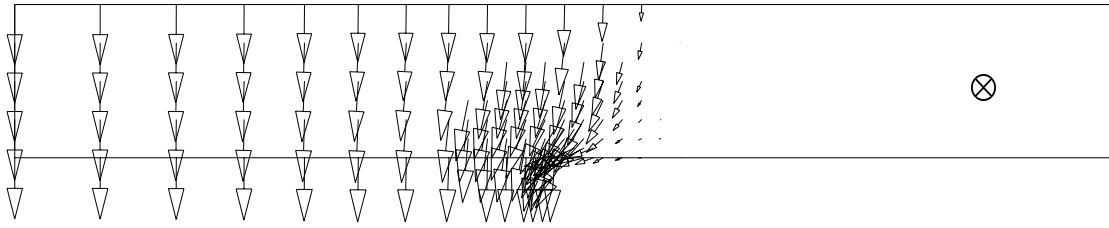


Bild 6.17: Darstellung des verbleibenden remanenten Polarisationsvektors \vec{P}^i nach der elektromechanischen FE-Simulation. Mit \otimes ist der Ort des im weiteren betrachteten Materialpunktes gekennzeichnet.

Aus den Konturplots (Bild 6.9b für $t = t_1$ und Bild 6.10 für $t = t_2$) sowie aus dem Verlauf des Potentials (Bild 6.12) ist zu entnehmen, daß während der gesamten Lastgeschichte die rechte Seite der modellierten Struktur mit nahezu keinem Potential belastet wird. Folglich ist das elektrische Feld zu klein, um in diesem Bereich eine remanente Polarisation zu induzieren. Dies bestätigt auch das in Bild 6.18a dargestellte dielektrische Verhalten D_2 über dem elektrischen Feld E_2 . Da sich im Laufe des gesamten Prozesses (A→C→D) keine irreversible Polarisation gebildet hat, liegt ein rein linear dielektrisches und damit ein elektromechanisch entkoppeltes Materialverhalten vor. Die rechte Seite der modellierten Struktur kann daher als ein elektrisch passiver Bereich mit einer homogenen Belastung in x_2 -Richtung betrachtet werden.

In Bild 6.18b ist das Verhalten der gesamten Dehnung S_{22} über dem elektrischen Feld E_2 dargestellt. Obwohl ein rein dielektrisches Materialverhalten vorliegt, ist ein irreversibler Dehnungsverlauf zu beobachten. Die Dehnung kann aufgrund des elektromechanisch entkoppelten Materialverhaltens nicht elektrisch, sondern nur durch eine vorhandene mechanische Spannung induziert worden sein. Zu den Ursachen für das Auftreten mechanischer Zugspannung im hier betrachteten passiven Bereich wird auf den Beginn des Abschnittes 6.5.4 über den Zustand der verbleibenden Eigenspannungen verwiesen.

In diesem hier vorliegenden, entkoppelten Fall setzt sich die gesamte Dehnung \mathbf{S} additiv aus dem linear elastischen Dehnungsanteil proportional zu Spannung $\mathcal{C}^{-1} : \mathbf{T}$ und der remanenten ferroelastischen Dehnung \mathbf{S}^{IF} zusammen. Es liegen zwei unterschiedliche Mechanismen vor, deren Wechselwirkung in der Öffnung im oberen, linken Ast der S_{22} - E_2 -Trajektorie (Bild 6.18b) zu erkennen ist.

Die mechanische Spannung T_{22} (Bild 6.18c) ist in der Endphase der Belastung (B^{II}→C) größer als in der Anfangsphase der Entlastung (C→D). Diese induziert also zuerst einen größeren, elastischen Dehnungsanteil der 2-2-Komponente des Ausdruckes $\mathcal{C}^{-1} : \mathbf{T}$ als nach

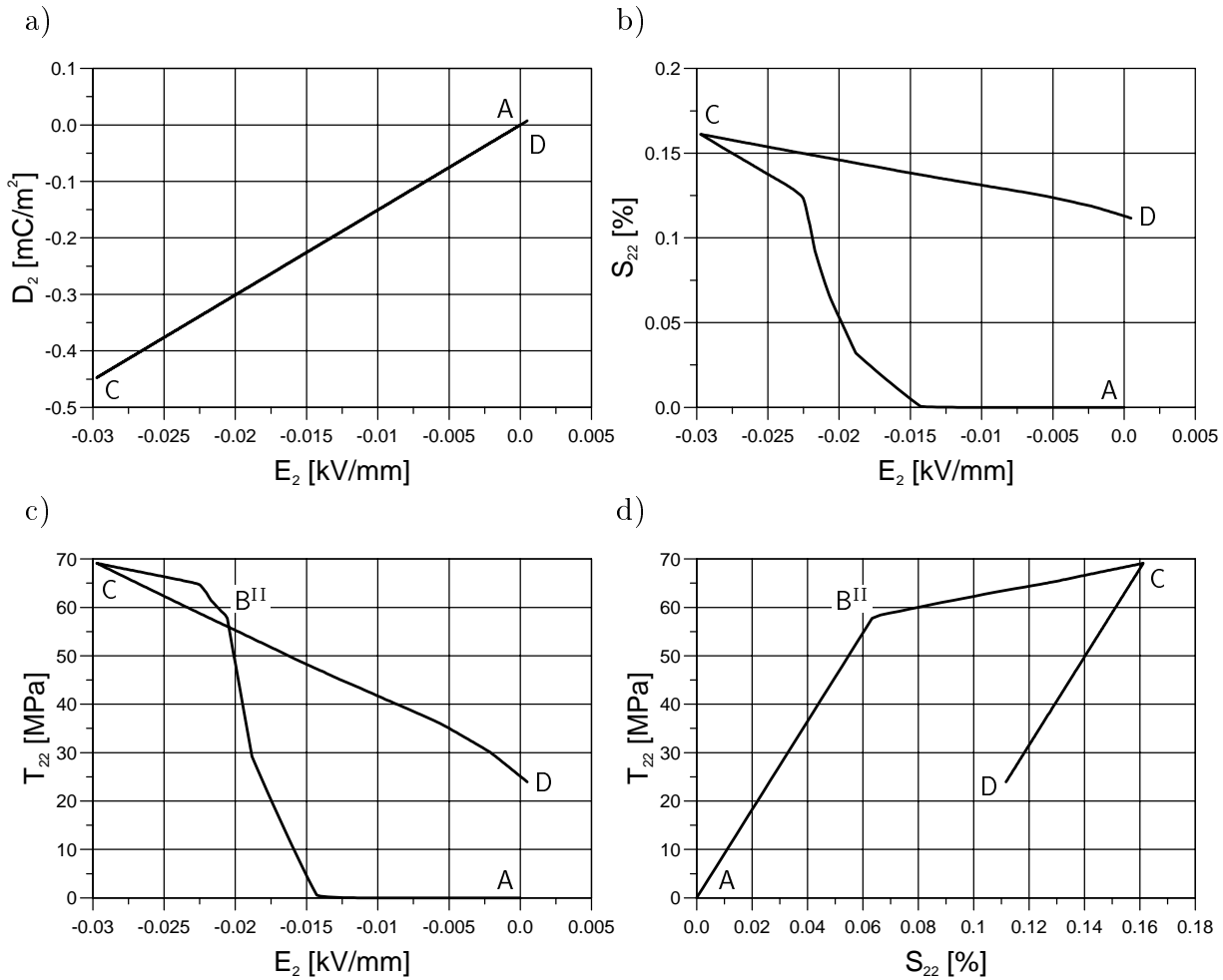


Bild 6.18: Materialverhalten des gepolten Bereiches:

- Dielektrische Verschiebung D_2 über dem elektrischen Feld E_2 .
- Gesamte Dehnung S_{22} über dem elektrischen Feld E_2 .
- Spannung T_{22} über dem elektrischen Feld E_2 .
- Spannung T_{22} über der gesamten Dehnung S_{22} .

der Belastungsumkehr.

Dem wirkt die Entwicklung der remanenten ferroelastischen Dehnung S_{22}^{iF} entgegen, die, aus Bild 6.18d ersichtlich, während der Belastungsphase (B^{II}→C) ständig anwächst und ihren Maximalwert bei Entlastung (C→D) beibehält. Damit trägt S_{22}^{iF} während der Belastungsphase einen kleineren und in der Entlastungsphase einen größeren Dehnungsanteil bei.

Da die Differenz der remanenten Dehnung S_{22}^{iF} größer als bei der 2-2-Komponente des Ausdruckes $\mathbf{C}^{-1}:\mathbf{T}$ ist, bestimmt S_{22}^{iF} überwiegend das Verhalten der gesamten Dehnung und ist für die Öffnung des linken Astes des S_{22} - E_2 -Verlaufes (Bild 6.18b) verantwortlich.

Das rein ferroelastische Materialverhalten ist in Bild 6.18d in Form einer unvollständigen Hysterese zu erkennen. Zu Beginn stellt sich zwischen den Punkten A und B^{II} linear elastisches Materialverhalten ein, das nach Erreichen einer kritischen Zugspannung T_{22} von 58 MPa in ein nicht reversibles Verhalten (B^{II}→C) übergeht. Das Einsetzen irreversibler, ferroelastischer Prozesse findet erst ab einem kritischen Spannungswert für T_{22} über der Koerzitivspannung ($\sigma_c = 50$ MPa) statt. Ursache ist der vorhandene mehrachsige Spannungszustand. Die Werte der T_{11} -Spannungskomponente können aus den bereits diskutierten Gründen vernachlässigt werden. Jedoch wird aufgrund der Annahme des ebenen Verzerrungszustandes eine Querkontraktion in x_3 -Richtung unterbunden und damit eine Spannung T_{33} induziert (auf eine Darstellung wurde verzichtet). Da nur deviatorische Spannungszustände ($\|\mathbf{T}^D\| = \sigma_c$) irreversible Prozesse auslösen können, kann der Wert der Spannungskomponente T_{22} ohne weiteres über dem Wert der Koerzitivspannung liegen. Hierzu ergänzend siehe die Motivation der Verwendung deviatorischer Größen bei der Verallgemeinerung der ferroelastischen Modellierung zu Beginn des Abschnittes 5.2. In der Entlastungsphase (C→D) des Polungsvorganges ist wieder linear elastisches Materialverhalten zu beobachten, an deren Ende im Punkt D eine verbleibende Zugeigenspannung von 24 MPa in x_2 -Richtung festgestellt werden kann.

6.5.3 Mehrachsiger Bereich III

Während im linken sowie im rechten Bereich des modellierten Stapelaktuator nahezu homogene einachsige Verhältnisse herrschen, liegen im Bereich der Elektrodenspitze mehrachsige Zustände vor. Dies wird in der Darstellung des remanenten Polarisationsvektors nach dem Polungsprozeß in Bild 6.19 verdeutlicht, welche im Bereich der Elektrodenspitze ein sich räumlich veränderndes \vec{P}^i zeigt. Die folgenden Betrachtungen beziehen sich auf

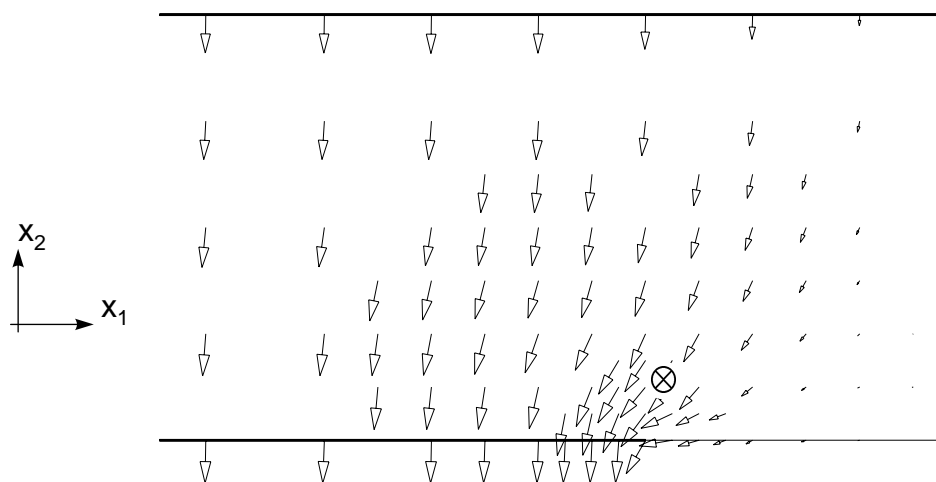


Bild 6.19: Remanenter Polarisationsvektor \vec{P}^i vor der Elektrodenspitze nach dem Polungsprozess ($t = t_2$).

den mit \otimes gekennzeichneten Materialpunkt und charakterisieren damit den mittleren mehrachsigen Bereich III.

Während des gesamten Polungsprozesses wurde der remanente Polarisationsvektor durch den im Bereich III vorhandenen mehrachsigen Belastungszustand stark beeinflusst. Er hat sich, wie Bild 6.20 zeigt, während des Prozesses sowohl im Betrag als auch in seiner Richtung geändert.

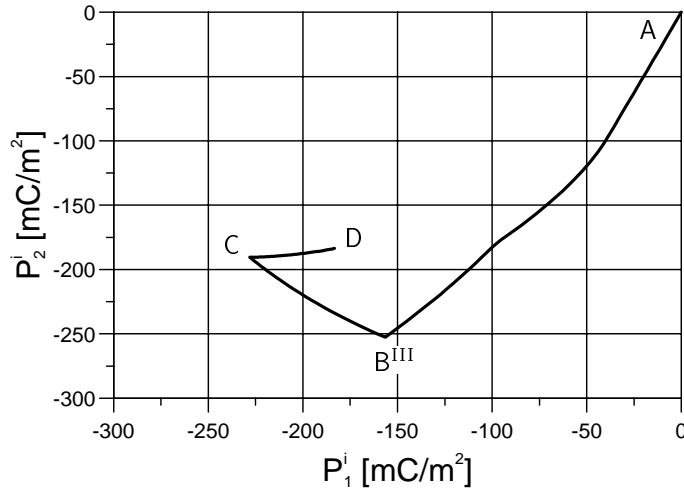


Bild 6.20: Entwicklung der beiden Komponenten P_1^i und P_2^i des remanenten Polarisationsvektors während des Polungsprozesses (Belastung: $A \rightarrow B^{III} \rightarrow C$; Entlastung: $C \rightarrow D$).

Die Entwicklungsgeschichte von \vec{P}^i läßt sich bis zur maximalen Belastung ($A \rightarrow B^{III} \rightarrow C$) in zwei Phasen aufteilen: Zu Beginn ($A \rightarrow B^{III}$) entwickelt sich die remanente Polarisation in Wirkungsrichtung des elektrischen Feldes und erreicht im Punkte B^{III} ihre Sättigung ($\|\vec{P}^i\| = P_{sat}$). Damit ist der Maximalbetrag des remanenten Polarisationsvektors erreicht. In der zweiten Phase ($B^{III} \rightarrow C$) wächst die elektrische Belastung weiter an, so daß der bereits gesättigte, remanente Vektor \vec{P}^i jetzt eine Rotation unter der Wirkung des elektrischen Feldes erfährt. Der Kurvenverlauf ($B^{III} \rightarrow C$) zeigt einen Kreisbogen mit dem konstanten Radius P_{sat} (vergleiche Abschnitt 5.1).

In der Entlastungsphase ($C \rightarrow D$) reduziert sich die P_1^i -Komponente während P_2^i sich kaum verändert. Somit rotiert der remanente Polarisationsvektor etwa in Richtung seiner ursprünglichen, gesättigten Lage B^{III} zurück, wobei auch sein Betrag geringfügig abnimmt. Nach dem Polungsprozeß verbleibt für den hier repräsentativ gewählten Materialpunkt eine remanente Polarisation von etwa 86% der Sättigungspolarisation P_{sat} ($\|\vec{P}^i\| = 259 \text{ mC/m}^2$).

Der Prozeß der Rotation von \vec{P}^i beeinflusst damit das ferroelektrische sowie das ferroelastische Materialverhalten des betrachteten Materialpunktes. In Bild 6.21a ist die dielek-

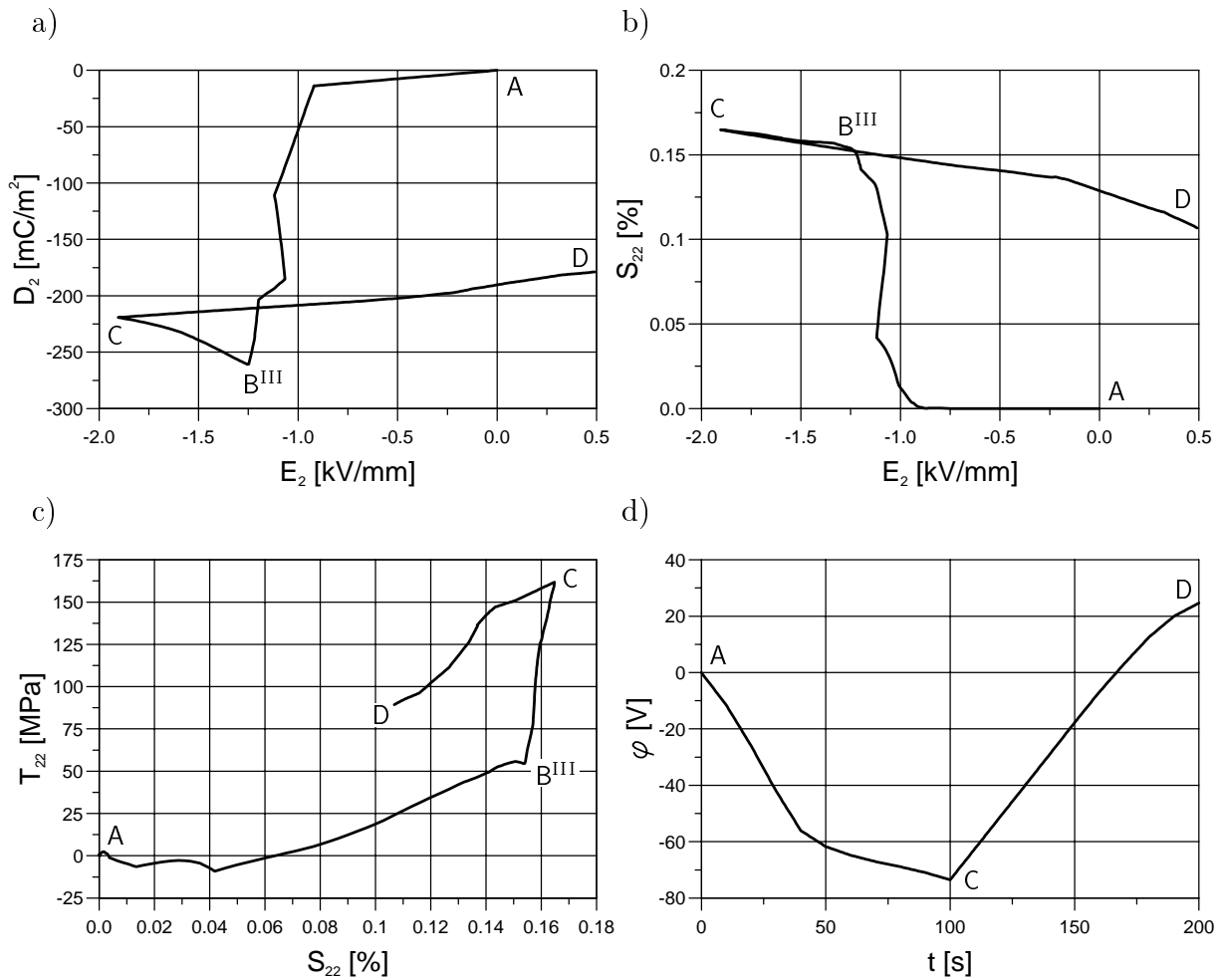


Bild 6.21: Veränderung des elektrischen und mechanischen Materialzustandes in der Nähe der Elektrodenspitze während des Polungsprozesses:

- Dielektrische Verschiebung D_2 über dem elektrischen Feld E_2 .
- Gesamte Dehnung S_{22} über dem elektrischen Feld E_2 .
- Spannung T_{22} über der gesamten Dehnung S_{22} .
- Elektrisches Potential φ über der Zeit t .

trische Trajektorie dargestellt. Sie zeigt im Anschluß an den linear dielektrischen Verlauf einen nichtlinearen Bereich, der bis zur maximalen elektrischen Belastung reicht. Bei Entlastung (C→D) ist wieder linear dielektrisches Verhalten zu beobachten. Die Schleife im linken Ast des D_2 - E_2 -Kurvenverlaufes wird durch die Rotation von \vec{P}^i hervorgerufen, da in dieser Phase die Komponente P_2^i kontinuierlich abnimmt (der Betrag von P_1^i hingegen nimmt zu). Dadurch reduziert sich D_2 , so daß sich nach der Sättigung der remanenten Polarisation im Punkt B^{III} kein linearer Verlauf einstellen kann.

Über dem elektrischen Feld E_2 ist in Bild 6.21b die Dehnung S_{22} aufgetragen. Anfänglich

ist ein entkoppeltes Materialverhalten zu beobachten, das noch vor dem Erreichen der Koerzitivfeldstärke in den irreversiblen Bereich übergeht. Die Grenze wird hierbei durch die Norm des Vektors \vec{E} , nicht durch den Betrag einer seiner Komponente (z.B. E_2) bestimmt. Ist der remanente Polarisationsvektor gesättigt und rotiert er unter der Last des elektrischen Feldes, ist von \mathbf{B}^{III} nach \mathbf{C} linear piezoelektrisches Verhalten zu beobachten. Der Grund für das Auftreten des linearen Kurvenverlaufes im oberen, linken Ast der S_{22} - E_2 -Trajektorie (keine Bildung einer Schleife) besteht im Zusammenspiel zwischen den beiden remanenten Dehnungsanteilen \mathbf{S}^{iP} und \mathbf{S}^{iF} . Die gesamte remanente Dehnung $\mathbf{S}^{\text{i}} = \mathbf{S}^{\text{iP}} + \mathbf{S}^{\text{iF}}$ setzt sich additiv aus diesen beiden Anteilen zusammen. Erreicht die remanente Polarisation nun ihre Sättigung, nimmt die zugehörige remanente Dehnung einen Maximalwert an. Für die gesamte remanente Dehnung ergibt sich ($\|\mathbf{S}^{\text{i}}\| = \|\mathbf{S}^{\text{iP}}\| = \varepsilon_{\text{sat}}$). Während der Rotation von \vec{P}^{i} ($\mathbf{B}^{\text{III}} \rightarrow \mathbf{C}$) bleibt dessen Norm konstant ($\|\vec{P}^{\text{i}}\| = P_{\text{sat}} = \textit{konst}$), so daß sich auch $\|\mathbf{S}^{\text{iP}}\|$ nicht verändert. Ein linear piezoelektrisches Verhalten ist zu beobachten.

In der Entlastungsphase ($\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{D}$) rotiert der remanente Polarisationsvektor erneut und nimmt dabei vom Betrag her ab (siehe Bild 6.20). Damit wird auch der remanente Dehnungsanteil $\|\mathbf{S}^{\text{iP}}\|$ zunehmend kleiner, so daß sich jetzt unter der Wirkung der vorhandenen Zugspannung (Bild 6.21c) die remanente ferroelastische Dehnung \mathbf{S}^{iF} entwickeln kann. Sie nimmt den komplett freiwerdenden Dehnungsanteil von \mathbf{S}^{iP} auf. Die Norm der gesamten remanente Dehnung bleibt dabei unverändert $\|\mathbf{S}^{\text{i}}\| = \varepsilon_{\text{sat}}$, weshalb bei Entlastung ($\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{D}$) ein erneut linear piezoelektrisches Materialverhalten in Bild 6.21b auftritt.

Das ferroelastische Verhalten der Spannung T_{22} über der gesamten Dehnung S_{22} ist in Bild 6.21c dargestellt. Bis zum Erreichen einer Dehnung von etwa $S_{22} = 0.15\%$ im Punkt \mathbf{B}^{III} bildet sich eine moderate Zugspannung aus, die dann aber rapide ansteigt. In dieser Phase ($\mathbf{B}^{\text{III}} \rightarrow \mathbf{C}$) findet die Rotation des remanenten Polarisationsvektors und eine kleine linear piezoelektrische Zunahme der gesamten Dehnung statt. Nach dem Polungsprozeß verbleibt eine Zugspannung im Punkt \mathbf{D} von 89 MPa.

Bild 6.21d zeigt den aus Schritt eins vorgegebenen Verlauf des Potentials φ über der Zeit t . In der Belastungsphase ($\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{C}$) ist ein nichtlinearer, zeitlicher Verlauf zu erkennen, der zum Zeitpunkt $t = t_1 = 100$ s eine maximale Belastung von $\varphi = -74$ V erreicht. Die Entlastungsphase ($\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{D}$) verläuft weitgehend linear, führt am Ende jedoch zu einem bleibenden, positiven Potential von 25 V.

6.5.4 Eigenspannungszustand

Während der Simulation des Polungsprozesses treten bei der elektromechanischen Spannungsanalyse im linken, gepolten Bereich in x_2 -Richtung mechanische Druckspannungen und im rechten, passiven Bereich in x_2 -Richtung mechanische Zugspannungen auf. Die Ursachen dieser Spannungen werden im folgenden diskutiert.

Der Polungsvorgang wird durch das Aufbringen eines Potentialunterschiedes zwischen der oberen und unteren Elektrode gesteuert. Dabei wird zwischen den Elektroden ein elektrisches Feld erzeugt, so daß im Laufe der Belastungsgeschichte im linken Bereich in x_2 -Richtung eine remanente Polarisierung und somit eine Polung induziert wird. Das Auftreten der Polung wird von einer positiven, remanenten Dehnung (Verlängerung) begleitet. Aufgrund der Zwangsbedingung $u_2(x_1) = konst$ (siehe Bild 6.7) darf die obere Elektrode nicht rotieren oder sich in x_2 -Richtung deformieren, sondern lediglich parallel zur x_1 -Achse bewegen. Somit muß die Verlängerung im linken Bereich den rechten Bereich gleichermaßen deformieren. Durch die Belastung des rechten Bereiches mit einer positiven Dehnung, werden große Zugspannungen eingebracht.

Da die obere Kante des Stapelaktuator's kräftefrei ist, muß die Summe der Spannungskomponenten

$$\int_{-l_1}^{l_2} T_{22}(x_1) dx_1 = 0 \quad (6.7)$$

über der oberen Elektrode verschwinden. Den Zugspannungen auf der rechten Seite stehen somit Druckspannungen auf der linken Seite der Struktur gegenüber. Die Druckspannungen im linken Bereich I wiederum können den Prozeß der mechanischen Depolarisierung und damit eine Reduktion der remanenten Polarisierung auslösen. Der Abbau der remanenten Polarisierung verursacht eine negative, remanente Dehnung (Stauchung) in x_2 -Richtung und beeinflußt somit den rechten, passiven Bereich II mechanisch. Dies führt zu einer Kopplung von sich gegenseitig beeinflussenden Mechanismen.

Bild 6.22 stellt die Normalkomponente der verbleibenden Spannung T_{22} nach dem Polungsprozeß graphisch dar.

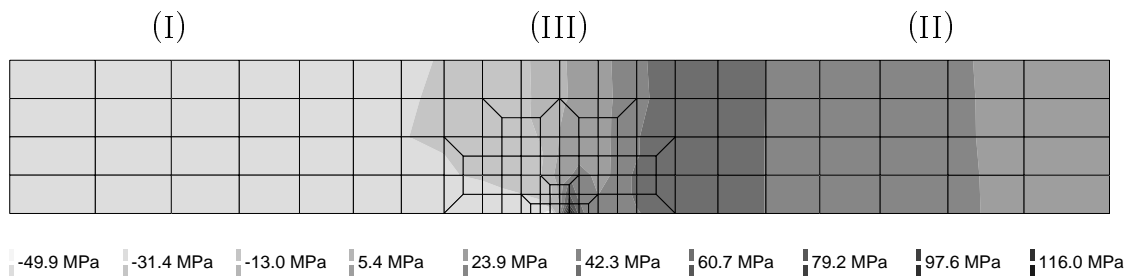


Bild 6.22: Konturplot der verbleibenden Normalspannungskomponente T_{22} nach der Simulation des Polungsprozesses ($t = t_2$). In der Legende sind die Werte an den Übergängen der dargestellten Graustufen angegeben.

Im linken Bereich I zeigen sich induzierte homogene Druckspannungen, denen im rechten Bereich II homogene Zugspannungen gegenüber stehen. Zwischen den beiden homogenen Gebieten liegt ein Übergangsbereich III mit inhomogener Spannungsverteilung.

Zur Analyse einer Struktur ist der Spannungszustand bei maximaler Belastung, aber auch der verbleibende Eigenspannungszustand am Ende der Entlastung von großem Interesse.

Das Versagen der Struktur wird hierbei durch die Spannungskomponente T_{22} senkrecht zu den beiden Elektroden maßgeblich bestimmt. In Bild 6.23 ist der Verlauf der T_{22} -Spannung entlang der unteren Kante der Struktur dargestellt.

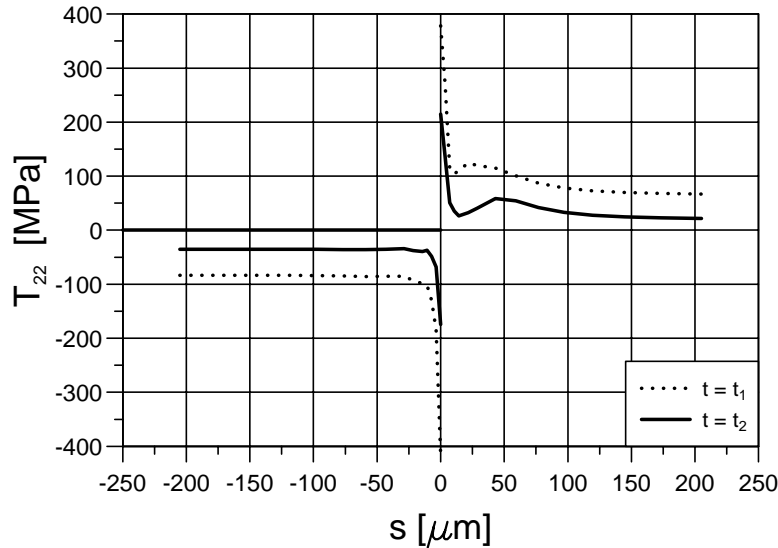


Bild 6.23: Verlauf der sich senkrecht zu den Elektroden einstellenden T_{22} -Spannungskomponente über der Unterkante der modellierten Struktur. Die gepunktete Linie zeigt den Verlauf bei maximaler Belastung ($t = t_1$), die durchgezogene Linie den Verlauf nach der Entlastung ($t = t_2$). Die horizontale Linie bei $T_{22} = 0$ MPa symbolisiert die Ausdehnung der unteren Elektrode.

Bereits bei maximaler Belastung ($t = t_1$) hat sich der signifikante Spannungszustand eingestellt. Auf der linken Seite sind hohe Druckspannungen zu erkennen, die im homogenen Bereich einen Wert von -83 MPa einnehmen. Die Zugspannungen auf der rechten Seite nehmen vor der Elektrodenspitze schnell ab und erreichen am äußeren rechten Ende einen weitgehend konstanten Verlauf ($T_{22} \approx 68$ MPa).

Nach der Entlastung ($t = t_2$) reduzieren sich die Werte um mehr als die Hälfte. Im Bereich der unteren Elektrode (homogen gepolter Bereich) verbleibt eine Druckeigen Spannung T_{22} von -35 MPa, die in Richtung der Elektrodenspitze rapide abfällt. Für $s > 0$ stellt sich eine zu Beginn stark abfallende Zugeigen Spannung ein, die jedoch einen Wert von ≈ 22 MPa nicht unterschreitet.

Eine quantitative Aussage über die genauen Werte der Spannungen in einem Bereich um das Ende der unteren Elektrode kann aufgrund der zu groben Vernetzung in dieser Region nicht angegeben werden. Jedoch ist ein qualitativer Verlauf erkennbar, aus dem eine kritische Zone um die Elektrodenspitze bestimmt und für spätere genauere Analysen feiner Vernetzung werden kann.

7 Zusammenfassung

Mit wachsenden Ansprüchen an die Zuverlässigkeit von elektromechanischen Komponenten wird eine möglichst realitätsnahe Modellierung des komplexen Materialverhaltens angestrebt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein dreidimensionales Materialmodell formuliert und in ein Finite-Elemente-Programm implementiert. Damit kann das phänomenologisch beobachtbare nichtlineare Materialverhalten ferroelektrischer Materialien in Simulationen berücksichtigt werden.

Für einen ersten Einblick in die zugrundeliegenden mikroskopischen Vorgänge wurden die Umklappprozesse am Beispiel der tetragonalen Einheitszelle von Barium-Titanat unter rein elektrischer und rein mechanischer Belastung diskutiert. Die Übertragung auf das makroskopisch nichtlineare Materialverhalten wurde anhand von Überlegungen bezüglich des mikroskopischen Umklappverhaltens eines Konglomerats von Domänen durchgeführt. Auf diese Weise konnte das nichtlineare elektrische Verhalten der experimentell beobachtbaren dielektrischen Hysterese und der Schmetterlingshysterese unter Belastung eines elektrischen Feldes erläutert werden. Anhand des nichtlinear mechanischen Materialverhaltens unter mechanischen Druck- und Zugspannungen wurde der ferroelastische Effekt und der Effekt der mechanischen Depolarisation untersucht und diskutiert.

Im elektrischen sowie im mechanischen Materialverhalten konnten drei charakteristische Bereiche identifiziert werden: Ein anfänglich linear reversibler Bereich, dann ein irreversibler Bereich, der durch Umklappprozesse der Domänen ausgelöst wird und dann in den dritten, gesättigten Bereich übergeht. Damit war das prinzipielle makroskopische Materialverhalten gegeben, das als Grundlage zur phänomenologischen Modellierung diente.

Die Gültigkeit entsprechender Belastungsbedingungen ermöglichte es, diese drei Bereiche mathematisch getrennt voneinander zu beschreiben. Für die Entwicklung der beiden remanenten Zustandsgrößen wurde in jedem dieser drei Bereiche je eine Normalenregel angenommen und mittels der Auswertung der entsprechend gültigen Konsistenzbedingung konnten je zwei Evolutionsgleichungen erhalten werden.

Das Antwortverhalten des Materialmodells wurde anhand zyklischer elektrischer bzw. mechanischer Belastungen verifiziert. Ebenso konnte auch die qualitative Übereinstimmung mit experimentell gewonnenen Verläufen gezeigt werden.

Um eine Strukturanalyse für inhomogene Probleme durchführen zu können, wurde das Modell auf eine dreidimensionale Form erweitert, ohne daß zusätzliche Materialparameter eingeführt werden mußten. Dabei wurde gewährleistet, daß das eindimensionale Modell als Sonderfall enthalten ist. Die Möglichkeit, spezielle mehrachsige Belastungsprozesse simulieren zu können, erforderte die Erweiterung der Evolutionsgleichungen um den Effekt

der Rotation der remanenten Polarisierung und der remanenten ferroelastischen Dehnung. Die sich aus dieser tensoriellen Formulierung ergebenden dreidimensionalen Materialgleichungen wurden in das Finite-Elemente-Programm PSU implementiert. Am Beispiel eines Stapelaktuators wurde eine Strukturanalyse des Polungsprozesses durchgeführt. Hierbei zeigte die rein elektrische Simulation einen signifikanten Unterschied zwischen der Annahme eines rein linearen und eines nichtlinearen Materialmodells. Im Gegensatz zu linearem Materialverhalten bleibt bei Berücksichtigung der nichtlinearen Hystereseeffekte eine verteilte elektrische Restladung im Bereich der Elektrodenpitze zurück.

Aus der elektromechanischen Simulation konnten nach dem Polungsprozeß im gepolten Bereich des Aktuators Druckeigenstressungen festgestellt werden. Im Bereich um die Elektrodenpitze stellte sich eine signifikante mehrachsige Belastung ein, die im Verlauf der Polung des Aktuators zu einer Rotation des Polarisationszustandes führte. Vor der Elektrodenpitze liegen Zugeigenstressungen vor, unter deren Wirkung sich im realen Bauteil Risse bilden und zu einem Versagen des Aktuators führen können. Daher werden Stapelaktuatoren in der praktischen Anwendung unter einer überlagerten Druckspannung betrieben. Diese lösen jedoch im gepolten Bereich, mechanisch depolarisierende Prozesse aus und beeinträchtigen damit die prinzipielle Funktionsfähigkeit des Aktuators.

Mit der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, daß die Einflüsse von nichtlinearen Materialeigenschaften mit Hystereseeffekten und verbleibender remanenter Polarisierung P_{sat} sowie remanenter Dehnung ε_{sat} auf die elektrische Polarisierung und die mechanische Spannung von entscheidender Bedeutung sind. Nur bei deren Berücksichtigung ist eine realistische strukturmechanische Analyse und somit eine zuverlässige Aussage über den inneren Materialzustand möglich.

Literaturverzeichnis

- [1] BOER, R. DE: *Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, (1982).
- [2] KLINGBEIL, E.: *Tensorrechnung für Ingenieure*. B.I.-Wissenschaftsverlag, (1989).
- [3] JAFFE, B., R.S. ROTH und S. MARZULLO: *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).
- [4] ALLIK, H. und T.J.R. HUGHES: *Finite Element Method for Piezoelectric Vibration*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2, 151–157, (1970).
- [5] CHEN, P.J. und P.S. PEERCY: *One Dimensional Dynamic Electromechanical Constitutive Relations of Ferroelectric Materials*. Acta Mechanica, 31, 231–241, (1979).
- [6] CHEN, P.J. und T.S. MONGOMERY: *A Macroscopic Theory for the Existence of the Hysteresis and Butterfly Loops in Ferroelectricity*. Ferroelectrics, 23, 199–208, (1980).
- [7] CHEN, P.J. und T.J. TUCKER: *Determination of the Polar Equilibrium Properties of the Ferroelectric Ceramic PZT 65/35*. Acta Mechanica, 38, 209–218, (1981).
- [8] CHEN, P.J. und T.J. TUCKER: *One Dimensional Polar Mechanical Dielectric Responses of the Ferroelectric Ceramic PZT 65/35 due to Domain Switching*. International Journal of Engineering Science, 19, 147–158, (1981).
- [9] BASSIOUNY, E., A. F. GHALEB und G. A. MAUGIN: *Thermomechanical Formulation for Coupled Electromechanical Hysteresis Effects: I. Basic Equations, II. Poling of Ceramics*. International Journal of Engineering Science, 26, 1279–1306, (1988).
- [10] BASSIOUNY, E. und G. A. MAUGIN: *Thermomechanical Formulation for Coupled Electromechanical Hysteresis Effects: III. Parameter Identification, IV. Combined Electromechanical Loading*. International Journal of Engineering Science, 27, 975–987, (1989).

- [11] HWANG, S.C., C.S. LYNCH und R.M. McMEEKING: *Ferroelectric / Ferroelastic Interactions and a Polarization Switching Model*. Acta Metallurgica et Materialia, 43, 2073–2084, (1995).
- [12] McMEEKING, R.M. und S.C. HWANG: *On the Potential Energy of a Piezoelectric Inclusion and the Criterion for Ferroelectric Switching*. Ferroelectrics, 20, 151–174, (1997).
- [13] HWANG, S.C., J.E. HUBER, R.M. McMEEKING und N.A. FLECK: *The Simulation of Switching in Polycrystalline Ferroelectric Ceramics*. Journal of Applied Physics, 84, 1530–1540, (1998).
- [14] HWANG, S.C. und R.M. McMEEKING: *A Finite Element Model of Ferroelectric Polycrystals*. Ferroelectrics, 211, 177–194, (1998).
- [15] HWANG, S.C. und R.M. McMEEKING: *A Finite Element Model of Ferroelastic Polycrystals*. International Journal of Solids and Structures, 36, 1541–1556, (1999).
- [16] HUO, Y. und Q. JIANG: *Modeling of Domain Switching in Polycrystalline Ferroelectric Ceramics*. Smart Materials and Structures, 6, 441–447, (1997).
- [17] HUO, Y. und Q. JIANG: *Modeling of Domain Switching in Ferroelectric Ceramics: An Example*. International Journal of Solids and Structures, 35, 1339–1353, (1997).
- [18] GERTHSEN, CH., H.O. KNESER und H. VOGEL: *Physik. Ein Lehrbuch zum Gebrauch neben Vorlesungen*. Springer-Verlag, Berlin, (1990).
- [19] GREINER, W.: *Theoretische Physik, Band 3: Klassische Elektrodynamik*. Verlag Harri Deutsch, (1978).
- [20] HOFMANN, H.: *Das elektromagnetische Feld*. Springer-Verlag, Berlin, (1982).
- [21] JAFFE, B., W.R. COOK und H. JAFFE: *Piezoelectric Ceramics*. Academic Press, London and New York, (1971).
- [22] FELDTKELLER, E.: *Dielektrische und magnetische Materialeigenschaften I*. 485. B.I.-Wissenschaftsverlag, (1973).
- [23] FELDTKELLER, E.: *Dielektrische und magnetische Materialeigenschaften II*. 488. B.I.-Wissenschaftsverlag, (1974).
- [24] TICHÝ, J. und G. GAUTSCHI: *Piezoelektrische Meßtechnik*. Springer-Verlag, Berlin, (1980).

- [25] ENDRISS, A.: *Reorientierungsverhalten von Domänen und mikroskopische Gitterdeformation in piezoelektrischen PZT-Keramiken*. Dissertation, Fakultät für Physik, Universität Tübingen, (1996).
- [26] HAMMER, M.: *Herstellung und Gefüge-Eigenschaftskorrelationen von PZT-Keramiken*. Dissertation, Institut für Keramik im Maschinenbau, Universität Karlsruhe, (1996).
- [27] HAO, T.H., X. GONG und Z. SUO: *Fracture Mechanics for the Design of Ceramic Multilayer Actuators*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 44, 23–48, (1996).
- [28] BROWN, S.A., C.L. HOM, M. MASSUDA, J.D. PRODEY, K. BRIDGER, N. SHANKAR und S.R. WINZER: *Electromechanical Testing and Modeling of a $Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3 - PbTiO_3 - BaTiO_3$ Relaxor Ferroelectric*. Journal of American Ceramic Society, 79, 2271–2282, (1996).
- [29] SUO, Z.: *Mechanics Concepts for Failure in Ferroelectric Ceramics*. In *The Winter Annual Meeting of the American Society of Mechanical Engineers, Atlanta, Georgia*. AD-Vol. 24, AMD-Vol. 123, 1–6, (1991).
- [30] HOM, C.L. und N. SHANKAR: *A Fully Coupled Constitutive Model for Electrostrictive Ceramic Materials*. Journal of Intelligent Materials Systems and Structures, 5, 795–801, (1994).
- [31] SONIN, A.S. und B.A. STRUKOW: *Einführung in die Ferroelektrizität*. Akademie-Verlag Berlin, (1974).
- [32] SMOLENSKIJ, G.A. und N.N. KRAJNIK: *Ferroelektrika und Antiferroelektrika*. BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, (1972).
- [33] FATUZZO, E. und W.J. MERZ: *Ferroelectricity*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, (1967).
- [34] JIANG, Q.: *On the Electromechanical Response of Electrically Active Materials*. Journal of Intelligent Materials Systems and Structures, 6, 181–190, (1995).
- [35] CAO, H. und A.G. EVANS: *Nonlinear Deformation of Ferroelectric Ceramics*. Journal of American Ceramic Society, 76, 890–896, (1993).
- [36] LYNCH, C.S.: *The Effect of Uniaxial Stress on the Electro-Mechanical Response of 8/65/35 PLZT*. Acta Materialia, 44, 4137–4148, (1996).

- [37] KAMLAH, M.: *Zur Modellierung von nichtlinearen elektromechanischen Koppelphänomenen in Piezokeramiken*. eingereichte Habilitation, Institut für Mechanik, Universität Gesamthochschule Kassel, (1999).
- [38] SCHÄUFELE, A.: *Ferroelastische Eigenschaften von Blei-Zirkonat-Titanat Keramiken*. Dissertation, Universität Karlsruhe, Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 5, Nr. 445, Düsseldorf, (1996).
- [39] ALATSATHIANOS, S.: *Experimentelle Untersuchungen zu nichtlinearen Koppelphänomenen in Piezokeramiken*. Dissertation, Universität Karlsruhe, in Vorbereitung.
- [40] FETT, T., D. MUNZ und G. THUN: *Nonsymmetric Deformation Behavior of Lead Zirconate Titanate Determined in Bending Tests*. Journal of American Ceramic Society, 81, 269–272, (1998).
- [41] FETT, T., S. MÜLLER, D. MUNZ und G. THUN: *Nonsymmetry in deformation behaviour of PZT*. Journal of Materials Science Letters, 17, 261–265, (1998).
- [42] FETT, T., D. MUNZ und G. THUN: *Nonsymmetric deformation behaviour of several PZT ceramics*. Submitted to Journal of Materials Science Letters, (1998).
- [43] SALJE, E.K.H.: *Phase transitions in ferroelastic and co-elastic crystals*. Cambridge University Press, (1990).
- [44] SCHÄUFELE, A. und K.H. HÄRDTL: *Ferroelastic Properties of Lead Zirconate Titanate Ceramics*. Journal of American Ceramic Society, 79, 2637–2640, (1996).
- [45] HAUPT, P.: *Foundation of Continuum Mechanics*. In *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*. Springer-Verlag, Wien – New York, 1–77, (1993).
- [46] FLIESSBACH, T.: *Elektrodynamik, Lehrbuch zur Theoretischen Physik II*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg – Berlin – Oxford, (1997).
- [47] MAUGIN, G. A. und E. BASSIOUNY: *Continuum Mechanics and its Applications*. In *Continuum Thermodynamics of Electromechanical Hysteresis in Ceramics*. G.A.C. Graham New York, 225–235, (1989).
- [48] FETT, T. und D. MUNZ: *Measurement of Young's moduli for PZT ceramics*. Submitted to Journal of Testing and Evaluation, (1999).
- [49] PAK, Y.E.: *Linear electro-elastic fracture mechanics of piezoelectric materials*. International Journal of Fracture, 54, 79–100, (1992).
- [50] PI-CERAMIC: *Datenblatt*. Firma PI-Ceramic GmbH, Lederhose in Thüringen, (1998).

- [51] ESCHENAUER, H. und W. SCHNELL: *Elastizitätstheorie I*. B.I.-Wissenschaftsverlag, (1986).
- [52] SACHSE, H.: *Ferroelektrika*. Springer-Verlag, Berlin, (1956).
- [53] TSAKMAKIS, C.: *Methoden zur Darstellung inelastischen Materialverhaltens bei kleinen Deformationen*. Habilitation, Institut für Mechanik, Universität Gesamthochschule Kassel, (1994).
- [54] KAMLAH, M. und CH. TSAKMAKIS: *Phenomenological Modeling of the Non-Linear Electro-mechanical Coupling in Ferroelectrics*. International Journal of Solids and Structures, 36, 669–695, (1999).
- [55] MUNZ, D., T. FETT, S. MÜLLER und G. THUN: *Deformation and strength behaviour of a soft PZT ceramic*. Part of the SPIE Conference on Mathematics and Control in Smart Structures, San Diego, California, 3323, 84–95, (1998).
- [56] BRONSTEIN, I.N. und K.A. SEMENDJAJEW: *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, (1989).
- [57] ENGELN-MÜLLGES, G. und F. REUTTER: *Numerik-Algorithmen mit FORTRAN 77 – Programmen*. B.I.-Wissenschaftsverlag, (1993).
- [58] ENGELN-MÜLLGES, G. und F. REUTTER: *Numerik-Algorithmen mit ANSI C – Programmen*. B.I.-Wissenschaftsverlag, (1993).
- [59] SCIENCE, COMPUTER und SYSTEMS DIVISION: *Harwell Subroutine Library – A Catalogue of Subroutines*. Atomic Energy Research Establishment Harwell, Oxfordshire, England, (1979).
- [60] TÖRNIG, W. und P. SPELLUCCI: *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker, Band 2: Numerische Methoden der Analysis*. Springer-Verlag, Berlin, (1990).
- [61] HAIRER, E., S.P. NØRSETT und G. WANNER: *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer-Verlag, Berlin, (1991).
- [62] FEHLBERG, E.: *Neue genauere Runge-Kutta-Formeln für Differentialgleichungen zweiter Ordnung*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, 40, 252–259, (1960).
- [63] FEHLBERG, E.: *Neue genauere Runge-Kutta-Formeln für Differentialgleichungen n-ter Ordnung*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, 40, 449–455, (1960).

- [64] FEHLBERG, E.: *New High-Order Runge-Kutta Formulas with Step Size Control for Systems of First- and Second-Order Differential Equations*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, 44, 17–29, (1964).
- [65] BJÖRCK, Å und G. DAHLQUIST: *Numerische Methoden*. R. Oldenbourg Verlag, (1972).
- [66] BÖHLE, U., M. KAMLAH, D. MUNZ und CH. TSAKMAKIS: *Macroscopic Description of the Non-Linear Electro-Mechanical Coupling in Ferroelectrics*. In *Proceedings of the 4th. European Conference on Smart Structures and Materials, Harrogate, UK*. Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 511–518, (1998).
- [67] KAMLAH, M., U. BÖHLE, D. MUNZ und CH. TSAKMAKIS: *Macroscopic Description of the Non-Linear Electro-Mechanical Coupling in Ferroelectrics*. SPIE's 4th. Annual Symposium on Smart Structures and Materials, 3039, 144–155, (1997).
- [68] MÜLLER, S.: *Messungen an PZT-Keramiken*. Technischer Bericht, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 6190, (1999).
- [69] GHANDI, K. und N.W. HAGOOD: *Nonlinear Finite Element Modeling of Phase Transitions in Electro-Mechanically Coupled Material*. SPIE's 3th. Annual Symposium on Smart Structures and Materials, 2715, (1996).
- [70] YANG, P. und D.A. PAYNE: *Thermal Stability of Field-Forced and Field-Assisted Antiferroelectric-Ferroelectric Phase Transformation in $Pb(Zr,Sn,Ti)O_3$* . Journal of Applied Physics, 71, 1361–1367, (1992).
- [71] PAN, W., Q. ZHANG, A. BHALLA und L.E. CROSS: *Field-Forced Antiferroelectric-to-Ferroelectric Switching in Modified Lead Zirconate Titanate Stannate Ceramics*. Journal of American Ceramic Society, 72, 571–578, (1989).
- [72] CARL, K. und K.H. HÄRDTL: *Electrical After-Effects in $Pb(Ti,Zr)O_3$ Ceramics*. Ferroelectrics, 17, 473–486, (1978).
- [73] NEUMANN, H.: *Das innere Feld in akzeptor-dotierter Bariumtitanat-Keramik*. Fakultät für Elektrotechnik, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, (1988).
- [74] FETT, T., D. MUNZ und G. THUN: *Nonsymmetric deformation behaviour of several PZT ceramics*. Journal of Materials Science Letters, 17, 261–265, (1998).
- [75] HOM, C.L. und N. SHANKAR: *A Numerical Analysis of Relaxor Ferroelectric Multilayered Actuators an 2-2 Composite Arrays*. Smart Materials and Structures, 4, 305–317, (1995).

- [76] HOM, C.L. und N. SHANKAR: *A Finite Element Method for Electrostrictive Ceramic Devices*. International Journal of Solids and Structures, 33, 1757–1779, (1996).
- [77] GAUDENZI, P. und K.J. BATHE: *An Iterative Finite Element Procedure for the Analysis of Piezoelectric Continua*. Journal of Intelligent Materials Systems and Structures, 6, 266–273, (1995).
- [78] CHEN, W. und C.S. LYNCH: *A Nonlinear Finite Element Method for Ferroelectric Ceramics*. Submitted to Journal of the Mechanics and Physics of Solids, (1999).
- [79] WANG, Y.: *Numerical Simulation on Fatigue Behavior of Ferroelectric Ceramics*. Dissertation, Universität Lincoln, Nebraska, The Graduate College at the University of Nebraska, (1997).
- [80] HUGHES, T.J.R.: *The Finite Element Method*. Prentice-Hall International, (1987).
- [81] INSTITUT FÜR STATIK UND DYNAMIK DER LUFT- UND RAUMFAHRTKONSTRUKTIONEN ISD DER UNIVERSITÄT STUTTGART: *Dokumentation zum Finite-Elemente-Programm PSU*.
- [82] LÜBBING, C.: *Zur Stabilität von gestaffelten Finite-Elemente Berechnungen*. Dissertation, Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen, Universität Stuttgart, (1997).
- [83] KAMLAH, M. und U. BÖHLE: *Finite Element Analysis of Piezoceramic Components Taking into Account Ferroelectric Hysteresis Behavior*. Submitted to International Journal of Solids and Structures, (1999).
- [84] RITTER, B.: *Finite Elemente Simulationen zur Auswirkung von Imperfektionen auf das Versagensverhalten elastisch-plastischer Druckbehälter*. Technischer Bericht, Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 5718, (1996).
- [85] BERLINCOURT, D.A., D.R. CURRAN und H. JAFFE: *Piezoelectric and Piezomagnetic Materials and Their Function in Transducers*. In *Physical Acoustics: Principles and Methods, Volume I, Part A*. Edited by Mason, W.P., Academic Press, New York and London, 169–270, (1964).
- [86] ZICKGRAF, B.: *Ermüdungsverhalten von Multilayer-Aktoren aus Piezokeramik*. Dissertation, Universität Stuttgart, Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 18, Nr. 191, Düsseldorf, (1996).
- [87] ABURATANI, H., S. HARADA, K. UCHINO und A. FURUTA: *Destruction Mechanisms in Ceramic Multilayer Actuators*. Japanese Journal of Applied Physics, Part 1, 33, 3091–3094, (1994).

- [88] MEHTA, K. und A.V. VIRKAR: *Fracture Mechanisms in Ferroelectric–Ferroelastic Lead Zirconate Titanate (Zr:Ti = 0.54:0.46) Ceramics*. Journal of American Ceramic Society, 73, 567–574, (1990).
- [89] LYNCH, C.S., W. YANG, L. COLLIER und R.M. SUO, Z. MCMEEKING: *Electric Field Induced Cracking in Ferroelectric Ceramics*. Ferroelectrics, 166, 11–30, (1995).
- [90] GONG, X. und Z. SUO: *Reliability of Ceramic Multilayer Actuators: A Nonlinear Finite Element Simulation*. Journal of American Ceramic Society, 44, 751–769, (1996).
- [91] GONG, X.: *Stresses Near the End of an Internal Electrode in Multilayer Electrostrictive Ceramic Actuators*. Materials Research Society Symposia Proceeding, 360, 83–88, (1995).
- [92] WUNSCH, G.: *Feldtheorie, Band 2: Elektromagnetische Felder*. Dr. Alfred Hüthig Verlag Heidelberg, (1976).

A Zusammengefaßte Darstellung des eindimensionalen Materialmodells

Additive Zerlegung von Dehnung und Polarisation:

$$\varepsilon = \varepsilon^r + \varepsilon^i \quad (\text{A.1})$$

$$P = P^r + P^i \quad (\text{A.2})$$

Linear piezoelektrische Grundgleichung:

$$\varepsilon^r = \frac{1}{Y} \sigma + dl E \quad (\text{A.3})$$

$$P^r = dl \sigma + \epsilon E \quad (\text{A.4})$$

Piezoelektrischer Modul:

$$dl = d \frac{P^i}{P_{sat}} \quad (\text{A.5})$$

Additive Zerlegung der remanenten Dehnung:

$$\varepsilon^i = \varepsilon^{iP} + \varepsilon^{iF} \quad (\text{A.6})$$

Remanente Dehnung induziert durch remanente Polarisation:

$$\varepsilon^{iP} = \varepsilon_{sat} \frac{|P^i|}{P_{sat}} \quad (\text{A.7})$$

Ferroelektrische Fließfunktionen:

$$f^P(E, P^i) = |E - c^P P^i| - E_c \quad (\text{A.8})$$

$$h^P(\sigma, E, P^i) = |P^i| - \hat{P}_{sat}(\sigma, E, P^i) \quad (\text{A.9})$$

Ferroelastische Fließfunktionen:

$$f^F(\sigma, E, \varepsilon^{iF}, P^i) = |\sigma - c^F \varepsilon^{iF}| - \hat{\sigma}_c(E, P^i) \quad (\text{A.10})$$

$$h^F(\varepsilon^{iF}, P^i) = |\varepsilon^{iF}| - \varepsilon_{sat} \left(1 - \frac{|P^i|}{P_{sat}} \right) \quad (\text{A.11})$$

Mechanische Depolarisation:

$$\hat{P}_{sat}(\sigma, E, P^i) = P_{sat} e^{-\frac{1}{m} \langle -\sigma - \hat{\sigma}_c(E, P^i) \rangle} \quad (\text{A.12})$$

$$\hat{P}_{sat}(\sigma, E, P^i) = (P_{sat} - P_\delta) \left\langle 1 - \frac{1}{m} \langle -\sigma - \hat{\sigma}_c(E, P^i) \rangle \right\rangle + P_\delta \quad (\text{A.13})$$

Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld:

$$\hat{\sigma}_c(E, P^i) = \left\langle \sigma_c + n \frac{E}{E_c} \frac{P^i}{|P^i|} \right\rangle \quad (\text{A.14})$$

Fließregel der ferroelektrischen inneren Variable:

$$\dot{P}^i = \begin{cases} 0 & : \text{ Fall 1} \\ \lambda_f^P \left(\frac{\partial f^P}{\partial E} \right) & : \text{ Fall 2} \\ \lambda_h^P \left(\frac{\partial h^P}{\partial P^i} \right) & : \text{ Fall 3} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Evolutionsgleichung der remanenten Polarisation:

$$\begin{aligned} \dot{P}^i &= F^P H^P \frac{1}{c^P} \dot{E} \\ &+ (1 - H^P) \left(\frac{P^i}{|P^i|} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial P^i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \sigma} \dot{\sigma} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial E} \dot{E} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Logische ferroelektrische Vorfaktoren:

$$F^P H^P = [f^P] [f^{*P}] \left[[-h^{*P}] - [h^P] \right] [-f^P] = \begin{cases} 1 & : \text{ Fall 2} \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

$$(1 - H^P) = \left(1 - \left[[-h^{*P}] - [h^P] \right] [-f^P] \right) = \begin{cases} 1 & : \text{ Fall 3} \vee f^P > 0 \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

mit

$$f^{*P} = \left. \frac{d}{dt} f^P \right|_{\dot{P}^i = 0} \quad (\text{A.19})$$

$$h^{*P} = \left. \frac{d}{dt} h^P \right|_{\dot{P}^i = F^P \dot{E}/c^P} \quad (\text{A.20})$$

Fließregel der ferroelastischen inneren Variable:

$$\dot{\varepsilon}^{iF} = \begin{cases} 0 & : & \text{Fall 1} \\ \lambda_f^F \left(\frac{\partial f^F}{\partial \sigma} \right) & : & \text{Fall 2} \\ \lambda_h^F \left(\frac{\partial h^F}{\partial \varepsilon^{iF}} \right) & : & \text{Fall 3} \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Evolutionsgleichung der remanenten ferroelastischen Dehnung:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}^{iF} &= F^F H^F \frac{1}{c^F} \left(\dot{\sigma} - \frac{\sigma - c^F \varepsilon^{iF}}{|\sigma - c^F \varepsilon^{iF}|} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial E} \dot{E} + \frac{\partial \hat{\sigma}_c}{\partial P^i} \dot{P}^i \right) \right) \\ &- (1 - H^F) \frac{\varepsilon_{sat}}{P_{sat}} \frac{P^i}{|P^i|} \frac{\varepsilon^{iF}}{|\varepsilon^{iF}|} \dot{P}^i \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Logische ferroelastische Vorfaktoren:

$$F^F H^F = \lfloor f^F \rfloor \lfloor f^{*F} \rfloor \left[\lfloor -h^{*F} \rfloor - \lfloor h^F \rfloor \right] \lfloor -f^F \rfloor = \begin{cases} 1 & : & \text{Fall 2} \\ 0 & : & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

$$(1 - H^F) = \left(1 - \left[\lfloor -h^{*F} \rfloor - \lfloor h^F \rfloor \right] \lfloor -f^F \rfloor \right) = \begin{cases} 1 & : & \text{Fall 3} \vee f^F > 0 \\ 0 & : & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

mit

$$f^{*F} = \left. \frac{d}{dt} f^F \right|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = 0} \quad (\text{A.25})$$

$$h^{*F} = \left. \frac{d}{dt} h^F \right|_{\dot{\varepsilon}^{iF} = F^F \dot{\sigma} / c^F} \quad (\text{A.26})$$

B Zusammengefaßte Darstellung des dreidimensionalen Materialmodells

Feldgleichungen:

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = \vec{0} \quad \text{Impulsbilanz} \quad (\text{B.1})$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathbf{D}} = 0 \quad \text{Gauß'sches Gesetz} \quad (\text{B.2})$$

mit

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\operatorname{grad} \vec{\mathbf{u}} + (\operatorname{grad} \vec{\mathbf{u}})^T \right) \quad (\text{B.3})$$

$$\vec{\mathbf{D}} = \varepsilon_0 \vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{P}} \quad (\text{B.4})$$

$$\vec{\mathbf{E}} = -\operatorname{grad} \varphi \quad (\text{B.5})$$

Additive Zerlegung der Dehnung und Polarisation:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^r + \mathbf{S}^i \quad (\text{B.6})$$

$$\vec{\mathbf{P}} = \vec{\mathbf{P}}^r + \vec{\mathbf{P}}^i \quad (\text{B.7})$$

Linear piezoelektrische Grundgleichung:

$$\mathbf{S}^r = \mathbf{C}^{-1} : \mathbf{T} + \mathbf{d}^T \cdot \vec{\mathbf{E}} \quad (\text{B.8})$$

$$\vec{\mathbf{P}}^r = \mathbf{d} : \mathbf{T} + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \vec{\mathbf{E}} \quad (\text{B.9})$$

Dielektrizitätstensor:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \epsilon \cdot \mathbf{1} \quad (\text{B.10})$$

Elastizitätstensor:

$$\mathbf{C} = \frac{Y}{(1 + \nu)} \left(\mathcal{I} + \frac{\nu}{(1 - 2\nu)} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right) \quad (\text{B.11})$$

Piezoelektrizitätstensor:

$$\begin{aligned} \mathbf{d} = & d_{\parallel} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} + \\ & d_{\perp} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \otimes (\mathbf{1} - \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i}) + \\ & d_{\perp} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} \left((\mathbf{1} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i}) + (\mathbf{1} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i})^{T_{23}} - 2 \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \otimes \vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{P}^i} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Transponierter Piezoelektrizitätstensor:

$$\begin{aligned}
\mathbf{d}^T &= d_{\parallel} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \quad + \\
& d_{\perp} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} (\mathbf{1} - \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}}) \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \quad + \\
& d_{\perp} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} \left((\mathbf{1} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}})^{T_{23}} + (\vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \mathbf{1}) - 2 \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} \right)
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Additive Zerlegung der remanenten Dehnung:

$$\mathbf{S}^i = \mathbf{S}^{\text{iP}} + \mathbf{S}^{\text{iF}} \tag{B.14}$$

Remanente Dehnung induziert durch remanente Polarisation:

$$\mathbf{S}^{\text{iP}} = \frac{3}{2} \varepsilon_{sat} \frac{\|\vec{\mathbf{P}}^i\|}{P_{sat}} \left(\vec{e}_{\text{Pi}} \otimes \vec{e}_{\text{Pi}} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \right) \tag{B.15}$$

Ferroelektrische Fließfunktionen:

$$f^{\text{P}}(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \left\| \vec{\mathbf{E}} - c^{\text{P}} \vec{\mathbf{P}}^i \right\| - E_c \tag{B.16}$$

$$h^{\text{P}}(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \left\| \vec{\mathbf{P}}^i \right\| - \hat{P}_{sat}(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) \tag{B.17}$$

Ferroelastische Fließfunktionen:

$$f^{\text{F}}(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \mathbf{S}^{\text{iF}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\| (\mathbf{T} - c^{\text{F}} \mathbf{S}^{\text{iF}})^D \right\| - \hat{T}_c(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) \tag{B.18}$$

$$h^{\text{F}}(\mathbf{S}^{\text{iF}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\| \mathbf{S}^{\text{iF}} \right\| - \left(\varepsilon_{sat} - \sqrt{\frac{2}{3}} \left\| \mathbf{S}^{\text{iP}} \right\| \right) \tag{B.19}$$

Mechanische Depolarisation:

$$\hat{P}_{sat}(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = P_{sat} e^{-\frac{1}{m} \left\langle -\frac{3}{2} \vec{e}_{\text{Pi}} \cdot \mathbf{T}^D \cdot \vec{e}_{\text{Pi}} - \hat{T}_c(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) \right\rangle} \tag{B.20}$$

$$\hat{P}_{sat}(\mathbf{T}, \vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = (P_{sat} - P_{\delta}) \left\langle 1 - \frac{1}{m} \left\langle -\frac{3}{2} \vec{e}_{\text{Pi}} \cdot \mathbf{T}^D \cdot \vec{e}_{\text{Pi}} - \hat{T}_c(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) \right\rangle \right\rangle + P_{\delta} \tag{B.21}$$

Abhängigkeit der Koerzitivspannung vom elektrischen Feld:

$$\hat{T}_c(\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{P}}^i) = \left\langle \sigma_c + n \frac{\vec{\mathbf{E}}}{E_c} \cdot \vec{e}_{\text{Pi}} \right\rangle \tag{B.22}$$

Fließregel der ferroelektrischen inneren Variablen:

$$\dot{\vec{P}}^i = \begin{cases} 0 & : & \text{Fall 1} \\ \Lambda_f^P \left(\frac{\partial f^P}{\partial \vec{E}} \right) & : & \text{Fall 2} \\ \Lambda_h^P \left(\frac{\partial h^P}{\partial \vec{P}^i} \right) & : & \text{Fall 3} \end{cases} \quad (\text{B.23})$$

Evolutionsgleichung der remanenten Polarisation:

$$\begin{aligned} \dot{\vec{P}}^i &= (F^P H^P \mathbf{1} + K^P \mathbf{P}^P) \cdot (\vec{N}^P \otimes \vec{N}^P) \cdot \frac{\dot{\vec{E}}}{c^P} \\ &+ (1 - H^P) \left\| \vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right\|^{-2} \left(\frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \mathbf{T}} : \dot{\mathbf{T}} + \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} \right) \left(\vec{e}_{P^i} - \frac{\partial \hat{P}_{sat}}{\partial \vec{P}^i} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

mit

$$\vec{N}^P = \frac{\vec{E} - c^P \vec{P}^i}{\|\vec{E} - c^P \vec{P}^i\|} \quad (\text{B.25})$$

Logische ferroelektrische Vorfaktoren:

$$F^P H^P = [f^P][f^{*P}][[-h^P] - [h^P]][-f^P] = \begin{cases} 1 & : & \text{Fall 2} \\ 0 & : & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

$$(1 - H^P) = \left(1 - [[-h^P] - [h^P]][-f^P] \right) = \begin{cases} 1 & : & \text{Fall 3} \vee f^P > 0 \\ 0 & : & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

$$K^P = [-[-f^P] - [-f^{*P}]] = \begin{cases} 1 & : & f^P > 0 \wedge f^{*P} > 0 \\ 0 & : & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

mit

$$f^{*P} = \left. \frac{d}{dt} f^P \right|_{\dot{\vec{P}}^i = \vec{0}} \quad (\text{B.29})$$

$$h^{*P} = \left. \frac{d}{dt} h^P \right|_{\dot{\vec{P}}^i = F^P \Lambda_f^P (\partial f^P / \partial \vec{E})} \quad (\text{B.30})$$

Ferroelektrischer Projektionstensor:

$$\mathbf{P}^P = \mathbf{1} - \frac{\partial h^P / \partial \vec{P}^i}{\|\partial h^P / \partial \vec{P}^i\|} \otimes \frac{\partial h^P / \partial \vec{P}^i}{\|\partial h^P / \partial \vec{P}^i\|} \quad (\text{B.31})$$

Fließregel der ferroelastischen inneren Variablen:

$$\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}} = \begin{cases} \mathbf{0} & : \text{ Fall 1} \\ \Lambda_f^{\text{F}} \left(\frac{\partial f^{\text{F}}}{\partial \mathbf{T}} \right) & : \text{ Fall 2} \\ \Lambda_h^{\text{F}} \left(\frac{\partial h^{\text{F}}}{\partial \mathbf{S}^{\text{iF}}} \right) & : \text{ Fall 3} \end{cases} \quad (\text{B.32})$$

Evolutionsgleichung der remanenten ferroelastischen Dehnung:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}} &= (F^{\text{F}} H^{\text{F}} \mathcal{I} + K^{\text{F}} \mathcal{P}^{\text{F}}) : \\ &\frac{1}{c^{\text{F}}} \left\{ (\mathbf{N}^{\text{F}} \otimes \mathbf{N}^{\text{F}}) : \dot{\mathbf{T}}^D - \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{N}^{\text{F}} \left(\frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \hat{\mathbf{E}}} \cdot \dot{\hat{\mathbf{E}}} + \frac{\partial \hat{T}_c}{\partial \hat{\mathbf{P}}^{\text{i}}} \cdot \dot{\hat{\mathbf{P}}^{\text{i}}} \right) \right\} \\ &- (1 - H^{\text{F}}) \left(\frac{\mathbf{S}^{\text{iP}}}{\|\mathbf{S}^{\text{iP}}\|} \otimes \frac{\mathbf{S}^{\text{iF}}}{\|\mathbf{S}^{\text{iF}}\|} \right) : \dot{\mathbf{S}}^{\text{iP}} \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

mit

$$\mathbf{N}^{\text{F}} = \frac{(\mathbf{T} - c^{\text{F}} \mathbf{S}^{\text{iF}})^D}{\|(\mathbf{T} - c^{\text{F}} \mathbf{S}^{\text{iF}})^D\|} \quad (\text{B.34})$$

Logische ferroelastische Vorfaktoren:

$$F^{\text{F}} H^{\text{F}} = \lfloor f^{\text{F}} \rfloor \lfloor f^{*\text{F}} \rfloor \left[\lfloor -h^{\text{F}} \rfloor - \lfloor h^{\text{F}} \rfloor \right] \lfloor -f^{\text{F}} \rfloor = \begin{cases} 1 & : \text{ Fall 2} \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (\text{B.35})$$

$$(1 - H^{\text{F}}) = \left(1 - \left[\lfloor -h^{\text{F}} \rfloor - \lfloor h^{\text{F}} \rfloor \right] \lfloor -f^{\text{F}} \rfloor \right) = \begin{cases} 1 & : \text{ Fall 3} \vee f^{\text{F}} > 0 \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (\text{B.36})$$

$$K^{\text{F}} = \left[-\lfloor -f^{\text{F}} \rfloor - \lfloor -f^{*\text{F}} \rfloor \right] = \begin{cases} 1 & : f^{\text{F}} > 0 \wedge f^{*\text{F}} > 0 \\ 0 & : \text{ sonst} \end{cases} \quad (\text{B.37})$$

mit

$$f^{*\text{F}} = \left. \frac{d}{dt} f^{\text{F}} \right|_{\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}} = \mathbf{0}} \quad (\text{B.38})$$

$$h^{\text{F}} = \left. \frac{d}{dt} h^{\text{F}} \right|_{\dot{\mathbf{S}}^{\text{iF}} = F^{\text{F}} \Lambda_f^{\text{F}} (\partial f^{\text{F}} / \partial \mathbf{T})} \quad (\text{B.39})$$

Ferroelastischer Projektionstensor:

$$\mathcal{P}^{\text{F}} = \mathcal{I} - \frac{\partial h^{\text{F}} / \partial \mathbf{S}^{\text{iF}}}{\|\partial h^{\text{F}} / \partial \mathbf{S}^{\text{iF}}\|} \otimes \frac{\partial h^{\text{F}} / \partial \mathbf{S}^{\text{iF}}}{\|\partial h^{\text{F}} / \partial \mathbf{S}^{\text{iF}}\|} \quad (\text{B.40})$$