

Forschungszentrum Karlsruhe  
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte  
FZKA 6628

**Mikromechanisches Modell zur Ermittlung effektiver  
Materialeigenschaften von piezoelektrischen  
Polykristallen**

Andreas Fröhlich  
Institut für Materialforschung

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

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe  
2001

# Kurzfassung

## Mikromechanisches Modell zur Ermittlung effektiver Materialeigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen

Der vorliegende Bericht befasst sich mit der Modellierung eines piezoelektrischen Polykristalls und der Entwicklung einer Vorgehensweise zur Berechnung effektiver elektromechanischer Materialparameter. Dabei werden Ausschnitte der heterogenen Mikrostruktur der Piezokeramik im Unterschied zu analytischen mikromechanischen Verfahren direkt in einem endlichen stochastischen Volumenelement beschrieben.

Zufällige zweidimensionale Voronoi-Mosaik für verschiedene erzeugende Punktprozesse stellen die Geometrie der Kornstruktur dar. Jedem Korn wird eine zufällige Orientierung der kristallographischen Achsen zugeordnet. Eine isotrope Orientierungsverteilung beschreibt hierbei die ungepolte Piezokeramik. Ausgehend von diesem Zustand wird die durch Umklappprozesse veränderte Verteilung der spontanen Polarisierung mit sogenannten Polungsrichtungsfunktionen modelliert. Die behandelten Belastungsarten sind die Polung durch ein elektrisches Feld oberhalb der Koerzitivfeldstärke sowie einachsige Zug- und Druckbelastung oberhalb der Koerzitivspannung. Der Grad der Ausrichtung der spontanen Polarisierung kann jeweils durch einen Parameter variiert werden.

Die elektromechanischen Feldgleichungen werden für ein Randbedingungssystem bestehend aus fünf linear unabhängigen Randbedingungen mit der Methode der Finiten Elemente gelöst. Aus den Volumenmittelwerten der lokalen Felder können die anisotropen effektiven Materialtensoren vollständig ermittelt werden. Für die Fälle der makroskopischen Isotropie und transversalen Isotropie wird ein Berechnungsschema für effektive (transversal) isotrope elastische, dielektrische und piezoelektrische Parameter angegeben.

Mit numerischen Simulationen werden die lokal fluktuierenden Felder auf der Mikroebene für Bariumtitanat untersucht. Der Einfluss der Randbedingungen, der Größe des Volumenelements, der Orientierungsverteilung und der Geometrie auf die effektiven Eigenschaften wird diskutiert. Für die verschiedenen Belastungszustände werden die transversal isotropen effektiven Materialparameter berechnet und mit experimentellen und analytischen Ergebnissen verglichen.

# Abstract

## Micromechanical model to determine effective material properties of piezoelectric polycrystals

This report deals with the modeling of a piezoelectric polycrystal and the development of a procedure to calculate effective electromechanical material parameters. In contrast to analytical micromechanical models, samples of the heterogeneous microstructure of a piezoceramic are described directly by a finite stochastic volume element.

Random two-dimensional voronoi tessellations constructed from different point processes represent the geometry of the grain structure. A random orientation of the crystallographic axes is attributed to each grain. The unpoled piezoceramic is described by an isotropic orientation distribution. Starting from this state, the distribution of the spontaneous polarization, which changes during the switching process, is modeled by so-called poling direction functions. The considered loading conditions are poling by an electric field above the coercive field, as well as tension and compression above the coercive stress. A parameter is introduced describing the degree of alignment of spontaneous polarization in each of these case.

The electromechanical field equations are solved by the finite element method for a system of boundary conditions consisting of five linear independent boundary conditions. Using the spatial average values of the local fields, the anisotropic effective material tensors can be determined completely. For the case of macroscopic isotropy or transverse isotropy a calculation scheme for effective (transversely) isotropic elastic, dielectric, and piezoelectric parameters is presented.

The fluctuating local fields on the microscale are investigated in terms of finite element solutions for barium titanate. The influence of the boundary conditions, the size of the volume element, the orientation distribution, and the geometry on the effective properties are discussed. For the different loading conditions, the transversely isotropic effective material parameters are calculated and compared to experimental and analytical results.

# Mikromechanisches Modell zur Ermittlung effektiver Materialeigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
**Doktors der Ingenieurwissenschaften**

von der Fakultät für Maschinenbau der

Universität Karlsruhe

genehmigte

**Dissertation**

von

Dipl.-Math. Andreas Fröhlich

aus München

Tag der mündlichen Prüfung:

Hauptreferent:

Korreferent:

28. Mai 2001

Prof. Dr. rer. nat. D. Munz

Prof. Dr. rer. nat. A. Brückner-Foit

# Inhaltsverzeichnis

Notation und Operatoren	v
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen der Piezoelektrizität</b>	<b>3</b>
2.1 Materialverhalten von Piezokeramiken . . . . .	3
2.1.1 Die Perowskit-Struktur . . . . .	3
2.1.2 Ferroelektrizität . . . . .	5
2.1.3 Ferroelastizität . . . . .	6
2.1.4 Piezokeramiken . . . . .	7
2.1.5 Nichtlineares Materialverhalten . . . . .	8
2.2 Grundgleichungen der Piezoelektrizität . . . . .	10
2.2.1 Materialtensoren von Bariumtitanat . . . . .	11
2.3 Umklappkriterien . . . . .	12
<b>3 Mikromechanische Modellierung</b>	<b>14</b>
3.1 Konzept des repräsentativen Volumenelements . . . . .	14
3.1.1 Definition des repräsentativen Volumenelements . . . . .	14
3.1.2 Homogenisierung . . . . .	16
3.1.3 Randbedingungen . . . . .	16
3.2 Strategien in der Mikromechanik . . . . .	18

3.3	Effektive Materialtensoren . . . . .	19
3.4	Stochastische Mikromechanik . . . . .	23
3.5	Erweiterung auf lineare Piezoelektrizität . . . . .	26
3.5.1	Homogenisierung und Randbedingungen . . . . .	26
3.5.2	Effektive Materialtensoren . . . . .	28
3.6	Schranken der effektiven Materialtensoren . . . . .	31
3.6.1	Mikro- und Makropotenziale . . . . .	31
3.6.2	Einfache Schranken nach Voigt und Reuss . . . . .	33
3.6.3	Schranken aufgrund der Randbedingungen . . . . .	35
3.6.4	Schranken aufgrund von Gebietszerlegung . . . . .	37
3.6.5	Zusammenfassung . . . . .	38
3.7	Zweidimensionale Näherung eines Volumenelements . . . . .	39
3.8	Effektive (transversal) isotrope Materialparameter . . . . .	40
3.8.1	Makroskopische Isotropie . . . . .	41
3.8.2	Makroskopische transversale Isotropie . . . . .	43
3.9	Analytische Methoden zur Berechnung effektiver Eigenschaften von piezo- elektrischen Polykristallen . . . . .	45
3.9.1	Voigt- und Reuss-Grenzen . . . . .	45
3.9.2	Hashin-Shtrikman-Grenzen . . . . .	46
3.9.3	Optimale Grenzen . . . . .	49
3.9.4	Selbstkonsistente Methode . . . . .	50
3.9.5	Methoden für gepolte Polykristalle . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Modellierung des piezoelektrischen Polykristalls</b>	<b>54</b>
4.1	Modellierung der Korngeometrie . . . . .	55
4.1.1	Voronoi-Zerlegung . . . . .	55
4.1.2	Randeffekte . . . . .	59

4.1.3	Anforderungen an vernetzbare Voronoi-Mosaik	61
4.1.4	Vernetzungsalgorithmus	63
4.2	Modellierung isotroper Kristallorientierungen	66
4.2.1	Anisotropie des endlichen Volumenelements	68
4.3	Modellierung der Polarisationsrichtung	71
4.3.1	Elektrische Belastung	71
4.3.2	Mechanische Belastung	74
4.3.3	Remanente Dehnung und remanente Polarisation	77
<b>5</b>	<b>Ergebnisse der Finite-Elemente-Simulationen</b>	<b>80</b>
5.1	Lokale Felder auf der Mikroebene	81
5.1.1	Spannungsfelder bei reiner Elastizität	82
5.1.2	Spannungsfelder und elektrische Felder bei Piezoelektrizität	86
5.2	Effektive Eigenschaften für rein elastisches Materialverhalten	90
5.2.1	Einfluss der Volumenelementgröße und der Orientierungsverteilung	91
5.2.2	Einfluss der Geometrie der Kornstruktur	95
5.2.3	Einfluss der Einkristallparameter	96
5.2.4	Einfluss der Art des Modells und der Randbedingungen	97
5.2.5	Verfahren zur Reduzierung des Einflusses der Randbedingungen	101
5.3	Effektive Eigenschaften für piezoelektrisches Materialverhalten	102
5.3.1	Ungepolter Zustand	103
5.3.2	Elektrische Belastung	107
5.3.3	Zugbelastung	112
5.3.4	Druckbelastung	113
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>115</b>
<b>A</b>	<b>Materialensoren der Piezoelektrizität</b>	<b>117</b>

<b>B Ungleichungen für Tensoren</b>	<b>120</b>
<b>C Einflusstensoren</b>	<b>122</b>
<b>D Einschlussproblem nach Eshelby</b>	<b>124</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>



# Notation und Operatoren

Vektoren und Tensoren zweiter und dritter Stufe werden mit Fettdruck dargestellt, Tensoren vierter Stufe werden zusätzlich durch kalligraphische Buchstaben gekennzeichnet. Die Komponentendarstellung tensorieller Größen bezieht sich auf ein kartesisches Koordinatensystem. Soweit nicht anders angegeben gilt die Einstein'sche Summationskonvention. Die verwendeten Rechenregeln für Tensoren können dem Lehrbuch KLINGBEIL [47] entnommen werden.

## Lateinische Buchstaben

$A$	Anisotropiefaktor
$b$	charakteristische Größe eines Mikrobestandteils
$B$	charakteristische Abmessung des Volumenelements
$\mathbf{C}$	Steifigkeitsmatrix
$\mathbf{d}$	piezoelektrischer Kopplungstensor
$\mathbf{D}$	Nachgiebigkeitsmatrix
$\mathbf{D}$	dielektrische Verschiebung
$D_n$	Normalkomponente der dielektrischen Verschiebung
$e_{\min}$	minimale Kantenlänge
$\mathbf{e}$	piezoelektrischer Kopplungstensor
$E$	Elastizitätsmodul
$E$	Erwartungswert
$\mathbf{E}$	elektrisches Feld
$E^c$	Koerzitivfeldstärke
$f$	Verteilungsdichte
$G$	Gleitmodul
$\mathbf{h}$	piezoelektrischer Kopplungstensor
$k$	Korrelationsfunktion
$K$	Kompressionsmodul

$L_Z$	Kantenverhältnis einer Zelle
$L_{\min}$	minimales Kantenverhältnis
$p$	Polungsrichtungsfunktion
$P$	Wahrscheinlichkeit
$\mathbf{P}$	Polarisation
$\mathbf{P}^R$	remanente Polarisation
$P^S$	spontane Polarisation
$\mathbf{Q}$	Transformationstensor
$s^2$	Varianz
$\mathbf{t}$	Spannungsvektor
$\mathbf{T}$	Transformationstensor
$T_c$	Curietemperatur
$\mathbf{u}$	Verschiebungsvektor
$U_c$	kritische Energie

### Griechische Buchstaben

$\beta$	Inverse des Dielektrizitätstensors
$\epsilon$	Dehnungstensor
$\epsilon_0$	dielektrische Feldkonstante
$\epsilon^R$	remanente Dehnung
$\epsilon^S$	spontane Dehnung in Polarisationsrichtung
$\theta_D$	kritischer Orientierungswinkel bei Druckbelastung
$\theta_E$	kritischer Orientierungswinkel bei elektrischer Belastung
$\theta_Z$	kritischer Orientierungswinkel bei Zugbelastung
$\kappa$	Dielektrizitätskonstante
$\boldsymbol{\kappa}$	Dielektrizitätstensor (konstante Dehnung)
$\sigma\kappa$	Dielektrizitätskonstante (konstante Spannung)
$\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\kappa}$	Dielektrizitätstensor (konstante Spannung)
$\lambda$	Intensität des Punktprozesses
$\nu$	Poisson-Zahl
$\boldsymbol{\sigma}$	Spannungstensor
$\sigma^c$	Koerzitivspannung
$\hat{\boldsymbol{\tau}}$	Eigenspannung
$\varphi$	elektrisches Potenzial
$\phi$	Mikropotenzial
$\Phi$	Makropotenzial

$\psi$	Mikropotenzial
$\Psi$	Makropotenzial

### Kalligraphische Buchstaben

$\mathcal{A}$	Einflusstensor
$\mathcal{C}$	Steifigkeitstensor
${}^D\mathcal{C}$	Steifigkeitstensor (konstante dielektrische Verschiebung)
$\mathcal{D}$	Nachgiebigkeitstensor
$\mathcal{I}$	symmetrischer Einheitstensor vierter Stufe
$\mathcal{P}$	Eshelby-Tensor

### Indizes

$()^*$	effektiver Materialtensor
$()^L$	linearer Anteil
$()^R$	Reuss'scher Ansatz
$()^V$	Voigt'scher Ansatz
$()^t$	Spannungsrandbedingungen
$()^u$	Verschiebungsrandbedingungen
$()^D$	dielektrische Randbedingungen
$()^E$	Potenzialrandbedingungen
$()^g$	gemischte Randbedingungen

### Operatoren

$\nabla ()$	Gradient
$\nabla \cdot ()$	Divergenz
$\ \mathbf{A}\ $	euklidische Norm ( $\ \mathbf{A}\  = \sqrt{\mathbf{A} : \mathbf{A}}$ )
$()^{-1}$	Inverse
$()^T$	Transponierte
$()^I$	isotropisierter Tensor
$()^{II}$	transversal isotropisierter Tensor
$\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}$	dyadisches Produkt ( $\mathbf{m} \otimes \mathbf{n} = m_i n_j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ )
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	Skalarprodukt ( $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij}$ )
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	Tensorprodukt ( $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{ip} B_{pj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ )

# Kapitel 1

## Einleitung

Piezoelektrische keramische Werkstoffe wie etwa Bleititanat-Zirconat (PZT) oder Bariumtitanat ( $\text{BaTiO}_3$ ) sind in der Lage, elektrische Energie in mechanische Energie umzuwandeln und umgekehrt. Aufgrund dieser als Piezoelektrizität bezeichneten Eigenschaft werden sie häufig in der Aktuatorik und Sensorik eingesetzt. Zur Auslegung von Bauteilen aus piezokeramischen Materialien in derartigen Anwendungen ist eine genaue Kenntnis des makroskopischen Materialverhaltens erforderlich, um eine hohe Präzision garantieren zu können. Wegen der elektromechanischen Kopplung, der Anisotropie und insbesondere der Ferroelektrizität ist dieses Verhalten komplex. Bei hinreichend hoher Belastung kommt es zu einer remanenten Reorientierung der Polarisationsrichtung in den einzelnen Kristalliten, was zu Nichtlinearitäten und Hystereseeffekten führt.

Zur Beschreibung des Materialverhaltens einer Piezokeramik wurden phänomenologische Materialmodelle entwickelt [44]. Als Alternative kann die Abhängigkeit des makroskopischen Verhaltens von der Mikrostruktur untersucht werden. Dies ist für ein grundlegendes Verständnis der beobachteten Phänomene und zur Erzielung von gewünschten Eigenschaften durch Manipulation der Mikrostruktur notwendig. Eine wichtige Zielsetzung ist dabei, das Einsetzen der Umklappvorgänge und ausgehend davon das nichtlineare Hystereseverhalten bei großen Belastungen vorherzusagen [40]. In dieser Arbeit liegt jedoch das Interesse in der linear piezoelektrischen Materialantwort der Piezokeramik bei kleinen Signalen. Da die Umklappvorgänge zu einer anisotropen Verteilung der Polarisationsrichtung in gepolten Materialien führen, haben sie wegen der anisotropen linearen Materialparameter auch in diesem Fall einen wichtigen Einfluss.

Zur Untersuchung des makroskopischen Materialverhaltens auf Grundlage einer heterogenen Mikrostruktur bieten sich Methoden der Mikromechanik an. In den letzten Jahrzeh-

ten wurden analytische Näherungslösungen erfolgreich für viele verschiedene Problemstellungen entwickelt, so auch zur Untersuchung der linearen effektiven Eigenschaften piezoelektrischer Polykristalle [19], [38], [69],[76]. Dabei werden meist einzelne einfache Mikrobestandteile in einem unendlichen Umgebungsmaterial untersucht. In den letzten Jahren wurden in der Mikromechanik auch Verfahren eingesetzt, bei denen endliche Ausschnitte (Volumenelemente) der Mikrostruktur direkt modelliert werden und die Feldgleichungen innerhalb dieses Ausschnitts numerisch gelöst werden [10]. Neben einer realistischeren geometrischen Beschreibung hat dies den Vorteil, dass Wechselwirkungen zwischen den Mikrobestandteilen stärker berücksichtigt werden.

Ein Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines mikromechanischen Modells mit endlichen Volumenelementen für linear elastisches und piezoelektrisches Materialverhalten. Dabei werden auch grundsätzliche Fragestellungen wie die notwendige Größe des Volumenelements, die Wahl der Randbedingungen und eine stochastische Modellierung behandelt. Auf Grundlage dieses Modells sollen die effektiven elastischen, dielektrischen und piezoelektrischen Eigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen unter verschiedenen elektromechanischen Belastungszuständen berechnet werden.

Im zweiten Kapitel werden kurz die Grundlagen der Piezoelektrizität und Ferroelektrizität dargestellt.

Im dritten Kapitel wird die mikromechanische Modellierung von endlichen Volumenelementen erläutert. Dabei wird insbesondere auf das Berechnungsschema für die elektromechanischen Parameter eingegangen. Weiterhin werden die analytischen Methoden zur Bestimmung effektiver Eigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen vorgestellt.

Im vierten Kapitel wird das stochastische Modell der Mikrostruktur eines piezoelektrischen Polykristalls präsentiert. Im Mittelpunkt steht dabei die geometrische Modellierung der Kornstruktur und die Verteilung der Polarisation in Abhängigkeit vom makroskopischen Belastungszustand.

Im fünften Kapitel werden abschließend die Ergebnisse der Finite-Elemente-Simulationen vorgestellt und diskutiert.

Die Kapitel drei und vier entstanden in Zusammenarbeit mit meinem Kollegen Dipl.-Ing. S. Weyer am Institut für Zuverlässigkeit und Schadenskunde im Maschinenbau der Universität Karlsruhe.

# Kapitel 2

## Grundlagen der Piezoelektrizität

In diesem Kapitel werden die innerhalb dieser Arbeit benötigten Grundlagen der Piezoelektrizität und der Ferroelektrizität behandelt. Dabei wird insbesondere auf die speziellen Eigenschaften von Bariumtitanat eingegangen. In der technischen Anwendung spielt es zwar eine eher untergeordnete Rolle, aufgrund seiner einfachen Struktur wird es aber häufig für theoretische Untersuchungen gewählt.

### 2.1 Materialverhalten von Piezokeramiken

Unter Piezoelektrizität versteht man die lineare elektromechanische Wechselwirkung zwischen mechanischen und elektrischen Zustandsgrößen in Kristallen. In Piezoelektrika verschieben zum einen mechanische Spannungen die Ladungsträger und führen so zu einer proportionalen Änderung der elektrischen Polarisierung (direkter Piezoeffekt). Zum anderen bewirkt das Anlegen eines äußeren elektrischen Feldes eine proportionale, reversible Verformung des Kristalles (inverser Piezoeffekt).

Zunächst wird der Aufbau und das Materialverhalten von piezoelektrischen Einkristallen erläutert. Anschließend wird die Betrachtung auf polykristalline Keramiken erweitert. Dabei steht die mikroskopische Betrachtungsweise im Vordergrund.

#### 2.1.1 Die Perowskit-Struktur

Die meisten piezoelektrischen Kristalle, wie etwa Bariumtitanat  $\text{BaTiO}_3$ , besitzen eine Perowskit-Struktur, die in Abbildung 2.1a schematisch dargestellt ist. In der kubischen

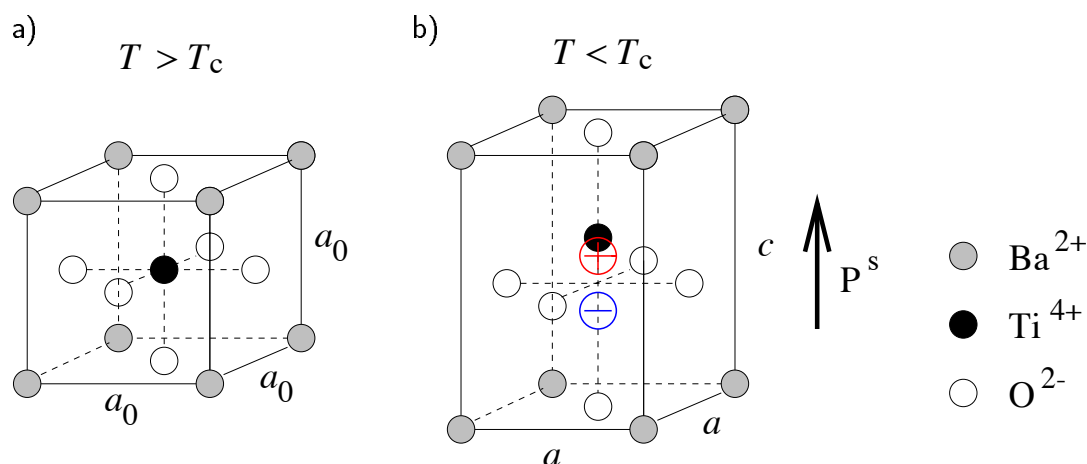


Abbildung 2.1: Einheitszelle von Bariumtitanat: a) Paraelektrische Phase mit kubischer Perowskitstruktur. b) Ferroelektrische Phase mit tetragonaler Struktur und spontaner Polarisation.

Einheitszelle mit Kantenlänge  $a_0$  liegt raumzentriert ein  $\text{Ti}^{4+}$ -Ion, das von flächenzentrierten  $\text{O}^{2-}$ -Ionen umgeben wird. Die acht Ecken sind mit  $\text{Ba}^{2+}$ -Ionen besetzt. Dieser Zustand ist stabil oberhalb einer kritischen Temperatur, der Curietemperatur, und wird *paraelektrische Phase* genannt. Der positive und der negative Ladungsschwerpunkt liegen aufeinander und es liegt eine polare Symmetrie ohne Piezoelektrizität vor.

Bei Unterschreitung der Curietemperatur  $T_c$  tritt eine Phasenumwandlung in die *ferroelektrische Phase* auf. Hierbei entsteht eine tetragonale Struktur und das  $\text{Ti}^{4+}$ -Ion verschiebt sich in Richtung eines der Sauerstoffionen (Abbildung 2.1b). Dadurch werden der positive und der negative Ladungsschwerpunkt voneinander getrennt und es ergibt sich eine spontane Polarisation  $P^S$ . Der Kristall verhält sich in der tetragonalen Struktur piezoelektrisch. So führt eine mechanische Verlängerung der Einheitszelle in Richtung  $P^S$  zu einer Verschiebung der Ladungsschwerpunkte und somit zu einer Zunahme der Polarisation. Für das  $\text{Ti}^{4+}$ -Ion sind bei der Phasenumwandlung sechs verschiedene gleichberechtigte Richtungen möglich.

In der Literatur werden für die Curietemperatur  $T_c$  von Bariumtitanat Werte zwischen  $120^\circ\text{C}$  und  $130^\circ\text{C}$  angegeben [23], [42]. Die spontane Polarisation beträgt bei Zimmertemperatur  $P^S = 0.26 \text{ C/m}^2$  [60]. Die kubische Einheitszelle hat die Kantenlänge  $a_0 = 0.4009 \text{ nm}$  [42]. Die Kantenlängen der tetragonalen Einheitszelle sind temperaturabhängig, bei  $0^\circ\text{C}$  betragen sie  $a = 0.3992 \text{ nm}$  und  $c = 0.4035 \text{ nm}$  [45]. Bei dem Phasenüber-

gang bildet sich damit in Polarisationsrichtung die spontane Dehnung

$$\epsilon^S = \frac{c - a_0}{a_0} \approx 0,65\% \quad . \quad (2.1)$$

Bei weiterer Abkühlung unterhalb von  $0^\circ\text{C}$  bzw.  $-90^\circ\text{C}$  treten weitere Phasenübergänge in eine orthorombische bzw. rhomboedrische Einheitszelle auf [42].

## 2.1.2 Ferroelektrizität

Lässt sich bei einem piezoelektrischen Kristall mit spontaner Polarisation die Richtung der Polarisation durch ein äußeres elektrisches Feld umkehren, dann wird der Kristall als *ferroelektrisch* bezeichnet. Es gibt in der Literatur eine Vielzahl von experimentellen Untersuchungen zum Materialverhalten von Ferroelektrika [14], [41].

Ein ferroelektrischer Kristall besteht im Allgemeinen aus mehreren Domänen [22]. Das sind Bereiche mit homogener spontaner Polarisation, die sich aus energetischen Gründen bilden (Vieldomänenkristall). Direkt nach der Herstellung ist die Richtung der spontanen Polarisation zufällig, d.h. es liegt eine statistisch gleichverteilte Orientierung der Domänen vor. Abbildung 2.2a zeigt schematisch diesen Zustand des Vieldomänenkristalls. Der Kristall zeigt keine makroskopische Polarisation, da sich die Beiträge der einzelnen Domänen aufheben, und er verhält sich makroskopisch nicht piezoelektrisch.

Durch Anlegen eines hinreichend großen elektrischen Feldes kann bei einem ferroelektrischen Kristall die spontane Polarisation der einzelnen Domänen in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet werden (Abbildung 2.2b). Nach dieser *Polung* ergibt sich als Summe der spontanen Polarisation der einzelnen Domänen eine makroskopische *remanente Polarisation*. Beim Abschalten des elektrischen Feldes bleibt die Ausrichtung der Domänen (zumindest zum größten Teil) erhalten. Die kritische Feldstärke, bei der dieser Umklappprozess einsetzt, nennt man die *Koerzitivfeldstärke*  $E^c$ . Nur durch ein hinreichend starkes, entgegengesetztes Feld kann eine erneute Reorientierung bewirkt werden.

Bei einer tetragonalen Kristallsymmetrie, wie sie etwa Bariumtitanat besitzt, können zwei verschiedene Arten von Umklappen unterschieden werden: Bei einem entgegen der spontanen Polarisation ausgerichteten elektrischen Feld findet ein *180°-Umklappen* statt. Bei einer Ausrichtung senkrecht zur spontanen Polarisation findet ein *90°-Umklappen* statt (siehe z.B. Domäne links oben bzw. rechts oben in Abbildung 2.2). Beide Umklappprozesse führen zu einer Änderung der remanenten Polarisation. 90°-Umklappen führt zusätzlich zu einer remanenten Dehnung der Einheitszelle in Feldrichtung.



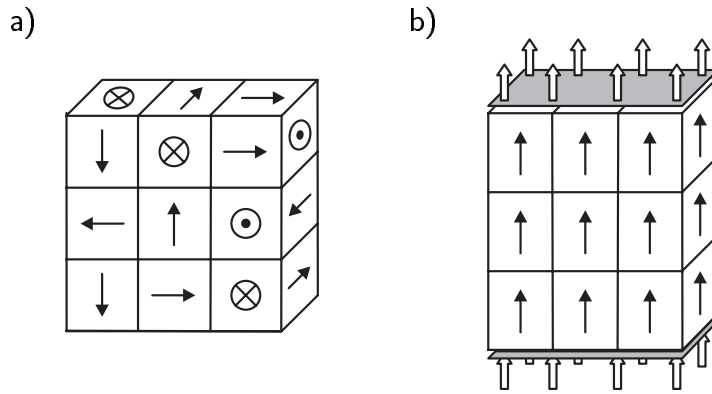


Abbildung 2.2: Verteilung der Domänen eines Einkristalls a) im isotropen Zustand und b) nach elektrischer Polung. Der Pfeil stellt die Richtung der spontanen Polarisation vom negativen zum positiven Ladungsschwerpunkt dar.

### 2.1.3 Ferroelastizität

Lässt sich die Richtung der spontanen Polarisation durch eine mechanische Belastung umkehren, dann wird der Kristall als *ferroelastisch* bezeichnet. Häufig tritt dieser Effekt gemeinsam mit Ferroelektrizität auf und man spricht allgemein von einem *Ferroelektrikum*. Ferroelastisches Materialverhalten wurde experimentell untersucht u.a. in [14], [41] und [79].

Ausgehend vom isotropen Ausgangszustand klappen bei einer hinreichend großen Druckspannung oberhalb der *Koerzitivspannung*  $\sigma^c$  die ursprünglich in Belastungsrichtung orientierten Domänen in eine senkrecht dazu liegende Richtung um (siehe Abbildung 2.3). Dabei gibt es bei einer tetragonalen Kristallstruktur vier mögliche Richtungen für die spontane Polarisation innerhalb der Ebene. Falls keine Bevorzugung z.B. durch weitere Belastung vorhanden ist, sind diese Richtungen gleich wahrscheinlich. Der Vielomänenkristall wird beim Umklappen in Belastungsrichtung gestaucht. Ein Umklappprozess kann ebenfalls durch eine hinreichend große Zugspannung ausgelöst werden. Die Domänen orientieren sich dabei wie in Abbildung 2.3b dargestellt in Belastungsrichtung um. Bei einer tetragonalen Kristallstruktur gibt es zwei gleich wahrscheinliche entgegengesetzte Richtungen. Der Kristall erfährt ausgehend vom isotropen Anfangszustand eine Verlängerung.

Durch Zug- und Druckbelastung ist kein 180°-Umklappen, sondern nur ein 90°-Umklappen möglich. Dabei entsteht keine remanente Polarisation. Es kann also durch mechanische Belastung keine makroskopische Piezoelektrizität induziert werden. Bei einem gepolten Ausgangszustand kann jedoch mit Hilfe einer hinreichend großen Druckbelastung die re-

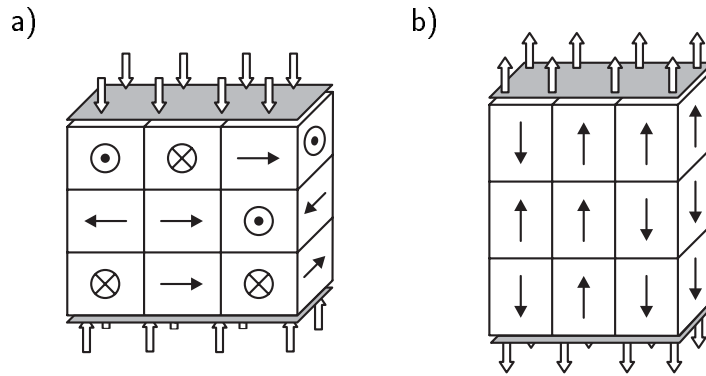


Abbildung 2.3: Verteilung der Domänen eines Einkristalls a) nach Druckbelastung und b) nach Zugbelastung.

manente Polarisation entfernt werden. Man spricht dabei von *mechanischer Depolarisierung*.

#### 2.1.4 Piezokeramiken

Eine Piezokeramik ist ein ferroelektrischer und -elastischer Polykristall, der aus einer Vielzahl von Körnern unregelmäßiger Form aufgebaut ist. Abbildung 2.4a zeigt eine schematische Darstellung. Die Körner sind Einkristalle mit zufällig orientierten Kristallgittern. Jedes Korn kann wiederum aus mehreren Domänen bestehen. Gefügeschliffe von polykristallinem Bariumtitanat sind u.a. zu finden in DEVRIES & BURKE [17]. Es zeigt sich generell eine Abhängigkeit der Gefügestruktur von den Herstellungsbedingungen. Die durchschnittliche Korngröße kann zwischen  $5\ \mu\text{m}$  und über  $100\ \mu\text{m}$  liegen [42].

Nach Herstellung durch Sintern und anschließender Abkühlung unter die Curietemperatur oder nach einer thermischen Depolarisierung liegt eine Gleichverteilung der kristallographischen Achsen vor. In diesem Zustand besitzt die Piezokeramik keine remanente Polarisation und verhält sich isotrop. Wie in Abschnitt 2.1.2 beschrieben lassen sich die Domänen durch Polung mit einem elektrischen Feld ausrichten (siehe Abbildung 2.4b). Bei einer Keramik muss dabei zusätzlich die unterschiedliche Orientierung der kristallographischen Achsen der einzelnen Körner berücksichtigt werden. Die Reorientierung erfolgt derart, dass eine möglichst starke Ausrichtung an das elektrische Feld erzielt wird. Die spontane Polarisation klappt zu der kristallographischen Achse um, die am nächsten in Richtung des elektrischen Feldes liegt.

Die maximal erreichbare remanente Polarisation in der Keramik bei vollständiger Aus-

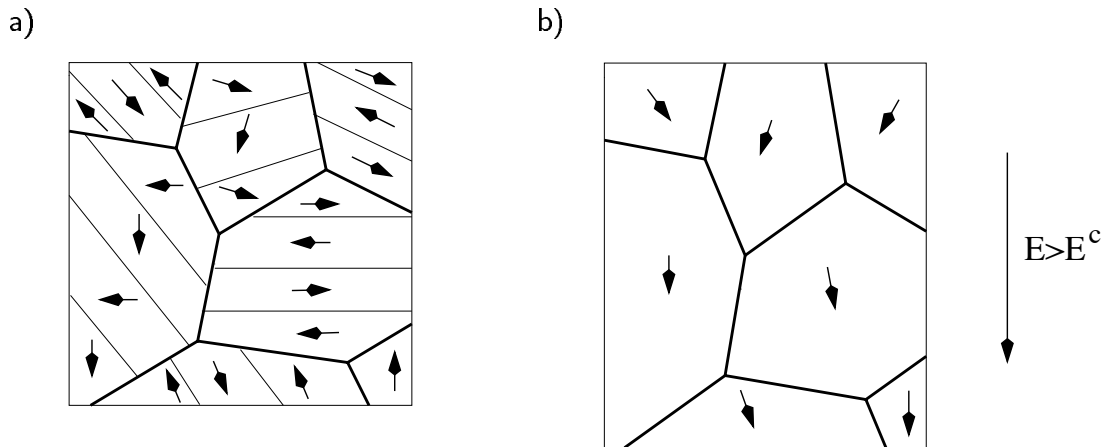


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Kornstruktur einer Piezokeramik. a) Isotroper Ausgangszustand. b) Nach Polung mit elektrischem Feld.

richtung aller Domänen wird *Sättigungspolarisation*  $P^{\text{sat}}$  genannt. Bei einer tetragonalen Kristallstruktur ist sie gegeben durch [2]

$$P^{\text{sat}} = 0.831P^S \quad (2.2)$$

und damit niedriger als die spontane Polarisation des Einkristalls. Für die *Sättigungsdehnung*  $\epsilon^{\text{sat}}$ , die maximal erreichbare Dehnung in Polungsrichtung, gilt nach [42]

$$\epsilon^{\text{sat}} = 0.552\epsilon^S \quad (2.3)$$

### 2.1.5 Nichtlineares Materialverhalten

Ferroelektrika zeigen aufgrund der Umklappvorgänge ein stark nichtlineares Materialverhalten mit ausgeprägten Hystereseeffekten [8]. Lediglich bei Belastungen unterhalb der Koerzitivfeldstärke bzw. der Koerzitivspannung ist näherungsweise ein linear piezoelektrisches Verhalten zu beobachten.

Abbildung 2.5 zeigt schematisch den Verlauf der Polarisation einer Piezokeramik, die durch ein zyklisches elektrisches Feld belastet wird. Ausgehend von einem ungepolten Zustand (Punkt 1) beobachtet man zunächst reversibles, linear dielektrisches Materialverhalten. Erreicht das elektrische Feld Werte im Bereich der Koerzitivfeldstärke<sup>1</sup>  $E^c$ , dann klappen die Domänen zunehmend in Belastungsrichtung um. Dies führt zu einer remanenten Polarisation, die einen deutlich größeren Beitrag zur Gesamtpolarisation liefert

<sup>1</sup>In Abbildung 2.5 wird eine abweichende, in der Literatur für Keramiken ebenfalls übliche Definition der Koerzitivfeldstärke  $E^c$  als Nulldurchgang der dielektrischen Hysteresis verwendet.

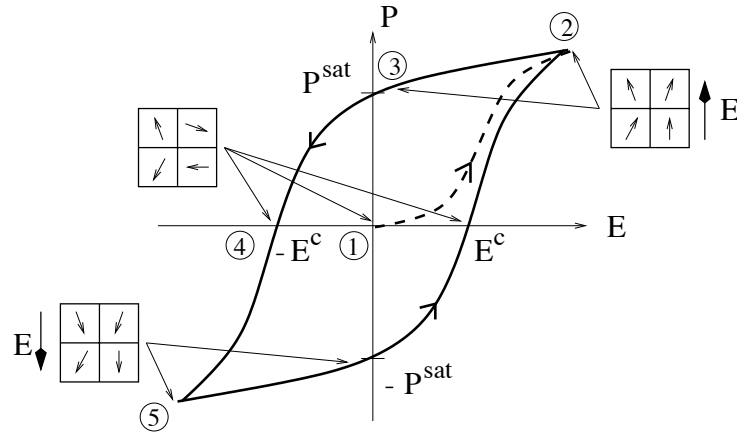


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der dielektrischen Hysterese.

als die dielektrische Polarisation. Wenn sich keine Domänen mehr ausrichten, stellt sich wieder ein annähernd linear dielektrisches Verhalten ein (Punkt 2). Bei verschwindendem elektrischen Feld verbleibt eine remanente Polarisation (Punkt 3). Falls die Ausrichtung der Domänen vollständig erfolgte, erreicht sie den maximalen Wert der Sättigungspolarisation  $P^{\text{sat}}$ . Erneute Umklappprozesse finden erst wieder bei einem hinreichend großen Feld in die entgegengesetzte Richtung statt. Dies führt zu einer Umkehr der Domänenorientierungen (Punkte 4,5). Durch wiederholte Änderung der Feldrichtung erhält man eine geschlossene dielektrische Hysterese.

Die zyklische elektrische Belastung führt außerdem zu einem nichtlinearen Verlauf der Dehnung, dargestellt in der sogenannten Schmetterlingshysterese (siehe etwa [8]). Bei einer hinreichend großen zyklischen mechanischen Belastung einer Piezokeramik ergibt sich aufgrund der Ferroelastizität ein Hystereseverhalten zwischen mechanischer Dehnung und Spannung. Diese ferroelastische Hysterese ist vergleichbar mit der dielektrischen Hysterese in Abbildung 2.5.

Die Steigungen der ferroelektrischen und dielektrischen Hysteresekurven sind im linearen Bereich durch die Elastizität bzw. die Dielektrizität der Piezokeramik gegeben. Diese können im ungepolten Zustand (Punkt 1) und im gepolten Zustand (Punkt 2) verschieden sein. Der Grund hierfür sind die unterschiedlichen Orientierungen der Domänen in den beiden Zuständen und die Anisotropie der Elastizitäts- und Dielektrizitätskonstanten (siehe Abschnitt 2.2.1). In dieser Arbeit werden die Steigungen in den linearen Bereichen ausgehend von Einkristallparametern und Annahmen über die Gefügestruktur und den Verlauf des Umklappprozesses berechnet.

## 2.2 Grundgleichungen der Piezoelektrizität

Im Folgenden werden die elektromechanischen Feldgleichungen eines piezoelektrischen Körpers  $K$  beschrieben [28], [30]. Unter der Annahme, dass Volumenkräfte vernachlässigt werden können, gilt die statische Gleichgewichtsbedingung

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad , \quad (2.4)$$

$\mathbf{x} \in K$ . Hierbei ist  $\boldsymbol{\sigma}$  der symmetrische Spannungstensor,  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$ . Mit dem Verschiebungsvektor  $\mathbf{u}$  wird die Dehnung  $\boldsymbol{\epsilon}$  als linearisierter Green'scher Verzerrungstensor definiert:

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}))^T \right) \quad . \quad (2.5)$$

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

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) = 0 \quad , \quad (2.6)$$

wobei freie Ladungen im Dielektrikum vernachlässigt werden. Die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}$  ist definiert als

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{x}) + \mathbf{P}(\mathbf{x}) \quad . \quad (2.7)$$

$\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$  ist die dielektrische Feldkonstante,  $\mathbf{E}$  das elektrische Feld und  $\mathbf{P}$  die Polarisation. Das elektrische Feld kann mit Hilfe des Potentials  $\varphi$  geschrieben werden als

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla \varphi(\mathbf{x}) \quad . \quad (2.8)$$

Um die konstitutiven Gleichungen für piezoelektrisches Materialverhalten aufzustellen, werden die Dehnung und die dielektrische Verschiebung in die linearen Anteile  $\boldsymbol{\epsilon}^L$  und  $\mathbf{D}^L$  und die remanenten Anteile  $\boldsymbol{\epsilon}^R$  und  $\mathbf{P}^R$  zerlegt:

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^L(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}^R(\mathbf{x}) \quad (2.9)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = \mathbf{D}^L(\mathbf{x}) + \mathbf{P}^R(\mathbf{x}) \quad . \quad (2.10)$$

Damit können die konstitutiven Gleichungen als lineare Beziehung zwischen den mechanischen und den elektrischen Größen geschrieben werden:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^L(\mathbf{x}) - \mathbf{e}^T(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.11)$$

$$\mathbf{D}^L(\mathbf{x}) = \mathbf{e}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^L(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad .$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$  den vierstufigen Elastizitätstensor,  $\mathbf{e}(\mathbf{x})$  den dreistufigen piezoelektrischen Kopplungstensor und  $\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})$  den zweistufigen Dielektrizitätstensor (siehe Anhang A). Aus Gleichung (2.11) ist ersichtlich, dass der direkte und der indirekte Piezoeffekt mit dem gleichen Kopplungstensor  $\mathbf{e}$  beschrieben werden. Dies folgt aus thermodynamischen Gründen. In Gleichung (2.11) wurde  $\boldsymbol{\epsilon}$  und  $\mathbf{E}$  als unabhängige Feldvariablen gewählt. Andere Schreibweisen, die innerhalb dieser Arbeit ebenfalls verwendet werden, sind in Anhang A aufgeführt. Auf die möglichen Randbedingungen wird in den Abschnitten 3.1.3 und 3.5.1 ausführlich eingegangen.

Für grundlegende Untersuchungen wird in dieser Arbeit auch das rein linear elastische Randwertproblem betrachtet, gegeben durch die Gleichungen (2.4) und (2.5). Dabei gibt es zwei mögliche Annahmen für den elektrischen Zustand:  $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = 0$  oder  $\mathbf{D}(\mathbf{x}) = 0$  für  $\mathbf{x} \in K$ . Aus Gleichung (2.11) erhält man im ersten Fall einfach

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^L(\mathbf{x}) \quad (2.12)$$

und im zweiten Fall

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = (\mathbf{C}(\mathbf{x}) + \mathbf{e}^T(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\kappa}^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{x})) : \boldsymbol{\epsilon}^L(\mathbf{x}) \quad . \quad (2.13)$$

Bei nicht verschwindender Piezoelektrizität,  $\mathbf{e}(\mathbf{x}) \neq 0$ , führen demnach diese zwei Annahmen zu unterschiedlichem elastischen Verhalten. Analog gibt es für das rein dielektrische Randwertproblem, Gleichungen (2.6), (2.7) und (2.8), die zwei möglichen Annahmen  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = 0$  und  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0$  für  $\mathbf{x} \in K$ .

## 2.2.1 Materialtensoren von Bariumtitanat

Die Materialtensoren eines piezoelektrischen Einkristalls sind anisotrop. Je nach Symmetrieklasse des Kristalls bestehen  $\mathbf{C}$ ,  $\boldsymbol{\kappa}$  und  $\mathbf{e}$  aus maximal 21, 6 bzw. 15 unabhängigen Komponenten. Wie in Abschnitt 2.1.1 dargestellt, besitzt Bariumtitanat bei Raumtemperatur eine tetragonale materielle Symmetrie. Die explizite Struktur der Materialtensoren für tetragonale Symmetrie ist in Gleichung (A.9) angegeben. In Tabelle 2.1 sind die innerhalb dieser Arbeit verwendeten, experimentell bestimmten Materialparameter für Bariumtitanat-Einkristalle aufgelistet. Zur Verdeutlichung der elastischen Anisotropie können aus dem Elastizitätstensor  $\mathbf{C}$  folgende Parameter bestimmt werden:

$$E_{\max}^{EK} = 201.3 \text{ GPa} \quad , \quad E_3^{EK} = 124.2 \text{ GPa} \quad , \quad E_{\min}^{EK} = E_1^{EK} = 63.7 \text{ GPa} \quad . \quad (2.14)$$

$E_3^{EK}$  ist der Elastizitätsmodul in Richtung der spontanen Polarisation,  $E_1^{EK}$  senkrecht dazu in Richtung der  $a$ -Achse der Einheitszelle.  $E_{\max}^{EK}$  und  $E_{\min}^{EK}$  sind der Maximal- bzw.

$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{66}$	$e_{31}$	$e_{33}$	$e_{15}$	$\kappa_{11}/\epsilon_0$	$\kappa_{33}/\epsilon_0$
[GPa]	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[C/m <sup>2</sup> ]	[C/m <sup>2</sup> ]	[C/m <sup>2</sup> ]	[–]	[–]
275.1	179.0	151.6	164.9	54.3	113.1	–2.69	3.65	21.3	1910	112

Tabelle 2.1: Elastische, piezoelektrische und dielektrische Materialparameter von einkristallinem Bariumtitanat nach BERLINCOURT & JAFFE [5].

Minimalwert des richtungsabhängigen Elastizitätsmoduls (siehe Anhang A). Man sieht, dass sich der Einkristall in Richtung der spontanen Polarisation weicher verhält als senkrecht zu dieser Richtung.

Auffallend an den Einkristallparametern von Bariumtitanat ist ebenfalls die extrem hohe Anisotropie im dielektrischen Verhalten. Nach FELDTKELLER [23] ist die niedrige Dielektrizitätskonstante  $\kappa_{33}$  auf die eingeschränkte Beweglichkeit des  $Ti^{4+}$ -Ions in Richtung der c-Achse der Einheitszelle zurückzuführen. Ebenfalls in [23] beschrieben ist die deutliche Temperaturabhängigkeit der Dielektrizität.

An dieser Stelle sei erwähnt, dass der Elastizitätsmodul von dem elektrischen Zustand abhängt. Dies wurde bereits an den Unterschieden zwischen den Gleichungen (2.12) und (2.13) deutlich. Experimentell wurde dies u.a. von FETT & MUNZ [24] an PZT-Keramiken untersucht. In dieser Arbeit werden die berechneten elastischen bzw. dielektrischen Materialparameter entsprechend Gleichung (2.11) stets für die Schreibweise mit unabhängigem elektrischen Feld bzw. unabhängiger Dehnung angegeben. Die Umrechnung für die anderen Zustände erfolgt einfach mit den Formeln aus Anhang A.

## 2.3 Umklappkriterien

In der Literatur werden Umklappprozesse in Piezokeramiken üblicherweise mit einem energiebasierten Umklappkriterium modelliert. Dabei geht man aus von der potenziellen Energie  $\Pi$  eines piezoelektrischen Körpers, die gegeben ist durch [58]

$$\Pi = \frac{1}{2} \int_V \mathbf{E} \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{P}^R) \, dV + \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^R) \, dV - \int_{\partial V_\varphi} \varphi^0 \omega \, dA - \int_{\partial V_t} \mathbf{t}^0 \cdot \mathbf{u} \, dA \quad . \quad (2.15)$$

Im Folgenden betrachten wir einen Umklappprozess, bei dem sich die spontane Polarisation von  $\mathbf{P}^R(\mathbf{x})$  zu  $\mathbf{P}^R(\mathbf{x}) + \Delta\mathbf{P}^R(\mathbf{x})$  ändert (analog ändern sich alle anderen Größen

ebenfalls um ein  $\Delta \dots$ ). Die Energiefreisetzungsrage während des Umklappens ist die negative Änderung der potenziellen Energie. Nach KESSLER & BALKE [46] kann sie als Volumenintegral

$$\Delta\Pi = - \int_V \Delta g(\mathbf{x}) \, dV \quad (2.16)$$

geschrieben werden mit der Dichte der Energiefreisetzungsrage

$$\begin{aligned} \Delta g(\mathbf{x}) = & \left( \mathbf{E} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{E} \right) \cdot \Delta \mathbf{P}^R + \left( \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{\sigma} \right) : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^R + \frac{\mathbf{E} \otimes (\mathbf{E} + \Delta \mathbf{E})}{2} : \Delta \boldsymbol{\kappa} + \\ & \frac{\boldsymbol{\sigma} \otimes (\boldsymbol{\sigma} + \Delta \boldsymbol{\sigma})}{2} : \Delta \mathbf{C}^{-1} + \frac{\mathbf{E} \otimes (\boldsymbol{\sigma} + \Delta \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{E} + \Delta \mathbf{E}) \otimes \boldsymbol{\sigma}}{2} : \Delta \mathbf{e} \quad . \quad (2.17) \end{aligned}$$

Bei der Modellierung von Umklappprozessen geht man meist von der Annahme aus, dass die Polarisation dann umklappt, wenn die Energiefreisetzungsrage zwischen neuem und altem Zustand einen kritischen Wert überschreitet. Dabei wird häufig vereinfacht angenommen, dass sich die treibenden Kräfte  $\mathbf{E}$  und  $\boldsymbol{\sigma}$  sowie die linearen Materialtensoren  $\mathbf{C}$ ,  $\boldsymbol{\kappa}$  und  $\mathbf{e}$  während des Umklappens nicht verändern [41], [61]. Als Umklappkriterium erhält man dann nach (2.17)

$$\Delta g(\mathbf{x}) = \mathbf{E}(\mathbf{x}) \cdot \Delta \mathbf{P}^R(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^R(\mathbf{x}) \geq U_c \quad . \quad (2.18)$$

Je nach Art des Umklappens kann der kritische Wert  $U_c$  unterschiedliche Werte annehmen. Falls nicht zwischen 180°- und 90°-Umklappen unterschieden werden soll, wird häufig  $U_c = 2P^S E^c$  gewählt [41]. Damit ist  $U_c$  die Energiedifferenz bei einem 180°-Umklappen im Einkristall. Falls mehrere aufgrund der Kristallsymmetrie mögliche Richtungen Gleichung (2.18) erfüllen, wird diejenige gewählt, für die die Energiefreisetzungsrage am größten ist.



# Kapitel 3

## Mikromechanische Modellierung

### 3.1 Konzept des repräsentativen Volumenelements

In diesem Abschnitt werden die grundlegenden Aspekte der Mikromechanik heterogener Materialien dargestellt und dabei insbesondere das Konzept des repräsentativen Volumenelements erläutert. Eine ausführliche Beschreibung ist zu finden u.a. in SEELIG & ZOHDI [80], BÖHM [9], NEMAT-NASSER & HORI [65] und BERVEILLER [6].

#### 3.1.1 Definition des repräsentativen Volumenelements

Die Grundidee der Mikromechanik besteht in der Verwendung mindestens zweier unterschiedlicher Betrachtungsebenen zur Beschreibung von mechanischen oder anderen physikalischen Zusammenhängen. Die Betrachtungsebenen unterscheiden sich in den Größen- und Längenskalen (siehe Abbildung 3.1). Auf der *Makroebene* betrachten wir einen materiellen Körper  $\mathcal{B}$  (etwa ein Bauteil oder eine Probe) bestehend aus einer Menge von materiellen Punkten  $X$  im Rahmen der Kontinuumsmechanik. Der materielle Punkt  $X \in \mathcal{B}$  bekommt eine Umgebung zugeordnet, die auch als *Mikroebene* bezeichnet wird. In der Umgebung des materiellen Punktes wird die Mikrostruktur, z.B. Körner, Mikrorisse oder Poren, beschrieben.

Eine wichtige Voraussetzung ist die Homogenität des Körpers auf der Makroebene. Zwar ist die Umgebung jedes materiellen Punktes  $X$  damit nicht identisch, es macht aber keinen prinzipiellen Unterschied, welches  $X \in \mathcal{B}$  betrachtet wird. Im Gegensatz dazu ist die Mikrostruktur auf der Mikroebene heterogen, die einzelnen Mikrobestandteile sind zufällig

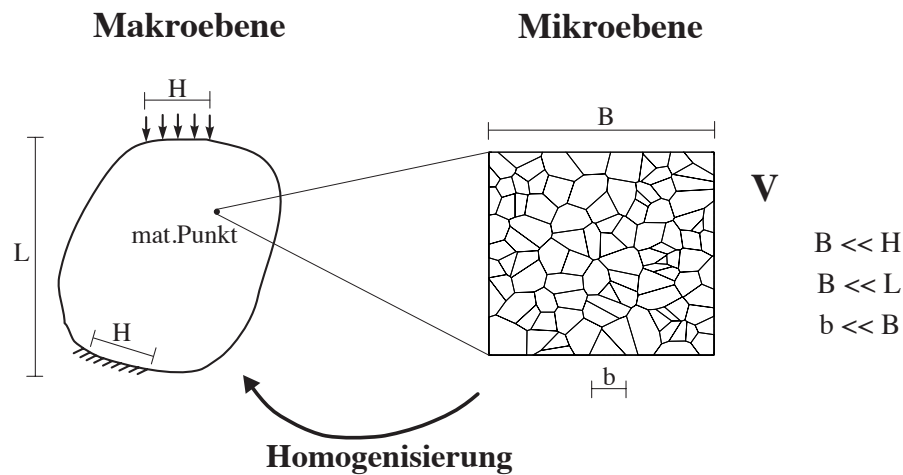


Abbildung 3.1: Die zwei Betrachtungsebenen der Mikromechanik.  $L$ ,  $H$ ,  $B$  und  $b$  sind charakteristische Abmessungen des Bauteils, einer auf das Bauteil wirkenden Kraft, des Volumenelements bzw. eines Mikrobestandteils, z.B. einer Korngrenze.

oder regelmäßig in der Umgebung verteilt. Das Materialverhalten ist auf dieser Ebene bekannt, z.B. linear elastisch, und kann mit Materialgleichungen beschrieben werden.

Für die weitere Vorgehensweise muss die Umgebung folgende Eigenschaften erfüllen:

- Die Umgebung ist hinreichend groß, d.h. die Abmessungen der Mikrobestandteile sind sehr viel kleiner als die Abmessung der Umgebung ( $b \ll B$ ). Die Umgebung enthält dann eine hinreichend große Anzahl von Mikrobestandteilen.
- Die Umgebung ist hinreichend klein, sodass Spannungsgradienten auf der Makroebene innerhalb der Umgebung vernachlässigbar sind ( $B \ll H, L$ ).

Eine Umgebung, die diese Forderungen erfüllt, nennt man *repräsentatives Volumenelement* (kurz: RVE). Das Konzept des repräsentativen Volumenelements zur Modellierung heterogener Materialien wurde erstmals von HILL [36] und HASHIN [32] verwendet.

Bei den in technischen Anwendungen üblichen Werkstoffen wie z.B. Metallen oder keramischen Werkstoffen ist die charakteristische Abmessung  $b$  eines Mikrobestandteils im Mikrometer-Bereich (z.B. Korngrenze, Pore). Die Abmessung des Bauteils  $L$  ist im Millimeter- oder Meter-Bereich. Modelliert man jedoch etwa Materialien aus der Geophysik, z.B. Gesteine, dann kann  $b$  im Meterbereich und  $L$  im Bereich von einigen 100 Metern liegen. Für das weitere Vorgehen wird angenommen, dass die Mikrobestandteile groß genug sind, um im Rahmen der Kontinuumsmechanik beschrieben werden zu können.

### 3.1.2 Homogenisierung

Eine wichtige Methode innerhalb der Mikromechanik ist die Homogenisierung. Das Ziel besteht dabei darin, aus der bekannten heterogenen Struktur des Materials auf der Mikroebene homogene Ersatzzeigenschaften auf der Makroebene abzuleiten. So sollen innerhalb dieser Arbeit aus Einkristallparametern und Informationen über Geometrie und Orientierungen der Kristallite makroskopische Materialeigenschaften des Polykristalls bestimmt werden.

Die Lösung der Feldgleichungen auf der Mikroebene liefert lokale Spannungs- und Dehnungsfelder  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$  und  $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x})$ , die aufgrund der heterogenen Mikrostruktur inhomogen sind. Zur Charakterisierung des materiellen Punktes  $X$  auf der Makroebene muss der Informationsgehalt dieser lokal fluktuierenden Felder reduziert werden. Dazu werden sie durch den Volumenmittelwert über das repräsentative Volumenelement  $V$  ersetzt:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle := \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) \, dV, \quad \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle := \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x}) \, dV \quad . \quad (3.1)$$

Eine andere Art der Homogenisierung ergibt sich bei einer statistischen Betrachtung, wie sie etwa von KRÖNER [50] durchgeführt wurde und in Abschnitt 3.4 diskutiert wird. Dabei erfolgt die Mittelung durch Bildung von Erwartungswerten.

Um die Homogenisierung physikalisch konsistent durchzuführen, ist es üblich, die Gleichheit der Verzerrungsenergiedichte auf der Mikro- und auf der Makroebene zu fordern,

$$\langle \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x}) \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle \quad . \quad (3.2)$$

Diese Bedingung wurde erstmals von HILL [35] formuliert.

Mit Hilfe der Homogenisierung können effektive Materialeigenschaften definiert werden. Sie dienen der Charakterisierung des Materials auf der Makroebene und hängen ab von der gegebenen heterogenen Materialverteilung auf der Mikroebene. Wir betrachten zunächst rein linear elastisches Materialverhalten. Der effektive Elastizitätstensor  $\boldsymbol{C}^*$  wird definiert als lineare Beziehung zwischen den Mittelwerten der Spannungs- und Dehnungsfelder über das Volumenelement [65]:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \boldsymbol{C}^* : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle . \quad (3.3)$$

### 3.1.3 Randbedingungen

Zur eindeutigen Lösung der Feldgleichungen im Volumenelement  $V$  sind noch Randbedingungen notwendig. Der Spannungszustand und die Verschiebungen am Rand der Umgebung sind jedoch unbekannt, da sie im Inneren des Körpers  $\mathcal{B}$  liegt. Deswegen ist die Wahl

der Randbedingungen kein triviales Problem und kann, wie wir später sehen werden, einen Einfluss auf die abgeleiteten effektiven Eigenschaften haben. Wegen der Forderung, dass  $V$  hinreichend klein ist, müssen makroskopische Spannungs- und Verschiebungsgradienten bei der Wahl der Randbedingungen nicht berücksichtigt werden.

Der Rand von  $V$  wird als  $\partial V$  bezeichnet. Prinzipiell können an jedem Punkt  $\mathbf{x} \in \partial V$  die Verschiebungen, der Spannungsvektor in Normalenrichtung oder drei geeignete gemischte Komponenten dieser Vektoren vorgegeben werden. Im Folgenden betrachten wir die Randbedingungsarten

*Lineare Verschiebungsrandbedingungen:*

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x} \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad (3.4)$$

*Konstante Spannungsrandbedingungen:*

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad (3.5)$$

Mit  $\mathbf{n}(\mathbf{x})$  wird der nach außen gerichtete Einheitsvektor am Punkt  $\mathbf{x} \in \partial V$  bezeichnet.  $\mathbf{t}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$  ist der Spannungsvektor in Normalenrichtung,  $\boldsymbol{\sigma}^0$  und  $\boldsymbol{\epsilon}^0$  sind beliebige symmetrische (nicht verschwindende) Tensoren zweiter Stufe. Bei konstanten Spannungsrandbedingungen (3.5) ist demnach  $\mathbf{t}(\mathbf{x})$  lediglich abhängig vom Normalenvektor  $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in \partial V$ . Eine weitere Randbedingungsart sind

*Periodische Randbedingungen:*

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x} &= \mathbf{u}(\mathbf{x}^P) - \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x}^P \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= -\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}^P) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}^P) \end{aligned} \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad . \quad (3.6)$$

Hierbei ist  $\mathbf{x}^P \in \partial V$  der zu  $\mathbf{x} \in \partial V$  gehörende Punkt am gegenüberliegenden Rand. Für die Anwendbarkeit periodischer Randbedingungen ist es notwendig, dass die Geometrie des Volumenelements periodisch fortsetzbar ist, z.B. ein Quader.

Jede dieser Randbedingungen liefert im Allgemeinen unterschiedliche mittlere Felder  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  und  $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle$ . Die Randbedingung (3.4) stellt den Fall der stärksten Zwangsbedingung am Rand dar, Randbedingung (3.5) den Fall ohne Zwangsbedingungen, bei dem sich jeder Randpunkt frei verschieben kann. Die tatsächlichen Randbedingungen des Volumenelements sind unbekannt und liegen zwischen diesen beiden Fällen.

Aufgrund der materiellen Heterogenität fluktuieren die Spannungs- und Dehnungsfelder im repräsentativen Volumenelement. Bei Vorgabe von Verschiebungsrandbedingungen

(3.4) oder periodischen Randbedingungen (3.6) gilt für das inhomogene Dehnungsfeld jedoch das *Average Strain Theorem* [65]

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad . \quad (3.7)$$

Für Spannungsrandbedingungen (3.5) gilt analog das *Average Stress Theorem*

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \boldsymbol{\sigma}^0 \quad . \quad (3.8)$$

Die am Rand des Volumenelements aufgebrauchte Dehnung  $\boldsymbol{\epsilon}^0$  bzw. Spannung  $\boldsymbol{\sigma}^0$  entspricht also gerade der mittleren Dehnung bzw. Spannung. Sie charakterisieren damit den Dehnungs- bzw. Spannungszustand des materiellen Punktes auf der Makroebene.

Diese drei Randbedingungsarten besitzen weiterhin folgende Eigenschaft: Sie führen zu Feldern  $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x})$  und  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$ , die die Hill-Bedingung (3.2) erfüllen. Es ist also gewährleistet, dass die Verzerrungsenergie auf der Mikroebene und auf der Makroebene übereinstimmt. In den Beweis geht lediglich die Erfüllung der kinematischen Verträglichkeit (2.5) von  $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x})$  bzw. des Kräftegleichgewichts (2.4) von  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$  ein [57]. Die Hill-Bedingung, wie auch das Average Strain Theorem und das Average Stress Theorem, gilt unabhängig von den konstitutiven Gleichungen, die die beiden Felder miteinander verknüpfen, also unabhängig vom vorliegenden Stoffverhalten.

## 3.2 Strategien in der Mikromechanik

Nach BÖHM [9] lassen sich die verschiedenen mikromechanischen Verfahren in zwei große Gruppen einteilen:

Zum einen gibt es Ansätze, bei denen ausgehend von bestimmten Informationen über die Mikrostruktur die lokalen Felder in jedem Mikrobestandteil durch Phasenmittelwerte approximiert werden (*Mean field approaches*). Dabei geht man immer von einem unendlichen Medium aus. Diese Verfahren sind analytisch oder zumindest mit relativ geringem numerischen Aufwand zu realisieren und wurden auf eine Vielzahl von mechanischen Problemstellungen angewendet [65]. Eng damit verwandt sind Variationsmethoden zur Ermittlung von Schranken. Die für das Problem piezoelektrischer Polykristalle in der Literatur verwendeten Verfahren werden in Abschnitt 3.9 vorgestellt.

Zum anderen gibt es Ansätze, bei denen einzelne konkrete Ausschnitte der Mikrostruktur analysiert werden. Die lokalen Felder auf der Mikroebene werden dabei mit hoher

lokaler Auflösung bestimmt. Dazu werden meistens numerische Methoden wie die Finite-Elemente-Methode herangezogen. Die Beschreibung des Volumenelements erfolgt entweder direkt mit einem gegebenen realen Ausschnitt der Mikrostruktur eines Materials, z.B. einem Gefügeschliff. Häufiger wird die Mikrostruktur jedoch mit einem allgemeinen Modell beschrieben. Dies können einfache periodische Anordnungen der Mikrobestandteile (Einheitszellen) bis hin zu sehr komplexen geometrischen Strukturen mit einem statistischen Ansatz sein. Ein guter Überblick dieser Verfahren ist in BÖHM [9] zu finden.

Der Hauptvorteil der Analyse von konkreten Ausschnitten ist die Möglichkeit, komplexere Geometrieanordnungen und komplexeres Materialverhalten auf der Mikroebene beschreiben zu können. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass es neben der Homogenisierung auch möglich ist, lokale Phänomene wie etwa Spannungskonzentrationen, Rissbildung oder Umklappprozesse zu untersuchen. Aus diesem Grund wurde dieser Ansatz im Rahmen dieser Arbeit gewählt, der nach Wissen des Autors noch nicht auf piezoelektrische Polykristalle angewendet wurde. Die Nachteile bestehen in der geringeren Allgemeingültigkeit der Ergebnisse, einem möglichen Einfluss des Randes und dem höheren numerischen Aufwand.

Die meisten grundlegenden mikromechanischen Arbeiten beziehen sich auf die analytischen und semianalytischen Verfahren. Bei der Mehrheit der Ansätze mit konkreten Ausschnitten wird die Annahme einer periodischen Mikrostruktur getroffen und periodische Randbedingungen verwendet (siehe etwa [11]). Ohne diese einschränkende Annahme stellt die Wahl der (unbekannten) Randbedingungen ein Problem dar, da die abgeleiteten effektiven Eigenschaften von ihnen abhängen. Bisher gibt es in der Literatur dazu wenige Ansätze [39], [71]. Aus diesem Grund scheint es notwendig, die mikromechanische Theorie mit besonderem Augenmerk auf die Endlichkeit des Volumenelements und den Einfluss der Randbedingungen ausführlich darzustellen.

Speziell wird der Fall eines linear elastischen bzw. piezoelektrischen Materialverhaltens angenommen, der sich auf andere lineare Probleme, z.B. Thermoelastizität, oder auf durch Mikrorisse geschädigtes Material [92], erweitern lässt.

### 3.3 Effektive Materialtensoren

In Gleichung (3.3) wurde der effektive Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^*$  als eindeutige Beziehung zwischen  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  und  $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle$  definiert. Das bedeutet, dass Gleichung (3.3) für alle Spannungs- und Dehnungsfelder erfüllt sein muss, welche den Feldgleichungen für beliebige Randbedingungen genügen. Bei einem endlichen Volumenelement ist aufgrund des Einflusses der Randbedingungen die Existenz einer solchen eindeutigen Beziehung nicht gewährleistet.

Da wir uns im Rahmen dieser Arbeit auf die numerische Untersuchung von endlichen Volumenelementen konzentrieren, wird eine davon abweichende Definition von  $\mathbf{C}^*$  eingeführt, in welche die Abhängigkeit von der gewählten Randbedingung explizit eingeht.

Bei Vorgabe einer Randbedingung ist  $\mathbf{C}^*$  durch die implizite Definition (3.3) nicht eindeutig bestimmt. Es ergeben sich nur sechs Gleichungen für die 36 Komponenten<sup>1</sup> von  $\mathbf{C}^*$ . Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass eine bijektive lineare Abbildung eindeutig bestimmt ist mit den linear unabhängigen Bildern von  $n$  linear unabhängigen Vektoren, wobei  $n$  die Dimension des Urbildraums ist. Der Raum der Dehnungen bzw. der Spannungen hat unter Berücksichtigung der Symmetrie dieser beiden Tensoren die Dimension 6. Zur vollständigen Bestimmung von  $\mathbf{C}^*$  müssen demnach sechs geeignete Randbedingungen  $RB^i$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , vorgegeben werden, die zu linear unabhängigen mittleren Spannungen  $\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle$  und linear unabhängigen mittleren Dehnungen  $\langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle$  führen.

Wir nennen deshalb eine Menge von sechs Randbedingungen

$$\mathcal{R} := \{RB^1, \dots, RB^6\} \quad (3.9)$$

ein *Randbedingungssystem*. Für ein Randbedingungssystem  $\mathcal{R}$  nennen wir die Lösung des Gleichungssystems

$$\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle = \mathbf{C}^{*\mathcal{R}} : \langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle \quad , \quad i = 1, \dots, 6, \quad (3.10)$$

den *effektiven Steifigkeitstensor*  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$  zum *Randbedingungssystem*  $\mathcal{R}$ . Hierbei sind  $\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle$  und  $\langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle$  die Mittelwerte der Spannungs- bzw. Dehnungsfelder für die Lösung des Randwertproblems mit Randbedingung  $RB^i$ ,  $i = 1, \dots, 6$ .

Für ein beliebiges Randbedingungssystem ist noch nicht gewährleistet, dass das Gleichungssystem (3.10) eine eindeutige Lösung besitzt. Dies ist dann der Fall, wenn  $\langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle$  und  $\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle$  jeweils linear unabhängig sind. Es ist weiter sinnvoll, für  $\mathbf{C}^*$  folgende Symmetrieeigenschaft zu fordern:

$$\mathbf{C}_{ijkl}^{*\mathcal{R}} = \mathbf{C}_{klij}^{*\mathcal{R}} \quad . \quad (3.11)$$

Wir nennen deshalb ein Randbedingungssystem  $\mathcal{R}$  *vollständig*, wenn das Gleichungssystem (3.10) eine eindeutige Lösung  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$  liefert, das die Symmetriebedingung (3.11) erfüllt. Für ein vollständiges Randbedingungssystem  $\mathcal{R}$  erhalten wir ein wohldefiniertes  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$ .

---

<sup>1</sup>Die symmetrischen Spannungs- und Dehnungstensoren besitzen jeweils sechs unabhängige Komponenten. An  $\mathbf{C}^*$  wird zunächst nur die Symmetrieforderung  $\mathbf{C}_{ijkl}^* = \mathbf{C}_{jikl}^* = \mathbf{C}_{ijlk}^*$  gestellt. Damit ergeben sich 36 unabhängige Komponenten.

Im Folgenden betrachten wir das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_u$  mit linearen Verschiebungsrandbedingungen

$$RB^i : \quad \mathbf{u}^i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} \cdot \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \in \partial V, \quad i = 1, \dots, 6, \quad (3.12)$$

für linear unabhängige  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$ . Der effektive Elastizitätstensor zum Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_u$  ist  $\mathbf{C}^{*u} = \mathbf{C}^{*\mathcal{R}_u}$ . Der folgende Satz zeigt, dass dieses Randbedingungssystem vollständig ist.

### Satz 1

Das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_u$  ist vollständig.

### Beweis 1

a)  $\langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , sind linear unabhängig wegen der linearen Unabhängigkeit von  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  und des Average Strain Theorems.

b) zu zeigen:  $\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , sind linear unabhängig.

Seien  $\lambda^1, \dots, \lambda^6 \in \mathbb{R}$  mit  $\lambda^1 \langle \boldsymbol{\sigma}^1 \rangle + \dots + \lambda^6 \langle \boldsymbol{\sigma}^6 \rangle = \mathbf{0}$ . Wir betrachten die Lösung des Randwertproblems mit Randbedingung (3.4) für

$$\boldsymbol{\epsilon}^0 = \lambda^1 \boldsymbol{\epsilon}^{0(1)} + \dots + \lambda^6 \boldsymbol{\epsilon}^{0(6)}.$$

Mit dem Superpositionsprinzip erhält man  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \lambda^1 \langle \boldsymbol{\sigma}^1 \rangle + \dots + \lambda^6 \langle \boldsymbol{\sigma}^6 \rangle = \mathbf{0}$ . Aufgrund der Hill-Bedingung (3.2) folgt daraus

$$0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\epsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle.$$

Da  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$  positiv definit ist, kann dies nur erfüllt sein, wenn  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  für alle  $\mathbf{x}$  außerhalb einer Nullmenge.<sup>2</sup> Damit gilt  $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \mathbf{0}$ . Da  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  linear unabhängig sind, folgt  $\lambda^i = 0$ ,  $i = 1, \dots, 6$ .

c) zu zeigen:  $\mathbf{C}^{*u}$  ist symmetrisch.

Dies folgt aus der Darstellung von  $\mathbf{C}^{*u}$  mit Hilfe von Einflusstensoren

$$\mathbf{C}^{*u} = \langle \mathcal{A}^T(\mathbf{x}) : \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathcal{A}(\mathbf{x}) \rangle \quad .$$

Siehe hierzu Anhang C und Gleichung (C.9).

---

<sup>2</sup>Für eine Nullmenge  $N$  gilt:  $\int I_N = 0$ , wobei  $I_N$  die Indikatorfunktion der Menge  $N$  ist.



Die Verwendung von sechs geeigneten Verschiebungsrandbedingungen führt also zu einem eindeutig bestimmten effektiven Elastizitätstensor. Wegen der Linearität des Randwertproblems kann gezeigt werden, dass der effektive Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^{*u}$  unabhängig von der Wahl der  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  ist. Eine mögliche Wahl der  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  mit beliebigem  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  ist

$$\boldsymbol{\epsilon}^{0(1)} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^{0(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^{0(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}^{0(4)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\lambda}{2} & 0 \\ \frac{\lambda}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^{0(5)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\lambda}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^{0(6)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{2} \\ 0 & \frac{\lambda}{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_t$

$$RB^i : \quad \mathbf{t}^i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}^{0(i)} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial V, \quad i = 1, \dots, 6, \quad (3.14)$$

für linear unabhängige  $\boldsymbol{\sigma}^{0(i)}$  ist ebenfalls vollständig. Dies kann analog zum Beweis von  $\mathcal{R}_u$  gezeigt werden. Der effektive Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^{*t}$  ist unabhängig von der Wahl der  $\boldsymbol{\sigma}^{0(i)}$ .

Nach HILL [37] gilt für die Abweichung des effektiven Elastizitätstensors für Spannungs- und Dehnungsrandbedingungen die Abschätzung

$$\mathbf{C}^{*u} : (\mathbf{C}^{*t})^{-1} = \mathbf{I} + O\left(\left(\frac{b}{B}\right)^3\right). \quad (3.15)$$

Hierbei ist  $b$  die charakteristische Länge einer Inhomogenität und  $B$  die Größe des repräsentativen Volumenelements (siehe Abbildung 3.1). Der Fehlerterm ist von der Ordnung 3 in  $b/B$ , er nimmt mit zunehmender Größe des Volumenelements stark ab. Für ein unendliches Volumenelement gilt somit  $\mathbf{C}^{*u} = \mathbf{C}^{*t} = \mathbf{C}^*$ .

Wenn für beliebige Randbedingungssysteme  $\mathcal{R}_1$  und  $\mathcal{R}_2$

$$\|\mathbf{I} - \mathbf{C}^{*\mathcal{R}_1} : (\mathbf{C}^{*\mathcal{R}_2})^{-1}\| < \epsilon \quad (3.16)$$

mit einer gegebenen Genauigkeit  $\epsilon$  erfüllt ist, dann nennt man das Volumenelement  $V$  *statistisch repräsentativ*.

$\epsilon$  bestimmt die Mindestgröße  $B$  des statistisch repräsentativen Volumenelements. Für ein statistisch repräsentatives Volumenelement  $V$  ist der effektive Elastizitätstensor näherungsweise unabhängig vom Randbedingungssystem  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}_1} \approx \mathbf{C}^{*\mathcal{R}_2}$ . In diesem Fall sprechen

wir vom tatsächlichen effektiven Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^* \approx \mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$  für ein beliebiges Randbedingungssystem  $\mathcal{R}$ . Ist die Ungleichung (3.16) nicht erfüllt, dann können nur scheinbar effektive Materialtensoren  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$  bestimmt werden.

### 3.4 Stochastische Mikromechanik

In den vorherigen Abschnitten wurde die Mikrostruktur der Werkstoffe auf eine rein deterministische Weise beschrieben. Das heißt, die Materialverteilung auf der Mikroebene ist fest vorgegeben. Bei vielen Werkstoffen gibt es eine zufällige, unregelmäßige Anordnung der Mikrobestandteile. Dies ist z.B. bei Polykristallen und bei zufällig angeordneten Einschlüssen oder Mikrorissen der Fall. Für diese Mikrostrukturen können zumeist keine einfachen Regelmäßigkeiten beobachtet werden. Aus diesem Grund kann eine stochastische Betrachtungsweise der Mikrostruktur sinnvoll sein.

Die Grundidee der stochastischen Mikromechanik ist die Verwendung von Zufallsvariablen zur Beschreibung der Materialverteilung auf der Mikroebene. Für eine vertiefende Betrachtung sei auf die Arbeiten von KRÖNER [50] und von KREHER & POMPE [86] verwiesen. Im Folgenden sei der Elastizitätstensor  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in V$ , eine Zufallsvariable. Die Menge dieser Zufallsvariablen wird *Zufallsfeld*  $\mathbf{C}$  genannt und wir sprechen von einem *stochastischen Volumenelement*.

Die Verteilung eines Zufallsfeldes kann dargestellt werden mit Hilfe von  $n$ -Punkt Wahrscheinlichkeitsdichten

$$f_n(\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_n; \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n), \quad n \in \mathbb{N} \quad . \quad (3.17)$$

Im Falle eines  $k$ -phasigen Materials gibt  $f_n$  die gemeinsame Wahrscheinlichkeit dafür an, dass das Zufallsfeld  $\mathbf{C}$  an der Stelle  $\mathbf{x}_i$  den Wert  $\mathbf{C}_i$  annimmt,  $i = 1, \dots, n$ ,

$$P(\{\mathbf{C}(\mathbf{x}_1) = \mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}(\mathbf{x}_n) = \mathbf{C}_n\}) = f_n(\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_n; \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \quad . \quad (3.18)$$

Diese Schreibweise kann auf den kontinuierlichen Fall eines Materials mit unendlich vielen verschiedenen Phasen (z.B. Polykristall, jede Kristallorientierung entspricht einer Phase) übertragen werden. Die Verteilung des Zufallsfeldes  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$  ist eindeutig bestimmt durch die Vorgabe von  $f_n$  für alle  $n \in \mathbb{N}$ . Eine weitere Darstellungsweise des Zufallsfeldes  $\mathbf{C}$  ist

mit Hilfe von Korrelationsfunktionen  $k_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$  möglich [51]:

$$\begin{aligned} k_1(\mathbf{x}_1) &= \int (\mathbf{c}_1 - E[\mathbf{c}(\mathbf{x}_1)]) f_1(\mathbf{c}_1, \mathbf{x}_1) d\mathbf{c}_1 = \mathbf{0} \quad , \\ k_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \int \int (\mathbf{c}_1 - E[\mathbf{c}(\mathbf{x}_1)]) (\mathbf{c}_2 - E[\mathbf{c}(\mathbf{x}_2)]) f_2(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \quad . \end{aligned} \quad (3.19)$$

Eine wichtige Voraussetzung für die weitere Vorgehensweise ist die Forderung nach *statistischer Homogenität*. Diese besagt, dass die statistischen Eigenschaften nicht von der absoluten Position im Raum abhängen. Für die  $n$ -Punkt Wahrscheinlichkeitsdichten bedeutet dies, dass sie nur abhängig sind von den Differenzen der Form  $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1, i = 2, \dots, n$ :

$$\begin{aligned} f_n(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n; \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) &= \tilde{f}_n(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n; \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1) \\ f_1(\mathbf{c}_1; \mathbf{x}_1) &= \tilde{f}_1(\mathbf{c}_1) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Insbesondere ist  $f_1$  unabhängig von der Position  $\mathbf{x}_1 \in V$ . Das bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit, auf ein bestimmtes Material  $\mathbf{c}_1$  (z.B. Einschluss oder Matrix) zu treffen, an jeder Stelle im Volumenelement gleich groß ist. Für einen makroskopisch homogenen Werkstoff ist dies eine sinnvolle Annahme. Als wichtigen Spezialfall betrachten wir eine stückweise konstante Mikrostruktur, z.B. ein Polykristall oder Einschlüsse in einer Matrix. In diesem Fall kann das Zufallsfeld  $\mathbf{c}$  folgendermaßen geschrieben werden:

$$\mathbf{c}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} I_{F_i}(\mathbf{x}) \mathbf{c}_i \quad . \quad (3.21)$$

Hierbei beschreibt die Zufallsvariable  $F_i$  die Fläche des  $i$ -ten Bereichs,<sup>3</sup> die Zufallsvariable  $\mathbf{c}_i$  den konstanten Elastizitätstensor in diesem Bereich und  $I_{F_i}$  ist die Indikatorfunktion der Menge  $F_i$ . Bei vielen Werkstoffen (z.B. Polykristall) können die lokalen Materialorientierungen (Körner) als unabhängig voneinander angenommen werden. Dies bedeutet, dass die Zufallsvariablen  $\mathbf{c}_i$  stochastisch unabhängig sind.

Für den Erwartungswert von  $\mathbf{c}(\mathbf{x})$  folgt aus der statistischen Homogenität

$$E[\mathbf{c}(\mathbf{x})] = \int \mathbf{c} f_1(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = E[\mathbf{c}] \quad . \quad (3.22)$$

Das Zufallsfeld ist demnach unabhängig von der Position  $\mathbf{x}$ . Bei der Modellierung von makroskopisch isotropem Materialverhalten ist  $E[\mathbf{c}] = E[\mathbf{c}(\mathbf{x})]$  ein isotroper Tensor.

Eine weitere Forderung, die in der stochastischen Mikromechanik oft gestellt wird, ist die *Ergodizität* [50]. Ergodizität besagt, dass die Erwartungswerte eines Zufallsfeldes bereits

<sup>3</sup>Zur Theorie zufälliger Mengen siehe z.B. STOYAN & STOYAN [82].

aus einer Realisierung bestimmt werden können. Dies impliziert etwa, dass der Volumenmittelwert  $\langle \mathbf{C} \rangle$  einer beliebigen Realisierung dem Erwartungswert  $E[\mathbf{C}]$  entspricht:

$$P(\langle \mathbf{C} \rangle = E[\mathbf{C}]) = 1 \quad . \quad (3.23)$$

Dies stellt starke Anforderungen an die Größe des repräsentativen Volumenelements und an das Zufallsfeld. Für ein endliches Volumenelement ist (3.23) nicht erfüllt, vielmehr hat  $\langle \mathbf{C} \rangle$  eine Verteilung mit einer nicht verschwindenden Streuung  $s^2[\langle \mathbf{C} \rangle] > 0$ . Für einen makroskopisch isotropen Körper (z.B. Polykristall) mit mikroskopisch anisotropem Materialverhalten (Körner) ist  $E[\mathbf{C}]$  ein isotroper Tensor. Aufgrund der endlichen Anzahl der Körner im Volumenelement kann der Volumenmittelwert über eine Realisierung  $\langle \mathbf{C} \rangle$  trotzdem leicht anisotrop sein.

Im Weiteren betrachten wir die Spannungsfelder  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$ . Sie sind deterministisch über die Feldgleichungen mit dem Zufallsfeld  $\mathbf{C}$  gekoppelt und sind demnach ebenfalls Zufallsfelder. Es ist meist nicht möglich, aus der gegebenen Verteilung von  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$  die Verteilung von  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  in geschlossener Form anzugeben. Sie muss meist durch numerische Simulation näherungsweise bestimmt werden. Dazu werden eine Vielzahl von Realisierungen des stochastischen Volumenelements untersucht.

Die Verteilung von  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  eines endlichen Volumenelements ist im Allgemeinen auch bei statistischer Homogenität von der Position  $\mathbf{x} \in V$  abhängig, wie bereits in [95] angedeutet. Der Grund hierfür liegt in dem Einfluss der Randbedingungen auf die Spannungsfelder am Rand. Die Abhängigkeit der Verteilung von  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  von der relativen Lage zum Rand des Volumenelements wird in Abschnitt 5.1.1 näher untersucht.

Diese Erkenntnisse können folgendermaßen zusammengefasst werden: Für ein unendliches Volumenelement ist bei Forderung von statistischer Homogenität und Ergodizität die Mittelung durch Erwartungswerte und die Volumenmittelung für eine beliebige Realisierung gleichwertig:

$$P(\langle \mathbf{C} \rangle = E[\mathbf{C}]) = 1 \quad , \quad P(\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = E[\boldsymbol{\sigma}]) = 1 \quad . \quad (3.24)$$

Die deterministische und die stochastische Betrachtungsweise sind in diesem Fall äquivalent. Ohne die Forderung nach Ergodizität ist der Erwartungswert der Felder unabhängig von der Lage im Volumenelement und demnach gleich dem Erwartungswert des Volumenmittelwertes,

$$E[\mathbf{C}(\mathbf{x}_1)] = E[\mathbf{C}(\mathbf{x}_2)] = E[\langle \mathbf{C} \rangle] \quad , \quad E[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}_1)] = E[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}_2)] = E[\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle] \quad , \quad (3.25)$$

$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in V$ . Die Volumenmittelwerte  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  von verschiedenen Realisierungen können jedoch unterschiedlich sein. Bei endlichen Volumenelementen gilt (3.25) aufgrund der Randeffekte lediglich für das Zufallsfeld  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$  und nicht für  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ .

Die deterministische Definition von  $\mathbf{C}^*$  in Gleichung (3.3) wird nun auf ein stochastisches Volumenelement übertragen. Nach WILLIS [95] und KREHER & POMPE [86] wird ein effektives Materialgesetz als Beziehung zwischen den Erwartungswerten der Spannungs- und Dehnungsfelder definiert:

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})] = \mathbf{C}^* : \mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})] \quad . \quad (3.26)$$

Dies ist zunächst nur eine punktweise Definition. Aufgrund von Gleichung (3.25) ist sie nur für unendliche Volumenelemente sinnvoll. Obwohl jeder Punkt dieselben statistischen Materialeigenschaften besitzt (statistische Homogenität), ist für endliche Volumenelemente  $\mathbf{C}^*$  nach Definition (3.26) wegen des Einflusses des Randes abhängig von  $\mathbf{x} \in V$ . Eine Möglichkeit, um diese Ortsabhängigkeit zu umgehen, ist die folgende Definition:

$$\mathbb{E}[\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle] = \mathbf{C}^* : \mathbb{E}[\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle] \quad . \quad (3.27)$$

Nach (3.27) ist  $\mathbf{C}^*$  definiert als lineare Beziehung zwischen den Erwartungswerten der mittleren Spannungen und Dehnungen über das Volumenelement.

## 3.5 Erweiterung auf lineare Piezoelektrizität

In diesem Abschnitt wird die bisher für linear elastisches Materialverhalten vorgestellte mikromechanische Theorie auf lineare Piezoelektrizität erweitert.

### 3.5.1 Homogenisierung und Randbedingungen

Die Homogenisierung erfolgt zusätzlich zu den mechanischen auch für die elektrischen Feldgrößen,

$$\langle \mathbf{E} \rangle := \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{E}(\mathbf{x}) \, dV \quad , \quad \langle \mathbf{D} \rangle := \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{D}(\mathbf{x}) \, dV \quad . \quad (3.28)$$

Die Hill-Bedingung wurde von HORI & NEMAT-NASSER [38] auf das piezoelektrische Problem verallgemeinert. Die Energie des Volumenelements setzt sich dabei aus einem elastischen und einem elektrischen Beitrag zusammen,

$$\langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \quad . \quad (3.29)$$

Wir betrachten zwei verschiedene Arten von elektrischen Randbedingungen:

*Lineare Potenzialrandbedingungen:*

$$\varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{x} \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad . \quad (3.30)$$

*Konstante dielektrische Randbedingungen:*

$$D_n(\mathbf{x}) = \mathbf{D}^0 \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad . \quad (3.31)$$

$\mathbf{E}^0$  und  $\mathbf{D}^0$  sind beliebige Vektoren und  $D_n(\mathbf{x}) = \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$  ist die Normalkomponente der dielektrischen Verschiebung. Zusammen mit den elastischen Randbedingungen (3.4) oder (3.5) und den Feldgleichungen aus Abschnitt 2.2 ist damit das piezoelektrische Randwertproblem vollständig bestimmt. Für periodische Randbedingungen muss eine zusätzliche Bedingung zu Gleichung (3.6) erfüllt sein.

*Periodische Randbedingungen:*

$$\begin{aligned} D_n(\mathbf{x}) &= -D_n(\mathbf{x}^P) \\ \varphi(\mathbf{x}) - \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{x} &= \varphi(\mathbf{x}^P) - \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{x}^P \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad . \end{aligned} \quad (3.32)$$

Das Average Strain Theorem (3.7) und das Average Stress Theorem (3.8) sind, unabhängig von den elektrischen Randbedingungen, weiterhin gültig. Analoge Beziehungen können für den Mittelwert des elektrischen Feldes  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  und des dielektrischen Verschiebungsfeldes  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$  abgeleitet werden. Für lineare Potenzialrandbedingungen und periodische Randbedingungen gilt [38]

$$\langle \mathbf{E} \rangle = \mathbf{E}^0 \quad (3.33)$$

und für konstante dielektrische Randbedingungen

$$\langle \mathbf{D} \rangle = \mathbf{D}^0 \quad . \quad (3.34)$$

Die Gültigkeit der erweiterten Hill-Bedingung (3.29) wurde in [38] für die vier Kombinationen von Verschiebungs- oder Spannungsrandbedingungen mit Potenzial- oder dielektrischen Randbedingungen gezeigt. Diese werden im Weiteren zur Vereinfachung als  $u$ - $E$ -,  $u$ - $D$ -,  $t$ - $E$ - und  $t$ - $D$ -Randbedingungen bezeichnet. Um (3.29) auch für periodische Randbedingungen zu beweisen, gehen wir aus von dem Beweis in MAUGIN [57] für den rein mechanischen Fall. Um die elektrischen Terme erweitert ergibt sich

$$\begin{aligned} &\langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \rangle - \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\epsilon} - \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle) \rangle + \langle \mathbf{D} \cdot (\mathbf{E} - \langle \mathbf{E} \rangle) \rangle \\ &= \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} (\mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x}) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, dS + \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} (\varphi - \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{x})(\mathbf{D} \cdot \mathbf{n}) \, dS = 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.35)$$

Der erste bzw. zweite Integrand verschwindet wegen der Periodizität von  $\mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x}$  bzw.  $\varphi - \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{x}$  und der Antiperiodizität von  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$  bzw.  $\mathbf{D} \cdot \mathbf{n}$  am Rand des Volumenelements unter Verwendung von Gleichung (3.7) bzw. (3.33).

### 3.5.2 Effektive Materialtensoren

Die konstitutiven piezoelektrischen Gleichungen wurden bereits in Gleichung (2.11) aufgestellt. Die Definition des effektiven Steifigkeitstensors  $\mathbf{C}^*$ , des piezoelektrischen Kopp lungstensors  $\mathbf{e}^*$  und des Dielektrizitätstensors  $\boldsymbol{\kappa}^*$  ist demnach analog zu Gleichung (3.3) durch

$$\begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \\ \langle \mathbf{D}^L \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}^* & -\mathbf{e}^{*T} \\ \mathbf{e}'^* & \boldsymbol{\kappa}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\epsilon}^L \rangle \\ \langle \mathbf{E} \rangle \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

gegeben, wobei eine verkürzte Schreibweise verwendet wird. Die effektiven Materialtensoren hängen wegen der Linearität des Randwertproblems nur von den linearen Beiträgen der Feldgrößen ab. Die remanente Polarisation  $\mathbf{P}^R$  und die remanente Dehnung  $\boldsymbol{\epsilon}^R$  müssen deswegen zur Bestimmung von  $\mathbf{C}^*$ ,  $\mathbf{e}^*$  und  $\boldsymbol{\kappa}^*$  nicht berücksichtigt werden. Sie spielen lediglich bei der Berechnung von effektiven remanenten Größen eine Rolle. Dies wird nicht innerhalb dieser Arbeit behandelt (siehe hierzu u.a. [76]). Zur Vereinfachung schreiben wir im Weiteren  $\mathbf{D}$  statt  $\mathbf{D}^L$  und  $\boldsymbol{\epsilon}$  statt  $\boldsymbol{\epsilon}^L$ .

Das Gleichungssystem (3.36) besteht aus neun Gleichungen für die 81 Komponenten der effektiven Materialtensoren. Wir nennen deshalb eine Menge von neun elektromechanischen Randbedingungen  $\mathcal{R} = \{RB^1, \dots, RB^9\}$  ein *piezoelektrisches Randbedingungssystem*. Zunächst muss noch zwischen  $\mathbf{e}^*$  und  $\mathbf{e}'^*$  unterschieden werden. Die effektiven Materialtensoren  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$ ,  $\mathbf{e}'^{*\mathcal{R}}$ ,  $\mathbf{e}^{*\mathcal{R}}$  und  $\boldsymbol{\kappa}^{*\mathcal{R}}$  zum Randbedingungssystem  $\mathcal{R}$  sind definiert als Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle \\ \langle \mathbf{D}^i \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}^{*\mathcal{R}} & -\mathbf{e}^{*\mathcal{R},T} \\ \mathbf{e}'^{*\mathcal{R}} & \boldsymbol{\kappa}^{*\mathcal{R}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle \\ \langle \mathbf{E}^i \rangle \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 9 \quad (3.37)$$

Hierbei sind  $\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle$ ,  $\langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle$ ,  $\langle \mathbf{D}^i \rangle$  und  $\langle \mathbf{E}^i \rangle$  die mittleren Felder für die Lösung des Randwertproblems mit Randbedingung  $\mathcal{R}^i$ ,  $i = 1, \dots, 9$ .

Ein Randbedingungssystem heißt *vollständig*, wenn das Gleichungssystem (3.37) eine eindeutige Lösung liefert, die folgende Symmetriebedingungen erfüllt:

$$\mathbf{C}_{ijkl}^{*\mathcal{R}} = \mathbf{C}_{klij}^{*\mathcal{R}}, \quad \boldsymbol{\kappa}_{ij}^{*\mathcal{R}} = \boldsymbol{\kappa}_{ji}^{*\mathcal{R}}, \quad \mathbf{e}_{ijk}^{*\mathcal{R}} = \mathbf{e}_{ijk}^{\prime*\mathcal{R}} \quad (3.38)$$

Für ein vollständiges Randbedingungssystem erhält man also wohldefinierte effektive Materialtensoren, welche die Symmetrieeigenschaften besitzen, die auch für die lokalen Materialtensoren gelten.

Wir betrachten nun die vier Randbedingungssysteme, die aus den vier Kombinationen von homogenen elektrischen und mechanischen Randbedingungen entstehen. So ist beispielsweise das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_{uD}$  mit  $u$ - $D$ -Randbedingungen folgendermaßen definiert:

$$RB^i : \quad \begin{aligned} \mathbf{u}^i(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} \cdot \mathbf{x} \\ D_n^i(\mathbf{x}) &= \mathbf{D}^{0(i)} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V, \quad i = 1, \dots, 9 \quad (3.39)$$

mit linear unabhängigen Vektoren  $\begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} \\ \mathbf{D}^{0(i)} \end{pmatrix}$ .

Analog werden die Randbedingungssysteme  $\mathcal{R}_{uE}$ ,  $\mathcal{R}_{tD}$  und  $\mathcal{R}_{tE}$  definiert. Die Vollständigkeit dieser Randbedingungssysteme kann ähnlich wie in Satz 1 bewiesen werden.

### Satz 2

Das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_{uE}$  ist vollständig.

### Beweis 2

Es muss die lineare Unabhängigkeit der Vektoren

$$\begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle \\ \langle \mathbf{E}^i \rangle \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle \\ \langle \mathbf{D}^i \rangle \end{pmatrix} \quad , \quad i = 1, \dots, 9 \quad ,$$

gezeigt werden. Die erste Unabhängigkeit folgt direkt aus den Gleichungen (3.7) und (3.33). Zum Beweis der zweiten Unabhängigkeit seien  $\lambda^1, \dots, \lambda^9 \in \mathbb{R}$  mit  $\lambda^i \langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle = \mathbf{0}$  und  $\lambda^i \langle \mathbf{D}^i \rangle = \mathbf{0}$ . Wir betrachten das Randwertproblem mit  $u$ - $E$ -Randbedingungen für

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}^0 \\ \mathbf{E}^0 \end{pmatrix} = \lambda^i \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} \\ \mathbf{E}^{0(i)} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} \\ \mathbf{E}^{0(i)} \end{pmatrix} \neq \mathbf{0} \quad .$$

Mit dem Superpositionsprinzip gilt  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{0}$  und  $\langle \mathbf{D} \rangle = \mathbf{0}$ . Mit der erweiterten Hill-Bedingung (3.29) folgt daraus

$$0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \rangle = \langle \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\mathcal{C}} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E} \rangle \quad .$$

Da  $\boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x})$  positiv definit sind, ist  $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \mathbf{0}$  und  $\mathbf{E}^0 = \langle \mathbf{E} \rangle = \mathbf{0}$  und damit  $\lambda^i = 0$ ,  $i = 1, \dots, 9$ . Die Symmetrieeigenschaften ergeben sich aus der Darstellung mit Einflusstensoren (siehe Anhang C).



Die Vollständigkeit von  $\mathcal{R}_{uD}$ ,  $\mathcal{R}_{tE}$  und  $\mathcal{R}_{tD}$  kann nicht direkt aus Satz 2 abgeleitet werden. Es ist hierfür notwendig, die linearen piezoelektrischen Gleichungen mit den entsprechenden unabhängigen Feldvariablen darzustellen (siehe Anhang A). Der Beweis soll beispielsweise an  $\mathcal{R}_{uD}$  vorgeführt werden.

### Satz 3

Das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_{uD}$  ist vollständig.

### Beweis 3

Die Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle \\ \langle \mathbf{E}^i \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^D\mathbf{C}^{*\mathcal{R}} & \mathbf{h}^{*\mathcal{R},T} \\ \mathbf{h}'^{*\mathcal{R}} & \boldsymbol{\beta}^{*\mathcal{R}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle \\ \langle \mathbf{D}^i \rangle \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 9,$$

ist eindeutig: Die lineare Unabhängigkeit der Vektoren der rechten Seite folgt direkt aus (3.7) und (3.34). Zum Beweis der Unabhängigkeit der Vektoren der linken Seite seien  $\lambda^1, \dots, \lambda^9 \in \mathbb{R}$  mit  $\lambda^i \langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle = \mathbf{0}$  und  $\lambda^i \langle \mathbf{E}^i \rangle = \mathbf{0}$ . Für das Randwertproblem mit  $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \lambda^i \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  und  $\mathbf{D}^0 = \lambda^i \mathbf{D}^{0(i)}$  gilt  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{0}$  und  $\langle \mathbf{E} \rangle = \mathbf{0}$ . Daraus folgt

$$0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \rangle \cdot \langle \mathbf{E} \rangle = \langle \boldsymbol{\epsilon} : {}^D\mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle + \langle \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{D} \rangle + 2\langle \mathbf{D} \cdot \mathbf{h} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle.$$

Nach LOTHE & BARNETT [55] ist der Term<sup>4</sup>

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) : {}^D\mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) + \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) + 2\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{h}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) > 0$$

für  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$  und  $\mathbf{D}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ . Damit folgt  $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \mathbf{0}$  und  $\mathbf{D}^0 = \langle \mathbf{D} \rangle = \mathbf{0}$  und weiter  $\lambda^i = 0$ ,  $i = 1, \dots, 9$ . Mit Gleichung (A.5) ergeben sich aus den eindeutigen  ${}^D\mathbf{C}^{\mathcal{R}}$ ,  $\boldsymbol{\beta}^{*\mathcal{R}}$  und  $\mathbf{h}^{*\mathcal{R}}$  eindeutige  $\mathbf{C}^{*\mathcal{R}}$ ,  $\boldsymbol{\kappa}^{*\mathcal{R}}$  und  $\mathbf{e}^{*\mathcal{R}}$  mit der Symmetrieeigenschaft (3.38).

Wie im elastischen Fall sind die effektiven Materialtensoren für das Randbedingungssystem  $\mathcal{R}_{uD}$  unabhängig von  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  und  $\mathbf{D}^{0(i)}$ ,  $i = 1, \dots, 9$ . Folgende Wahl ist naheliegend: Die ersten sechs Randbedingungen sind rein mechanische Belastungen mit  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)}$  nach (3.13) und  $\mathbf{D}^{0(i)} = \mathbf{0}$ ,  $i = 1, \dots, 6$ . Die drei weiteren Randbedingungen sind rein elektrische Belastungen mit

$$\mathbf{D}^{0(7)} = \begin{pmatrix} \lambda \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^{0(8)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \lambda \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^{0(9)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

<sup>4</sup>Dieser Term entspricht dem Mikropotenzial  $\phi$  in Gleichung (3.41). Siehe dazu auch den Abschnitt 3.6.1 über Mikro- und Makropotenziale.

$\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  beliebig, und festgehaltenem Rand,  $\boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} = \mathbf{0}$ ,  $i = 7, \dots, 9$ . Analoges gilt für die Randbedingungssysteme  $\mathcal{R}_{uE}$ ,  $\mathcal{R}_{tD}$  und  $\mathcal{R}_{tE}$ .

Bei der Beschreibung von piezoelektrischem Verhalten kann die Definition des statistisch repräsentativen Volumenelements in (3.16) um einen elektrischen Term ergänzt werden. Die stochastische Mikromechanik kann analog zum rein elastischen Fall eingeführt werden.

Als wichtiges Ergebnis bleibt Folgendes festzuhalten: Durch Lösen des elektromechanischen Randwertproblems im Volumenelement für neun geeignete Randbedingungen können die effektiven elastischen, dielektrischen und piezoelektrischen Eigenschaften bestimmt werden. Diese können in sechs rein mechanische und drei rein elektrische Belastungen aufgeteilt werden. Es sind alle vier Kombinationen von Spannungs- und Verschiebungsrandbedingungen mit Potenzial- und dielektrischen Randbedingungen sowie periodische Randbedingungen möglich. Diese erfüllen die erweiterte Hill-Bedingung und liefern wohldefinierte effektive Materialtensoren.

Die Darstellung der effektiven Materialparameter kann einheitlich in einer der vier Varianten der linear piezoelektrischen Gleichungen erfolgen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden als unabhängige Variablen die Dehnung und das elektrische Feld gewählt. Im Vergleich zum rein elastischen Problem ist zu beachten, dass im Allgemeinen  $\boldsymbol{c}^{*uE} \neq \boldsymbol{c}^{*u} \neq \boldsymbol{c}^{*uD}$  gilt.

## 3.6 Schranken der effektiven Materialtensoren

Für die effektiven Materialtensoren können auf verschiedene Weise Schranken abgeleitet werden: Durch einfache Volumenmittelwerte der lokalen Materialparameter (Abschnitt 3.6.2), durch Wahl von bestimmten Randbedingungen (Abschnitt 3.6.3) und durch Lösen des Randwertproblems für Teilgebiete einer Gebietszerlegung des Volumenelements (Abschnitt 3.6.4).

### 3.6.1 Mikro- und Makropotenziale

Entsprechend der Vorgehensweise nach HORI & NEMAT-NASSER [65], [38] betrachten wir zur Ableitung der Schrankeneigenschaften thermodynamische Potenziale auf der Mikro- und auf der Makroebene.

Das Mikropotenzial für linear piezoelektrisches Verhalten, das von  $\boldsymbol{\epsilon}$  und  $\mathbf{D}$  abhängt, ist gegeben durch

$$\phi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) : {}^r\mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) + \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{h}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.41)$$

Das von  $\boldsymbol{\sigma}$  und  $\mathbf{E}$  abhängige Mikropotenzial ist gegeben durch<sup>5</sup>

$$\psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \mathcal{D}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \mathbf{E}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{d}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \mathbf{E}(\mathbf{x}) \cdot {}^s\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.42)$$

Hierbei ist  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  ein beliebiges (kinematisch) zulässiges Dehnungsfeld und  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  ein beliebiges zulässiges elektrisches Feld, d.h. es gibt ein  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  bzw.  $\varphi(\mathbf{x})$  mit

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}))^T \right) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla \varphi(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.43)$$

$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  ist ein beliebiges (statisch) zulässiges Spannungsfeld und  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$  ein beliebiges zulässiges dielektrisches Verschiebungsfeld, d.h.

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{bzw.} \quad \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad . \quad (3.44)$$

Folgende Beziehungen der Mikropotenziale können einfach verifiziert werden:

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \phi = \boldsymbol{\sigma} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{D}} \phi = \mathbf{E} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \psi = \boldsymbol{\epsilon} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}} \psi = \mathbf{D} \quad . \quad (3.45)$$

Für die anderen Kombinationsmöglichkeiten  $(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{E})$  und  $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{D})$  kann kein geeignetes Potenzial angegeben werden, das die Beziehungen (3.45) erfüllt, da dabei die piezoelektrischen Kopplungsterme verschwinden [38]. Im linear elastischen Fall fällt jeweils der zweite und dritte Term in (3.41) und (3.42) weg. Die makroskopischen Potenziale erhält man als Volumenmittelwert der mikroskopischen Potenziale über  $V$ ,

$$\Phi(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}) = \langle \phi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}) \rangle \quad , \quad \Psi(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) = \langle \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) \rangle \quad . \quad (3.46)$$

Im Weiteren seien die Felder  $\boldsymbol{\epsilon}^{uD}(\mathbf{x})$ ,  $\boldsymbol{\sigma}^{uD}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{D}^{uD}(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{E}^{uD}(\mathbf{x})$  die Lösung des elektromechanischen Randwertproblems für  $u$ - $D$ -Randbedingungen. Analog bezeichnen  $\boldsymbol{\epsilon}^{tE}(\mathbf{x})$  usw. die Felder der Lösung für  $t$ - $E$ -Randbedingungen. Das Makropotenzial  $\Phi$  besitzt folgende wichtige Minimaleigenschaft (siehe [65],[38]):

<sup>5</sup>Siehe hierzu die verschiedenen Schreibweisen der linear piezoelektrischen Gleichungen in Anhang A. Es ist zu beachten, dass  $\mathbf{D}$  die dielektrische Verschiebung und  $\mathcal{D}$  den Nachgiebigkeitstensor bezeichnen.

### Theorem 1

Für die Felder  $\boldsymbol{\epsilon}^{uD}(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{D}^{uD}(\mathbf{x})$  der Lösung des Randwertproblems für  $u$ - $D$ -Randbedingungen gilt

$$\Phi(\boldsymbol{\epsilon}^{uD}, \mathbf{D}^{uD}) = \min_{(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}) \in \mathcal{K}_1} \Phi(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}) \quad \text{mit}$$

$$\mathcal{K}_1 = \{(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}) \mid \boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D} \text{ zulässig}, D_n(\mathbf{x})|_{\partial V} = \mathbf{D}^0 \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \mathbf{u}(\mathbf{x})|_{\partial V} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x}\} \quad .$$

$\mathcal{K}_1$  ist die Menge aller 'Tupel', bestehend aus einem kinematisch zulässigen Feld  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  und einem statisch zulässigen Feld  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$ , welche die Verschiebungs- bzw. dielektrischen Randbedingungen erfüllen. Diese Felder sind unabhängig von den konstitutiven Gleichungen, müssen also nicht zu einem statisch zulässigen  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und kinematisch zulässigen  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  führen. Dies wird nur von der eindeutigen Lösung des Randwertproblems  $(\boldsymbol{\epsilon}^{uD}, \mathbf{D}^{uD}) \in \mathcal{K}_1$  erfüllt. Nach Theorem 1 nimmt das Makropotenzial  $\Phi$  für diese Lösung das Minimum an. Analog dazu gilt folgende Minimaleigenschaft des Makropotenzials  $\Psi$ :

### Theorem 2

Für die Felder  $\boldsymbol{\sigma}^{tE}(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{E}^{tE}(\mathbf{x})$  der Lösung des Randwertproblems für  $t$ - $E$ -Randbedingungen gilt

$$\Psi(\boldsymbol{\sigma}^{tE}, \mathbf{E}^{tE}) = \min_{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) \in \mathcal{K}_2} \Psi(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) \quad \text{mit}$$

$$\mathcal{K}_2 = \{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) \mid \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E} \text{ zulässig}, \mathbf{t}(\mathbf{x})|_{\partial V} = \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \mathbf{E}(\mathbf{x})|_{\partial V} = \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{x}\} \quad .$$

Die Minimalwerte der Makropotenziale können für die entsprechenden Randbedingungenarten in Abhängigkeit von den effektiven Materialtensoren dargestellt werden. Unter Verwendung der erweiterten Hill-Bedingung (3.29) und der Gleichungen (3.7), (3.34) bzw. (3.8), (3.33) gilt

$$\Phi(\boldsymbol{\epsilon}^{uD}, \mathbf{D}^{uD}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^0 : \mathcal{D}^{*uD} : \boldsymbol{\epsilon}^0 + \mathbf{D}^0 \cdot \mathbf{h}^{*uD} : \boldsymbol{\epsilon}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{D}^0 : \boldsymbol{\beta}^{*uD} : \mathbf{D}^0 \quad , \quad (3.47)$$

$$\Psi(\boldsymbol{\sigma}^{tE}, \mathbf{E}^{tE}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathcal{D}^{*tE} : \boldsymbol{\sigma}^0 + \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{d}^{*tE} : \boldsymbol{\sigma}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{E}^0 : \boldsymbol{\kappa}^{*tE} : \mathbf{E}^0 \quad . \quad (3.48)$$

## 3.6.2 Einfache Schranken nach Voigt und Reuss

Für die effektiven Materialtensoren können mit Hilfe der Minimaleigenschaften der Makropotenziale obere und untere Schranken in Form von einfachen Volumenmittelwerten abgeleitet werden. Für den linear elastischen Fall ergeben sich die bekannten Grenzen von VOIGT [87] und REUSS [74].

Wir betrachten dazu die konstanten Felder  $\boldsymbol{\epsilon}^V(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^0$  und  $\mathbf{D}^V(\mathbf{x}) = \mathbf{D}^0$  für alle  $\mathbf{x} \in V$ . Dies entspricht dem Voigt'schen Ansatz eines konstanten Dehnungsfeldes. Dieser Ansatz verletzt zwar das Kräftegleichgewicht (2.4), er ist jedoch in der Menge  $\mathcal{K}_1$  enthalten. Damit erhält man aus der Minimaleigenschaft des Makropotenzials  $\Phi$  (Theorem 1) und Gleichung (3.47) für beliebige  $\boldsymbol{\epsilon}^0$  und  $\mathbf{D}^0$  die Ungleichung

$$\begin{aligned}
\Phi(\boldsymbol{\epsilon}^V, \mathbf{D}^V) &= \langle \phi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\epsilon}^0, \mathbf{D}^0) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^0 : \langle {}^D\mathcal{C}(\mathbf{x}) \rangle : \boldsymbol{\epsilon}^0 + \mathbf{D}^0 \cdot \langle \mathbf{h}(\mathbf{x}) \rangle : \boldsymbol{\epsilon}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{D}^0 \cdot \langle \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) \rangle \cdot \mathbf{D}^0 \\
&\geq \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^0 : {}^D\mathcal{C}^{*uD} : \boldsymbol{\epsilon}^0 + \mathbf{D}^0 \cdot \mathbf{h}^{*uD} : \boldsymbol{\epsilon}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{D}^0 : \boldsymbol{\beta}^{*uD} : \mathbf{D}^0 \\
&= \Phi(\boldsymbol{\epsilon}^{uD}, \mathbf{D}^{uD}) \quad .
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Dies stellt eine gekoppelte obere Schranke für die effektiven elastischen, dielektrischen und piezoelektrischen Materialtensoren dar. Im Sinne einer positiv definiten quadratischen Form (siehe Anhang B) kann dies geschrieben werden als

$$({}^D\mathcal{C}^{*uD}, \mathbf{h}^{*uD}, \boldsymbol{\beta}^{*uD}) \leq (\langle {}^D\mathcal{C}(\mathbf{x}) \rangle, \langle \mathbf{h}(\mathbf{x}) \rangle, \langle \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}) \rangle) \quad . \tag{3.50}$$

Eine untere Schranke kann mit den Feldern  $\boldsymbol{\sigma}^R(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}^0$ ,  $\mathbf{E}^R(\mathbf{x}) = \mathbf{E}^0$  hergeleitet werden. Dies entspricht dem Reuss'schen Ansatz eines konstanten Spannungsfeldes. Aus der Minimaleigenschaft des Makropotenzials  $\Psi$  (Theorem 2) und Gleichung (3.48) ergibt sich die Ungleichung

$$\begin{aligned}
\Psi(\boldsymbol{\sigma}^R, \mathbf{E}^R) &= \langle \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}^0, \mathbf{E}^0) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^0 : \langle \mathcal{D}(\mathbf{x}) \rangle : \boldsymbol{\sigma}^0 + \mathbf{E}^0 \cdot \langle \mathbf{d}(\mathbf{x}) \rangle : \boldsymbol{\sigma}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{E}^0 \cdot \langle {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \rangle \cdot \mathbf{E}^0 \\
&\geq \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathcal{D}^{*tE} : \boldsymbol{\sigma}^0 + \mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{d}^{*tE} : \boldsymbol{\sigma}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{E}^0 : {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^{*tE} : \mathbf{E}^0 \\
&= \Psi(\boldsymbol{\sigma}^{tE}, \mathbf{E}^{tE})
\end{aligned} \tag{3.51}$$

oder in abgekürzter Schreibweise

$$(\mathcal{D}^{*tE}, \mathbf{d}^{*tE}, {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^{*tE}) \leq (\langle \mathcal{D}(\mathbf{x}) \rangle, \langle \mathbf{d}(\mathbf{x}) \rangle, \langle {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}) \rangle) \quad . \tag{3.52}$$

Durch die Wahl von  $\mathbf{D}^0 = \mathbf{0}$  in (3.49) sieht man, dass der Volumenmittelwert des lokalen Steifigkeitstensors eine obere Schranke des effektiven Steifigkeitstensors ist,

$$\boldsymbol{\epsilon}^0 : {}^D\mathcal{C}^{*uD} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \leq \boldsymbol{\epsilon}^0 : \langle {}^D\mathcal{C}(\mathbf{x}) \rangle : \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{3.53}$$

für alle  $\boldsymbol{\epsilon}^0$ . Die Wahl von  $\boldsymbol{E}^0 = \mathbf{0}$  in (3.51) liefert analog eine obere Schranke des effektiven Nachgiebigkeitstensors. Mit  $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \mathbf{0}$  und  $\boldsymbol{\sigma}^0 = \mathbf{0}$  ergeben sich Schranken des effektiven Dielektrizitätstensors. Zusammenfassend gelten folgende Ungleichungen im Sinne einer positiv definiten quadratischen Form:

$${}^D\mathbf{C}^{*uD} \leq \langle {}^D\mathbf{C} \rangle \quad , \quad \mathbf{D}^{*tE} \leq \langle \mathbf{D} \rangle \quad , \quad \boldsymbol{\beta}^{*uD} \leq \langle \boldsymbol{\beta} \rangle \quad , \quad \sigma_{\boldsymbol{\kappa}^{*tE}} \leq \langle \sigma_{\boldsymbol{\kappa}} \rangle \quad . \quad (3.54)$$

Nun betrachten wir den Spezialfall eines linear elastischen Materialverhaltens<sup>6</sup> mit  $\mathbf{C}^{*uD} = \mathbf{C}^{*uE} = \mathbf{C}^{*u}$  und  $\mathbf{C}^{*tD} = \mathbf{D}^{*tE} = \mathbf{C}^{*t}$ . Es gilt nach (3.54)

$$\mathbf{C}^{*u} \leq \langle \mathbf{C} \rangle \quad , \quad \mathbf{D}^{*t} \leq \langle \mathbf{D} \rangle \quad . \quad (3.55)$$

Ist das Volumenelement statistisch repräsentativ, dann ist  $\mathbf{C}^{*u} \approx \mathbf{D}^{*t-1} = \mathbf{C}^*$  nach Definition (3.16) und die effektiven Materialeigenschaften sind näherungsweise unabhängig von der Art der Randbedingung. Für isotrope Tensoren  $\mathbf{C}^*$ ,  $\langle \mathbf{C} \rangle$  und  $\langle \mathbf{D} \rangle$  können diese Ungleichungen zusammengefasst werden (siehe Anhang B) und man erhält eine obere und eine untere Schranke für  $\mathbf{C}^*$ :

$$\langle \mathbf{D} \rangle^{-1} \leq \mathbf{C}^* \leq \langle \mathbf{C} \rangle \quad . \quad (3.56)$$

Es sei zum besseren Verständnis erwähnt, dass Ungleichung (3.56) in gewisser Weise eine Verallgemeinerung der Ungleichung zwischen dem harmonischen und dem arithmetischen Mittel auf Tensoren vierter Stufe darstellt.

### 3.6.3 Schranken aufgrund der Randbedingungen

Wir betrachten im Folgenden neben  $u$ - $D$ -Randbedingungen und  $t$ - $E$ -Randbedingungen die Felder  $\boldsymbol{\epsilon}^g(\mathbf{x})$ ,  $\boldsymbol{\sigma}^g(\mathbf{x})$ ,  $\boldsymbol{E}^g(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{D}^g(\mathbf{x})$  der Lösung des Randwertproblems für beliebige gemischte elektromechanische Randbedingungen. Nach HORI & NEMAT-NASSER [38] haben die Makropotenziale (3.46) folgende Minimaleigenschaften:

#### Theorem 3

Für die Felder  $\boldsymbol{\epsilon}^{tE}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{D}^{tE}(\mathbf{x})$  der Lösung des Randwertproblems für  $t$ - $E$ -Randbedingungen gilt

$$\Phi(\boldsymbol{\epsilon}^{tE}, \boldsymbol{D}^{tE}) = \min_{(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{D}) \in \mathcal{L}_1} \Phi(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{D}) \quad \text{mit} \quad (3.57)$$

$$\mathcal{L}_1 = \{(\boldsymbol{\epsilon}^g, \boldsymbol{D}^g) \mid \langle \boldsymbol{\epsilon}^g \rangle = \langle \boldsymbol{\epsilon}^{tE} \rangle, \langle \boldsymbol{D}^g \rangle = \langle \boldsymbol{D}^{tE} \rangle\} \quad .$$

---

<sup>6</sup>Es wird dazu die Annahme  $\boldsymbol{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{x} \in V$ , gemacht. Mit der Annahme  $\boldsymbol{D}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  ergeben sich analoge Ungleichungen mit  ${}^P\mathbf{C}$  und  ${}^P\mathbf{D}$  statt  $\mathbf{C}$  und  $\mathbf{D}$ . Nur  $\langle {}^P\mathbf{C} \rangle$  und  $\langle \mathbf{D} \rangle$  sind Schranken für den piezoelektrischen Fall.

Die Menge  $\mathcal{L}_1$  ist die Menge aller Dehnungs- und dielektrischen Felder, welche die elektromechanischen Feldgleichungen für beliebige Randbedingungen erfüllen und zu gleichen Mittelwerten der Dehnungen und des dielektrischen Feldes führen wie die Felder für konstante Spannungs- und lineare Potenzialrandbedingungen.

**Theorem 4**

Für die Felder  $\boldsymbol{\sigma}^{uD}(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{E}^{uD}(\mathbf{x})$  der Lösung des Randwertproblems für  $u$ - $D$ -Randbedingungen gilt

$$\Psi(\boldsymbol{\sigma}^{uD}, \mathbf{E}^{uD}) = \min_{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) \in \mathcal{L}_2} \Psi(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}) \quad \text{mit} \quad (3.58)$$

$$\mathcal{L}_2 = \{(\boldsymbol{\sigma}^g, \mathbf{E}^g) \mid \langle \boldsymbol{\sigma}^g \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma}^{uD} \rangle, \langle \mathbf{E}^g \rangle = \langle \mathbf{E}^{uD} \rangle\} \quad .$$

Diese Theoreme stellen Erweiterungen von Ergebnissen für lineare Elastizität dar [65]. Anschaulich besagen sie, dass konstante Spannungsrandbedingungen zu einem Verschiebungsfeld führen, welches das Makropotenzial  $\Phi$  minimiert. Lineare Verschiebungsrandbedingungen führen zu einem Spannungsfeld, welches das Makropotenzial  $\Psi$  minimiert.

Erfüllen die Felder der gemischten Randbedingungen die erweiterte Hill-Bedingung (3.29), so können aus den obigen Theoremen Ungleichungen für die effektiven Materialtensoren gewonnen werden:

$$({}^D\mathbf{C}^{*tE}, \mathbf{h}^{*tE}, \boldsymbol{\beta}^{*tE}) \leq ({}^D\mathbf{C}^{*g}, \mathbf{h}^{*g}, \boldsymbol{\beta}^{*g}) \quad , \quad (3.59)$$

$$(\mathcal{D}^{*uD}, \mathbf{d}^{*uD}, \boldsymbol{\kappa}^{*uD}) \leq (\mathcal{D}^{*g}, \mathbf{d}^{*g}, \boldsymbol{\kappa}^{*g}) \quad . \quad (3.60)$$

Für isotrope effektive Materialtensoren erhält man getrennte Ungleichungen für die elastischen und die dielektrischen Komponenten

$${}^D\mathbf{c}^{*tE} \leq \mathbf{c}^{*g} \leq {}^D\mathbf{c}^{*uD} \quad , \quad \boldsymbol{\beta}^{*tE} \leq \boldsymbol{\beta}^{*g} \leq \boldsymbol{\beta}^{*uD} \quad (3.61)$$

und für rein linear elastisches Materialverhalten

$$\mathbf{c}^{*t} \leq \mathbf{c}^{*g} \leq \mathbf{c}^{*u} \quad . \quad (3.62)$$

Es genügt also nach Ungleichung (3.62), konstante Spannungs- und lineare Verschiebungsrandbedingungen zu betrachten, weil diese eine obere und eine untere Schranke für den effektiven Elastizitätstensor liefern. Gleichmaßen genügt für das gekoppelte Problem die Verwendung von  $t$ - $E$ -Randbedingungen und  $u$ - $D$ -Randbedingungen. Das Problem, dass die wahren Randbedingungen des Volumenelements auf der Mikroebene unbekannt sind und somit der 'wahre' effektive Elastizitätstensor nicht ermittelbar ist, kann damit umgangen werden. Eine Aussage über die Abweichung von  $\mathbf{c}^{*t}$  und  $\mathbf{c}^{*u}$  ist durch die Abschätzung (3.15) gegeben.

### 3.6.4 Schranken aufgrund von Gebietszerlegung

Oft ist es nicht möglich, das vollständige Randwertproblem für ein großes Volumenelement zu lösen, da der numerische Aufwand stark zunimmt. Nur für hinreichend große Volumenelemente erhält man jedoch effektive Materialeigenschaften, die annähernd von der Art der Randbedingung unabhängig sind (siehe Abschätzung (3.15) und Ungleichung (3.16)). Deswegen kann es zweckmäßig sein, das Gesamtproblem in  $n$  Teilprobleme zu zerlegen. Dazu wird das Volumen in  $n$  disjunkte Teilgebiete zerlegt:

$$V = \bigcup_{i=1}^n V_i \quad , \quad V_i \cap V_j = \emptyset, \quad i \neq j \quad . \quad (3.63)$$

Die Idee der Gebietszerlegung wurde von HUET [39] für linear elastisches Materialverhalten vorgeschlagen. Zur Vereinfachung der Notation beschränken wir uns auf diesen Fall, die Erweiterung auf Piezoelektrizität folgt direkt. Zunächst betrachten wir lineare Verschiebungsrandbedingungen. Zusätzlich zum Rand  $\partial V$  werden die Verschiebungen auch auf den Rändern der Teilgebiete  $\partial V_i$  vorgegeben,

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \Big|_{\bigcup_{i=1}^n \partial V_i} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x} \quad . \quad (3.64)$$

Aufgrund der heterogenen Struktur des Volumenelements weicht  $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$  im Allgemeinen von der wahren Lösung  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  ab. Aus der Gebietszerlegung ergeben sich  $n$  Randwertprobleme auf  $V_i$  mit den Randbedingungen

$$\tilde{\mathbf{u}}^i(\mathbf{x}) \Big|_{\partial V_i} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \mathbf{x} \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad . \quad (3.65)$$

Durch Zusammensetzen der Lösungen  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^i(\mathbf{x})$  und  $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^i(\mathbf{x})$  ergibt sich als Lösung für das gesamte Volumenelement

$$\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^i(\mathbf{x}) \Big|_{V_i} \quad , \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^i(\mathbf{x}) \Big|_{V_i} \quad . \quad (3.66)$$

Für jedes Teilgebiet  $V_i$  kann der effektive Elastizitätstensor  $\tilde{\boldsymbol{C}}^{*i,u}$  analog zu Gleichung (3.3) berechnet werden,

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^i \rangle \Big|_{V_i} = \tilde{\boldsymbol{C}}^{*i,u} : \langle \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^i \rangle \Big|_{V_i} \quad , \quad (3.67)$$

wobei die Volumenmittelwerte jeweils über das Teilgebiet  $V_i$  berechnet werden. Der effektive Steifigkeitstensor  $\tilde{\boldsymbol{C}}^{*u}$  des gesamten Gebiets wird nun als gewichtete Summe von  $\tilde{\boldsymbol{C}}^{*i,u}$  definiert:

$$\tilde{\boldsymbol{C}}^{*u} = \sum_{i=1}^n \frac{|V_i|}{|V|} \tilde{\boldsymbol{C}}^{*i,u} \quad . \quad (3.68)$$



Für  $\tilde{\mathbf{C}}^{*u}$  gilt nach HUET [39] die Ungleichungskette

$$\mathbf{C}^{*u} \leq \tilde{\mathbf{C}}^{*u} \leq \langle \mathbf{C} \rangle \quad . \quad (3.69)$$

$\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$  ist ein kinematisch zulässiges Dehnungsfeld aus der Menge  $\mathcal{K}_1$  (siehe Theorem 1). Die erste Ungleichung in (3.69) erhält man somit in gleicher Weise wie die Voigt-Grenze (3.55). Für jedes Teilgebiet  $V_i$  ist  $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^i$  die Lösung des Randwertproblems auf  $V_i$  mit  $\langle \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^i \rangle = \boldsymbol{\epsilon}^0$ . Damit gilt für  $\tilde{\mathbf{C}}^{*i,u}$  wegen der Minimaleigenschaft des Makropotenzials analog zu Ungleichung (3.49)

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon}^0 : \tilde{\mathbf{C}}^{*i,u} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \leq \frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon}^0 : \langle \mathbf{C}^i \rangle : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad .$$

Durch volumengewichtete Summation nach Gleichung (3.68) erhält man die zweite Ungleichung in (3.69).

Analog kann für Spannungsrandbedingungen auf den Teilgebieten  $V_i$

$$\tilde{\mathbf{t}}^i(\mathbf{x})|_{V_i} = \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad (3.70)$$

der effektive Nachgiebigkeitstensor  $\tilde{\mathbf{D}}^{*t}$  definiert werden. Mit einer ähnlichen Begründung wie für Verschiebungsrandbedingungen erhält man die Ungleichung

$$\mathbf{D}^{*t} \leq \tilde{\mathbf{D}}^{*t} \leq \langle \mathbf{D} \rangle \quad . \quad (3.71)$$

### 3.6.5 Zusammenfassung

Falls die Tensoren in den Ungleichungen (3.69) und (3.71) isotrop sind, ergibt sich zusammenfassend mit (3.56) und (3.62) für lineare Elastizität die Ungleichungskette

$$\langle \mathbf{C}^{-1} \rangle^{-1} \leq \tilde{\mathbf{C}}^{*t} \leq \mathbf{C}^{*t} \leq \mathbf{C}^* \leq \mathbf{C}^{*u} \leq \tilde{\mathbf{C}}^{*u} \leq \langle \mathbf{C} \rangle \quad . \quad (3.72)$$

Zur praktischen Bedeutung dieser Ungleichungen folgen noch einige Bemerkungen: Der wahre effektive Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^*$  für ein Volumenelement  $V$  ist unbekannt. Durch einfache Volumenmittelung können obere und untere Schranken  $\langle \mathbf{C} \rangle$  und  $\langle \mathbf{C}^{-1} \rangle^{-1}$  für  $\mathbf{C}^*$  nach Voigt und Reuss bestimmt werden. Durch Lösen des Randwertproblems in  $V$  für homogene Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen können engere obere und untere Schranken  $\mathbf{C}^{*u}$  bzw.  $\mathbf{C}^{*t}$  berechnet werden. Ist dies, etwa aus numerischen Gründen, nicht möglich und werden stattdessen die Randwertprobleme lediglich auf Teilgebieten gelöst, dann ergeben sich wiederum Schranken  $\tilde{\mathbf{C}}^{*u}$  und  $\tilde{\mathbf{C}}^{*t}$ . Diese schließen ein größeres Intervall ein, liegen aber innerhalb der Schranken nach Voigt und Reuss.

### 3.7 Zweidimensionale Näherung eines Volumenelements

Wenn das Randwertproblem innerhalb eines dreidimensionalen Volumenelements numerisch gelöst werden soll, können darin aufgrund der beschränkten Rechnerkapazität oftmals nur wenige Mikrobestandteile beschrieben werden oder die Geometrie der Mikrobestandteile muss stark vereinfacht werden. In diesem Fall ist es sinnvoll, eine zweidimensionale Näherung eines Volumenelements zu betrachten. Dieser Ansatz wurde u.a. von BÖHM & HAN zur Berechnung effektiver Eigenschaften von partikelverstärkten Metallen verwendet [10].

Die mechanischen und elektrischen Felder sowie die Materialparameter sind dabei in einer Richtung, etwa der  $x_3$ -Richtung, konstant. In der Elastizitätstheorie werden der ebene Dehnungszustand (EDZ) und der ebene Spannungszustand (ESZ) unterschieden. Beim ebenen Dehnungszustand werden die Dehnungskomponenten in  $x_3$ -Richtung null gesetzt,  $\epsilon_{3i}(\boldsymbol{x}) = 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Damit vereinfacht sich das linear piezoelektrische Materialgesetz (2.11) in Matrixschreibweise (siehe Anhang A) zu

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \\ D_1 \\ D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{11} & \mathbf{C}_{12} & \mathbf{C}_{16} & -e_{11} & -e_{21} \\ \mathbf{C}_{12} & \mathbf{C}_{22} & \mathbf{C}_{26} & -e_{12} & -e_{22} \\ \mathbf{C}_{16} & \mathbf{C}_{26} & \mathbf{C}_{66} & -e_{16} & -e_{26} \\ e_{11} & e_{12} & e_{16} & \kappa_{11} & \kappa_{12} \\ e_{21} & e_{22} & e_{26} & \kappa_{12} & \kappa_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ 2\epsilon_{12} \\ E_1 \\ E_2 \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}^{\text{edz}} & -\mathbf{e}^{\text{edz},T} \\ \mathbf{e}^{\text{edz}} & \boldsymbol{\kappa}^{\text{edz}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix}.$$

Die Komponenten außerhalb der Ebene werden im Weiteren nicht betrachtet. Für den ebenen Spannungszustand gilt  $\sigma_{3i}(\boldsymbol{x}) = 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Damit erhält man das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ 2\epsilon_{12} \\ D_1 \\ D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{11} & \mathbf{D}_{12} & \mathbf{D}_{16} & d_{11} & d_{21} \\ \mathbf{D}_{12} & \mathbf{D}_{22} & \mathbf{D}_{26} & d_{12} & d_{22} \\ \mathbf{D}_{16} & \mathbf{D}_{26} & \mathbf{D}_{66} & d_{16} & d_{26} \\ d_{11} & d_{12} & d_{16} & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}_{11} & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}_{12} \\ d_{21} & d_{22} & d_{26} & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}_{12} & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \\ E_1 \\ E_2 \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon} \\ \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{\text{esz}} & \mathbf{d}^{\text{esz},T} \\ \mathbf{d}^{\text{esz}} & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^{\text{esz}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix}.$$

Im Folgenden soll die in Abschnitt 3.3 dargestellte Theorie zur Berechnung der effektiven Materialtensoren auf den zweidimensionalen Fall übertragen werden. Selbst für reine lineare Elastizität erschwert sich dieses Vorgehen wegen  $\mathbf{C}^{esz} \neq (\mathbf{D}^{edz})^{-1}$ . Im zweidimensionalen Fall verringert sich die Anzahl der unabhängigen Gleichungen von neun auf fünf (bzw. von sechs auf drei für lineare Elastizität). Deshalb besteht ein Randbedingungssystem lediglich aus fünf (drei) Randbedingungen,  $\mathcal{R} = \{RB^1, \dots, RB^5\}$ . Für ein Randbedingungssystem  $\mathcal{R}$  sind beim ebenen Dehnungszustand, analog zur Definition (3.37), die effektiven (reduzierten) Materialtensoren  $\mathbf{C}^{*,edz}$ ,  $\boldsymbol{\kappa}^{*,edz}$  und  $\mathbf{e}^{*,edz}$  die Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle \\ \langle \mathbf{D}^i \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}^{*,edz} & -\mathbf{e}^{*,edz,T} \\ \mathbf{e}^{*,edz} & \boldsymbol{\kappa}^{*,edz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\epsilon}^i \rangle \\ \langle \mathbf{E}^i \rangle \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 5. \quad (3.75)$$

Beim ebenen Spannungszustand können die effektiven (reduzierten) Materialtensoren  $\mathbf{D}^{*,esz}$ ,  $\mathbf{d}^{*,esz}$  und  $\sigma \boldsymbol{\kappa}^{*,esz}$  analog ausgehend von Gleichung (3.74) definiert werden. Der Begriff des statistisch repräsentativen Volumenelements in (3.16) kann jeweils für den ebenen Dehnungszustand und für den ebenen Spannungszustand übertragen werden.

### 3.8 Effektive (transversal) isotrope Materialparameter

Für viele Anwendungen in der Mikromechanik kann ein makroskopisch isotropes oder transversal isotropes Materialverhalten angenommen werden. Makroskopische Isotropie tritt z.B. auf für einen Polykristall mit zufällig isotrop verteilten Orientierungen und für mehrphasiges Material mit kugelförmigen Einschlüssen oder zufällig angeordneten Fasern. Zur Charakterisierung des Materialverhaltens auf der Makroebene liegt in diesem Fall das Interesse in effektiven isotropen Größen wie dem Elastizitätsmodul  $E^*$ , der Poisson-Zahl  $\nu^*$  und der Dielektrizitätskonstante  $\kappa^*$ .

Eine makroskopische transversale Isotropie erhält man etwa bei Faserverbundwerkstoffen mit ausgerichteten Fasern oder, wie etwa in dieser Arbeit, bei einachsig gepolten Ferroelektrika. Bei linear piezoelektrischem Materialverhalten benötigt man in diesem Fall fünf elastische, zwei dielektrische und drei piezoelektrische effektive Parameter.

Auch wenn das Materialverhalten auf der Makroebene isotrop ist, kann der effektive Elastizitätstensor für ein endliches Volumenelement leicht anisotrop sein. So mittelt sich etwa bei einem Polykristall mit einer endlichen Anzahl zufällig orientierter anisotroper Körner die Anisotropie nicht vollständig weg. Bei einer begrenzten Anzahl an zufällig orientierten ellipsoidförmigen Einschlüssen aus isotropem Material in einer isotropen Matrix kann sich eine schwache resultierende Vorzugsrichtung für die Ellipsenorientierung ergeben. Aus

stochastischer Sicht bedeutet dies, dass für ein endliches Volumenelement Gleichung (3.23) nicht erfüllt ist.

Gleiches gilt für ein makroskopisch transversal isotropes Materialverhalten. Auch in diesem Fall sind bei einem endlichen Volumenelement im Allgemeinen die effektiven Materialtensoren nicht exakt transversal isotrop.

Da in dieser Arbeit explizit endliche Volumenelemente verwendet werden, wird im Folgenden ausführlich beschrieben, wie aus den effektiven Materialtensoren effektive (transversal) isotrope Parameter bestimmt werden können. In der Literatur gibt es bisher, insbesondere für transversale Isotropie, Piezoelektrizität und zweidimensionale Volumenelemente, kein anwendbares Verfahren. Dagegen kann aufgrund des isotropen Materialverhaltens auf der Mikroebene die Auswertung bei der numerischen Analyse von Einheitszellen in BÖHM & HAN [10] auf einfache Weise erfolgen.

### 3.8.1 Makroskopische Isotropie

#### Dreidimensionaler Fall

Zur Bestimmung der effektiven elastischen Konstanten wird im isotropen Fall der effektive Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^*$  über die isotrope Orientierungsverteilung (4.14) integriert:

$$\mathcal{C}_{ijkl}^I = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Q_{im} Q_{jn} Q_{ko} Q_{lp} \mathcal{C}_{mnop}^* \sin \theta \, d\psi \, d\theta \, d\phi \quad . \quad (3.76)$$

$\mathbf{Q}(\psi, \theta, \phi)$  ist der Transformationstensor für die Eulerwinkel.<sup>7</sup>  $\mathcal{C}^I$  stellt damit eine Isotropisierung von  $\mathbf{C}^*$  dar.<sup>8</sup> Durch Lösen des Integrals (3.76) ergibt sich für die beiden unabhängigen Komponenten von  $\mathcal{C}^I$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{1111}^I &= \frac{3}{15} (\mathcal{C}_{1111}^* + \mathcal{C}_{2222}^* + \mathcal{C}_{3333}^*) + \frac{2}{15} (\mathcal{C}_{1122}^* + \mathcal{C}_{1133}^* + \mathcal{C}_{2233}^*) + \\ &\quad \frac{4}{15} (\mathcal{C}_{1212}^* + \mathcal{C}_{1313}^* + \mathcal{C}_{2323}^*) \quad , \\ \mathcal{C}_{1122}^I &= \frac{1}{15} (\mathcal{C}_{1111}^* + \mathcal{C}_{2222}^* + \mathcal{C}_{3333}^*) + \frac{4}{15} (\mathcal{C}_{1122}^* + \mathcal{C}_{1133}^* + \mathcal{C}_{2233}^*) + \\ &\quad \frac{2}{15} (\mathcal{C}_{1212}^* + \mathcal{C}_{1313}^* + \mathcal{C}_{2323}^*) \quad . \end{aligned} \quad (3.77)$$

<sup>7</sup>Siehe auch die ausführlichen Erklärungen zu den Eulerwinkeln in Abschnitt 4.2

<sup>8</sup>Zur Erklärung von Gleichung (3.76): Das Volumenelement kann als zufällig orientierter Ausschnitt der Mikrostruktur interpretiert werden. Die Isotropisierung entspricht dann dem Mittelwert der effektiven Eigenschaften über alle Orientierungen.

Daraus berechnen sich mit den bekannten Formeln der isotropen Elastizität die effektiven isotropen Materialparameter [30]

$$\begin{aligned} E^* &= \mathcal{C}_{1111}^I - 2 \frac{(\mathcal{C}_{1111}^I)^2}{\mathcal{C}_{1111}^I + \mathcal{C}_{1122}^I} \quad , \quad \nu^* = \frac{\mathcal{C}_{1122}^I}{\mathcal{C}_{1111}^I + \mathcal{C}_{1122}^I} \quad , \\ G^* &= \frac{E^*}{2(1 + \nu^*)} \quad , \quad K^* = \frac{E^*}{3(1 - 2\nu^*)} \quad . \end{aligned} \quad (3.78)$$

Die Isotropisierung des effektiven Dielektrizitätstensors  $\boldsymbol{\kappa}^*$  erfolgt analog zum elastischen Fall (siehe Gleichung (3.76)) und liefert für die effektive isotrope Dielektrizitätskonstante  $\kappa^*$  die einfache Beziehung

$$\kappa^* = \frac{1}{3} (\kappa_{11}^* + \kappa_{22}^* + \kappa_{33}^*) \quad . \quad (3.79)$$

Bei Anwendung von Gleichung (3.76) auf den effektiven piezoelektrischen Tensor  $\boldsymbol{d}^*$  verschwindet das Integral. Der einzige isotrope Tensor dritter Stufe ist der Nulltensor.

### Ebener Dehnungszustand

Für eine Mittelung mit Gleichung (3.76) fehlen bei einer zweidimensionalen Betrachtungsweise die Komponenten in  $x_3$ -Richtung. Deshalb wird lediglich über alle möglichen Orientierungen in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene integriert. Im Falle des ebenen Dehnungszustands ergibt sich folgende Mittelung des effektiven (reduzierten) Steifigkeitstensors  $\boldsymbol{c}^{*,\text{edz}}$ :

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta\gamma\delta}^I = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} T_{\alpha\mu} T_{\beta\nu} T_{\gamma\rho} T_{\delta\sigma} \mathcal{C}_{\mu\nu\rho\sigma}^{*,\text{edz}} \, d\phi \quad (3.80)$$

mit dem Transformationstensor

$$\mathbf{T}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \quad . \quad (3.81)$$

Lösen des Integrals (3.80) liefert die zwei unabhängigen Komponenten von  $\boldsymbol{c}^I$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{1111}^I &= \frac{3}{8} \left( \mathcal{C}_{1111}^{*,\text{edz}} + \mathcal{C}_{2222}^{*,\text{edz}} \right) + \frac{1}{4} \mathcal{C}_{1122}^{*,\text{edz}} + \frac{1}{2} \mathcal{C}_{1212}^{*,\text{edz}} \quad , \\ \mathcal{C}_{1122}^I &= \frac{1}{8} \left( \mathcal{C}_{1111}^{*,\text{edz}} + \mathcal{C}_{2222}^{*,\text{edz}} \right) + \frac{3}{4} \mathcal{C}_{1122}^{*,\text{edz}} - \frac{1}{2} \mathcal{C}_{1212}^{*,\text{edz}} \quad . \end{aligned} \quad (3.82)$$

Daraus berechnen sich  $E^*$  und  $\nu^*$  mit Gleichung (3.78). Für  $\kappa^*$  ergibt die gleiche Vorgehensweise

$$\kappa^* = \frac{1}{2} \left( \kappa_{11}^{*,\text{edz}} + \kappa_{22}^{*,\text{edz}} \right) \quad . \quad (3.83)$$

## Ebener Spannungszustand

Die Isotropisierung  $\mathcal{D}^I$  des effektiven (reduzierten) Nachgiebigkeitstensors  $\mathcal{D}^{*,esz}$  erhält man analog zu Gleichung (3.80) mit Ersetzen von  $\mathcal{C}^{*,edz}$  durch  $\mathcal{D}^{*,esz}$ . Daraus berechnen sich  $E^*$  und  $\nu^*$  aus den bekannten Formeln [30]

$$E^* = \frac{1}{\mathcal{D}_{1111}^I} \quad , \quad \nu^* = -\frac{\mathcal{D}_{1122}^I}{\mathcal{D}_{1111}^I} \quad . \quad (3.84)$$

Ersetzen von  $\kappa^{*,edz}$  durch  $\sigma\kappa^{*,esz}$  in Gleichung (3.83) liefert die effektive Dielektrizitätskonstante  $\sigma\kappa^*$  (unter konstanter Spannung). Da die makroskopische Piezoelektrizität in diesem Fall verschwindet,  $\mathbf{e}^{*,edz} = \mathbf{d}^{*,esz} = \mathbf{0}$ , gilt nach der Umrechnungsformel (A.4) für die effektive Dielektrizitätskonstante (unter konstanter Dehnung)  $\kappa^* = \sigma\kappa^*$ .

## 3.8.2 Makroskopische transversale Isotropie

Die makroskopische Isotropieachse sei im Folgenden die  $\mathbf{x}_3$ -Achse.

### Dreidimensionaler Fall

Ähnlich wie im zweidimensionalen Fall bei makroskopischer Isotropie wird der effektive Elastizitätstensor  $\mathcal{C}^*$  lediglich über alle Orientierungen in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene integriert, d.h. über alle Orientierungen, die senkrecht zur makroskopischen Isotropieachse liegen,

$$\mathcal{C}_{ijkl}^{\Pi} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} T_{im} T_{jn} T_{ko} T_{lp} \mathcal{C}_{mnop}^* d\phi \quad (3.85)$$

mit dem Transformationstensor

$$\mathbf{T}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad . \quad (3.86)$$

Aus dem Integral (3.85) ergeben sich die fünf unabhängigen Komponenten von  $\mathcal{C}^{\Pi}$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{1111}^{\Pi} &= \frac{3}{8} (\mathcal{C}_{1111}^* + \mathcal{C}_{2222}^*) + \frac{1}{4} \mathcal{C}_{1122}^* + \frac{1}{2} \mathcal{C}_{1212}^* \quad , \\ \mathcal{C}_{1122}^{\Pi} &= \frac{1}{8} (\mathcal{C}_{1111}^* + \mathcal{C}_{2222}^*) + \frac{3}{4} \mathcal{C}_{1122}^* - \frac{1}{2} \mathcal{C}_{1212}^* \quad , \\ \mathcal{C}_{1133}^{\Pi} &= \frac{1}{2} (\mathcal{C}_{1133}^* + \mathcal{C}_{2233}^*) \quad , \quad \mathcal{C}_{1313}^{\Pi} = \frac{1}{2} (\mathcal{C}_{1313}^* + \mathcal{C}_{2323}^*) \quad , \quad \mathcal{C}_{3333}^{\Pi} = \mathcal{C}_{3333}^* \quad . \end{aligned} \quad (3.87)$$

Durch Invertieren von  $\mathbf{c}^{\text{TI}}$  können daraus die effektiven transversal isotropen Materialparameter wie etwa der Elastizitätsmodul  $E_3^*$  in Richtung der Symmetrieachse und  $E_1^*$  senkrecht zu dieser Achse berechnet werden (siehe Gleichung (A.12)). Bei Integration von  $\boldsymbol{\kappa}^*$  analog zu Gleichung (3.85) erhält man die zwei unabhängigen Komponenten von  $\kappa^{\text{TI}}$

$$\kappa_{11}^{\text{TI}} = \frac{1}{2}(\kappa_{11}^* + \kappa_{22}^*) \quad , \quad \kappa_{33}^{\text{TI}} = \kappa_{33}^* \quad (3.88)$$

und bei Integration von  $\mathbf{e}^*$  die drei unabhängigen Komponenten von  $\mathbf{e}^{\text{TI}}$  (in Matrixnotation, siehe Anhang A)<sup>9</sup>

$$e_{33}^{\text{TI}} = e_{33}^* \quad , \quad e_{31}^{\text{TI}} = \frac{1}{2}(e_{31}^* + e_{32}^*) \quad , \quad e_{15}^{\text{TI}} = \frac{1}{2}(e_{15}^* + e_{24}^*) \quad . \quad (3.89)$$

### Ebener Dehnungszustand

Die makroskopische Isotropieachse soll durch die  $\mathbf{x}_3$ -Achse beschrieben werden, deshalb muss anstelle der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene die  $x_1$ - $x_3$ -Ebene betrachtet werden. Die Isotropieachse liegt innerhalb der betrachteten Ebene und nicht, wie meist üblich, senkrecht dazu. Dies ist notwendig, um Belastungen in Richtung der Isotropieachse beschreiben zu können. Der (reduzierte) effektive Steifigkeitstensor benötigt aufgrund der fehlenden Komponenten im Unterschied zum dreidimensionalen Fall keine zusätzliche Symmetrieeigenschaft,

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{1111}^{\text{TI}} &= \mathcal{C}_{1111}^{*,\text{edz}} \quad , \quad \mathcal{C}_{3333}^{\text{TI}} = \mathcal{C}_{3333}^{*,\text{edz}} \\ \mathcal{C}_{1313}^{\text{TI}} &= \mathcal{C}_{1313}^{*,\text{edz}} \quad , \quad \mathcal{C}_{1133}^{\text{TI}} = \mathcal{C}_{1133}^{*,\text{edz}} \quad . \end{aligned} \quad (3.90)$$

Da die Ebene senkrecht zur Isotropieachse im zweidimensionalen Modell nicht vollständig beschrieben wird, kann  $\mathcal{C}_{1122}^{\text{TI}}$  nicht bestimmt werden und es wird  $\mathcal{C}_{1122}^{\text{TI}} = \mathcal{C}_{1133}^{\text{TI}}$  angenommen. Durch Invertieren von  $\mathbf{c}^{\text{TI}}$  können die transversal isotropen Moduln mit Gleichung (A.12) berechnet werden.

Die dielektrischen und piezoelektrischen Parameter ergeben sich direkt aus  $\boldsymbol{\kappa}^{*,\text{edz}}$  und  $\mathbf{e}^{*,\text{edz}}$ :

$$\begin{aligned} \kappa_{11}^{\text{TI}} &= \kappa_{11}^{*,\text{edz}} \quad , \quad \kappa_{33}^{\text{TI}} = \kappa_{33}^{*,\text{edz}} \quad , \\ e_{33}^{\text{TI}} &= e_{33}^{*,\text{edz}} \quad , \quad e_{31}^{\text{TI}} = e_{31}^{*,\text{edz}} \quad , \quad e_{15}^{\text{TI}} = e_{15}^{*,\text{edz}} \quad . \end{aligned} \quad (3.91)$$

---

<sup>9</sup>Zwei weitere nicht verschwindende Komponenten von  $\mathbf{e}^{\text{TI}}$  sind  $e_{14}^{\text{TI}} = -e_{25}^{\text{TI}} = (e_{14}^* - e_{25}^*)/2$ . Die Integration von Gleichung (3.85) mit vertauschten Komponenten  $T_{12}$  und  $T_{21}$  in (3.86) liefert die gleichen transversal isotropen Parameter mit Ausnahme von  $e_{14}^{\text{TI}} = -e_{25}^{\text{TI}} = -(e_{14}^* - e_{25}^*)/2$ . Mit der Forderung nach Rotationssymmetrie um die Isotropieachse folgt  $e_{14}^{\text{TI}} = e_{25}^{\text{TI}} = 0$ .

## Ebener Spannungszustand

Beim ebenen Spannungszustand werden  $\mathcal{D}^{\text{II}}$ ,  $\gamma\kappa^{\text{II}}$  und  $\mathbf{d}^{\text{II}}$  analog zu den Gleichungen des ebenen Dehnungszustands (3.90) und (3.91) bestimmt. Die transversal isotropen elastischen Moduln ergeben sich direkt mit Gleichung (A.12). Lediglich  $\nu_{12}^*$  kann nicht berechnet werden, da nur die  $x_1$ - $x_3$ -Ebene betrachtet wird. Mit den Beziehungen (A.4) erhält man die dielektrischen und piezoelektrischen Moduln  $\kappa^{\text{II}}$  und  $\mathbf{e}^{\text{II}}$ .

## 3.9 Analytische Methoden zur Berechnung effektiver Eigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen

In der Literatur gibt es eine Vielzahl von Arbeiten zur näherungsweise Bestimmung effektiver Eigenschaften für verschiedenste Mikrostrukturen, z.B. Poren, Risse und Fasern in einer Matrix. In diesem Abschnitt werden speziell die (semi-)analytischen Verfahren für einen piezoelektrischen Polykristall vorgestellt. Zunächst wird der isotrope Fall betrachtet. In Abschnitt 3.9.5 werden die in den letzten Jahren entwickelten Ansätze für gepolte Zustände zusammengestellt.

### 3.9.1 Voigt- und Reuss-Grenzen

Die ersten einfachen Näherungslösungen für elastisches Materialverhalten stammen von VOIGT [87] und REUSS [74]. Dabei wird der Ansatz eines konstanten Dehnungs- bzw. Spannungsfeldes für ein unendliches Volumenelement verwendet (siehe auch Abschnitt 3.6.2). Nach HILL [35] und PAUL [72] erhält man damit eine obere und eine untere Schranke für den effektiven Elastizitätstensor:

$$\langle \mathcal{D} \rangle^{-1} \leq \mathbf{c}^* \leq \langle \mathbf{c} \rangle \quad . \quad (3.92)$$

Für dielektrisches Materialverhalten gilt analog nach einem Ansatz, der auf WIENER [94] zurückgeht:

$$\langle \beta \rangle^{-1} \leq \kappa^* \leq \langle \kappa \rangle \quad . \quad (3.93)$$

Durch Mittelung der elastischen bzw. dielektrischen Einkristallparameter über alle Orientierungen der Kristallite können die Schranken für einen isotropen Polykristall berechnet werden. Tabelle 3.1 zeigt die Ergebnisse für den Elastizitätsmodul  $E^*$ , die Poisson-Zahl



$\nu^*$ , den Kompressionsmodul  $K^*$ , den Gleitmodul  $G^*$  sowie für die Dielektrizitätskonstante  $\kappa^*$  im Fall von Bariumtitanat. Die Einkristallparameter wurden in Tabelle 2.1 angegeben. Für die elastischen Konstanten muss dabei zwischen der Annahme eines konstanten elek-

Modell	$E^*$ [GPa]	$\nu^*$ [-]	$K^*$ [GPa]	$G^*$ [GPa]	$\kappa^*/\epsilon_0$ [-]
Reuss ( $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ )	130.0	0.367	162.9	47.5	1958
Voigt ( $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ )	162.3	0.355	186.6	59.9	1310
Reuss ( $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ )	166.6	0.335	168.0	62.4	451
Voigt ( $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ )	194.5	0.327	187.0	73.3	300

Tabelle 3.1: Voigt- und Reuss-Grenzen der elastischen Konstanten und der Dielektrizitätskonstante für Bariumtitanat.

trischen Feldes und einer konstanten dielektrischen Verschiebung unterschieden werden. Eine analoge Unterscheidung gibt es für das dielektrische Problem. Da Bariumtitanat hohe piezoelektrische Konstanten aufweist, führen diese Annahmen zu deutlich voneinander abweichenden Ergebnissen für  $E^*$ ,  $\nu^*$ ,  $G^*$  und insbesondere für  $\kappa^*$ . Der Einfluss auf  $K^*$  ist hingegen nur gering.

Aus der Ungleichung (3.92) folgt die Schrankeneigenschaft jedoch lediglich für  $K^*$  und  $G^*$ , während  $E^*$  und  $\nu^*$  theoretisch außerhalb der Voigt-Reuss-Grenzen liegen können [6]. Es gibt Anordnungen der Mikrobestandteile, für welche diese Näherungen angenommen werden: die Voigt-Grenze für eine Reihenanordnung, die Reuss-Grenze für eine Parallelanordnung der einzelnen Phasen. Sie stellen damit die beste Aussage dar, die ohne jegliche geometrische und statistische Information getroffen werden kann. HILL schlug als verbesserten Näherungswert das arithmetische Mittel der beiden Schranken vor [35]. Wie bereits in Abschnitt 3.6.2 gezeigt sind für das elektromechanisch gekoppelte Problem nur die Kombinationen aus konstantem  $\boldsymbol{\sigma}$  und  $\mathbf{E}$  bzw. aus konstantem  $\boldsymbol{\epsilon}$  und  $\mathbf{D}$  Schranken für die effektiven Materialparameter.

### 3.9.2 Hashin-Shtrikman-Grenzen

Eine Verbesserung der Voigt-Reuss-Schranken kann aus dem Variationsprinzip von HASHIN & SHTRIKMAN [33] abgeleitet werden. Zur Vereinfachung wird im Folgenden der linear elastische Fall dargestellt. Dieser wurde kürzlich auf das elektromechanisch gekoppelte Problem erweitert (siehe etwa HORI & NEMAT-NASSER [38]). Explizite Grenzen für Bariumtitanat sind jedoch bisher nur für das entkoppelte Problem berechnet worden.

Das Variationsprinzip basiert auf der Idee des *homogenen Vergleichsmediums*. Dabei wird das elastische Randwertproblem für einen heterogenen Volumenbereich in ein homogenes Vergleichsproblem überführt (siehe Anhang D). Im Folgenden werden Verschiebungsrandbedingungen betrachtet. Dann liefert das homogene Vergleichsproblem mit  $\mathbf{C}_0$  das konstante Dehnungsfeld  $\boldsymbol{\epsilon}^0$ . Das Elastizitätsgesetz kann damit dargestellt werden in der Form

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) + \hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) \quad , \quad (3.94)$$

wobei das Eigenspannungsfeld  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$  gegeben ist durch

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) = (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.95)$$

Das Dehnungsfeld  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  kann aufgrund der Linearität des Randwertproblems mit Hilfe eines linearen Integraloperators  $\Gamma(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\tau}})$  in Abhängigkeit des Eigenspannungsfeldes  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$  geschrieben werden (siehe Gleichung (D.4)):

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^0 - \Gamma(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\tau}}) \quad . \quad (3.96)$$

Elimination von  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  aus den Gleichungen (3.95) und (3.96) liefert eine lineare Integralgleichung für  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$ :

$$(\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0)^{-1} : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) + \Gamma(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\tau}}) - \boldsymbol{\epsilon}^0 = 0 \quad . \quad (3.97)$$

Gleichung (3.97) wird in der Literatur als *Konsistenzbedingung* bezeichnet und bildet den Ausgangspunkt für das Variationsprinzip nach HASHIN & SHTRIKMAN [33]. Dabei wird ein Funktional für die Eigenspannungen  $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$  des homogenen Körpers aufgestellt:

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\epsilon}^0) = \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) : (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0)^{-1} : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) : \Gamma(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau}) \rangle - \langle \boldsymbol{\epsilon}^0 : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \rangle \quad . \quad (3.98)$$

Das Funktional  $\mathcal{F}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\epsilon}^0)$  ist für das exakte Eigenspannungsfeld  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$ , das die Konsistenzbedingung (3.97) erfüllt, stationär. Durch Einsetzen von (3.95) und (3.97) und der Definition von  $\mathbf{C}^*$  in (3.3) nimmt es für  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$  folgenden Wert an:

$$\mathcal{F}(\hat{\boldsymbol{\tau}}, \boldsymbol{\epsilon}^0) = -\frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\epsilon}^0 : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^0 : (\mathbf{C}_0 - \mathbf{C}^*) : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad . \quad (3.99)$$

Das Prinzip der Stationarität führt nach WALPOLE [88] bei geeigneter Wahl von  $\mathbf{C}_0$  auf ein Minimum- bzw. Maximum-Prinzip:

$$\mathcal{F}(\hat{\boldsymbol{\tau}}, \boldsymbol{\epsilon}^0) = \begin{cases} \min_{\boldsymbol{\tau} \in \mathcal{T}} \{ \mathcal{F}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\epsilon}^0) \} & \text{für } \mathbf{C}_0 \geq \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in V \\ \max_{\boldsymbol{\tau} \in \mathcal{T}} \{ \mathcal{F}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\epsilon}^0) \} & \text{für } \mathbf{C}_0 \leq \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in V \end{cases} \quad (3.100)$$

mit

$$\mathcal{T} = \{\boldsymbol{\tau} \mid \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla \cdot (\mathbf{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}))\} \quad . \quad (3.101)$$

Das Funktional  $\mathcal{F}$  nimmt also das Minimum bzw. das Maximum für das wahre Eigenspannungsfeld an. Aus dieser Extremaleigenschaft und (3.99) folgt

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^0 : \mathbf{C}^* : \boldsymbol{\epsilon}^0 \geq \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^0 : \mathbf{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon}^0 - \mathcal{F}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\epsilon}^0) \quad \text{für} \quad \mathbf{C}_0 \geq \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (3.102)$$

für ein beliebiges Eigenspannungsfeld  $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$ . Dies bildet die Grundlage für die Bestimmung von Grenzen der effektiven Materialtensoren. Die Idee dabei ist, eine stückweise konstante Näherungslösung  $\boldsymbol{\tau}$  für das wahre Eigenspannungsfeld  $\hat{\boldsymbol{\tau}}$  zu wählen. Dabei wird unter Verwendung von Informationen über die Mikrostruktur eine stochastische Betrachtungsweise herangezogen [95]. Es werden folgende Voraussetzungen an das Volumenelement gestellt:

- Makroskopische Isotropie.
- Statistische Homogenität.
- Isotrope 2-Punkte Dichte:  $f_2(\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \tilde{f}_2(\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2; \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|)$ .
- Kleine Korrelationslänge  $l$  der 2-Punkt Dichte:  
 $\tilde{f}_2(\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2; \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) = \tilde{f}_1(\mathbf{C}_1) \tilde{f}_1(\mathbf{C}_2) \quad \forall \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \geq l$ .

Für einen Polykristall bedeutet die letzte Forderung, dass die Orientierungen der einzelnen Körner stochastisch unabhängig sind. Durch eine geeignete Wahl einer oberen bzw. unteren Abschätzung  $\mathbf{C}_0$  von  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$  können die oberen bzw. unteren Hashin-Shtrikman-Grenzen  $\mathbf{C}_{HS}(\mathbf{C}_0)$  für  $\mathbf{C}^*$  abgeleitet werden. Es gilt

$$\mathbf{C}_{HS}(\mathbf{C}_0) \geq \mathbf{C}^* \quad \text{für} \quad \mathbf{C}_0 \geq \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad . \quad (3.103)$$

Hierbei ist die Tensorfunktion  $\mathbf{C}_{HS}(\mathbf{C}_0)$  explizit gegeben durch

$$\mathbf{C}_{HS}(\mathbf{C}_0) = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}) : (\mathbf{I} + \mathcal{P} : (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0)^{-1}) : \langle (\mathbf{I} + \mathcal{P} : (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0)^{-1}) \rangle^{-1} \rangle, \quad (3.104)$$

wobei  $\mathcal{P}(\mathbf{C}_0)$  der ESHELBY-Einflusstensor [21] für eine Kugel ist (siehe Gleichung (D.8)). Wie bei den Voigt-Reuss-Grenzen aus Abschnitt 3.9.1 gehen als Informationen der Mikrostruktur in Gleichung (3.104) lediglich die Materialparameter der Phasen (Einkristalle) ein. Die Hashin-Shtrikman-Grenzen sind jedoch nur unter den oben aufgeführten Voraussetzungen erfüllt. Für die Grenzfälle  $\mathbf{C}_0 \rightarrow \mathbf{0}$  und  $\mathbf{C}_0 \rightarrow \infty$  erhält man gerade die Voigt-

und Reuss-Schranken. Eine optimale Wahl von  $\mathcal{C}_0$  liefert die in der Literatur bekannten optimalen Hashin-Shtrikman-Grenzen.

Bei kubischer materieller Symmetrie stimmen die obere und die untere Grenze des Kompressionsmoduls überein und für den Gleitmodul gibt es einfache Formeln [86]. Für Polykristalle mit tetragonaler Symmetrie wurden die Grenzen von WATT [90] berechnet. Die Ergebnisse für Bariumtitanat bei konstantem elektrischen Feld sind in Tabelle 3.2 aufgelistet. Für konstante dielektrische Verschiebung sind die Ergebnisse in der Literatur nicht

Modell	$E^*$ [GPa]	$\nu^*$ [-]	$K^*$ [GPa]	$G^*$ [GPa]
HS -	140.4	0.366	174.3	51.4
HS +	151.1	0.362	181.9	55.5

Tabelle 3.2: Untere (HS -) und obere (HS +) Hashin-Shtrikman-Grenzen der elastischen Konstanten für Bariumtitanat bei konstantem elektrischen Feld [90].

angegeben.

Das Verfahren von Hashin-Shtrikman wurde von OLSON & AVELLANEDA [69] auf einen piezoelektrischen Polykristall erweitert. Explizite Grenzen wurden für die Dielektrizitätskonstante berechnet, jedoch für Piezoelektrika einer anderen Symmetrieklasse als Bariumtitanat. BISEGNA & LUCIANO [7] haben mit einem Variationsprinzip Grenzen der effektiven Eigenschaften für piezoelektrische Verbundwerkstoffe berechnet. Die theoretischen Grundlagen des Variationsprinzips sind in HORI & NEMAT-NASSER [38] für das elektromechanisch gekoppelte Problem dargelegt. Diese basieren auf der Lösung des elektromechanischen Einschlussproblems (siehe Anhang D).

### 3.9.3 Optimale Grenzen

Die Voigt-Reuss-Grenzen und die Hashin-Shtrikman-Grenzen sind optimale Grenzen in Bezug auf die gegebene statistische Information [51]. Im Allgemeinen können mit mehr statistischer Information engere optimale Grenzen abgeleitet werden. Optimalitätsaussagen sind möglich, wenn diese durch Korrelationsfunktionen  $k_n$  gegeben sind. Man spricht von optimalen Grenzen  $n$ -ter Ordnung, wenn  $k_i$  für  $i \leq n$  gegeben ist. Bei vollständiger Information,  $n \rightarrow \infty$ , gibt es nach KRÖNER [51] einen exakten Ausdruck für  $\mathcal{C}^*$ .

Die Korrelationsfunktionen höherer Ordnung sind für ein bestimmtes Material experimentell meist nicht bestimmbar. In einem Fall, dem sog. perfekt ungeordneten Zustand, sind jedoch alle  $k_n$  bekannt und bereits aus der 1-Punkt Dichte ableitbar. Perfekte Unordnung bedeutet, dass die Materialverteilung an allen Punkten unabhängig voneinander

ist, d.h. die Zufallsvariablen  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in V$ , sind stochastisch unabhängig. Für die Korrelationsfunktionen gilt in diesem Fall  $k_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = 0$  für alle  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  außer für  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 = \dots = \mathbf{x}_n$ . Speziell für einen Polykristall ist diese Unabhängigkeitsforderung für Punkte  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  verletzt, deren Abstand kleiner als eine typische Korngröße ist. Dann befinden sich  $\mathbf{x}_1$  und  $\mathbf{x}_2$  mit einer hohen Wahrscheinlichkeit im selben Korn und  $\mathbf{C}(\mathbf{x}_1)$  und  $\mathbf{C}(\mathbf{x}_2)$  hängen voneinander ab. Die perfekte Unordnung stellt trotzdem eine gute Approximation an den Zustand in realen Materialien dar [50].

In diesem Kontext sind die Voigt-Reuss-Grenzen optimale Grenzen erster Ordnung. Sie sind unabhängig von den statistischen Eigenschaften allgemeingültig. Die Hashin-Shtrikman-Grenzen sind optimale Grenzen zweiter Ordnung. Für kubische Kristallsymmetrie hat KRÖNER [51] die optimalen Grenzen dritter Ordnung explizit bestimmt.

### 3.9.4 Selbstkonsistente Methode

Die Selbstkonsistente Methode ist der am häufigsten verwendete Ansatz der Mikromechanik zur Berechnung effektiver Materialeigenschaften. Sie wurde von BRUGGEMAN [12] für dielektrisches Materialverhalten entwickelt. KRÖNER [49] berechnete mit dieser Methode effektive Eigenschaften für elastische Polykristalle und STROUD [83] für dielektrische Polykristalle. Der Ansatz von BRUGGEMAN wurde erstmals von MARUTAKE [56] auf Piezoelektrika angewendet.

Bei der Selbstkonsistenten Methode wird ein einzelner Mikrobestandteil, z.B. Korn, Pore oder Riss, in ein unendlich ausgedehntes, effektives Umgebungsmedium eingebettet. Das effektive Medium besitzt gerade die zu bestimmenden unbekannt Materialparameter. Durch 'Verschmieren' der Mikrobestandteile zu einem homogenen Matrixmaterial wird deren Wechselwirkung näherungsweise berücksichtigt. Der Mikrobestandteil wird meist als ein ellipsoidförmiger Einschluss beschrieben. Für diese Geometrie ist nach ESHELBY [21] die Dehnung innerhalb des Einschlusses konstant (siehe Anhang D), was die analytische Behandlung entscheidend vereinfacht. Speziell für einen Polykristall wird also ein Korn als ein Ellipsoid approximiert.

Bei Vorgabe von Verschiebungsrandbedingungen kann der effektive Elastizitätstensor  $\mathbf{C}^{*u}$  nach Anhang C in der Form

$$\mathbf{C}^{*u} = \langle \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle : \langle \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle^{-1} \quad (3.105)$$

geschrieben werden. Zur Ermittlung einer Näherungslösung wird in der Mikromechanik versucht, eine Approximation für den Einflusstensor  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  zu bestimmen. Bei der Selbstkonsistenten Methode wird  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  durch den Einflusstensor  $\mathbf{A}^\infty$  eines ellipsoidförmigen

Einschlusses  $\mathbf{C}^I$  in einer unendlichen homogenen Matrix mit dem (unbekannten) Matrixmaterial  $\mathbf{C}^*$  approximiert. Die Dehnung innerhalb des Kornes ist für diese Konfiguration nach Gleichung (D.9) konstant und gegeben durch

$$\boldsymbol{\epsilon}^I = \mathbf{A}^\infty : \boldsymbol{\epsilon}^0 = (\mathbf{I} + \mathcal{P}^* : (\mathbf{C}^{*-1} : \mathbf{C}^I - \mathbf{I}))^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad . \quad (3.106)$$

Hierbei ist  $\mathcal{P}^*$  der Eshelby-Tensor, der von dem Umgebungsmedium  $\mathbf{C}^*$  und der Lage und Form des Ellipsoids abhängig ist. Durch Einsetzen von  $\mathbf{A}^\infty$  in (3.105) erhält man ein implizites Gleichungssystem für  $\mathbf{C}^*$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^* &= \langle \mathbf{C}^I : \mathbf{A}^\infty \rangle : \langle \mathbf{A}^\infty \rangle^{-1} \\ &= \langle \mathbf{C}^I : (\mathbf{I} + \mathcal{P}^* : (\mathbf{C}^{*-1} : \mathbf{C}^I - \mathbf{I}))^{-1} \rangle : \langle \mathbf{I} + \mathcal{P}^* : (\mathbf{C}^{*-1} : \mathbf{C}^I - \mathbf{I})^{-1} \rangle^{-1} \quad . \end{aligned} \quad (3.107)$$

Die Mittelung in Gleichung (3.107) erfolgt über die Kristallorientierungen des Einschlusses. Bei einem makroskopisch isotropen Polykristall wird über alle möglichen Orientierungen integriert. Zusätzlich kann über verschiedene Formen des Ellipsoids gemittelt werden.<sup>10</sup> Die Vorgabe von Spannungsrandbedingungen liefert die gleiche Lösung für  $\mathbf{C}^*$  wie für Verschiebungsrandbedingungen.

Die Selbstkonsistente Methode kann auf piezoelektrisches Materialverhalten übertragen werden. Die Erweiterung basiert wesentlich auf der Lösung des elektromechanisch gekoppelten Einschlussproblems eines Ellipsoids in einer unendlichen piezoelektrischen Matrix [4], [18] (siehe Anhang D). Für einen makroskopisch isotropen Zustand können die effektiven elastischen und dielektrischen Parameter  $\mathbf{C}^*$  und  $\boldsymbol{\kappa}^*$  nach DUNN [19] mit dem Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^* &= \langle \mathbf{C}^I : \mathbf{A}^{1,\infty} - \mathbf{e}^{I,T} \cdot \mathbf{A}^{2,\infty} \rangle : \langle \mathbf{A}^{1,\infty} \rangle^{-1} \\ \boldsymbol{\kappa}^* &= \langle \mathbf{e}^I : \mathbf{A}^{3,\infty} + \boldsymbol{\kappa}^I \cdot \mathbf{A}^{4,\infty} \rangle : \langle \mathbf{A}^{4,\infty} \rangle^{-1} \end{aligned} \quad (3.108)$$

bestimmt werden. Hierbei sind  $\boldsymbol{\kappa}^I$  und  $\mathbf{e}^I$  die dielektrischen bzw. piezoelektrischen Parameter des Einschlusses und  $\mathbf{A}^{i,\infty}$ ,  $i = 1, \dots, 4$ , die elektromechanischen Einflussensoren eines ellipsoidförmigen Einschlusses (siehe Anhang C). Diese hängen ab von den piezoelektrischen Analoga zu dem Eshelby-Tensor  $\mathcal{P}^*$  und berücksichtigen die piezoelektrische Kopplung. Für  $\mathbf{e}^I \neq \mathbf{0}$  ist etwa  $\mathbf{A}^{1,\infty} \neq \mathbf{A}^\infty$ .

OLSON & AVELLANEDA [69] und DUNN [19] berechneten die elastischen und dielektrischen Eigenschaften für ungepoltes Bariumtitanat mit kugelförmigen Körnern (siehe

<sup>10</sup>Wird eine derartige Mittelung nicht durchgeführt, etwa bei kugelförmigen Einschlüssen, dann gilt  $\langle \mathbf{A}^\infty \rangle = \mathbf{I}$  und Gleichung (3.107) vereinfacht sich zu  $\mathbf{C}^* = \langle \mathbf{C}^I : \mathbf{A}^\infty \rangle$ .

Tabelle 3.3). Der Unterschied des Gleitmoduls zwischen der rein elastischen Rechnung mit  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  und  $\mathbf{D} = \mathbf{0}$  ist mit etwa 25 % sehr groß. Daran erkennt man, dass die piezoelektrischen Wechselwirkungen innerhalb der Mikrostruktur nicht vernachlässigbar sind [69]. Diese werden nur für die elektromechanisch gekoppelte Selbstkonsistente Methode näherungsweise berücksichtigt, die Ergebnisse innerhalb der ungekoppelten Werte liefert. Noch größere Unterschiede sind im dielektrischen Verhalten zu beobachten.

Modell	$E^*$ [GPa]	$\nu^*$ [-]	$K^*$ [GPa]	$G^*$ [GPa]	$\kappa^*/\epsilon_0$ [-]
$\mathbf{E} = \mathbf{0}$ bzw. $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$	146.5	0.364	179.0	53.7	1610
gekoppelt	157.8	0.353	179.4	58.3	1320
$\mathbf{D} = \mathbf{0}$ bzw. $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{0}$	180.9	0.332	180.0	67.9	1090

Tabelle 3.3: Näherungslösungen der gekoppelten und ungekoppelten Selbstkonsistenten Methode mit kugelförmigen Körnern [69], [19].

DUNN [19] untersuchte den Einfluss der Geometrie der Körner auf die effektiven Eigenschaften. Dazu wendete er die gekoppelte Selbstkonsistente Methode für verschiedene rotationssymmetrische Ellipsoide an. Es wurde eine geringe Schwankung des Kompressionsmoduls um 2 %, des Gleitmoduls um 5 % und eine große Schwankung der Dielektrizitätskonstanten um 75 % festgestellt. Längliche Körner zeigen demnach ein höheres  $K^*$ ,  $G^*$  und  $\kappa^*$  im Vergleich zu kugelförmigen Körnern. Ein deutlich kleineres  $\kappa^*$  ergibt sich bei flachen Ellipsoiden.

### 3.9.5 Methoden für gepolte Polykristalle

Prinzipiell können die bisher beschriebenen Methoden auf gepolte Piezokeramiken übertragen werden. Der Unterschied zum isotropen Fall liegt darin, dass keine isotrope Verteilung der kristallographischen Orientierungen vorliegt, sondern eine Vorzugsrichtung der spontanen Polarisation aufgrund von ferroelektrischen Umklappprozessen existiert. Die in der Literatur vorgeschlagenen Modelle der Polarisationsrichtung [61], [76], [53] sowie das in dieser Arbeit verwendete Modell werden in Abschnitt 4.3 besprochen.

Die ersten Versuche, effektive piezoelektrische Eigenschaften zu berechnen, stammen von MARUTAKE [56]. Einfache Voigt- und Reuss-Grenzen können analog zu den Gleichungen (3.92) und (3.93) hergeleitet werden, indem nur über die betrachtete Kristallorientierungsverteilung gemittelt wird [53]. Die Selbstkonsistente Methode wurde erst in den letzten Jahren auf gepolte Piezokeramiken angewendet. Zur Berechnung der piezoelektrischen Konstanten können die Formeln aus RÖDEL & KREHER [76] verwendet werden, die eine

Verallgemeinerung des Gleichungssystems (3.108) darstellen. Hierzu wird die Lösung des elektromechanischen Einschlussproblems in einer transversal isotropen piezoelektrischen Matrix benötigt (siehe Anhang D).

RÖDEL & KREHER [77] sowie PERTSEV ET AL. [73] berechneten mit einer Selbstkonsistenten Methode effektive Materialparameter von Bariumtitanat in Abhängigkeit von der remanenten Polarisierung. Es zeigt sich, dass einige Parameter nichtmonoton vom Polungsgrad abhängen. Für eine große remanente Polarisierung wird ein stark anisotropes Verhalten vorhergesagt. LI [53] verwendete einen ähnlichen Ansatz, jedoch mit einer anderen Annahme über die Verteilung der Kristallorientierungen. TURIK ET AL. [85] widerlegten die beobachtete nichtmonotone Abhängigkeit, indem sie anstelle der Einkristallparameter berechnete Parameter des Vielkristalls verwendeten. LI ET AL. [54] untersuchten eine gepolte Piezokeramik mit einer fest vorgegebenen Richtung der spontanen Polarisierung. Die beiden anderen kristallographischen Achsen sind dabei frei. Für diese Mikrostruktur stimmen die Voigt-Reuss-Grenzen für alle transversal isotrope Moduln außer  $C_{11}$  und  $C_{66}$  überein.

Aufbauend auf der Selbstkonsistenten Methode wurde in letzter Zeit ein Verfahren entwickelt, das den Einfluss der Domänenstruktur der Körner und reversibler Domänenwandbewegung auf die effektiven Eigenschaften berücksichtigt [78]. Dies wird mit Hilfe einer zweistufigen Homogenisierung realisiert. Es ergibt sich dadurch ein nichtlineares effektives Verhalten mit Hystereseeigenschaften.

Auf die Ergebnisse wird im Einzelnen beim Vergleich mit den Ergebnissen des in dieser Arbeit verwendeten Finite-Elemente-Modells eingegangen. Der Vergleich ist schwierig u.a. wegen der Unterschiede in den verwendeten Einkristallparametern. Für andere anisotrope Zustände einer Piezokeramik, etwa nach rein mechanischer Zug- oder Druckbelastung, gibt es bisher nach Kenntnis des Autors keine analytischen Ergebnisse.



# Kapitel 4

## Modellierung des piezoelektrischen Polykristalls

In dieser Arbeit soll ein piezoelektrischer Polykristall mit einem repräsentativen Volumelement möglichst realitätsnah modelliert werden. Wie in Abschnitt 2.1.4 dargestellt besitzt eine Bariumtitanat-Keramik eine unregelmäßige, zufällige Mikrostruktur.

Zur Modellierung des Polykristalls werden einige grundlegende Annahmen getroffen. Die Körner sind groß genug, um sie im Rahmen der Kontinuumsmechanik beschreiben zu können. Das Materialverhalten der Körner ist linear piezoelektrisch. Weiterhin werden die Körner als defektfrei angenommen, weshalb die idealen Einkristallparameter verwendet werden können. Die Korngrenzen könnten prinzipiell als eigene Phase mit einem von den Kristalliten abweichenden Materialverhalten betrachtet werden. Bei einem mittleren Korndurchmesser von  $1\mu\text{m}$  nimmt nach KRÖNER [51] die Korngrenzenphase jedoch lediglich ca.  $10^{-7}\%$  des Volumens ein (bei einer Korngrenzendicke von einigen Atomabständen). Aus diesem Grund wird die Korngrenzenphase in dieser Arbeit vernachlässigt. Eine bedeutendere Vereinfachung stellt die Annahme von einkörnigen Körnern dar.

Im ersten Abschnitt wird die geometrische Modellierung eines Polykristalls vorgestellt. Die Modellierung der Kristallorientierungen gliedert sich in zwei Teile. Zunächst widmen wir uns der Erzeugung einer isotropen Orientierungsverteilung der kristallographischen Achsen der einzelnen Körner. Dies beschreibt eine Piezokeramik im isotropen Zustand. Hierauf aufbauend wird anschließend die Modellierung der Polarisationsrichtung für anisotrope Piezokeramiken nach elektrischer Polung oder mechanischer Belastung dargestellt.

## 4.1 Modellierung der Korngeometrie

Für viele Anwendungen genügt es, die Kornstruktur mit einfachen regelmäßigen Geometrien zu modellieren, z.B. Quadrate [59] oder Sechsecke [70]. Zur Modellierung unregelmäßiger Polykristalle sind sie jedoch aufgrund ihres hohen Grades an Symmetrie nur bedingt geeignet. Hierfür können Methoden der stochastischen Geometrie verwendet werden [81].

Ein in der Literatur häufig verwendetes Verfahren ist die Voronoi-Zerlegung. Ganz allgemein wird in der Materialforschung die Voronoi-Zerlegung zur Generierung zufälliger Mikrostrukturen wie z.B. Rissmuster und Einschlüsse in einer Matrix herangezogen. Einige Anwendungsbeispiele sind die Charakterisierung von Faserverbundwerkstoffen [43], die Modellierung von thermischer Ermüdung [52], interkristalliner Spannungsrisskorrosion [15] und Schädigung spröder Werkstoffe [84] sowie die Beschreibung von porösen Mikrostrukturen [62] und Partikelbruch in Verbundwerkstoffen [63]. Auch in anderen Bereichen der Wissenschaft, etwa in der Geophysik, der Astrophysik und der Zellbiologie, werden Voronoi-Mosaik verwendet. Einen Überblick über mögliche Anwendungen geben AURENHAMMER [1] und STOYAN ET AL. [81].

In dieser Arbeit wird das Randwertproblem im Volumenelement numerisch mit der Methode der Finiten-Elemente gelöst. Die hohe Komplexität der Voronoi-Zerlegung erlaubt deshalb nur eine zweidimensionale Betrachtungsweise. Um die Güte des zweidimensionalen Modells abschätzen zu können, wird zusätzlich ein einfaches dreidimensionales Modell verwendet, das aus einer Vielzahl von regelmäßigen Quadern besteht. Aufgrund der einfachen Handhabbarkeit dieses Modells wird auf eine genauere Beschreibung verzichtet.

### 4.1.1 Voronoi-Zerlegung

Allgemein ist bei einer Zerlegung eines Gebietes  $\mathcal{G}$  in Zellen zu fordern, dass sich die Zellen nicht überlappen und das gesamte Gebiet ausfüllen. Eine Möglichkeit zur Gebietszerlegung stellt die Voronoi-Zerlegung dar. Ausgangspunkt ist hierbei eine Menge von Punkten

$$\mathcal{M} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots\} \subseteq \mathcal{G} \quad . \quad (4.1)$$

Jedem Punkt  $\mathbf{x}_i \in \mathcal{M}$  kann eine Menge  $\mathcal{Z}(\mathbf{x}_i)$  zugeordnet werden, die aus denjenigen Punkten besteht, deren Abstand zu  $\mathbf{x}_i$  kleiner oder gleich ist als der Abstand zu allen anderen Punkten aus  $\mathcal{M}$ :

$$\mathcal{Z}(\mathbf{x}_i) = \bigcap_{\mathbf{x}_j \in \mathcal{M} \setminus \{\mathbf{x}_i\}} \{\mathbf{y} \in \mathcal{G} \mid \|\mathbf{y} - \mathbf{x}_i\| \leq \|\mathbf{y} - \mathbf{x}_j\|\} \quad . \quad (4.2)$$

Die Mengen  $\mathcal{Z}(\mathbf{x}_i)$  nennt man die Zellen der Zerlegung, sie sind abgeschlossen und konvex. Die Punkte  $\mathbf{x}_i$  heißen erzeugende Punkte. Für zwei benachbarte Zellen  $\mathcal{Z}(\mathbf{x}_i)$  und  $\mathcal{Z}(\mathbf{x}_j)$  ist die gemeinsame Kante die Mittelsenkrechte der Verbindungslinie zwischen  $\mathbf{x}_i$  und  $\mathbf{x}_j$ . In Abbildung 4.1 ist eine Voronoi-Zerlegung eines quadratischen Gebietes für 100 erzeugende Punkte dargestellt. Zur Erzeugung von Voronoi-Mosaiken wird in dieser Arbeit das Programm VORTESS [75] verwendet. Jeder Voronoi-Zerlegung kann eine sogenannte Delaunay-Triangulation zugeordnet werden. Sie besteht aus den Dreiecken, deren Eckpunkte in  $\mathcal{M}$  liegen und deren Seiten die erzeugenden Punkte benachbarter Zellen verbinden.

Eine zufällige Zerlegung eines Gebietes ergibt sich, wenn die erzeugenden Punkte Realisierungen eines stochastischen Punktprozesses sind [82]. Dabei ist ein Punktprozess derart zu wählen, dass die damit erzeugten Mosaiken die Mikrostruktur des Polykristalls möglichst realitätsnah beschreiben und gleichzeitig möglichst 'gute' statistische Eigenschaften besitzen. Es ist sinnvoll, nur homogene und isotrope Punktprozesse zu betrachten, d.h. Punktprozesse mit einer translations- und rotationsinvarianten Verteilung. Ein derartiger Punktprozess ist der *Poisson-Prozess* mit Parameter  $\lambda$ , der die mittlere Punktdichte bezeichnet. Die Anzahl der Punkte  $n$  pro Flächeneinheit ist poissonverteilt,

$$P(n = k) = e^{-\lambda} \lambda^k / k! \quad . \quad (4.3)$$

Der Poisson-Prozess besitzt starke Unabhängigkeitseigenschaften, so ist die Anzahl der Punkte in disjunkten Mengen voneinander unabhängig. Liegen  $n$  Punkte in einer beschränkten Menge  $\mathcal{B} \subset \mathcal{G}$ , dann bilden diese Punkte ein Binomial-Feld, d.h. diese Punkte sind unabhängig voneinander gleichmäßig in  $\mathcal{B}$  verteilt. Ein Beispiel für eine Realisierung eines Poisson-Feldes sind die erzeugenden Punkte in Abbildung 4.1a.

Zur Beschreibung eines Polykristalls mit globularer Kornstruktur sind Voronoi-Zerlegungen, die von einem Poisson-Feld erzeugt werden, gut geeignet. Diese Zerlegung nennen wir im Weiteren Poisson-Voronoi-Mosaik. In der Literatur sind eine Vielzahl von statistischen Eigenschaften für Poisson-Voronoi-Mosaiken des  $\mathbb{R}^2$  bekannt [81], [68]. Geometrische Größen, wie z.B. die Fläche einer Zelle, bilden Zufallsvariable, deren Verteilung zum Teil analytisch, zum Teil nur durch numerische Simulation bestimmt werden kann (siehe Tabelle 4.1). Unter der Voraussetzung statistisch unabhängiger Orientierungen der Körner besitzt das Poisson-Voronoi-Mosaik nach KRÖNER [51] weitere für die Modellierung eines Polykristalls wichtige Eigenschaften. So können die Korrelationsfunktionen in sehr einfacher Weise geschrieben werden [51]. Außerdem ist die 2-Punkt Dichte isotrop, etwa im Gegensatz zu Quader- oder Rechteck-Mosaiken.

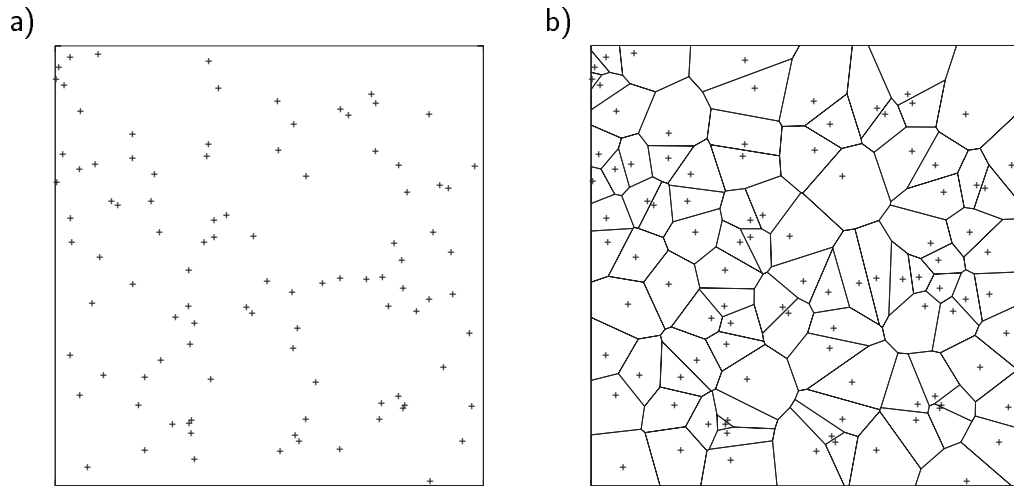


Abbildung 4.1: a) Poisson-Punktfeld. b) Voronoi-Zerlegung für ein Poisson-Punktfeld.

Geom. Größe	E	Geom. Größe	E
Zellen/Flächeneinheit	$\lambda$	innerer Winkel in Ecke	$2\pi/3$
Fläche einer Zelle	$1/\lambda$	Kantenlänge	$2/(3\lambda^{1/2})$
Umfang einer Zelle	$4/\lambda^{1/2}$	Sehnenlänge einer Zelle	$\pi/(4\lambda^{1/2})$
Ecken einer Zelle	6	Radius des Inkreises	$1/(2\lambda^{1/2})$

Tabelle 4.1: Erwartungswerte E geometrischer Größen der ebenen Voronoi-Zerlegung, basierend auf einem Poisson-Punktprozess mit Parameter  $\lambda$ .

Für einen Gefügeschliff kann die Anzahl der Schnitte pro Längeneinheit eines Testliniensystems  $P_L$  sowie die mittlere Anzahl der Körner pro Flächeneinheit  $N_A$  experimentell bestimmt werden.  $1/P_L$  entspricht der mittleren Sehnenlänge einer Zelle und beschreibt somit den mittleren Korndurchmesser des Polykristalls. Mit jedem dieser Werte kann die Intensität  $\lambda$  des Poisson-Prozesses mit den Formeln aus Tabelle 4.1 geschätzt werden. Im Allgemeinen führt dies zu unterschiedlichen Schätzwerten. Der Quotient

$$I = \frac{N_A}{P_L^2} \quad (4.4)$$

stellt nach OHSER [66] ein Maß für die Gleichmäßigkeit des Gefüges dar. Je ungleichmäßiger das Gefüge, desto größer ist  $I$ . Für ein ebenes Poisson-Voronoi-Mosaik gilt unabhängig von der Intensität  $\lambda$  mit den Formeln von Tabelle 4.1

$$I_{\text{Poisson}} = \frac{E(N_A)}{E(P_L)^2} = \frac{\pi^2}{16} \approx 0.617 \quad . \quad (4.5)$$

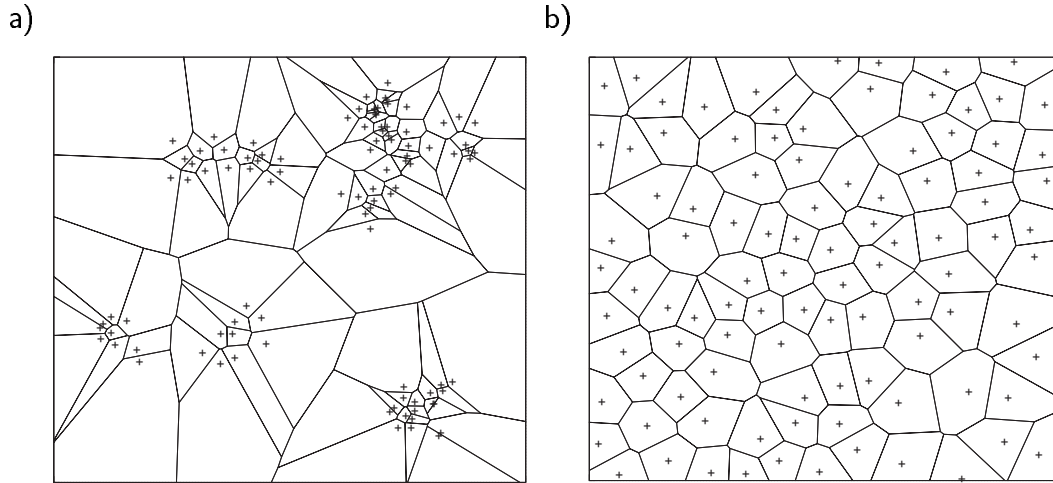


Abbildung 4.2: Voronoi-Zerlegung für a) ein Cluster-Punktfeld und b) ein Hardcore-Punktfeld.

Durch Vergleich von einem experimentell ermittelten Wert  $I_{\text{Exp}}$  eines realen Gefüges mit  $I_{\text{Poisson}}$  kann beurteilt werden, ob der reale Polykristall durch ein Poisson-Voronoi-Mosaik approximiert werden kann. Ist die Abweichung zu groß, kann es vorteilhaft sein, komplexere Punktprozesse zu verwenden.

Für  $I_{\text{Exp}} > I_{\text{Poisson}}$  ist das Gefüge des realen Werkstoffs ungleichmäßiger als das Gefüge des Poisson-Voronoi-Mosaiks. In diesem Fall können zur Gebietszerlegung Cluster-Punktfelder verwendet werden [67]. Hierbei werden zunächst sogenannte Elternpunkte verteilt, um die eine feste Anzahl von Tochterpunkten in einem Kreis mit Radius  $r$  verstreut werden. Dadurch wird das Voronoi-Mosaik ungleichmäßiger. Abbildung 4.2a zeigt das Voronoi-Mosaik eines Cluster-Punktfeldes mit 11 Elternpunkten und je 9 Tochterpunkten und einem Radius  $r/B = 0.05$ , wobei  $B$  die Seitenlänge des Mosaiks ist.

Für  $I_{\text{Exp}} < I_{\text{Poisson}}$  ist das Gefüge des realen Werkstoffs regelmäßiger als das Gefüge des Poisson-Voronoi-Mosaiks. In diesem Fall können Hardcore-Punktfelder verwendet werden [81]. Dabei wird ein Hardcore-Abstand  $r$ , ein minimaler Abstand zwischen den erzeugenden Punkten, eingeführt. Das bedeutet, dass der erzeugende Punkt  $\mathbf{x}_i$  nicht in den Kreisen mit Radius  $r$  um die erzeugenden Punkte  $\mathbf{x}_j$ ,  $j \neq i$ , liegen darf. Dies führt zu einer globulareren Kornstruktur mit dem Nachteil, dass mehr sehr kurze Kanten entstehen. Abbildung 4.2b zeigt ein Voronoi-Mosaik mit 99 Zellen eines Hardcore-Punktfeldes mit  $r/B = 0.06$ .

In Tabelle 4.2 sind die Varianz der Zellenflächen  $s^2[|\mathcal{Z}|]$  für die Mosaik in Abbildung 4.2 und das analytische Ergebnis für Poisson-Voronoi-Mosaik mit 99 Zellen ( $s^2[|\mathcal{Z}|] = 0.280\lambda^{-2}$ , siehe [81]) angegeben. Die großen Unterschiede verdeutlichen nochmals den Ein-

fluss des zugrunde liegenden Punktprozesses auf die Eigenschaften des Voronoi-Mosaiks. Außer der Wahl des Punktprozesses kann auch der Mosaiktyp variiert werden. Eine Ver-

	Hardcore	Poisson	Cluster
$s^2[ \mathcal{Z} ]$	0.089	0.286	2.09

Tabelle 4.2: Varianz der Kornflächen für ein Hardcore-, ein Poisson- und ein Cluster-Voronoi-Mosaik mit 99 Zellen in einem  $10 \times 10$  Flächeneinheiten großen Quadrat (Varianz in (Flächeneinheiten)<sup>2</sup>).

allgemeinerung des Voronoi-Mosaiks stellt das JOHNSON-MEHL-Mosaik [67] dar. Hierbei wird in Gleichung (4.2) die euklidische Norm durch eine andere Norm ersetzt. Dies führt zu krummlinig begrenzten Zellen, die nicht notwendig konvex sind. Eine andere Beschreibungsweise eines ebenen Gefügeanschliffs stellen ebene Schnitte durch ein räumliches Voronoi-Mosaik dar [67]. Auf diese Weise entsteht in der Schnittebene ein zufälliges ebenes Mosaik. Das Schnittmosaik ist jedoch kein zweidimensionales Voronoi-Mosaik, d.h. es existiert keine Punktconfiguration, für die das zugeordnete Voronoi-Mosaik mit dem Schnittmosaik übereinstimmt. Die statistischen Eigenschaften von Schnittmosaik unterscheiden sich deutlich von denen ebener Voronoi-Mosaik.

### 4.1.2 Randeffekte

In diesem Abschnitt werden die Unterschiede zwischen einem Poisson-Voronoi-Mosaik auf  $\mathbb{R}^2$  und auf einem beschränkten quadratischen Gebiet  $\mathcal{G}$  untersucht. Nur die Zellen aus dem Inneren  $\mathcal{G}_I$  des Mosaiks (siehe Abbildung 4.3a) besitzen die in Tabelle 4.1 angegebenen statistischen Eigenschaften, während die Zellen am Rand  $\mathcal{G}_A$  des Gebietes andere Eigenschaften aufweisen. So wurde durch eine numerische Simulation gezeigt, dass für große Mosaik ( $n \gtrsim 100$ ) die durchschnittliche Zellenfläche am Rand um etwa 10 – 15 % größer als im Inneren des Mosaiks ist. Für kleinere Mosaik beträgt der Unterschied etwa 20 %. Weil die Randzellen bei einem Gefügausschnitt nur Teile von Körnern darstellen, sollten deren Flächen im Modell jedoch kleiner sein als im Inneren.

Diese Diskrepanz kann vermieden werden, indem die Voronoi-Zerlegung eines geeigneten Gebietes  $\mathcal{G}' \supset \mathcal{G}$  betrachtet wird. Das Mosaik  $\mathcal{G}$  entsteht aus  $\mathcal{G}'$  durch Herausschneiden (siehe Abbildung 4.3b). Ein großer Nachteil bei dieser Vorgehensweise besteht jedoch darin, dass die Randkörner sehr klein sein können und deshalb bei der Diskretisierung eventuell Probleme bereiten. Aus diesem Grund wird diese Variante nicht weiter betrachtet.

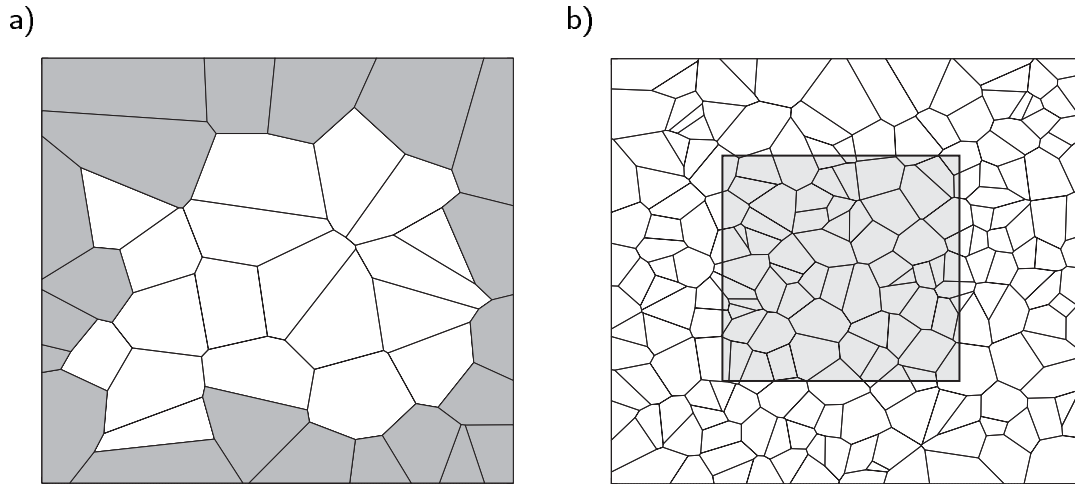


Abbildung 4.3: a) Äußere und innere Zellen eines Voronoi-Mosaiks. b) Generierung eines Voronoi-Mosaiks als Teilmenge eines größeren Gebietes.

Um den Einfluss des Randeffektes abschätzen zu können, betrachten wir eine Zerlegung von  $\mathcal{G}$  in  $n$  quadratische Zellen. Die Fläche aller Randkörner ist gegeben durch

$$|\mathcal{G}_A| = \frac{4(\sqrt{n} - 1)}{n} |\mathcal{G}| \quad . \quad (4.6)$$

Numerische Simulationen haben gezeigt, dass diese Beziehung näherungsweise auch für die Randfläche eines Poisson-Voronoi-Mosaiks mit  $n$  Zellen erfüllt ist. Demnach entfallen bei 100 Zellen 36 % der Fläche auf Randzellen, bei 1000 Zellen sind dies immer noch 12 %. Weiterhin ist die Streuung der Fläche in  $\mathcal{G}_A$  größer als in  $\mathcal{G}_I$ . Für große Gebiete sind diese Effekte zunehmend vernachlässigbar. Können jedoch aus numerischen Gründen nur Mosaik mit relativ wenig Zellen ( $n < 100$ ) betrachtet werden, so müssen die Randeffekte berücksichtigt werden.

An dieser Stelle soll eine ergänzende Bemerkung gemacht werden: Bei gegebener Intensität  $\lambda$  ist die mittlere Anzahl der Körner  $\bar{n}$  in einem beschränkten Gebiet  $\mathcal{G}$  gegeben durch  $\bar{n} = \lambda |\mathcal{G}|$ . Bei der praktischen Vorgehensweise wird die mittlere Anzahl der modellierten Körner in einem Gebiet vorgegeben. Die Größe des modellierten Gefügeausschnitts ist dann  $|\mathcal{G}| = \bar{n}/\lambda$ . Wird eine feste Anzahl an Körnern für dieses Gebiet vorgegeben, dann handelt es sich nicht um einen Poisson-Prozess, sondern um ein Binomial-Feld. Bei der Betrachtung von mehreren Realisierungen des Binomial-Feldes sind die Ergebnisse dann streng genommen nicht im Sinne eines Poisson-Feldes zu interpretieren.

### 4.1.3 Anforderungen an vernetzbare Voronoi-Mosaik

In dieser Arbeit wird das Randwertproblem im Volumenelement numerisch mit der Methode der Finiten-Elemente gelöst. Zur Diskretisierung eines ebenen Voronoi-Mosaiks können Dreiecke, Vierecke oder allgemein konvexe Polygone verwendet werden. Die Diskretisierung mit Dreiecken durch die Delaunay-Triangulation ist mit wenig Aufwand zu realisieren, jedoch besitzen Dreieckselemente im Allgemeinen eine geringere numerische Genauigkeit als z.B. Viereckselemente. Eine andere Möglichkeit besteht darin, eigene finite Elementansätze zu programmieren, sodass jede Voronoi-Zelle z.B. mit einem Element beschrieben werden kann [29]. Diese Vorgehensweise ermöglicht zwar die Modellierung einer großen Kornstruktur, Netzverfeinerungen am Rand sind jedoch nur schwierig zu realisieren. Zur Bestimmung des Spannungsverlaufs innerhalb einer Zelle (Korn) ist diese Methode bei großen Spannungsgradienten nur bedingt geeignet.

Aufgrund dieser Nachteile werden in dieser Arbeit Viereckselemente verwendet. Die Vernetzung mit Viereckselementen ist jedoch nicht für jede Realisierung einer Voronoi-Zerlegung möglich, sondern nur für die Teilmenge der sogenannten *vernetzbar* Voronoi-Mosaik. Der Grund hierfür liegt in den Anforderungen, die an die Geometrie des finiten Elements gestellt werden müssen [16].

Zur Charakterisierung vernetzbarer Voronoi-Mosaik benötigen wir folgende geometrische Größen. Für eine Zelle  $\mathcal{Z}(\mathbf{x}_i)$  mit den  $k$  Kantenlängen  $l_1, l_2, \dots, l_k$  ist

$$L_{\mathcal{Z}}(\mathbf{x}_i) = \frac{\min\{l_1, \dots, l_k\}}{\max\{l_1, \dots, l_k\}} \quad (4.7)$$

das Verhältnis von kleinster zu größter Kante der Zelle. Für ein Voronoi-Mosaik mit den Zellen  $\mathcal{Z}(\mathbf{x}_i)$ ,  $\mathbf{x}_i \in \mathcal{M}$ , kann damit das minimale (ungünstigste) Kantenverhältnis  $L_{\min}$  definiert werden als

$$L_{\min} = \min_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{M}} \{L_{\mathcal{Z}}(\mathbf{x}_i)\} \quad . \quad (4.8)$$

Aufgrund praktischer Erfahrung hat sich gezeigt, dass ein vernetzbares Mosaik für eine stabile Finite-Elemente-Analyse folgende Eigenschaften besitzen muss:

- Die inneren Winkel der Zellen müssen größer als ca.  $30^\circ$  sein.
- Das Kantenverhältnis  $L_{\min}$  muss größer als ca.  $1/500$  sein.
- Die kürzeste Kante des Mosaiks muss hinreichend groß sein.



Die ersten beiden Grenzen stellen brauchbare Schranken für den elastischen Fall dar, bei einem nichtlinearen Materialverhalten (z.B. Plastizität) müssen diese Schranken gegebenenfalls enger gewählt werden. Für die numerische Analyse darf die Anzahl der finiten Elemente nicht beliebig groß sein. Weil die kürzeste Kante des Mosaiks die Anzahl der benötigten finiten Elemente festlegt, stellt diese Größe eine weitere Anforderung an das Voronoi-Mosaik dar. Eine konkrete Schranke kann für die kürzeste Kante jedoch nicht angegeben werden, da dieser Wert von der vorhandenen Rechnerkapazität abhängt.

Eine vernetzbare Voronoi-Zerlegung erhält man durch eine einfache Trial-and-Error Methode. Dabei werden obige Parameter für jede Realisierung berechnet und alle Mosaikverteilungen verworfen, die den gestellten Anforderungen nicht genügen. Im Folgenden soll untersucht werden, wie viele Realisierungen benötigt werden, um eine vernetzbare Voronoi-Zerlegung zu erzeugen, d.h. wie wahrscheinlich eine Voronoi-Zerlegung vernetzbar ist. Dazu wurde die Verteilung der Zufallsvariablen  $L_{\min}$  für ein Poisson-Voronoi-Mosaik durch numerische Simulation mit jeweils 10000 Realisierungen pro Mosaikgröße berechnet. Abbildung 4.4a zeigt den Erwartungswert sowie die 5% und 95% Quantile<sup>1</sup> von  $L_{\min}$ . In Abbildung 4.4b ist die Wahrscheinlichkeit  $P(L_{\min} \geq c)$  dargestellt, dass das Kantenverhältnis  $L_{\min}$  oberhalb einer bestimmten Schranke  $c$  liegt. Um ein Mosaik mit  $L_{\min} \geq c$  zu erhalten, benötigt man damit durchschnittlich  $1/P(L_{\min} \geq c)$  Realisierungen.

Man erkennt, dass schon für 200 Zellen die Wahrscheinlichkeit für ein Kantenverhältnis von mindestens  $1/100$  kleiner als 0.4% ist, d.h. es werden durchschnittlich 250 Realisierungen benötigt, um ein derartiges Mosaik zu erzeugen. Unter den 10000 Realisierungen des Mosaiks mit 1000 Körnern genügte kein einziges einem Kantenverhältnis von  $1/300$ . Ab einer bestimmten Größe ist es also praktisch nicht mehr möglich, vernetzbare Mosaikverteilungen zu erzeugen. Dies stellt eine erste Schranke für die maximal mögliche Größe eines Volumenelements dar. Aus Abbildung 4.4a ist weiterhin ersichtlich, dass die Beziehung zwischen der Anzahl der Zellen und dem Erwartungswert  $E[L_{\min}]$  offenbar einem Potenzgesetz genügt.

Durch die Beschränkung auf vernetzbare Voronoi-Mosaikverteilungen stellt sich die Frage, ob diese Teilmenge andere geometrische und statistische Eigenschaften besitzt. Die unterschiedliche Verteilung der kürzesten Kante wird bei der Modellierung eines Polykristalls nicht als wesentlich angesehen. Numerische Simulationen haben gezeigt, dass die Varianz der Zellenfläche für beliebige Voronoi-Mosaikverteilungen und für Voronoi-Mosaikverteilungen mit beschränktem Kantenverhältnis annähernd gleich ist,  $s^2[|\mathcal{Z}|] \approx s^2[|\mathcal{Z}| | L_{\min} \geq c]$ . Somit kann davon ausgegangen werden, dass die Teilmenge der vernetzbaren Voronoi-Mosaikverteilungen keine signifi-

---

<sup>1</sup>Das sind die Werte  $x$  und  $y$  mit  $P(L_{\min} \leq x) = P(L_{\min} \geq y) = 0.05$ .

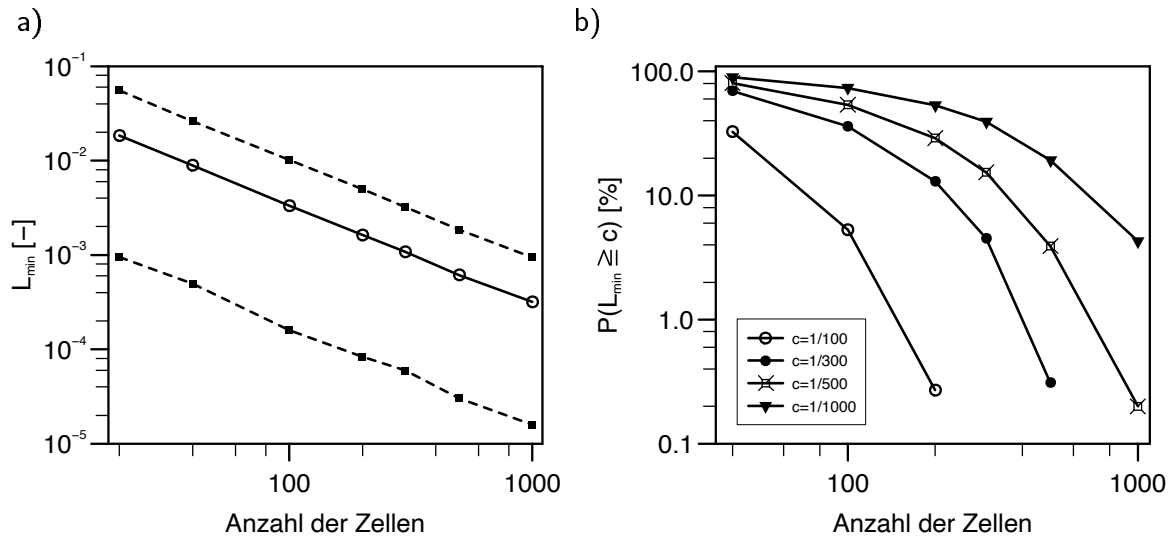


Abbildung 4.4: a) Erwartungswert sowie 5 % und 95 % Quantile des ungünstigsten Kantenverhältnisses  $L_{\min}$  einer Zelle für ein Poisson-Voronoi-Mosaik. b) Wahrscheinlichkeit, dass  $L_{\min}$  oberhalb der Werte  $1/100$ ,  $1/300$ ,  $1/500$  und  $1/1000$  liegt.

kanten Unterschiede zur Menge aller Voronoi-Mosaik aufweist.

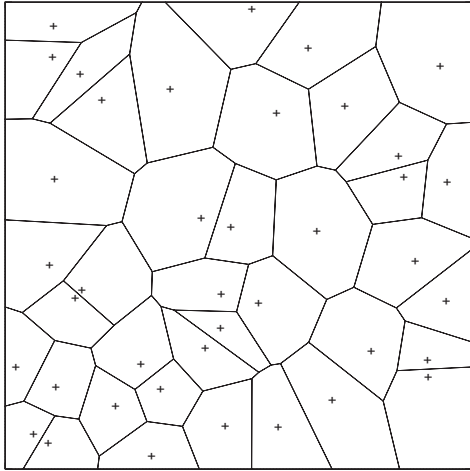
#### 4.1.4 Vernetzungsalgorithmus

Die Diskretisierung der Voronoi-Mosaik zur Finiten-Elemente-Analyse wird mit dem kommerziellen Pre-/Post-Prozessor PATRAN [16] durchgeführt. Dieses Programm wurde gewählt, weil es die leistungsfähige Makrosprache PCL zur Verfügung stellt. Aufbauend auf dieser Sprache wurde ein Algorithmus entwickelt, der ein Voronoi-Mosaik automatisch vernetzt [93]. Eine automatische Vernetzung ist notwendig, da für eine statistische Betrachtung eine Vielzahl verschiedener Geometrien numerisch analysiert werden muss.

##### Einfache Vernetzung

Die Geometrie eines Voronoi-Mosaik wird eindeutig durch die Eckpunkte aller Zellen beschrieben. Mit diesen geometrischen Informationen werden innerhalb von PATRAN Punkte, Linien und Flächen erzeugt. Im nächsten Schritt wird vom Benutzer eine gewünschte minimale Kantenlänge eines finiten Elementes  $\epsilon_{\min}$  gewählt. Die kürzeste Kante im Voronoi-Mosaik stellt eine obere Schranke für  $\epsilon_{\min}$  dar. Für eine Linie der Länge  $l$  (Kante

a)



b)

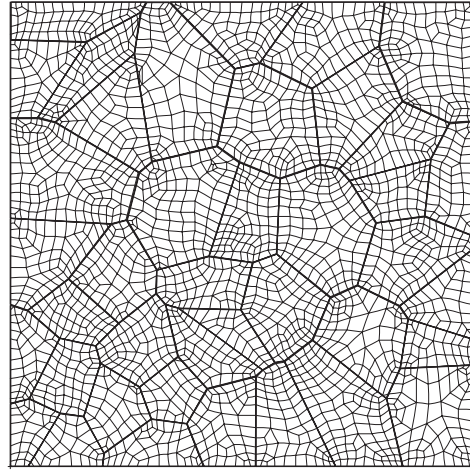


Abbildung 4.5: a) Voronoi-Zerlegung mit 40 Zellen und den erzeugenden Punkten. b) Finite-Elemente Netz für dieses Mosaik.

der Voronoi-Zelle) ist die Anzahl der Elemente gegeben durch

$$a = \min_{n \in \mathbb{N}} \left| \frac{l}{n} - e_{\min} \right| . \quad (4.9)$$

Da  $a$  nur von der Länge der Kante abhängt, ist die Kompatibilität der Netze benachbarter Körner gewährleistet.

Aufgrund möglicher hoher Spannungsgradienten in den Ecken der Zellen müssen diese Bereiche eventuell am feinsten diskretisiert werden. Dies wird durch eine variable mesh seed erreicht, wobei die Elementgröße zu den Kantenmitten hin um einen gegebenen Faktor zunimmt (siehe Abbildung 4.5, Faktor 2,5). Die Vernetzung der Zellen erfolgt mit einem freien Netzgenerator. Sollen den Korngrenzen gesonderte Eigenschaften zugewiesen werden (z.B. Risse mit Reibung), können diese zusätzlich mit Kontaktelementen vernetzt werden.

### Vernetzung mit Netzverfeinerung an den Korngrenzen

Jedes Korn besitzt unterschiedliche Materialorientierungen. Diese Unstetigkeit im Materialverhalten ist Ursache für hohe Spannungsgradienten an den Korngrenzen. Deshalb ist es notwendig, diesen Bereich des Korns feiner zu diskretisieren als das Korninnere. In diesem Abschnitt wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem aufbauend auf dem einfachen Vernetzungsalgorithmus die feinere Vernetzung realisiert wird.

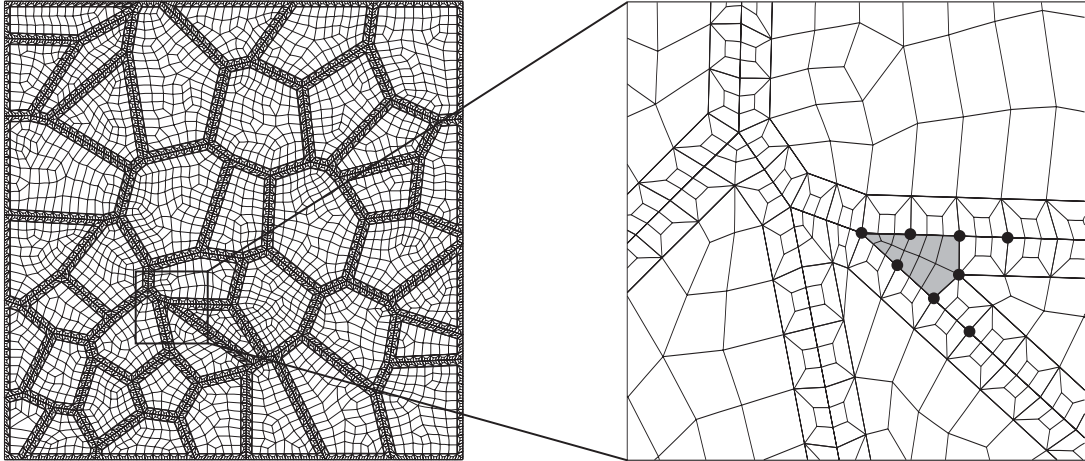


Abbildung 4.6: Finite-Elemente Netz mit Netzverfeinerung am Rand der Körner.

- a) Zur Netzverfeinerung an den Korngrenzen (siehe Abbildung 4.6) muss die Anzahl der Elemente  $a$  durch 3 teilbar sein.  $a$  ist gegeben durch

$$a = 3 \cdot \min_{n \in \mathbb{N}} \left| \frac{l}{3n} - e_{\min} \right| . \quad (4.10)$$

Die Kompatibilität der Netze benachbarter Körner ist damit gewährleistet.

- b) Für jeden Eckpunkt einer Zelle wird ein neuer Punkt entlang der Winkelhalbierenden der beiden benachbarten Kanten mit Abstand  $2e_{\min}$  projiziert. Aus den projizierten Punkten wird ein Polygon im Inneren generiert. Es wird gefordert, dass das innere Polygon die gleiche Anzahl an Kanten wie die Ausgangszelle besitzt. Aus dieser Forderung ergibt sich eine obere Grenze für  $e_{\min}$ . Diese hängt stark von der kürzesten Kante des Mosaiks ab. Ein Netz mit der kleinstmöglichen Anzahl an Elementen erhält man, wenn  $e_{\min}$  ca. 5% unterhalb dieser Schranke liegt.
- c) Alle inneren Polygone werden mit dem einfachen Vernetzungsalgorithmus vernetzt.
- d) Die Fläche zwischen äußerem und innerem Polygon wird in eine Reihe von viereckigen Flächen zerlegt. Diese Flächen werden mit jeweils vier finiten Elementen derart vernetzt, dass ein Kantenlängenverhältnis der Randelemente von 3 : 1 entsteht (siehe Abbildung 4.6). Dies ist möglich, da die Anzahl  $a$  der Randelemente durch drei teilbar ist.
- e) Für Ecken mit besonders spitzen Winkeln wird eine gesonderte Strategie benötigt, da sonst Elemente entstehen, deren Geometrie zu stark verzerrt ist. Dabei werden die Abstände zwischen der projizierten Ecke und jedem dritten Elementknoten

auf der benachbarten Korngrenze berechnet (siehe Vergrößerung in Abbildung 4.6). Liefert der Eckpunkt der Voronoi-Zelle den kleinsten Abstand, dann ist der Winkel groß genug und es wird verfahren wie in d). Andernfalls wird eine Fläche zwischen dem Eckpunkt der Voronoi-Zelle, der projizierten Ecke und den beiden Knoten der benachbarten Kanten mit minimalem Abstand erzeugt. Diese Fläche wird mit dem freien Netzgenerator vernetzt.

## 4.2 Modellierung isotroper Kristallorientierungen

Im Folgenden werden zwei kartesische Koordinatensysteme benötigt: Zum einen ein globales Koordinatensystem  $K$  mit den Achsen  $\mathbf{x}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$  und  $\mathbf{x}_3$ , zum anderen ein lokales Koordinatensystem  $K'$  mit den Achsen  $\mathbf{x}'_1$ ,  $\mathbf{x}'_2$  und  $\mathbf{x}'_3$ , das fest bezüglich der Kristallachsen ist. Die Orientierung eines Kornes des Polykristalls wird beschrieben durch die Rotation, die  $K$  in  $K'$  überführt. Diese Rotation wird in der Kristallographie üblicherweise [13] durch die drei Euler-Winkel  $\psi \in [0, 2\pi[$ ,  $\theta \in [0, \pi[$  und  $\phi \in [0, 2\pi[$  dargestellt (siehe Abbildung 4.7). Dabei wird das Koordinatensystem  $K$  zunächst mit dem Winkel  $\psi$  um die  $\mathbf{x}_3$ -Achse gedreht, dann mit dem Winkel  $\theta$  um die (gedrehte)  $\mathbf{x}_1$ -Achse und schließlich nochmals mit dem Winkel  $\phi$  um die (gedrehte)  $\mathbf{x}_3$ -Achse. Das linear elektromechanische Materialverhalten des Einkristalls ist gegeben durch die Materialtensoren  $\mathbf{C}'$ ,  $\boldsymbol{\kappa}'$  und  $\mathbf{e}'$  bezüglich des lokalen Koordinatensystems  $K'$ . Diese werden für jedes Korn durch

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= Q_{im}Q_{jn}Q_{ko}Q_{lp}C'_{mnop} \\ \kappa_{ij} &= Q_{im}Q_{jn}\kappa'_{mn} \quad , \quad e_{ijk} = Q_{im}Q_{jn}Q_{ko}e'_{mno} \end{aligned} \quad (4.11)$$

in das globale Koordinatensystem  $K$  transformiert. Hierbei ist  $\mathbf{Q}(\psi, \theta, \phi)$  der Transformationstensor für die Euler-Winkel mit den Spalten

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{(1)} &= \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \cos \theta \sin \psi \\ \cos \phi \sin \psi + \sin \phi \cos \theta \cos \psi \\ \sin \phi \sin \theta \end{pmatrix} \quad , \\ \mathbf{Q}^{(2)} &= \begin{pmatrix} -\sin \phi \cos \psi - \cos \phi \cos \theta \sin \psi \\ -\sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \theta \cos \psi \\ \cos \phi \sin \theta \end{pmatrix} \quad , \\ \mathbf{Q}^{(3)} &= \begin{pmatrix} \sin \theta \sin \psi \\ -\sin \theta \cos \psi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad . \end{aligned} \quad (4.12)$$

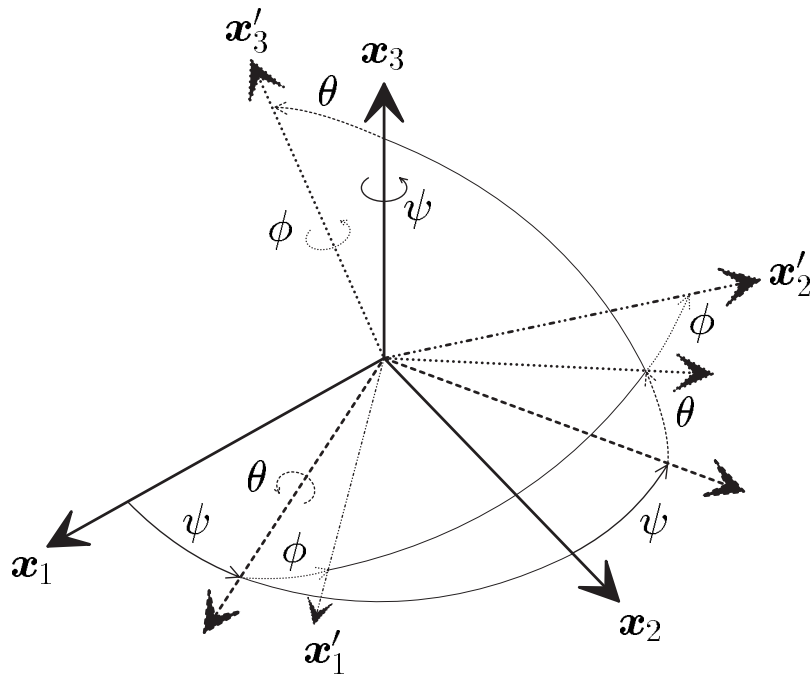


Abbildung 4.7: Definition der Euler-Winkel  $\psi$ ,  $\theta$  und  $\phi$ .

Die Spalten von  $\mathbf{Q}$  sind gerade die Darstellung der lokalen  $\mathbf{x}'_1$ -,  $\mathbf{x}'_2$ - und  $\mathbf{x}'_3$ -Achsen bezüglich des globalen Koordinatensystems  $K$ .

Jedem Korn wird wie in Abbildung 4.8 dargestellt eine zufällige Orientierung zugewiesen. Dazu werden die Euler-Winkel als Zufallsvariable angesehen. Die Orientierung jedes einzelnen Kornes ist dann eine Realisierung dieser Zufallsvariablen. Es wird angenommen, dass die Orientierung unabhängig von der Größe, der Form oder der Lage des Kornes ist und dass sie weiter auch unabhängig von der Orientierung der anderen (benachbarten) Körner ist. Die Euler-Winkel der einzelnen Körner sind dann unabhängige Zufallsvariable. Die Verteilung der Kristallorientierungen kann unabhängig von der Geometrie der Mikrostruktur beschrieben werden. Dies geschieht üblicherweise mit einer Orientierungsverteilungsdichte  $f(\psi, \theta, \phi)$ ,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} f(\psi, \theta, \phi) \, d\phi \, d\theta \, d\psi = 1 \quad . \quad (4.13)$$

Im einfachsten Fall besitzt der Polykristall keine Textur, d.h. es gibt keine Vorzugsrichtung der kristallographischen Achsen, und er verhält sich makroskopisch isotrop. Bei einer Piezokeramik ist dies der Fall für den Zustand direkt nach dem Übergang von der paraelektrischen in die ferroelektrische Phase.

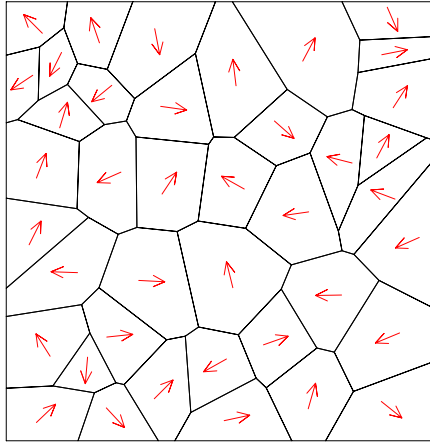


Abbildung 4.8: Ebene Projektion einer lokalen kristallographischen Achse für 40 Körner.

Die isotrope Verteilung der Orientierung des Kristallgitters kann beschrieben werden mit der isotropen Orientierungsverteilungsdichte

$$f_0(\psi, \theta, \phi) = \frac{1}{8\pi^2} \sin \theta \quad . \quad (4.14)$$

Die Zufallsvariablen  $\phi$  und  $\psi$  sind demnach gleichverteilt auf  $[0, 2\pi[$ . Die Nichtlinearität in der Verteilungsdichte des zweiten Euler-Winkels  $\theta$  resultiert aus der Forderung, dass die Durchstoßpunkte der lokalen Koordinatenachsen auf der Einheitskugel mit gleicher Wahrscheinlichkeit in gleich großen Flächenstücken liegen sollen.<sup>2</sup>

#### 4.2.1 Anisotropie des endlichen Volumenelements

Für eine unendliche Anzahl von Körnern erhält man mit der oben beschriebenen Vorgehensweise einen exakt isotropen Polykristall. Wir betrachten jedoch ein endliches Volumenelement mit einer endlichen Anzahl von Körnern (Orientierungen). Je nach Realisierung der Euler-Winkel erhält man somit nur eine annähernd isotrope Verteilung der Orientierungen.

Zur Charakterisierung der Anisotropie ist es sinnvoll, ein Maß für die Abweichung vom isotropen Materialverhalten im Volumenelement einzuführen. In der Literatur, z.B. [91],

---

<sup>2</sup>Eine Realisierung der Zufallsvariablen  $\theta$  erhält man durch Erzeugung einer gleichverteilten Zufallszahl  $y \in [0, 1[$  und die Transformation  $\theta = F_\theta^{-1}(y) = \arccos(1 - 2y)$ . Hierbei ist  $F_\theta = (1 - \cos\theta)/2$  die Verteilungsfunktion von  $\theta$ .

wird dabei häufig der Anisotropiefaktor

$$A_n = \frac{E_{\max}^V - E_{\min}^V}{E_{\max}^{EK} - E_{\min}^{EK}} \quad (4.15)$$

verwendet, wobei  $n$  die Anzahl der Körner ist.  $E_{\max}^{EK}$  und  $E_{\min}^{EK}$  sind der maximale bzw. minimale E-Modul des Einkristalls (siehe (2.14) und Anhang A). Die Größen  $E_{\max}^V$  und  $E_{\min}^V$  sind die entsprechenden Werte der Voigt'schen Näherung  $\langle \mathcal{C} \rangle$  über das Volumenelement. Der Bezug auf die Extremwerte des Einkristalls in (4.15) stellt sicher, dass der Anisotropiefaktor nicht von der Steifigkeit des Einkristalls abhängt. Für den Einkristall ist  $A_1 = 1$ , für den (exakt) isotropen Polykristall gilt  $A_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ . Analog zu (4.15) kann der Anisotropiefaktor auch über die Reuss'sche Näherung  $\langle \mathcal{D} \rangle$  definiert werden.

Da die Euler-Winkel Zufallsgrößen darstellen, ist auch  $A_n$  eine Zufallsvariable. Abbildung 4.9 zeigt den Erwartungswert  $E[A_n]$  und die 5% und 95% Quantile der Verteilung von  $A_n$  in Abhängigkeit von  $n$ . Diese wurden durch numerische Simulation von je 10000 Realisierungen der isotropen Orientierungsverteilung für Werte von  $n$  zwischen 5 und 10000 berechnet. Es wurden die Einkristallparameter von Bariumtitanat aus Tabelle 2.1 verwendet. Beispielsweise gilt  $E[A_{40}] = 0.22$ , d.h. die Differenz zwischen dem größten und kleinsten E-Modul in einem Volumenelement mit 40 Körnern beträgt durchschnittlich 22% der entsprechenden Differenz im Einkristall. Um tatsächlich ein annähernd isotropes Materialverhalten beschreiben zu können, benötigt man demnach eine größere Anzahl von Körnern.

Der lineare Verlauf in der doppeltlogarithmischen Darstellung von Abbildung 4.9 lässt auf ein Potenzgesetz zwischen  $n$  und dem mittleren Anisotropiefaktor  $E[A_n]$  schließen. Für  $n \gtrsim 15$  ergibt sich in sehr guter Näherung

$$E[A_n] = \frac{c}{\sqrt{n}} \quad (4.16)$$

mit  $c \approx 1.4$ . Bei einer Vervierfachung der Anzahl der Körner halbiert sich demnach der zu erwartende Anisotropiefaktor. Dies ist ein wichtiges Ergebnis zur Bestimmung der notwendigen Größe eines Volumenelements. Für andere Einkristalle ist zu erwarten, dass Gleichung (4.16) ebenfalls erfüllt ist,  $c$  jedoch einen anderen Wert annimmt. In diesem Fall kann durch die Bestimmung von  $E[A_n]$  für ein festes  $n \geq 15$  die mittlere Anisotropie für ein beliebiges  $n$  abgeschätzt werden. Aus den Quantilen in Abbildung 4.9 kann etwa abgelesen werden, dass 5% aller Volumenelemente mit 100 Körnern einen Anisotropiefaktor  $A_{100} \geq 0.2$  besitzen. Wird also lediglich eine Realisierung eines Volumenelements betrachtet, kann sich eine weitaus größere Anisotropie als nach Gleichung (4.16) ergeben.



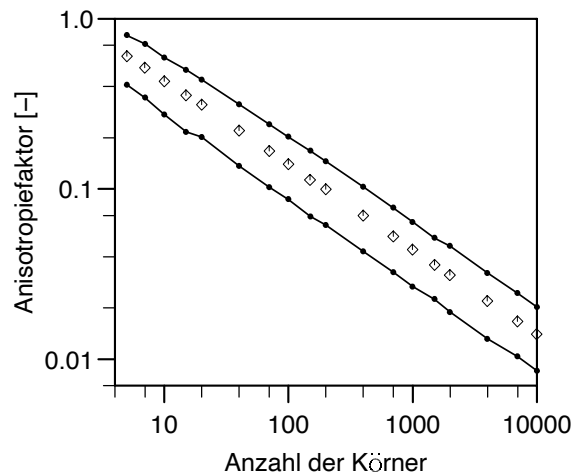


Abbildung 4.9: Erwartungswert sowie 5 % und 95 % Quantile der Verteilung des Anisotropiefaktors  $A_n$  in Abhängigkeit von der Anzahl der Körner  $n$ .

Zur Vermeidung einer zu hohen Anisotropie kann wie gesehen die Anzahl der Körner  $n$  erhöht werden. Dies ist jedoch je nach zur Verfügung stehender Rechnerkapazität nur beschränkt möglich. Eine naheliegende Alternative besteht darin, gezielt unter mehreren Realisierungen diejenige mit minimalem  $A_n$  auszuwählen. In der Literatur wurden in der Vergangenheit Verfahren vorgeschlagen, bei denen die Kristallorientierungen nicht Zufallsvariablen sind, sondern fest vorgegeben werden. Motivation hierfür ist, für ein kleines  $n$  eine möglichst isotrope Orientierungsverteilung zu erzeugen. Bei der in [31] beschriebenen Methode wird der Euler-Raum gleichmäßig diskretisiert. Je nach Kristallsymmetrie genügt die Diskretisierung nur eines Teiles des Euler-Raums. Bei der Kugelteilungsstrategie [64] wird die Einheitskugel in  $n$  gleich große Flächen aufgeteilt, deren Schwerpunkte in etwa gleich große Abstände besitzen. Diese Schwerpunkte sind gerade die Durchstoßpunkte der  $n$  kristallographischen Achsen.  $A_n$  kann auch iterativ minimiert werden [48]. Ausgehend von einer beliebigen Orientierung wird die  $i$ -te Orientierung ( $i = 2, \dots, n$ ) derart gewählt, dass  $A_i$  minimal wird.

Ein Nachteil dieser Verfahren besteht in dem physikalisch unbegründeten Verlust der Unabhängigkeit der Orientierungen. Insbesondere können bei der Diskretisierung des Euler-Raumes und der Kugelteilungsstrategie keine nur sehr wenig voneinander abweichenden Orientierungen auftreten. Aus diesem Grund werden diese Verfahren innerhalb dieser Arbeit nicht verwendet und die Orientierungen als unabhängige Zufallsvariablen beschrieben. Eine hohe Anisotropie wird zum einen durch die Betrachtung von mehreren Realisierungen im Rahmen der Gebietszerlegung und der stochastischen Mikromechanik vermieden. Eine zusätzliche Verringerung der Anisotropie ergibt sich durch die Isotropisierung von

$\mathbf{C}^*$  bei der Berechnung effektiver isotroper Materialparameter (siehe Gleichung (3.76)).

## 4.3 Modellierung der Polarisationsrichtung

Im letzten Abschnitt wurde die Verteilung der Kristallorientierungen für eine makroskopisch isotrope Piezokeramik beschrieben. Wie in Kapitel 2 dargestellt führen Umklappprozesse nach einer hinreichend großen elektrischen oder mechanischen Belastung zu einer anisotropen Verteilung der spontanen Polarisation. Im Folgenden soll die Orientierungsverteilung für derartige Zustände beschrieben werden. Dabei werden als Belastungsfälle eine einachsige, rein elektrische Belastung sowie eine einachsige, rein mechanische Belastung mit Zug und Druck einer zunächst isotropen Piezokeramik betrachtet.

### 4.3.1 Elektrische Belastung

Ausgangspunkt der Modellierung ist das in Gleichung (2.18) beschriebene Umklappkriterium

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) \cdot \Delta \mathbf{P}^R(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^R(\mathbf{x}) \geq U_c \quad . \quad (4.17)$$

Die Belastung ist gegeben durch ein einachsiges äußeres elektrisches Feld  $\mathbf{E}^0$  ohne äußere Spannung, d.h.  $\boldsymbol{\sigma}^0 = \mathbf{0}$ . Unter der Annahme eines homogenen elektrischen Feldes und homogener Spannungen vereinfacht sich Gleichung (4.17) zu

$$\mathbf{E}^0 \cdot \Delta \mathbf{P}^S \geq U_c \quad . \quad (4.18)$$

Die Schwankungen der lokalen Felder  $\mathbf{E}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  innerhalb der Körner werden dabei vernachlässigt. Dies stellt einen Ansatz nach Reuss dar (vgl. Abschnitt 3.6.2), der nur eine sehr grobe Näherung ist [40], die weitere Modellierung jedoch wesentlich vereinfacht. Die Wechselwirkung mit benachbarten Körnern, welche das Umklappen im Allgemeinen erschwert, wird nicht berücksichtigt, sondern lediglich die Wechselwirkungsenergie zwischen den spontanen Feldern und den äußeren Belastungen. Dies führt dazu, dass diejenigen Domänen, die am ungünstigsten zur Belastungsrichtung orientiert sind, unabhängig von ihrer Umgebung zuerst umklappen.

Wir betrachten ein eindomäniges Korn, dessen kristallographische Orientierung durch die Euler-Winkel  $\psi$ ,  $\theta$  und  $\phi$  beschrieben ist. Die Richtung der spontanen Polarisation ist die lokale  $\mathbf{x}'_3$ -Achse. Das Umklappen des Korns hängt nach Gleichung (4.18) lediglich von der

Stärke des elektrischen Feldes und dem Winkel zwischen der spontanen Polarisation und der Feldrichtung ab. Wenn die globale  $\boldsymbol{x}_3$ -Achse als Richtung von  $\boldsymbol{E}^0$  gewählt wird, ist dieser Winkel gerade der Euler-Winkel  $\theta$ . Analog zur Vorgehensweise in MICHELITSCH & KREHER [61] kann ein kritischer Orientierungswinkel  $\theta_E$  eingeführt werden. Damit kann

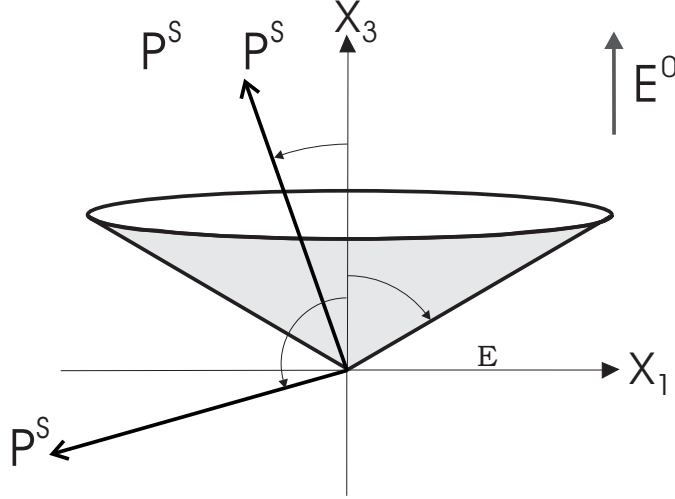


Abbildung 4.10: Kegel der möglichen Richtungen der spontanen Polarisation nach Umklappen unter elektrischer Belastung.

das Umklappkriterium (4.18) in der Form

$$\theta \geq \theta_E(U_c, \boldsymbol{E}^0) \quad (4.19)$$

geschrieben werden. Die spontane Polarisation liegt dann in einem Kegel mit Winkel  $\theta_E$  um die Polarisationsrichtung (siehe Abbildung 4.10). Die Abhängigkeit des Parameters  $\theta_E$  von  $\boldsymbol{E}^0$  und  $U_c$  wird im Weiteren nicht betrachtet [61]. Wir interpretieren  $\theta_E$  vielmehr als einen vorgegebenen Parameter, der ein Maß für die Ausrichtung der Domänen darstellt. Basierend auf Experimenten schätzten JAFFE ET AL. [42], dass in einer Bariumtitanat-Keramik bei einem sehr starken elektrischen Feld zwar alle 180°-Umklappvorgänge, jedoch nur etwa 12% der möglichen 90°-Umklappvorgänge tatsächlich stattfinden.

Ausgehend von diesem Modell machten RÖDEL & KREHER [76] die Annahme einer Gleichverteilung von  $\theta$  im Intervall  $[0, \theta_E]$ . Daraus ergibt sich die Orientierungsverteilungsdichte

$$f_P(\psi, \theta, \phi) = \begin{cases} \frac{\sin \theta}{4\pi^2(1-\cos \theta_E)} & \text{für } 0 \leq \theta \leq \theta_E \\ 0 & \text{für } \theta_E < \theta \leq \pi \end{cases} \quad (4.20)$$

PERTSEV ET AL. [73] nehmen zunächst ein vollständiges  $180^\circ$ -Umklappen und dann erst  $90^\circ$ -Umklappen an. Dies führt für  $\theta_E \geq \pi/2$  zu einer anderen Orientierungsverteilungsdichte. Erst kürzlich wurde von LI [53] für  $\theta$  die Annahme einer Normalverteilung getroffen. Der Erwartungswert ist dabei 0 und die Varianz ein Parameter, der den Grad der Ausrichtung an das elektrische Feld beschreibt.

Diese Ansätze vernachlässigen jedoch die tetragonale Kristallsymmetrie von Bariumtitanat. Die möglichen Richtungen der spontanen Polarisation nach dem Umklappen sind nämlich durch die Lage der anderen Kristallachsen festgelegt. So wird etwa der vollständig gepolte Zustand nicht richtig beschrieben, da der Grenzfall  $\theta_E = 0$  in Gleichung (4.20) einen Einkristall darstellt. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ein anderer Ansatz verfolgt. Ausgangspunkt ist eine isotrope Verteilung der Kristallachsen, die mit der isotropen Orientierungsverteilungsdichte  $f_0$  in (4.14) beschrieben wird. Zusätzlich wird die Polungsrichtungsfunktion

$$p : (\psi, \theta, \phi) \longrightarrow \{\pm 1, \pm 2, \pm 3\} \quad (4.21)$$

verwendet. Sie gibt die Richtung der spontanen Polarisation eines Korns mit den Euler-Winkeln  $\psi$ ,  $\theta$  und  $\phi$  an (siehe Abbildung 4.7). Dies ist entweder die positive oder die negative  $\mathbf{x}'_1$ -,  $\mathbf{x}'_2$ - oder  $\mathbf{x}'_3$ -Achse des Kristalls. Die Bedeutung der Werte von  $p$  im Hinblick auf das Umklappen sind in Tabelle 4.3 angegeben.

Für eine einachsige, rein elektrische Belastung hat  $p_E$  die Form

$$p_E(\psi, \theta, \phi) = \begin{cases} \pm 1 & \text{für } \theta \geq \theta_E \text{ und } \cos \alpha = \pm \sin \psi \sin \theta \\ \pm 2 & \text{für } \theta \geq \theta_E \text{ und } \cos \alpha = \mp \cos \psi \sin \theta \\ 3 & \text{für } \theta < \theta_E \text{ oder } \cos \alpha = \cos \theta \\ -3 & \text{für } \theta \geq \theta_E \text{ und } \cos \alpha = -\cos \theta \end{cases} \quad (4.22)$$

mit  $\pi/4 \leq \theta_E \leq \pi$ . Hierbei ist

$$\alpha(\psi, \theta, \phi) = \arccos(\max(|\cos \theta|, |\sin \psi \sin \theta|, |\cos \psi \sin \theta|)) \quad (4.23)$$

der kleinste Winkel zwischen der globalen  $\mathbf{x}_3$ -Achse und den drei lokalen Achsen des Korns. Die Winkel in Gleichung (4.22) ergeben sich aus der dritten Spalte des Transformationstensors  $\mathbf{Q}(\psi, \theta, \phi)$  in Gleichung (4.12).

Es ist ersichtlich, dass Umklappen ( $p_E \neq 3$ ) nur für  $\theta \geq \theta_E$  erfolgen kann. In diesem Fall klappt die spontane Polarisation in die Richtung um, für welche die linke Seite des Umklappkriteriums (4.18) am größten wird. Das ist die kristallographische Achse mit dem kleinsten Winkel zum elektrischen Feld, beschrieben durch  $\alpha$ . Dies stellt eine größtmögliche Ausrichtung an die Polungsrichtung dar. Tabelle 4.3 zeigt ausgehend vom ungepolten

a)

$p$	Bedeutung
3	kein Umklappen
-3	180°-Umklappen
$\pm 1, \pm 2$	90°-Umklappen

b)

$\theta_E$	Anfang	Ende
180°-Umklappen	$\pi$	$\pi - \arccos(1/\sqrt{3})$
90°-Umklappen	$3\pi/4$	$\pi/4$

Tabelle 4.3: a) Bedeutung der Polungsrichtungsfunktion  $p$ . b) Bereiche von 180°- und 90°-Umklappen bei elektrischer Polung

Zustand  $\theta_E = \pi$  die Bereiche von  $\theta_E$ , in denen 180°- und 90°-Umklappen auftreten kann. Es gibt einen kleinen Überlappungsbereich,  $0.696\pi \leq \theta_E \leq 0.75\pi$ , in dem 180°-Umklappen noch nicht abgeschlossen ist und 90°-Umklappen bereits einsetzt.

Die Transformation der lokalen Materialtensoren  $\mathbf{c}'$ ,  $\boldsymbol{\kappa}'$  und  $\mathbf{d}'$  nach dem Umklappen vom lokalen Koordinatensystem  $K'$  in das globale Koordinatensystem  $K$  erfolgt in zwei Schritten. Zusätzlich zur Rotation um die Euler-Winkel, beschrieben in Gleichung (4.11), wird eine Achsentransformation durchgeführt, die durch die Polungsrichtungsfunktion  $p$  beschrieben wird. Mit den Tensoren

$$\mathbf{Z}(\pm 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ \mp 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z}(\pm 2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \mp 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z}(\pm 3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

können die Transformationstensoren  $\mathbf{T}$  gebildet werden:

$$\mathbf{T}(\psi, \theta, \phi) = \mathbf{Q}(\psi, \theta, \phi) \cdot \mathbf{Z}(p(\psi, \theta, \phi)) \quad . \quad (4.25)$$

Damit kann etwa der lokale Steifigkeitstensor  $\mathbf{c}'$  transformiert werden durch

$$\mathcal{C}_{ijkl} = T_{im} T_{jn} T_{ko} T_{lp} \mathcal{C}'_{mnop} \quad . \quad (4.26)$$

### 4.3.2 Mechanische Belastung

Eine Orientierungsverteilung nach ferroelastischen Umklappprozessen bei einer mechanischen Depolarisierung wurde von MICHELITSCH & KREHER [61] aufgestellt. Wir gehen jedoch vom isotropen Zustand aus und beschreiben einachsige, mechanische Zug- und Druckbelastung. Die Belastung erfolgt in  $x_3$ -Richtung mit  $\boldsymbol{\sigma}^0$  ohne äußeres elektrisches Feld, d.h.  $\mathbf{E}^0 = \mathbf{0}$ . Analog zur Vorgehensweise bei elektrischer Belastung hat das Umklappkriterium (4.17) mit dem Ansatz von Reuss die Form

$$\boldsymbol{\sigma}^0 : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^R \geq U_c \quad . \quad (4.27)$$

**Einachsiger Zug:** Es ist  $\sigma_{33}^0 > 0$ . Je kleiner der Wert  $\epsilon_{33}^R$ , desto eher wird das Kriterium (4.27) erfüllt. Umklappen kann also dann erfolgen, wenn die spontane Polarisation möglichst senkrecht zur Belastungsachse ausgerichtet ist, d.h. wenn der Winkel  $\theta$  möglichst nahe an  $\pi/2$  liegt (siehe Abbildung 4.11a). Mit dem kritischen Orientierungswinkel  $\theta_Z$  kann dies geschrieben werden als

$$\theta_Z \leq \theta \leq \pi - \theta_Z \quad , \quad (4.28)$$

wobei  $\pi/4 \leq \theta_Z \leq \pi/2$  ist. Ist Gleichung (4.28) erfüllt, dann klappt die spontane Polarisation zu der kristallographischen Achse mit minimalem Winkel zur Belastungsachse um. Die Polungsrichtungsfunktion ist hierfür

$$p_Z(\psi, \theta, \phi) = \begin{cases} \pm 1 & \text{für } |\theta - \pi/2| \leq \pi/2 - \theta_Z \quad \text{und} \quad \cos \alpha = |\sin \psi \sin \theta| \\ \pm 2 & \text{für } |\theta - \pi/2| \leq \pi/2 - \theta_Z \quad \text{und} \quad \cos \alpha = |\cos \psi \sin \theta| \\ 3 & \text{für } |\theta - \pi/2| > \pi/2 - \theta_Z \quad \text{oder} \quad \cos \alpha = |\cos \theta| \end{cases} \quad (4.29)$$

mit dem Winkel  $\alpha$  aus Gleichung (4.23). Die zwei entgegengesetzten Richtungen dieser Achse sind energetisch gleichwertig. Das bedeutet, es gibt jeweils zwei Möglichkeiten für die neue Richtung der spontanen Polarisation. Dies veranschaulichen die zwei gegenüberliegenden Kegel um die  $\mathbf{x}_3$ -Achse in Abbildung 4.11a. Aus diesem Grund ist  $p_Z$  in Gleichung (4.29) keine deterministische Funktion. Es ist sinnvoll zu fordern, dass beide Richtungen gleich wahrscheinlich sind:

$$P(p_Z = 1) = P(p_Z = -1) \quad , \quad P(p_Z = 2) = P(p_Z = -2) \quad . \quad (4.30)$$

Aus Gleichung (4.29) ist ersichtlich, dass 180°-Umklappen,  $p = -3$ , bei einer Zugbelastung nicht möglich ist.

Kleine Winkel  $\theta_Z$ , d.h. starke Ausrichtungen, können experimentell nicht beobachtet werden. Die Piezokeramiken versagen aufgrund ihrer im Allgemeinen geringen Zugfestigkeit bereits weit vor dem Erreichen des Sättigungszustandes [25]. In diesem Sinne ist der vollständig ausgerichtete Zustand lediglich eine Modellvorstellung.

**Einachsiger Druck:** Es ist  $\sigma_{33}^0 < 0$ . Je größer der Wert  $\epsilon_{33}^R$ , desto eher wird das Kriterium (4.27) erfüllt. Umklappen kann also dann erfolgen, wenn die spontane Polarisation möglichst nahe zur Belastungsachse ausgerichtet ist, d.h. wenn der Winkel  $\theta$  möglichst nahe an 0 oder an  $\pi$  liegt (siehe Abbildung 4.11b). Mit dem kritischen Orientierungswinkel  $\theta_D$  kann dies geschrieben werden als

$$\theta \leq \theta_D \quad \text{oder} \quad \theta \geq \pi - \theta_D \quad , \quad (4.31)$$



Die Polungsrichtungsfunktion  $p_D$  muss genau wie  $p_Z$  stochastisch sein. Auch in diesem Fall sind die gegenüberliegenden Richtungen energetisch gleichwertig. Deshalb wird eine Bedingung analog zu Gleichung (4.30) gefordert.

### 4.3.3 Remanente Dehnung und remanente Polarisation

In diesem Abschnitt werden die remanente Polarisation  $\mathbf{P}^R$  und die remanente Dehnung  $\epsilon^R$  des Polykristalls nach elektrischer Polung und nach Zug- und Druckbelastung berechnet. Dazu muss der Erwartungswert der spontanen Polarisation über alle Orientierungen der Kristallite im jeweiligen Zustand bestimmt werden. Allgemein ist für eine gegebene Orientierungsverteilungsdichte  $f$  der Mittelwert  $\langle \mathbf{X} \rangle$  einer beliebigen tensorwertigen Größe  $\mathbf{X}(\psi, \theta, \phi)$  gegeben durch

$$\langle \mathbf{X} \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \mathbf{X}(\psi, \theta, \phi) f(\psi, \theta, \phi) d\phi d\theta d\psi \quad . \quad (4.34)$$

Dies stellt die einfachste Möglichkeit dar, effektive remanente Größen zu bestimmen, und entspricht einer Voigt'schen Näherung. Mit komplizierteren Ansätzen können auch Kornwechselwirkungen in einer Selbstkonsistenten Näherung berücksichtigt werden [86], [76].

Für die Orientierungsverteilungsdichte  $f_P$  in Gleichung (4.20) erhält man mit Gleichung (4.34) die remanente Polarisation bzw. Dehnung<sup>3</sup>

$$P_3^R = P^S \frac{1 + \cos \theta_E}{2} \quad , \quad \epsilon_{33}^R = \frac{1}{2} \epsilon^S \cos \theta_E (1 + \cos \theta_E) \quad . \quad (4.35)$$

Für die in den vorangegangenen Abschnitten aufgestellten Polarisationsmodelle ist eine analytische Berechnung in geschlossener Form nicht möglich, da die Darstellung nicht mit einer Orientierungsverteilungsdichte, sondern in Form einer Polungsrichtungsfunktion erfolgte. Deshalb wurde eine numerische Simulation mit 100000 Realisierungen der isotropen Orientierungsverteilung durchgeführt. Für jede Realisierung wurde durch Auswerten der Polungsrichtungsfunktion der Polungszustand mit abnehmendem kritischen Polungswinkel ermittelt und die remanenten Größen bestimmt. Die elektromechanischen Materialparameter und die Geometrie der Körner gehen nicht in die Rechnung ein.

---

<sup>3</sup>Der Mittelwert der spontanen Polarisation  $\langle \mathbf{P}^S \rangle$  bzw. spontanen Dehnung  $\langle \epsilon^S \rangle$  über die Orientierungen der Körner entspricht gerade der remanenten Polarisation  $\mathbf{P}^R$  bzw. remanenten Dehnung  $\epsilon^R$  des Polykristalls.



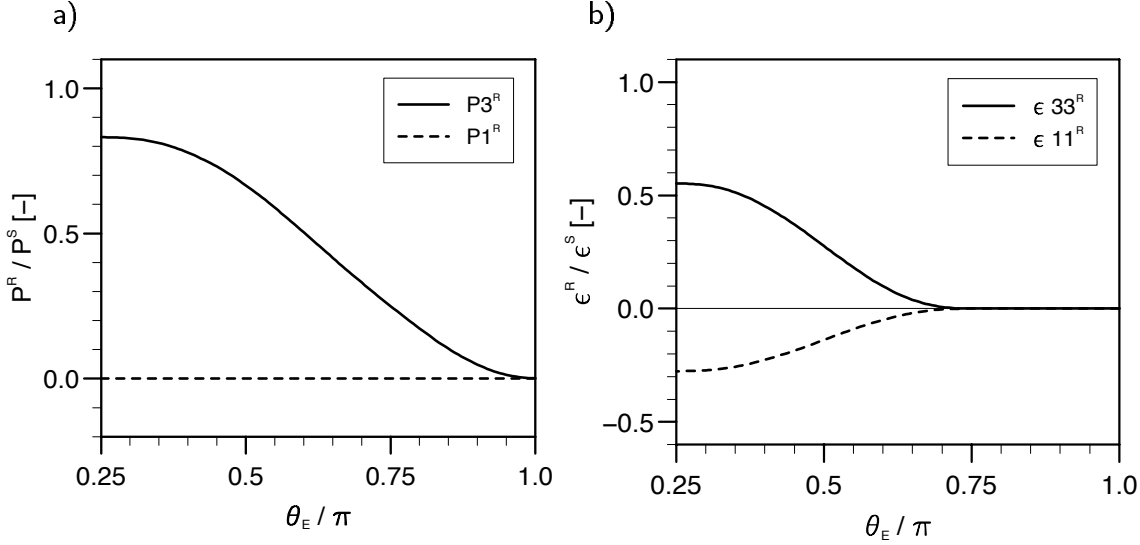


Abbildung 4.12: a) Remanente Polarisation und b) remanente Dehnung bezogen auf die Einkristallwerte bei elektrischer Belastung in Abhängigkeit vom Winkel  $\theta_E$ .

**Elektrische Belastung:** Wir betrachten die Polungsrichtungsfunktion  $p_E$  in (4.22). Abbildung 4.12a zeigt die remanente Polarisation  $P_3^R$  in Richtung des elektrischen Feldes und  $P_1^R$  senkrecht zu dieser Richtung in Abhängigkeit vom kritischen Winkel  $\theta_E$ . In Abbildung 4.12b sind die entsprechenden Komponenten der remanenten Dehnung,  $\epsilon_{33}^R$  und  $\epsilon_{11}^R$ , zu sehen.

$\theta_E = \pi$  beschreibt den isotropen Zustand ohne remanente Polarisation und remanente Dehnung. Für abnehmendes  $\theta_E$  wächst zunächst nur die remanente Polarisation in Polungsrichtung. Da für  $\theta_E \geq 3\pi/4$  nur 180°-Umklappen möglich ist, ändert sich in diesem Bereich die remanente Dehnung nicht. Eine Auswirkung ist erst bemerkbar, wenn 90°-Umklappen auftritt. Die Beziehung  $\epsilon_{33}^R = -2\epsilon_{11}^R$  gilt stets, da der Umklappvorgang unter Volumenkonstanz abläuft [41]. Für den vollständig ausgerichteten Fall ( $\theta_E = \pi/4$ ) stimmt die remanente Polarisation und die remanente Dehnung mit den analytischen Ergebnissen der Sättigungspolarisation (2.2) bzw. Sättigungsdehnung (2.3) für tetragonale Kristallsymmetrie überein.

**Mechanische Belastung:** Für die mechanische Zug- und Druckbelastung, gegeben durch die Polungsrichtungsfunktionen  $p_D$  und  $p_Z$ , entsteht wegen der Bedingung (4.30) keine remanente Polarisation. Die remanenten Dehnungen sind in Abbildung 4.13 angegeben.

Für Zugbelastung stellt sich derselbe Maximalwert  $\epsilon_{33}^R \approx 0.552\epsilon^S$  wie für elektrische Po-

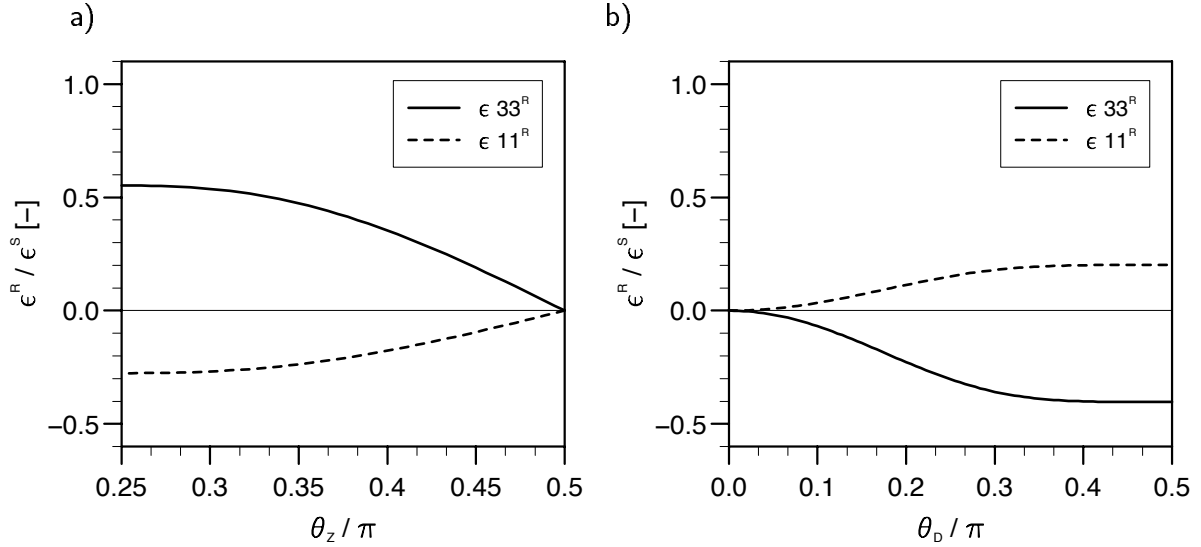


Abbildung 4.13: Remanente Dehnung bezogen auf die Einkristallwerte bei a) Zugbelastung und bei b) Druckbelastung in Abhängigkeit vom Winkel  $\theta_Z$  bzw.  $\theta_D$ .

lung ein. Unter Druckbelastung beobachtet man dagegen eine negative remanente Dehnung in Belastungsrichtung mit dem minimalen Wert  $\epsilon_{33}^R \approx -0.4035\epsilon^S$ . Die remanente Dehnung ist demnach für Druckbelastung kleiner als für Zugbelastung, da weniger Domänen umklappen. Dies ist auch eine Ursache des experimentell gemessenen, unsymmetrischen Deformationsverhaltens von Piezokeramiken [26]. Im Vergleich zu dem theoretischen Verhalten eines Vielodomänenkristalls ( $\epsilon_{33}^R = \epsilon^S$  bzw.  $\epsilon_{33}^R = -0.5\epsilon^S$ ) ist dieser Unterschied jedoch für einen Polykristall mit zufälligen Kristallorientierungen deutlich geringer.

Vergleicht man bei Druckbelastung zwei große kritische Winkel  $\theta_D^2 > \theta_D^1$ , so ist die Änderung der remanenten Dehnung nur sehr gering. Bei einem Umklappvorgang, der erst bei  $\theta_D^2$ , jedoch noch nicht bei  $\theta_D^1$  einsetzt, muss die spontane Polarisation einen Winkel  $\theta$  nahezu senkrecht zur Belastungsrichtung mit  $\pi/2 - \theta_D^2 \leq |\pi/2 - \theta| < \pi/2 - \theta_D^1$  einnehmen. Zusätzlich muss eine weitere kristallographische Achse einen Winkel kleiner  $|\theta - \pi/2|$  zur  $x_1$ - $x_2$ -Ebene besitzen. Es treten demnach nur noch wenige Umklappvorgänge auf, bei denen sich zudem die spontane Dehnung in  $x_3$ -Richtung kaum ändert.

# Kapitel 5

## Ergebnisse der Finite-Elemente-Simulationen

In diesem Kapitel werden Ergebnisse der numerischen Simulation von stochastischen repräsentativen Volumenelementen vorgestellt. Zunächst soll die dabei verwendete Vorgehensweise zusammenfassend dargestellt werden. Es sind folgende Schritte durchzuführen:

- Erzeugung einer Realisierung eines Voronoi-Mosaiks (siehe Abschnitt 4.1.1),
- Erzeugung einer Realisierung einer isotropen Orientierungsverteilung der kristallographischen Achsen für die Kornstruktur (siehe Abschnitt 4.2),
- Bestimmung der Polarisationsrichtung der einzelnen Körner (siehe Abschnitt 4.3),
- Diskretisierung der Korngeometrie mit dem auf der Makrosprache PCL des Pre-Prozessors PATRAN [16] basierenden Vernetzungsalgorithmus (siehe Abschnitt 4.1.4),
- Vorgabe von neun bzw. fünf geeigneten Randbedingungen für ein 3D- bzw. 2D-Volumenelement. Im rein elastischen Fall Vorgabe von sechs bzw. drei Randbedingungen (siehe Abschnitte 3.3 und 3.5.2),
- Lösung des Randwertproblems mit dem kommerziellen Finite-Elemente-Programm ABAQUS [34],
- Berechnung der Volumenmittelwerte der lokalen mechanischen und elektrischen Felder. Dies geschieht durch eine Mittelung der FE-Ergebnisse von den Integrationspunkten auf den Elementschwerpunkt (innerhalb von ABAQUS) und anschließender gewichteter Aufsummierung über alle Elemente,

- Berechnung der effektiven elastischen, dielektrischen und piezoelektrischen Tensoren durch Lösen des Gleichungssystems (3.75) für ein 2D- bzw. (3.3) für ein 3D-Volumenelement,
- Berechnung der effektiven isotropen oder transversal isotropen Materialparameter (siehe Abschnitt 3.8).

Diese Vorgehensweise kann für mehrere Realisierungen des stochastischen repräsentativen Volumenelements mit geeigneter anschließender Mittelung durchgeführt werden. Zwei verschiedene Interpretationen sind dabei möglich: Zum einen kann im Rahmen der stochastischen Mikromechanik der Erwartungswert der mittleren lokalen Felder für mehrere Realisierungen genauer bestimmt werden (siehe Abschnitt 3.4). Zum anderen können die Realisierungen im Rahmen der Gebietszerlegung als Teilgebiete eines Gesamtgebietes aufgefasst werden (siehe Abschnitt 3.6.4). Dies liefert in beiden Fällen genauere Ergebnisse für die effektiven Materialtensoren.

Im folgenden ersten Abschnitt werden zunächst die lokalen mechanischen und elektrischen Felder im Volumenelement untersucht. Der zweite Abschnitt beschäftigt sich mit den effektiven (makroskopischen) Eigenschaften des Volumenelements für den rein elastischen Fall. Dabei werden grundlegende Aspekte der mikromechanischen Modellierung diskutiert und verifiziert. Diese werden für den dritten Abschnitt benötigt, in dem das effektive piezoelektrische Materialverhalten untersucht wird.

## 5.1 Lokale Felder auf der Mikroebene

Die Volumenmittelwerte der lokalen Felder definieren das effektive Materialverhalten. In dieser Hinsicht stellen die Untersuchungen dieses Abschnitts die Grundlage für das wesentliche Ziel dieser Arbeit, die Bestimmung der effektiven Materialparameter, dar.

Im Gegensatz zu klassischen mikromechanischen Modellen werden mit der in dieser Arbeit gewählten Modellierung des stochastischen Volumenelements die lokalen Felder auf der Mikroebene vollständig berechnet. Daraus können zusätzlich Aussagen über die Lokalisation der mechanischen und elektrischen Felder gewonnen werden. Diese sind wichtig für die Auslegung von Bauteilen [27] und zur Modellierung z.B. von Mikrorissentstehung und Einsetzen von Domänenumklappen. Ein weiteres Ziel dieses Abschnitts ist demnach die Untersuchung dieser Lokalisation.

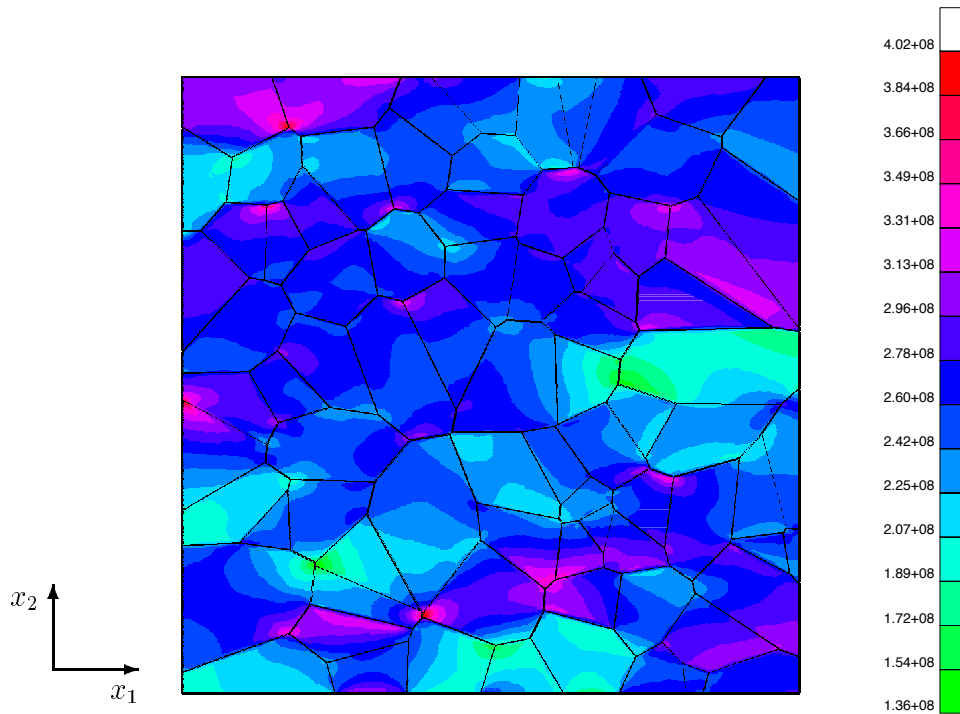


Abbildung 5.1: Lokales Spannungsfeld  $\sigma_{11}(\mathbf{x})$  (in Pa) auf der Mikroebene für 80 Körner bei Spannungsrandbedingungen mit  $\sigma_{11}^0 = 100$  MPa.

### 5.1.1 Spannungsfelder bei reiner Elastizität

Abbildung 5.1 zeigt das lokale Spannungsfeld  $\sigma_{11}(\mathbf{x})$  in einem repräsentativen Volumenelement mit 80 Körnern. Es wurde der ebene Dehnungszustand gewählt und Spannungsrandbedingungen in  $x_1$ -Richtung mit  $\sigma_{11}^0 = 100$  MPa aufgebracht. Es ist eine deutliche Spannungsfuktuation zu erkennen mit maximalem Wert 402 MPa und minimalem Wert 136 MPa. Der Grund hierfür liegt in den unterschiedlichen kristallographischen Orientierungen der Körner. Aufgrund des unstetigen Materialübergangs an den Korngrenzen ergeben sich in diesem Bereich tendenziell höhere Spannungsgradienten als innerhalb der Körner. Lokale Spannungsmaxima und -minima treten häufig an den Eckpunkten der Körner auf.

Für eine genauere Untersuchung der lokal fluktuierenden Spannung muss deren statistische Verteilung im Rahmen der stochastischen Mikromechanik betrachtet werden. Wir nehmen an, dass die statistische Verteilung von  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  unabhängig vom Punkt  $\mathbf{x} \in V$  ist.

Die Verteilungsdichten der Spannung  $\sigma_{11}$  sind in Abbildung 5.2a für Verschiebungsrandbedingungen,  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$ , und in Abbildung 5.2b für Spannungsrandbedingungen,  $\sigma_{11}^0 = 100$  MPa, aufgetragen. Sie wurden durch numerische Simulation von 50 Realisie-

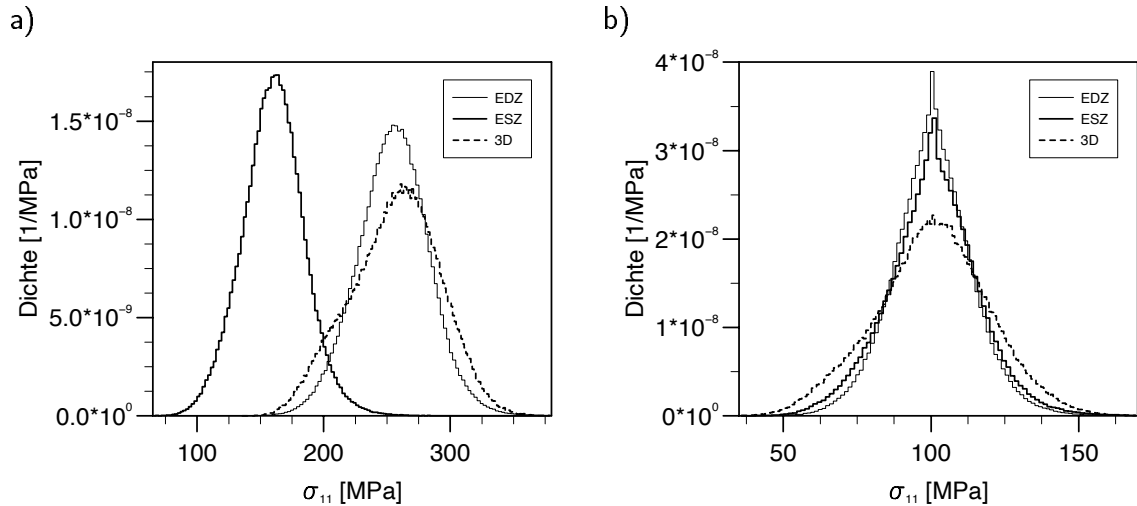


Abbildung 5.2: Verteilungsdichte der Spannung  $\sigma_{11}$  für den ebenen Dehnungszustand (EDZ), für den ebenen Spannungszustand (ESZ) und für das dreidimensionale Modell. a) für Verschiebungsrandbedingung  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$  und b) für Spannungsrandbedingungen  $\sigma_{11}^0 = 100$  MPa.

rungen der Orientierungen der kristallographischen Achsen berechnet. Das ebene Modell besteht aus 500 Körnern und wurde mit 18000 Elementen diskretisiert, das dreidimensionale Modell aus 4096 Körnern mit je 8 Elementen pro Korn. Die Spannungen innerhalb der Elemente wurden auf den jeweiligen Schwerpunkt gemittelt, die mittleren Elementspannungen wurden anschließend in 200 Klassen unterteilt.

Für Verschiebungsrandbedingungen liefert der ebene Spannungszustand deutlich geringere Spannungen als der ebene Dehnungszustand und das 3D-Modell. Ein Vergleich der Streuung ist wegen der unterschiedlichen mittleren Spannungen in diesem Fall schwierig. Bei Spannungsrandbedingungen ist der Mittelwert der Spannungen entsprechend dem Average Stress Theorem (3.8) gleich der am Rand des Volumenelements aufgetragenen Spannung,  $\langle \sigma_{11} \rangle = 100$  MPa. Lokal treten jedoch Spannungen zwischen etwa 50 MPa und 150 MPa auf. Weiterhin ist ersichtlich, dass die Streuung der Spannung für das 3D-Modell am größten ist. Die Unterschiede der verschiedenen Modelle werden später im Hinblick auf die effektiven Eigenschaften diskutiert.

Zur besseren Charakterisierung der statistischen Verteilung der Spannungen sind in Tabelle 5.1 der Erwartungswert und die Standardabweichung komponentenweise angegeben. Die Standardabweichung ist ein Maß für die Lokalisation bei einer realen Mikrostruktur im Vergleich zu einem homogenisierten Material. Man erkennt, dass sie von den Randbedingungen sowie von der Art des Modells (ebener Dehnungszustand, ebener Spannungs-

Modell		Verschiebungs- randbedingungen	Spannungs- randbedingungen
EDZ	$\sigma_{11}$ [MPa]	$254 \pm 21.4$	$100 \pm 10.4$
	$\sigma_{22}$ [MPa]	$143 \pm 15.3$	$0 \pm 8.0$
	$\sigma_{12}$ [MPa]	$0 \pm 10.2$	$0 \pm 4.8$
ESZ	$\sigma_{11}$ [MPa]	$159 \pm 18.6$	$100 \pm 11.9$
	$\sigma_{22}$ [MPa]	$58.9 \pm 12.5$	$0 \pm 8.1$
	$\sigma_{12}$ [MPa]	$0 \pm 8.9$	$0 \pm 5.5$
3D	$\sigma_{11}$ [MPa]	$255 \pm 24.7$	$100 \pm 13.7$
	$\sigma_{22}$ [MPa]	$145 \pm 12.1$	$0 \pm 8.2$
	$\sigma_{33}$ [MPa]	$145 \pm 12.1$	$0 \pm 8.2$
	$\sigma_{12}$ [MPa]	$0 \pm 11.9$	$0 \pm 5.8$
	$\sigma_{13}$ [MPa]	$0 \pm 11.9$	$0 \pm 5.8$
	$\sigma_{23}$ [MPa]	$0 \pm 5.9$	$0 \pm 4.8$

Tabelle 5.1: Erwartungswert und Standardabweichung der lokalen Spannung in einem Volumenelement mit 1000 Körnern (2D) bzw. 1728 Körnern (3D) für Verschiebungsrandbedingungen mit  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$  und für Spannungsrandbedingungen mit  $\sigma_{11}^0 = 100$  MPa.

zustand, 3D-Modell) abhängt. Sie ist am größten für die Spannungskomponente  $\sigma_{11}$  in Belastungsrichtung und am kleinsten für die Schubspannungen.

Als Alternative zum Poisson-Voronoi-Mosaik wurden in Abschnitt 4.1.1 Cluster- und Hardcore-Voronoi-Mosaik vorgestellt. Zum Vergleich dieser Geometrien wurden die beiden Mosaik mit 99 Körnern aus Abbildung 4.2 untersucht. Wie aus Tabelle 5.2 zu entnehmen ist, stimmen die Mittelwerte und die Streuungen der lokalen Felder in beiden Fällen annähernd mit denen des Poisson-Voronoi-Mosaiks überein. Die mögliche Vermutung, dass die deutlich höhere Streuung der Kornflächen beim Cluster-Voronoi-Mosaik auch zu einer höheren Streuung der Spannungsfelder führt, bestätigt sich also nicht. Daraus kann man schließen, dass unterschiedliche, homogene und isotrope Korngeometrien nur einen geringen Einfluss auf die Verteilungsdichte der lokalen Felder haben.

### Einfluss von Randeffekten

Dieser Abschnitt behandelt eine lediglich für die Modellierung interessante Fragestellung: Kann bei der Untersuchung der lokalen Felder das ganze Volumenelement herangezogen werden oder sollte ein bestimmter Randbereich ausgeschlossen werden? Wie schon

Modell	Cluster	Hardcore	Poisson
$\sigma_{11}$ [MPa]	$256 \pm 23.6$	$255 \pm 22.1$	$254 \pm 21.4$
$\sigma_{22}$ [MPa]	$144 \pm 15.2$	$144 \pm 15.0$	$143 \pm 15.3$
$\sigma_{12}$ [MPa]	$0 \pm 11.5$	$0 \pm 10.9$	$0 \pm 10.2$

Tabelle 5.2: Erwartungswert und Standardabweichung der lokalen Spannung in einem Cluster- und einem Hardcore-Voronoi-Mosaik mit 99 Körnern sowie einem Poisson-Voronoi-Mosaik für Verschiebungsrandbedingungen mit  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$ .

in Abschnitt 3.4 angesprochen und im Einfluss der Randbedingungen erkennbar, treten wegen der Endlichkeit des Volumenelements Randeffekte auf. Die Verteilung von  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$  ist deshalb im Allgemeinen abhängig von der Entfernung von  $\boldsymbol{x} \in V$  zum Rand  $\partial V$ .

Um dies zu untersuchen wurde das Volumenelement  $V$  in einen inneren Bereich  $V_I$  und einen äußeren Bereich  $V_A$  unterteilt. Die Unterteilung erfolgte analog zu Abbildung 4.3b, wobei die Breite des äußeren Streifens 10% der Kantenlänge  $B$  des gesamten Volumenelements betrug. Für Mosaik mit 100 und 1000 Körnern wurde die statistische Verteilung von  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$  für  $\boldsymbol{x} \in V_I$  und für  $\boldsymbol{x} \in V_A$  getrennt untersucht (siehe Tabelle 5.3). Zur besseren Vergleichbarkeit der Randbedingungsarten erfolgte die Belastung durch einfache Scherung<sup>1</sup> mit  $\sigma_{12}^0 = 100$  MPa bzw.  $\epsilon_{12}^0 = 0.0018$ , sodass für 1000 Körner in beiden Fällen  $\langle \sigma_{12} \rangle = 100$  MPa gilt.

Anzahl der Körner	Integrationsgebiet	Verschiebungsrandbedingungen	Spannungsrandbedingungen
100	$V_I$	$99.64 \pm 10.52$	$100.0 \pm 9.19$
	$V_A$	$100.95 \pm 13.24$	$100.0 \pm 6.94$
1000	$V_I$	$99.82 \pm 10.21$	$100.0 \pm 10.06$
	$V_A$	$100.30 \pm 11.37$	$100.0 \pm 8.90$

Tabelle 5.3: Erwartungswert und Standardabweichung der lokalen Spannung  $\sigma_{12}(\boldsymbol{x})$  unter Schubbelastung im inneren Bereich  $V_I$  und im äußeren Bereich  $V_A$  eines Volumenelements (in MPa).

Die mittlere Spannung ist im inneren und äußeren Bereich nahezu gleich, bei Verschiebungsrandbedingungen ergeben sich in  $V_A$  lediglich geringfügig höhere Werte als in  $V_I$ .

<sup>1</sup>Bei Zugbelastung gibt es aufgrund der Querkontraktion zwei nicht verschwindende Spannungskomponenten für Verschiebungsrandbedingungen, weshalb ein direkter Vergleich der Randbedingungsarten nicht möglich ist.



Bei 1000 Körnern beträgt die Standardabweichung im inneren Bereich  $V_I$  für beide Randbedingungen jeweils ca. 10 MPa. Bei Betrachtung des ganzen Volumenelements  $V$  und bei Reduzierung der Anzahl an Körnern stellt man eine deutliche Abweichung von diesem Wert fest. Für Verschiebungsrandbedingungen ist die Streuung der Spannung größer, d.h. die Spannungsfluktuationen werden überschätzt. Spannungsrandbedingungen führen hingegen bei nicht ausreichend großen Modellen zu einer Unterschätzung der Fluktuationen. Es sollte demnach zur Untersuchung der Streuung des Spannungsfeldes ein innerer Bereich eines hinreichend großen Volumenelements betrachtet werden.

Folgende Erklärung ist möglich: Die Einschränkung der Verschiebungsfreiheitsgrade am Rand verursacht dort geringfügig höhere Spannungen und eine stärkere Streuung. Die Vorgabe der Normalspannung am Rand führt dort wegen der Stetigkeit des Spannungsfeldes nur zu geringeren Schwankungen.

### 5.1.2 Spannungsfelder und elektrische Felder bei Piezoelektrizität

Zur Untersuchung der elektromechanisch gekoppelten lokalen Felder bei linear piezoelektrischem Materialverhalten werden Verschiebungsrandbedingungen zusammen mit Potenzialrandbedingungen verwendet. Zunächst betrachten wir den makroskopisch isotropen Zustand.<sup>2</sup>

Abbildung 5.3 zeigt das lokale Spannungsfeld  $\sigma_{11}(\mathbf{x})$  in einem Volumenelement mit 80 Körnern unter einer rein elektrischen Belastung in  $x_1$ -Richtung mit  $E_1^0 = 1000 \text{ kV/m}$  und  $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \mathbf{0}$ . Durch die piezoelektrische Kopplung werden in den einzelnen Körnern je nach kristallographischer Orientierung Zug- oder Druckspannungen induziert. Die mittlere Spannung ist jedoch wegen der makroskopischen Isotropie null. Im Vergleich zu Abbildung 5.1 ist die Fluktuation der Spannungen im Korninneren geringer und die lokalen Extrema in den Eckpunkten sind weniger ausgeprägt.

In Abbildung 5.4 ist die Komponente  $E_1$  des elektrischen Feldes dargestellt. In der Nähe mehrerer Eckpunkte der Körner sind lokale Maxima zu beobachten, mit Werten von  $E_1$ , die bis zu fünfmal größer als das mittlere elektrische Feld  $\langle E_1 \rangle = 1000 \text{ kV/m}$  sind. Lokal kann andererseits die Komponente des elektrischen Feldes in Richtung des angelegten Feldes verschwinden oder sogar leicht negative Werte annehmen. Die Absolutwerte der

---

<sup>2</sup>Es ist zu beachten, dass der Einfluss der spontanen Polarisation und Dehnung der einzelnen Körner auf die lokalen Felder nicht berücksichtigt wird (siehe Abschnitt 3.5.2).

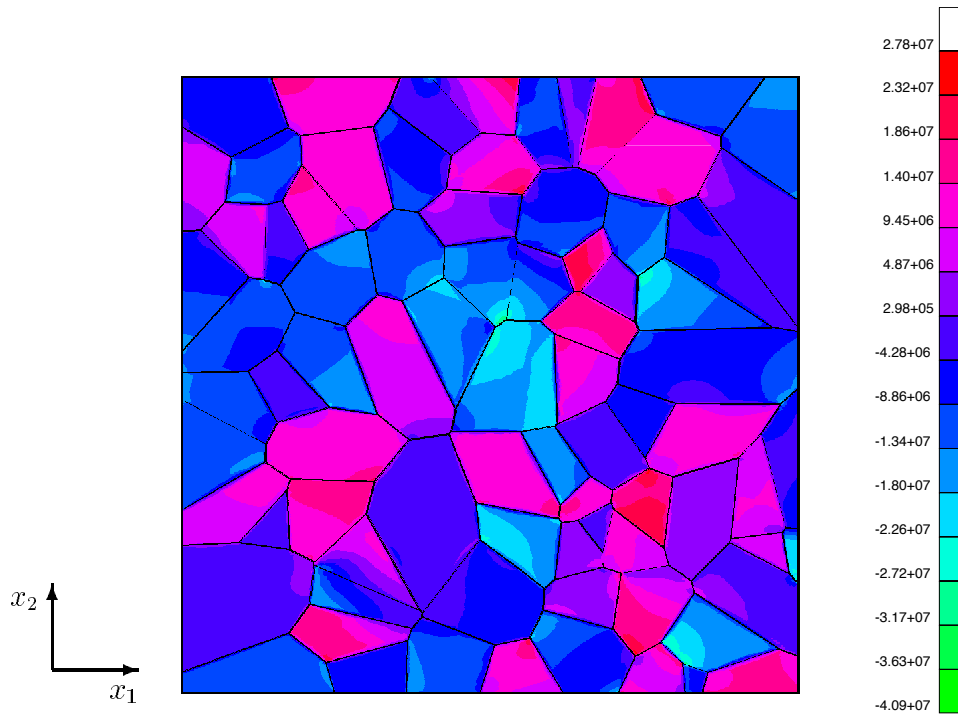


Abbildung 5.3: Spannung  $\sigma_{11}$  (in Pa) bei elektrischer Belastung,  $E_1^0 = 1000 \text{ kV/m}$ .

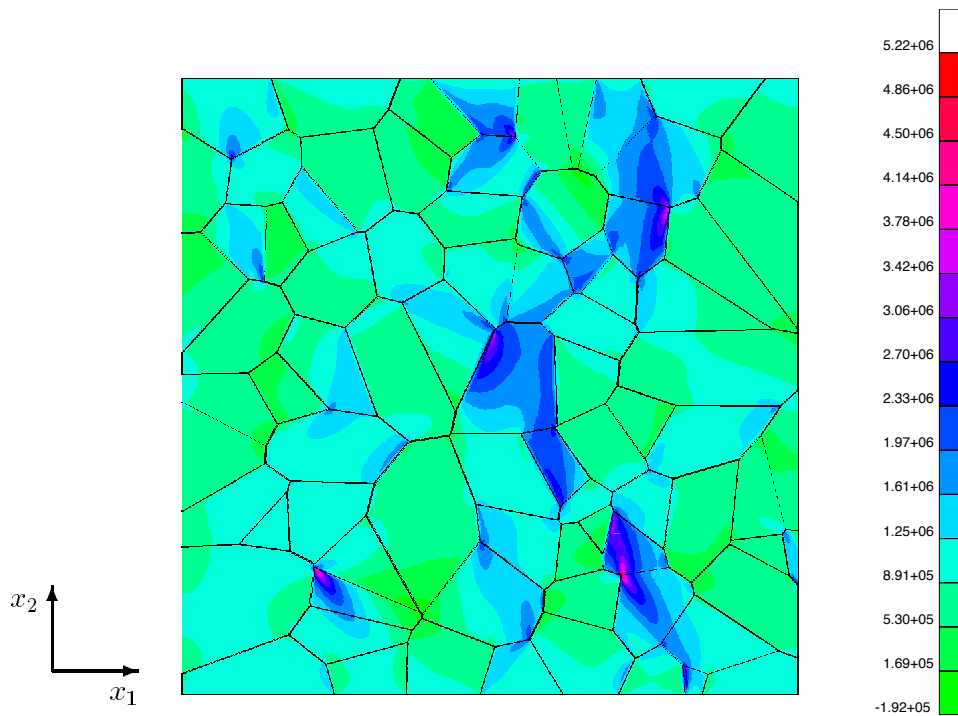


Abbildung 5.4: Elektrisches Feld  $E_1$  (in V/m) bei elektrischer Belastung,  $E_1^0 = 1000 \text{ kV/m}$ .

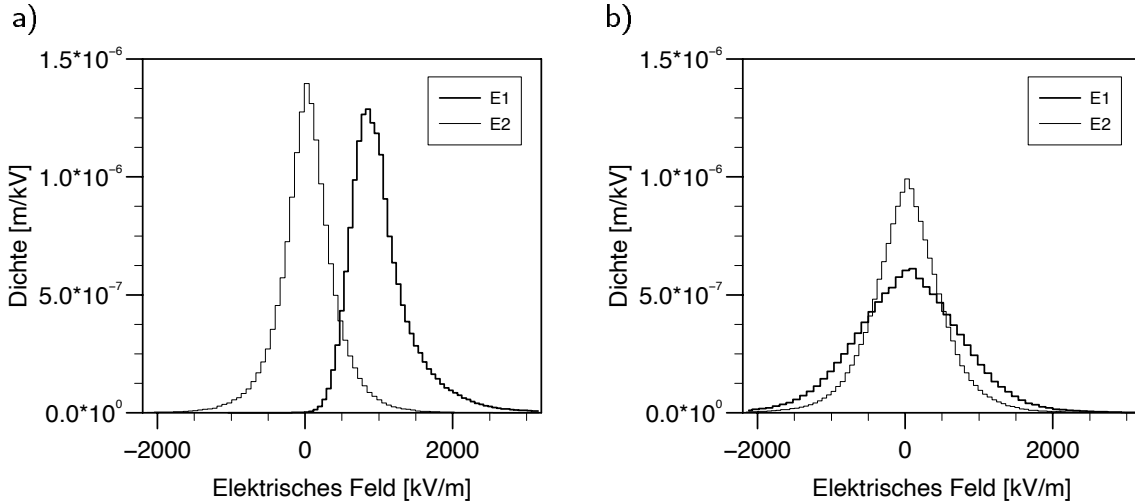


Abbildung 5.5: a) Verteilungsdichten des elektrischen Feldes unter a) elektrischer Belastung,  $E_1^0 = 1000 \text{ kV/m}$  und b) mechanischer Belastung,  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$ .

maximalen Abweichung vom Mittelwert sind für  $E_1$  in positive und in negative Richtung deutlich unterschiedlich.

Die Verteilungsdichten der Komponenten  $E_1$  und  $E_2$  des elektrischen Feldes in einem Volumenelement mit 1000 Körnern sind in Abbildung 5.5a aufgetragen. Bei der numerischen Simulation über 30 Realisierungen der Orientierungsverteilung wurde nur der innere Teil des Volumenelements  $V_I$  betrachtet. Es zeigt sich, dass die Streuung beider Komponenten annähernd gleich groß ist. Lokal können also auch elektrische Felder mit betragsmäßig großen Komponenten senkrecht zur Belastungsrichtung auftreten. Die Verteilung der Komponente  $E_2$  zeigt im Unterschied zu  $E_1$  keine Asymmetrie.

Für eine rein mechanische Belastung in  $x_1$ -Richtung mit  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$  und  $\mathbf{E}^0 = \mathbf{0}$  sind die Verteilungsdichten in Abbildung 5.5b zu sehen. Da der Polykristall makroskopisch ungepolt ist, verschwindet der Mittelwert des elektrischen Feldes. Die Streuung beruht auf dem piezoelektrischen Verhalten der einzelnen Körner und ist in Belastungsrichtung etwas größer als senkrecht dazu.

Der Erwartungswert und die Standardabweichung der lokalen Felder für elektrische und mechanische Belastung sind in Tabelle 5.4 aufgetragen. Ein Vergleich mit den rein elastischen Ergebnissen in Tabelle 5.1 zeigt, dass die Berücksichtigung der piezoelektrischen Kopplung nur einen minimalen Einfluss auf die Varianz der Spannung besitzt. In Belastungsrichtung beträgt die Streuung des elektrischen Feldes ca. 35%. Im Vergleich dazu streut die Spannung in Belastungsrichtung bei dem rein elastischen Problem mit Span-

	elektrische Belastung	mechanische Belastung
$\sigma_{11}$ [MPa]	$0 \pm 6.5$	$262 \pm 22.1$
$\sigma_{22}$ [MPa]	$0 \pm 5.8$	$139 \pm 16.1$
$\sigma_{12}$ [MPa]	$0 \pm 3.4$	$0 \pm 10.5$
$E_1$ [kV/m]	$1000 \pm 347$	$0 \pm 570$
$E_2$ [kV/m]	$0 \pm 316$	$0 \pm 412$

Tabelle 5.4: Erwartungswert und Standardabweichung der Spannung und des elektrischen Feldes in einem Volumenelement mit 1000 Körnern.

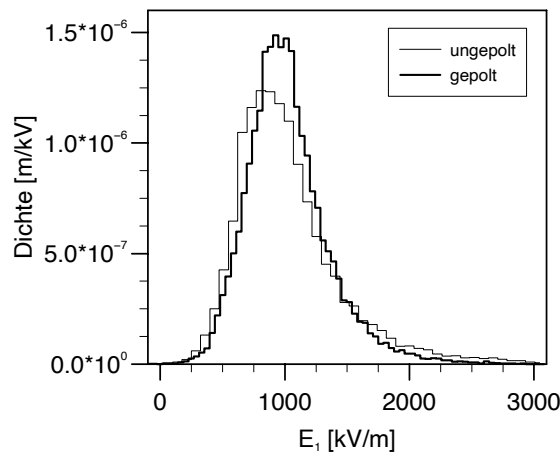


Abbildung 5.6: Verteilungsdichten von  $E_1$  unter elektrischer Belastung für ungepolt und vollständig gepolt Zustand mit  $E_1^0 = 1000$  kV/m.

nungsrandbedingungen nur um ca. 10 %. Die lokalen Fluktuationen des elektrischen Feldes sind demnach deutlich größer als die der Spannungen, wie bereits aus dem Vergleich der Abbildungen 5.3 und 5.4 hervorgeht. Diese Unterschiede im elektrischen und mechanischen Verhalten lassen sich mit der höheren Anisotropie der Dielektrizität im Vergleich zur Anisotropie der Elastizität bei Bariumtitanat-Einkristallen erklären.

Zum Abschluss dieses Abschnitts wird kurz der Einfluss des Polungszustands auf die Verteilung der lokalen Felder untersucht. Dazu wurde ein vollständig elektrisch gepolter Zustand betrachtet, der durch die Polungsrichtungsfunktion (4.22) mit  $\theta_E = \pi/4$  gegeben ist. Abbildung 5.6 stellt die Verteilungsdichten von  $E_1$  im ungepolt und gepolt Zustand gegenüber. Die Belastung erfolgt rein elektrisch in Polungsrichtung. Hierbei beobachtet man eine Verringerung der Streuung des elektrischen Feldes. Dies kann folgen-

dermaßen erklärt werden: Durch die Ausrichtung der Polarisationsrichtung im gepolten Zustand sind die Materialtensoren der Körner ebenfalls ausgerichtet und weichen damit weniger voneinander ab als im ungepolten Zustand. Diese geringere Streuung der lokalen Materialeigenschaften führt zu einer etwas geringeren Streuung der lokalen Felder.

## 5.2 Effektive Eigenschaften für rein elastisches Materialverhalten

Bei rein linear elastischem Materialverhalten hängen die effektiven Eigenschaften lediglich von folgenden materialspezifischen Größen ab:

- elastische Materialparameter des Einkristalls,
- Geometrie der Kornstruktur (Art des Voronoi-Mosaiks).

Durch die stochastische Beschreibung des repräsentativen Volumenelements ergeben sich für jede Realisierung unterschiedliche effektive Materialparameter. Deswegen kommen bei Verwendung einer beschränkten Anzahl von Realisierungen als Einflussgrößen hinzu:

- Realisierung der Orientierungsverteilung der kristallographischen Achsen,
- Realisierung des Punktprozesses des Voronoi-Mosaiks.

Als Modellierungsgrößen gehen weiter ein:

- Art des Modells (ebener Dehnungszustand, ebener Spannungszustand, 3D-Modell),
- Größe des Volumenelements (Anzahl der Körner),
- mechanische Randbedingungen,
- Diskretisierung.

In diesem Abschnitt wird die Bedeutung der einzelnen oben aufgeführten Einflussgrößen auf die effektiven Eigenschaften untersucht.

Zunächst eine Bemerkung zur Diskretisierung: Die numerischen Analysen haben gezeigt, dass das Integral über die lokalen Felder weitgehend von der Feinheit der Diskretisierung

unabhängig ist. So genügt zur Bestimmung der effektiven Eigenschaften bei der Diskretisierung eines zweidimensionalen Voronoi-Mosaiks mit dem Algorithmus nach Abschnitt 4.1.4 die kleinstmögliche Anzahl von Elementen, welche zur Vernetzung benötigt wird. Bei dreidimensionalen quaderförmigen Körnern genügen acht Elemente pro Korn, um ausreichend genaue Ergebnisse zu erzielen. Zur Untersuchung der lokalen Felder ist jedoch eine feinere Vernetzung nötig, insbesondere zur Bestimmung lokaler Spannungsmaxima.

### 5.2.1 Einfluss der Volumenelementgröße und der Orientierungsverteilung

Die Größe des gewählten repräsentativen Volumenelements ist bei der Modellierung eines Polykristalls durch die Anzahl an Körnern im Volumenelement gegeben. Der Größeneinfluss ist folglich direkt mit dem Einfluss der Orientierungsverteilung der kristallographischen Achsen der Körner verbunden. Es ist zu erwarten, dass die effektiven Eigenschaften, die mit unterschiedlichen Realisierungen der Orientierungsverteilung berechnet werden, mit zunehmender Anzahl der Körner weniger voneinander abweichen. Deswegen müssen diese beiden Einflussgrößen gemeinsam untersucht werden.

In den folgenden Abschnitten wird stets eine isotrope Orientierungsverteilung betrachtet. Erst in Abschnitt 5.3.2 werden anisotrope Polungszustände behandelt. Um den Einfluss der Größe des Volumenelements auf die effektive Materialantwort zu untersuchen, wurde die Anzahl der Körner  $n$  im Volumenelement von 5 bis 1000 variiert. Für jedes vorgegebene  $n$  wurde eine Realisierung eines Poisson-Voronoi-Mosaiks mit jeweils 50 Realisierungen der Orientierungsverteilung der kristallographischen Achsen erzeugt.

Der effektive E-Modul der einzelnen Realisierungen ist in Abbildung 5.7 in Abhängigkeit von  $n$  aufgetragen. Es wurde der ebene Dehnungszustand zugrunde gelegt und Verschiebungsrandbedingungen mit  $\epsilon_{11}^0 = 0.001$  aufgebracht. Wie zu sehen ist verringert sich die Streuung des effektiven E-Moduls für größer werdendes  $n$  deutlich. Der Grund hierfür ist der abnehmende Einfluss der Orientierung eines einzelnen Korns. Es ist zu beachten, dass die Abszisse in Abbildung 5.7 logarithmisch aufgetragen ist.

In Abbildung 5.7 sind weiterhin die Grenzen nach Voigt und Reuss eingezeichnet (siehe Tabelle 3.1). Diese stellen nach Ungleichung (3.92) eine obere und untere Schranke für den effektiven E-Modul dar. Für Volumenelemente mit weniger als 40 Körnern wird die obere Schranke von einigen Realisierungen verletzt. Dies ist möglich, da die Schranken nur für den unendlichen Polykristall gültig sind. Die einfachen Volumenmittelwerte  $\langle \mathbf{c} \rangle$

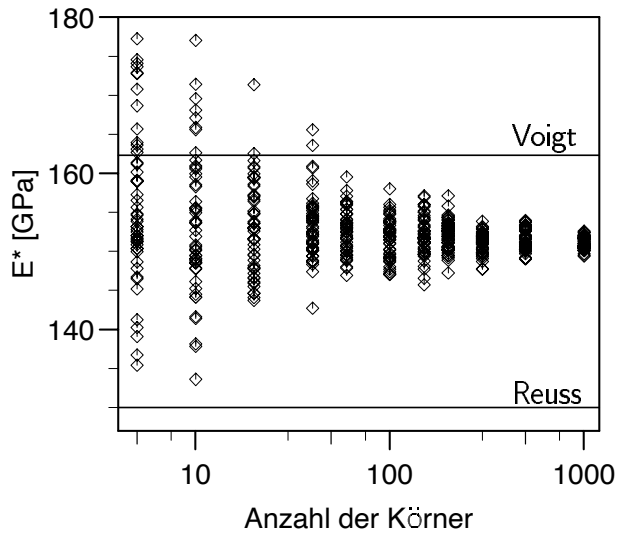


Abbildung 5.7: Effektiver E-Modul für jeweils 50 Realisierungen eines Volumenelements mit 5 bis 1000 Körnern sowie die Voigt- und Reuss-Grenzen.

und  $\langle \mathcal{D} \rangle^{-1}$  über das endliche Volumenelement schließen jedoch das numerisch berechnete  $\mathcal{C}^{*u}$  für jede Realisierung ein (siehe Ungleichung (3.56)).

Bei der Verwendung eines kleinen Volumenelements sollte demnach der Mittelwert von  $E^*$  über mehrere Realisierungen der Orientierungsverteilung betrachtet werden. Dies bietet sich insbesondere bei einer begrenzten Rechnerkapazität an.

Der Mittelwert des effektiven E-Moduls über die 50 Realisierungen der Orientierungsverteilung liegt jeweils innerhalb der Voigt- und Reuss-Grenzen. Für 1000 Körner ergibt sich als Mittelwert  $E^* = 151.0$  GPa. Als effektiven Gleitmodul erhält man bei diesem Modell  $G^* = 55.0$  GPa und als effektive Poisson-Zahl  $\nu^* = 0.360$ . Der Vergleich dieser Ergebnisse mit der oberen Hashin-Shtrikman-Grenze zeigt eine sehr gute Übereinstimmung (siehe Tabelle 3.2). Dieser Ansatz scheint dem FE-Modell am nächsten zu kommen, während die Selbstkonsistente Methode ein weniger steifes Materialverhalten vorhersagt (siehe Tabelle 3.3).

Die bereits in Abbildung 5.7 beobachtete Abnahme der Streuung der effektiven Eigenschaften mit Zunahme der Anzahl an Körnern ist in Abbildung 5.8 quantitativ dargestellt. Es zeigt sich, dass  $E^*$  und  $G^*$  in etwa gleich stark streuen, während  $\nu^*$  bereits mit weniger Körnern relativ genau bestimmt werden kann. Es ist zu vermuten, dass dieses Ergebnis von der speziellen Struktur des Einkristalltensors von Bariumtitanat abhängt und nicht ohne weiteres auf andere Materialien übertragen werden kann.

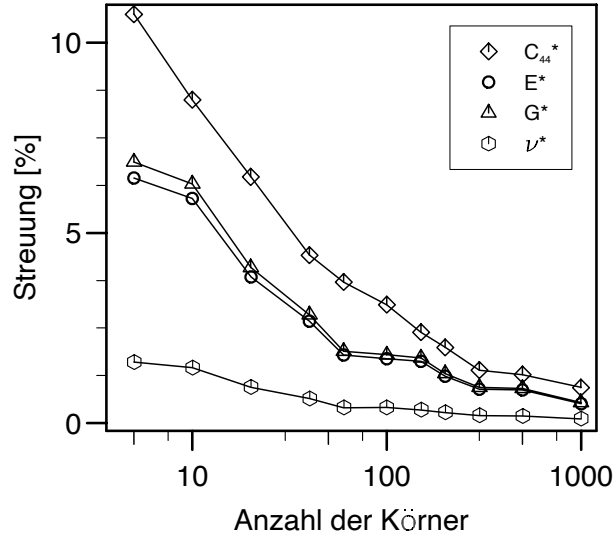


Abbildung 5.8: Streuung des effektiven E-Moduls  $E^*$ , Gleitmoduls  $G^*$ , der effektiven Poisson-Zahl  $\nu^*$  und  $C_{44}^*$  in Abhängigkeit von der Anzahl an Körnern.

Ebenfalls eingetragen ist in Abbildung 5.8 die Streuung der Komponente  $C_{44}^*$  der effektiven Elastizitätsmatrix. Sie liegt deutlich oberhalb der Streuung für  $G^*$ . Beide Werte machen eine Aussage über das effektive Materialverhalten unter Scherung und ihre Mittelwerte sind annähernd gleich. Der Unterschied besteht darin, dass  $C_{44}^*$  aus der Lösung des Randwertproblems für eine Scherbelastung bestimmt wird (siehe Gleichungen (3.13) und (3.75)).  $G^*$  hingegen ergibt sich aus den Lösungen für ein Randbedingungssystem bestehend aus drei Randbedingungen mit anschließender Mittelung gemäß Gleichung (3.80). Man sieht also, dass sich aufgrund dieser zusätzlichen Mittelung die Aussagekraft der Ergebnisse für eine Realisierung des Volumenelements deutlich verbessert.

In Abschnitt 4.2 wurde zur Ermittlung der benötigten Größe des Volumenelements der Anisotropiefaktor  $A_n$  als Maß für die Anisotropie eingeführt. Es zeigte sich, dass  $A_n$  mit zunehmender Anzahl an Körnern  $n$  mit  $1/\sqrt{n}$  abnimmt (Abbildung 4.9 und Gleichung (4.16)). Dabei wurde  $A_n$  durch eine einfache Volumenmittelung  $\langle \mathbf{C} \rangle$  berechnet. Es stellt sich nun die Frage, ob dies auch eine Aussage über die Anisotropie des effektiven Elastizitätstensors  $\mathbf{C}^*$  ermöglicht.

Dazu wurde der Anisotropiefaktor von  $\mathbf{C}^*$  für 3D-Volumenelemente mit 8 bis 4096 Körnern und jeweils 50 Realisierungen der Orientierungen berechnet. In Tabelle 5.5 werden die Mittelwerte für Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen  $\mathbf{C}^{*u}$  bzw.  $\mathbf{C}^{*t}$  mit den Ergebnissen der Voigt'schen und Reuss'schen Näherung  $\langle \mathbf{C} \rangle$  bzw.  $\langle \mathbf{D} \rangle^{-1}$  verglichen. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung, wobei die Voigt'sche Näherung geringfügig größere



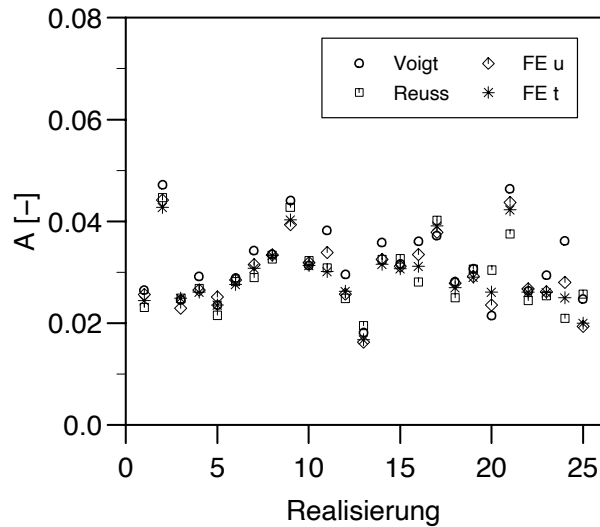


Abbildung 5.9: Anisotropiefaktor eines Volumenelements mit 1728 Körnern für 25 Realisierungen der Orientierungsverteilung (Voigt'sche und Reuss'sche Näherung, Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen).

Körner	Voigt	Reuss	<i>u</i> -RB	<i>t</i> -RB
8	0.466	0.425	0.458	0.424
64	0.173	0.160	0.166	0.158
512	0.061	0.057	0.058	0.057
1728	0.032	0.029	0.030	0.029
4096	0.021	0.019	0.020	0.020

Tabelle 5.5: Mittlerer Anisotropiefaktor  $A_n$  von 3D-Volumenelementen für die Voigt'sche und Reuss'sche Näherung sowie für Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen.

Werte liefert. Zumindest für große Volumenelemente haben die Randbedingungen keinen Einfluss auf den Anisotropiefaktor. Die Ergebnisse der einzelnen Realisierungen sind in Abbildung 5.9 für 1728 Körner aufgetragen. Selbst für große Volumenelemente ist demnach, wie bereits in Abbildung 4.9 beobachtet, die Streuung des Anisotropiefaktors groß. Für die meisten Realisierungen gibt es eine gute Übereinstimmung des Anisotropiefaktors der Näherungen und der FE-Rechnungen.

Zur Bestimmung der benötigten Größe des Volumenelements bei Simulation von makroskopisch isotropem Materialverhalten kann also folgendermaßen vorgegangen werden: Die maximal erlaubte Abweichung vom isotropen Verhalten wird in Form eines maximalen Anisotropiefaktors  $A_{\max}$  vorgegeben. Die benötigte minimale Anzahl an Körnern  $n$  mit

$A_n \approx A_{\max}$  kann dann aus einer einfachen Reuss'schen Mittelung über das Volumenelement bereits vor der FE-Analyse mit Hilfe von Gleichung (4.16) bestimmt werden.

## 5.2.2 Einfluss der Geometrie der Kornstruktur

Es sind zwei Aspekte zu untersuchen: Zum einen können unterschiedliche Punktprozesse zur Generierung eines Voronoi-Mosaiks verwendet werden. Zum anderen werden verschiedene Realisierungen desselben Punktprozesses zu unterschiedlichen effektiven Eigenschaften führen.

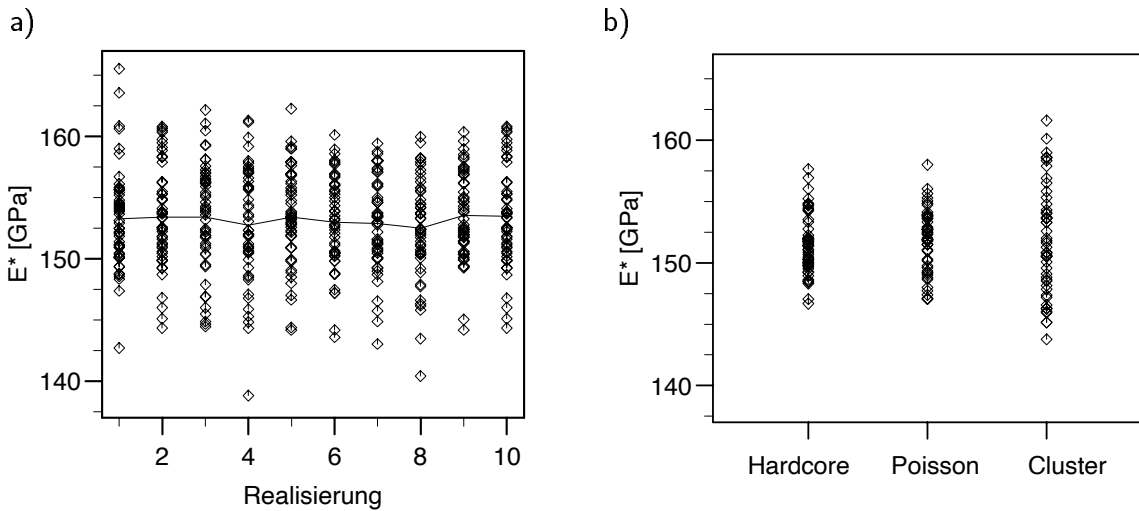


Abbildung 5.10: Effektiver E-Modul für a) 10 Realisierungen eines Poisson-Voronoi-Mosaiks mit jeweils 40 Körnern und b) ein Voronoi-Mosaik mit 99 Körnern, generiert aus einem Hardcore-, Poisson- und Cluster-Punktfeld. Jede Korngeometrie wurde mit 50 Realisierungen der Orientierungsverteilung analysiert.

Es wurden 10 Realisierungen eines Poisson-Punktprozesses mit 40 Punkten und jeweils 50 zufälligen Orientierungsverteilungen erzeugt. Man erkennt in Abbildung 5.10a, dass der effektive E-Modul für jedes Poisson-Voronoi-Mosaik etwa gleich stark streut. Die Mittelwerte über alle Orientierungen sind annähernd gleich. Daraus kann man schließen, dass es im Allgemeinen reicht, nur ein Voronoi-Mosaik zu betrachten. Zur Verbesserung der Genauigkeit der berechneten effektiven Materialparameter ist es jedoch sinnvoll, mehrere Realisierungen der Orientierungsverteilung zu betrachten.

Die lokalen Felder der Poisson-, Hardcore- und Cluster-Voronoi-Mosaik weisen keine statistischen Unterschiede auf (siehe Tabelle 5.2). Deshalb ist zunächst zu vermuten, dass

sie sich bezüglich der effektiven Eigenschaften ebenfalls ähnlich verhalten. In Abbildung 5.10b ist der effektive E-Modul der beiden Voronoi-Mosaik aus Abbildung 4.2 und eines Poisson-Voronoi-Mosaiks für jeweils 50 zufällige Orientierungsverteilungen aufgetragen. Der Mittelwert über 50 Orientierungen ist für jedes Mosaik gleich groß. Das Cluster-Punktfeld liefert jedoch eine etwa doppelt so große Streuung von  $E^*$  wie die beiden anderen Mosaik. Dies lässt sich mit der deutlich größeren Varianz der Zellenflächen des Cluster-Punktfeldes erklären. Die Streuung des effektiven E-Moduls für das Hardcore- und für das Poisson-Punktfeld ist annähernd gleich.

### 5.2.3 Einfluss der Einkristallparameter

Selbstverständlich hängen die berechneten effektiven Eigenschaften des Polykristalls stark von den verwendeten Einkristallparametern ab. Für Bariumtitanat sind in der Literatur experimentell an einkristallinen Einkristallen gemessene Materialparameter von BERLINCOURT & JAFFE [5] sowie von ZGONIK ET AL. [97] zu finden (siehe Tabelle 5.6). In

$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{66}$	$e_{31}$	$e_{33}$	$e_{15}$	$\kappa_{11}/\epsilon_0$	$\kappa_{33}/\epsilon_0$
[GPa]	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[GPa]	[C/m <sup>2</sup> ]	[C/m <sup>2</sup> ]	[C/m <sup>2</sup> ]	[-]	[-]
275.1	179.0	151.6	164.9	54.3	113.1	-2.69	3.65	21.3	1910	112
222	108	165	151	61	134	-0.7	6.7	34.2	2200	56

Tabelle 5.6: Materialparameter von einkristallinem Bariumtitanat nach BERLINCOURT & JAFFE [5] (obere Zeile) und ZGONIK ET AL. [97] (untere Zeile).

	$E^*$ [GPa]	$\nu^*$ [-]	$G^*$ [GPa]
Bariumtitanat [5]	151.7 (1.7%)	0.360 (0.4%)	55.7 (1.8%)
Bariumtitanat [97]	167.0 (1.6%)	0.297 (1.0%)	64.4 (1.9%)

Tabelle 5.7: Mittelwert (und Variationskoeffizient) der effektiven elastischen Parameter für die Einkristallwerte [5] und [97], berechnet für ein Volumenelement mit 100 Körnern.

Tabelle 5.7 werden die effektiven elastischen Parameter verglichen, die jeweils mit einem Volumenelement mit 100 Körnern und 100 Realisierungen der Orientierungsverteilung berechnet wurden. Die Materialparameter von ZGONIK ET AL. liefern ein 10-15% steiferes effektives Verhalten und eine deutlich niedrigere Poisson-Zahl des Polykristalls. Die Streuung aufgrund der unterschiedlichen Realisierungen der Orientierungsverteilung ist für  $E^*$  und  $G^*$  ungefähr gleich groß, wohingegen sich bei  $\nu^*$  Unterschiede ergeben. Da die Materialparameter von BERLINCOURT & JAFFE am häufigsten in den mikromechanischen Modellen Verwendung finden, werden diese für die weiteren Simulationen zugrunde gelegt.

## 5.2.4 Einfluss der Art des Modells und der Randbedingungen

Wie in Abbildung 5.2 bereits festgestellt wurde, liefern der ebene Dehnungszustand, der ebene Spannungszustand und das dreidimensionale Modell unterschiedliche mittlere Spannungen. Deshalb ist zu erwarten, dass die effektiven Materialparameter ebenfalls für jedes Modell voneinander abweichen. Es stellt sich nun die Frage, inwieweit der ebene Dehnungs- und Spannungszustand realistische Näherungen des dreidimensionalen Modells darstellen.

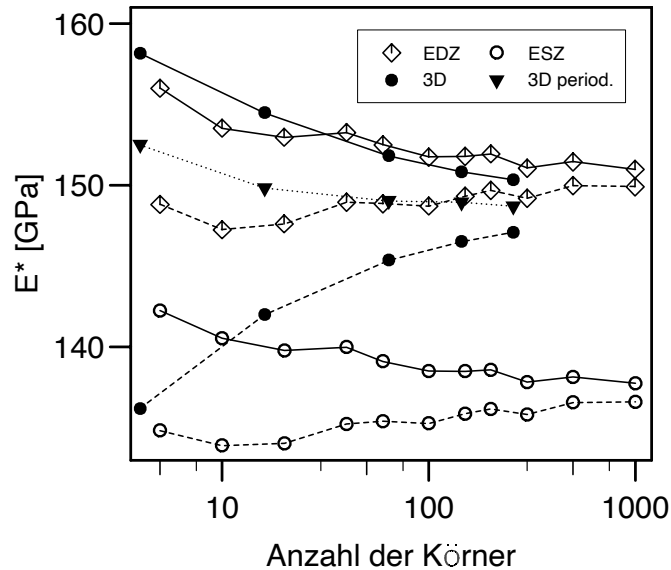


Abbildung 5.11: Mittlerer effektiver E-Modul über je 50 Orientierungsverteilungen eines Volumenelements mit 5 bis 1000 Körnern für ebenen Dehnungszustand, ebenen Spannungszustand und das 3D-Modell. (—) Verschiebungsrandbedingungen, (--) Spannungsrandbedingungen, (· · ·) periodische Randbedingungen.

Dazu wurde der effektive E-Modul für 2D-Volumenelemente mit 5 bis 1000 Körnern (Voronoi-Mosaik) und für 3D-Volumenelemente mit 8 bis 4096 quaderförmigen Körnern berechnet. Der Mittelwert des effektiven E-Moduls über jeweils 50 Realisierungen der Orientierungsverteilung ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Für die dreidimensionalen Modelle war zur besseren Vergleichbarkeit innerhalb der Darstellung die Anzahl der Körner in einem ebenen Schnitt maßgebend.

Verschiebungsrandbedingungen liefern für jedes Modell ein steiferes effektives Materialverhalten als Spannungsrandbedingungen. Dies entspricht der analytischen Schrankeigenschaft  $\mathbf{C}^{*t} \leq \mathbf{C}^* \leq \mathbf{C}^{*u}$  in Ungleichung (3.62). Als anschauliche Erklärung kann

angeführt werden, dass die Vorgabe der Verschiebung an den Randknoten bei Verschiebungsrandbedingungen zu höheren Spannungen am Rand des Volumenelements führt als bei Spannungsrandbedingungen.<sup>3</sup>

Das dreidimensionale Modell wurde zusätzlich mit periodischen Randbedingungen analysiert. Diese stellen gemischte Randbedingungen im Sinne von Ungleichung (3.62) dar, weshalb sie Werte innerhalb der Schranken  $\mathbf{C}^{*t}$  und  $\mathbf{C}^{*u}$  liefern. Es zeigt sich, dass sie für kleine Volumenelemente näher an den Ergebnissen für Verschiebungsrandbedingungen liegen. Für das zweidimensionale Modell konnten keine periodischen Randbedingungen aufgebracht werden, da die stochastische Kornstruktur nicht periodisch fortsetzbar ist.

Mit zunehmender Anzahl an Körnern konvergieren die Mittelwerte des effektiven E-Moduls für Spannungs- und Verschiebungsrandbedingungen. Dies bestätigt die Abschätzung nach Hill (3.15), nach der die Abweichung zwischen  $\mathbf{C}^{*u}$  und  $\mathbf{C}^{*t}$  mit zunehmender Größe des repräsentativen Volumenelements abnimmt. Für 1000 Körner beträgt der Unterschied zwischen  $E^{*u}$  und  $E^{*t}$  für den ebenen Dehnungs- und Spannungszustand lediglich 0.7% bzw. 0.8%. Für das dreidimensionale Modell ergibt sich selbst bei 4096 Körnern mit 2.2% eine größere Abweichung. Entscheidend ist jedoch für einen Vergleich nicht die Anzahl aller Körner, sondern der Körner in einem ebenen Schnitt, für 4096 Körner sind dies 256.

Weiter erkennt man in Abbildung 5.11, dass der ebene Spannungszustand ein deutlich weiches effektives Materialverhalten als der ebene Dehnungszustand liefert. Der Unterschied von  $E^*$  für Verschiebungsrandbedingungen beträgt bei 1000 Körnern 13.2 GPa. Der Mittelwert für den ebenen Spannungszustand,  $E^* = 137.8$  GPa, liegt noch unterhalb der unteren Hashin-Shtrikman-Grenze. Für eine große Anzahl an Körnern sind die Ergebnisse des dreidimensionalen Modells nur geringfügig niedriger als die des ebenen Dehnungszustands. Dies stimmt prinzipiell mit den Ergebnissen von BÖHM & HAN [10] für partikelverstärkte Komposite überein, wobei diese jedoch einen etwas größeren Unterschied zwischen dem ebenen Dehnungszustand und dem 3D-Modell feststellten.

### Übergang von einem 3D- auf ein 2D-Modell

Im Folgenden soll der Grund für die unterschiedlichen Ergebnisse der ebenen Modelle und des dreidimensionalen Modells untersucht werden. Anschaulich führen die zusätzlich eingeschränkten Verschiebungsfreiheitsgrade in  $x_3$ -Richtung beim ebenen Dehnungszustand zu einem steiferen Materialverhalten. Da dieser einen Schnitt durch einen unendlich ausgedehnten dreidimensionalen Körper darstellt, ist es plausibel, dass beide Modelle zu

---

<sup>3</sup>Siehe auch die Untersuchungen zum Einfluss des Randes auf die lokalen Felder in Abschnitt 5.1.

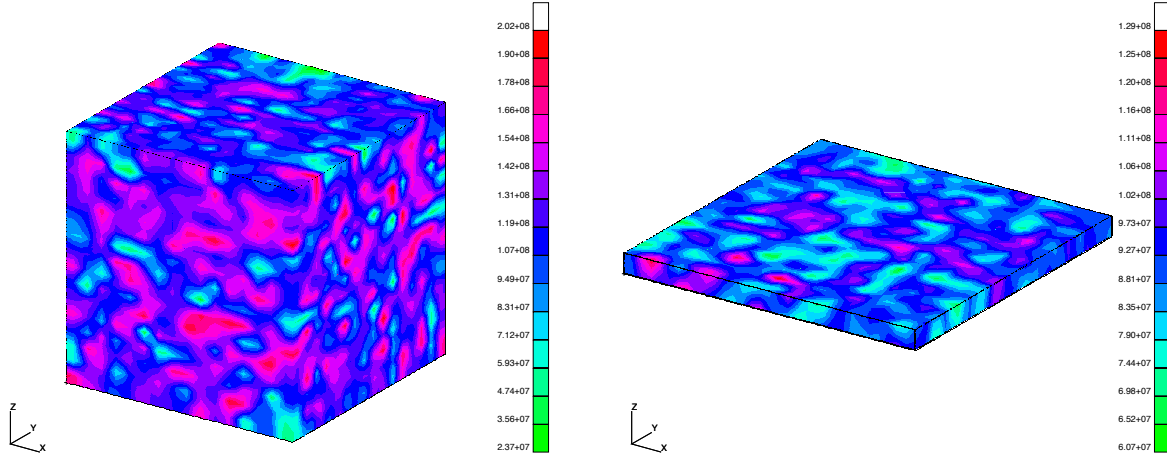


Abbildung 5.12: Spannung in einem 3D-Volumenelement mit  $16 \times 16 \times 16$  Körnern ( $h = 1$ ) und einem simulierten ebenen Modell mit  $16 \times 16 \times 1$  Körnern ( $h = 1/16$ ).

ähnlichen effektiven Eigenschaften führen.

Für eine genauere Untersuchung wird der Übergang von einem 3D-Volumenelement zu den 2D-Näherungen simuliert. Dazu müssen dem 3D-Modell geeignete Randbedingungen aufgebracht werden. Gleichzeitig wird die Höhe  $h$  des Volumenelements schrittweise reduziert. Der Ausgangswürfel in Abbildung 5.12 besteht aus  $16 \times 16 \times 16$  Körnern und wird bei jedem Schritt bis zum quasi-ebenen Modell mit  $16 \times 16 \times 1$  Körnern halbiert.

Der Rand des Volumenelements  $\partial V$  wird in einen oberen Rand ( $\partial V^o$ ), einen unteren Rand ( $\partial V^u$ ) und die Seitenflächen ( $\partial V^s$ ) zerlegt. An den Ober- und Unterseiten werden periodische Randbedingungen für die nicht verschwindenden Komponenten des Verschiebungs- und des Spannungsvektors gewählt:

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{x}) &= u_i(\mathbf{x}') \quad , \quad i = 1, 2 \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V^o, \quad \mathbf{x}' \in \partial V^u \\ t_i(\mathbf{x}) &= t_i(\mathbf{x}') \quad , \quad i = 1, 2 \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V^o, \quad \mathbf{x}' \in \partial V^u \quad . \end{aligned} \quad (5.1)$$

Zur Simulation des ebenen Dehnungszustandes wird die Verschiebung auf der gesamten Oberfläche in  $x_3$ -Richtung eingeschränkt, während für den simulierten ebenen Spannungszustand der Spannungsvektor in  $x_3$ -Richtung verschwindet,

$$u_3(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{bzw.} \quad t_3(\mathbf{x}) = 0 \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V \quad . \quad (5.2)$$

An den Seitenflächen werden jeweils Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen auf-

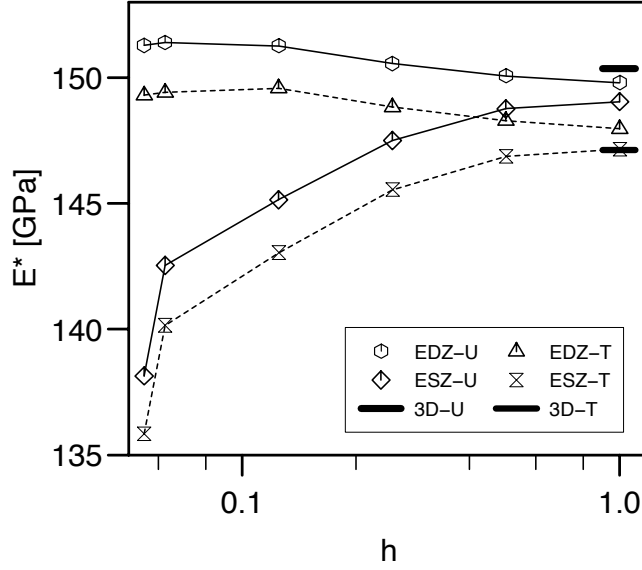


Abbildung 5.13: Effektiver E-Modul für einen schrittweisen Übergang von einem 3D-Modell zum ebenen Dehnungszustand und ebenen Spannungszustand.

gebracht,

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^{0(i)} \cdot \mathbf{x} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}^{0(i)} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad , \quad \mathbf{x} \in \partial V^s \quad , \quad (5.3)$$

mit

$$\boldsymbol{\epsilon}^{0(1)} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \boldsymbol{\epsilon}^{0(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \quad , \quad \boldsymbol{\epsilon}^{0(3)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\lambda}{2} \\ \frac{\lambda}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (5.4)$$

$\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , bzw. analog für  $\boldsymbol{\sigma}^{0(i)}$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Der effektive E-Modul wurde mit den Verfahren für den ebenen Dehnungs- bzw. Spannungszustand aus den Komponenten der lokalen Felder in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene berechnet (siehe Abschnitt 3.8.1). Abbildung 5.13 zeigt die Ergebnisse in Abhängigkeit der Dicke des Volumenelements. Die Punkte auf der linken Seite in Abbildung 5.13 sind die Ergebnisse des tatsächlichen ebenen Dehnungs- bzw. Spannungszustands.

Für den Quader ( $h = 1$ ) ergeben sich wegen der Schrankeneigenschaft (3.61) Werte zwischen den 3D-Ergebnissen. Die Unterschiede in der Vorgehensweise für ein 2D-Volumenelement (nur drei statt sechs Randbedingungen) erklärt noch nicht die niedrige Steifigkeit des ebenen Spannungszustands. Der Einfluss der eingeschränkten Verschiebungsfreiheitsgrade am oberen und unteren Rand, der beim simulierten ebenen Dehnungszustand zu einem steiferen Materialverhalten führt, nimmt für dünner werdende

Volumenelemente zu. Der effektive E-Modul nähert sich deshalb den Werten des tatsächlichen ebenen Dehnungszustands an. Andererseits ist eine deutliche Abnahme von  $E^*$  beim simulierten ebenen Spannungszustand mit abnehmender Dicke wegen des zunehmenden Einflusses der nicht eingeschränkten Randverschiebung zu beobachten. Zur Berechnung von effektiven Eigenschaften sollte also bei einer zweidimensionalen Modellierung der ebenen Dehnungszustand verwendet werden.

### 5.2.5 Verfahren zur Reduzierung des Einflusses der Randbedingungen

Der im letzten Abschnitt diskutierte Einfluss der Randbedingungen auf die effektiven Eigenschaften kann durch eine Erweiterung der bisherigen Vorgehensweise verringert werden. Das Verfahren basiert auf dem Prinzip der Selbstkonsistenten Methode, die in Abschnitt 3.9.4 vorgestellt wurde. Die Idee dabei ist, das betrachtete Volumenelement in ein homogenes Umgebungsmedium einzubetten, das die zu bestimmenden effektiven Eigenschaften besitzt. Es wird um das Volumenelement der Länge  $B$  eine Umgebung der Breite  $s$  gelegt (siehe Abbildung 5.14a). Das Volumenelement wird zusammen mit dem Umgebungsmedium in einer Finite-Elemente-Analyse untersucht. Die Vernetzung erfolgt ausgehend von dem Netz des Volumenelements. Bei der Mittelung der lokalen Felder wird die Umgebung nicht berücksichtigt. Als Materialparameter des Umgebungsmediums werden die Voigt'sche und die Reuss'sche Näherung (siehe Abschnitt 3.9.1) aufgrund ihrer Schrankeneigenschaft gewählt. Am äußeren Rand werden Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen aufgebracht.

Der effektive E-Modul ist für diese vier Fälle in Abbildung 5.14b für ein Volumenelement, bestehend aus 100 Körnern, für  $s = 0.1B$  und  $s = 0.25B$  aufgetragen. Es zeigt sich, dass die Materialparameter des Umgebungsmediums nur einen sehr geringen Einfluss auf  $E^*$  haben, der nahezu unabhängig ist von  $s$  (flache Balken in Abbildung 5.14b). Eine Iteration mit den berechneten effektiven Eigenschaften als neue Materialparameter der Umgebung ist deshalb nicht sinnvoll.

Bereits für  $s = 0.1B$  sieht man eine deutliche Abnahme des Einflusses der Randbedingungen im Vergleich zu den Ergebnissen ohne Umgebungsmedium ( $s = 0$ ). In diesem Fall beeinflussen die Randbedingungen die effektiven Eigenschaften jedoch deutlich stärker als das Umgebungsmedium. Für  $s = 0.25B$  ist die Abweichung zwischen Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen mit 0.07% deutlich kleiner als etwa bei 1000 Körnern ohne Umgebungsmedium (0.7%). Diesem Vorteil steht jedoch eine deutlich höhere Anzahl an finiten Elementen gegenüber.



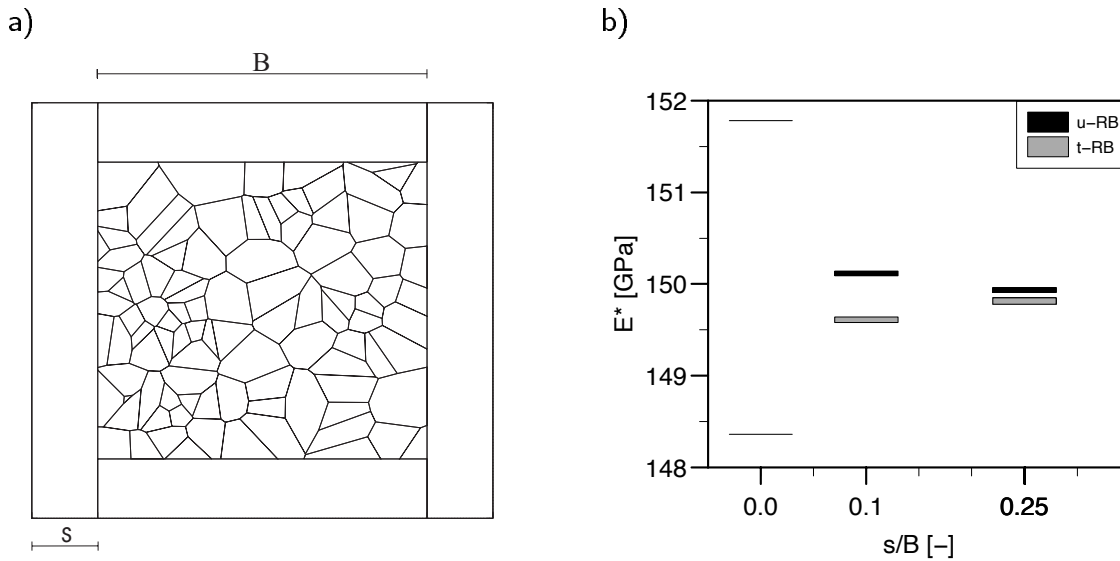


Abbildung 5.14: a) Volumenelement mit 100 Körnern, eingebettet in ein homogenes Umgebungsmedium. b) Effektiver E-Modul für Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen. Materialparameter des Umgebungsmediums Voigt'sche Näherung (oberes Balkenende) und Reuss'sche Näherung (unteres Balkenende).

### 5.3 Effektive Eigenschaften für piezoelektrisches Materialverhalten

Für linear piezoelektrisches Materialverhalten kommen zu den am Anfang von Abschnitt 5.2 aufgeführten Einflussgrößen auf die effektiven Eigenschaften folgende Punkte hinzu:

- dielektrische und piezoelektrische Materialparameter des Einkristalls,
- globaler Polungszustand (Polungsrichtungsfunktion),
- elektrische Randbedingungen.

Die Ergebnisse der effektiven Eigenschaften für piezoelektrisches Materialverhalten gliedern sich in vier Teile. Zunächst wird der ungepolte, isotrope Zustand behandelt. Hierbei wird auf die Unterschiede zwischen einem rein elastischen bzw. dielektrischen und einem piezoelektrisch gekoppelten Modell eingegangen und die Wahl der elektromechanischen Randbedingungen diskutiert. In den anschließenden drei Teilen werden die Ergebnisse nach einer elektrischen Polung und nach einer mechanischen Zug- und Druckbelastung vorgestellt und diskutiert.

### 5.3.1 Ungepolter Zustand

#### Elastisches Verhalten

Zur Berechnung der effektiven elastischen Eigenschaften eines piezoelektrischen Materials kann zwischen vier verschiedenen elektrischen 'Zuständen' im Volumenelement  $V$  unterschieden werden:

- rein elastisches Problem mit  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  in ganz  $V$ ,
- rein elastisches Problem mit  $\mathbf{D} = \mathbf{0}$  in ganz  $V$ ,
- piezoelektrisch gekoppeltes Problem mit Potenzialrandbedingungen auf  $\partial V$ ,
- piezoelektrisch gekoppeltes Problem mit dielektrischen Randbedingungen auf  $\partial V$ .

Die bisherigen numerischen Untersuchungen bezogen sich stets auf den ersten Fall, also ein verschwindendes elektrisches Feld.

In Abbildung 5.15a ist der effektive Gleitmodul  $G^*$  für die beiden elastischen Probleme für Verschiebungsrandbedingungen und in Abbildung 5.15b für Spannungsrandbedingungen aufgetragen (nicht ausgefüllte Symbole). Bei den Berechnungen wurden zwischen 5 und 50 Realisierungen der Orientierungsverteilung in einem dreidimensionalen Volumenelement mit 8 bis 1728 Körnern untersucht. Für konstantes  $\mathbf{D}$  ergibt sich ein deutlich höheres  $G^*$  als für konstantes  $\mathbf{E}$ . Dies ist nicht überraschend, da aufgrund des unterschiedlichen elektrischen Zustandes andere Materialparameter in die elastische Rechnung eingehen (siehe Gleichungen (2.12) und (2.13)). Der Unterschied beträgt für beide Randbedingungsarten unabhängig von der Größe des Volumenelements ca. 14.5 GPa. Dies entspricht in etwa dem Abstand zwischen den beiden Voigt-Grenzen (für konstantes  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{D}$ ) und dem Abstand zwischen den beiden Reuss-Grenzen in Tabelle 3.1. In beiden Fällen konvergieren die Ergebnisse für Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen wie erwartet mit größer werdender Anzahl an Körnern.

Ebenfalls in Abbildung 5.15 zu sehen ist der effektive Gleitmodul für das piezoelektrisch gekoppelte Randwertproblem (ausgefüllte Symbole). Die Ergebnisse der vier verschiedenen elektromechanischen Randbedingungen konvergieren gegen einen gemeinsamen Grenzwert. Dieser liegt zwischen den beiden Grenzwerten des linear elastischen Problems, wobei ein konstantes  $\mathbf{E}$  die bessere Näherung darstellt.  $u$ - $D$ -Randbedingungen liefern das steifste,  $t$ - $E$ -Randbedingungen das weichste Materialverhalten. Dies entspricht der in Abschnitt 3.6.3 hergeleiteten Schrankeneigenschaft (3.61) dieser Randbedingungskombinationen. Für das größte Modell mit 1728 Körnern beträgt der Unterschied zwischen

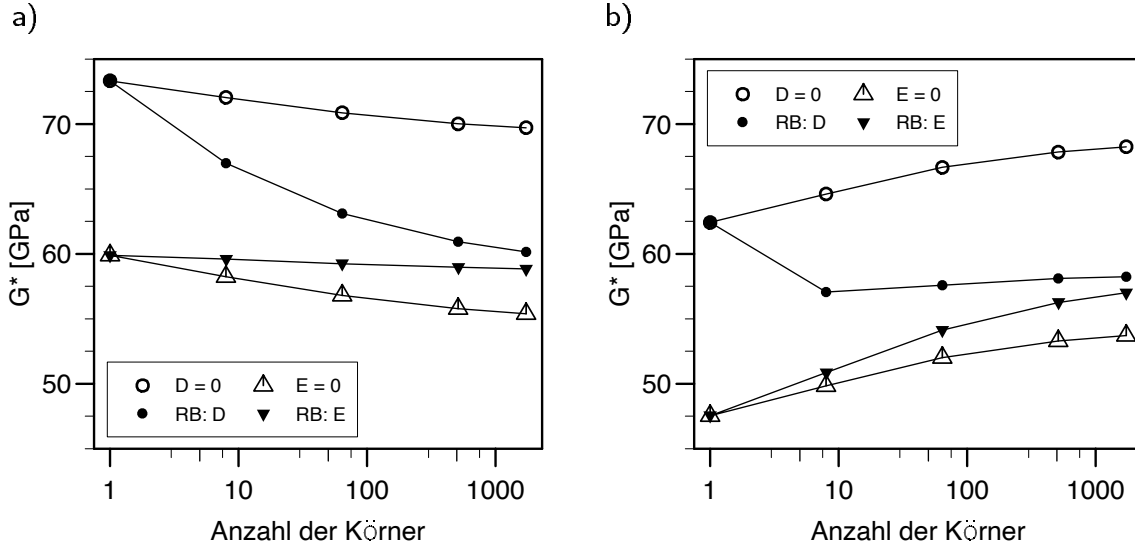


Abbildung 5.15: Effektiver Gleitmodul  $G^*$  für Potenzial- (RB:  $E$ ) und dielektrische Randbedingungen (RB:  $D$ ) sowie für rein elastisches Randwertproblem mit  $E = 0$  und  $D = 0$  in Abhängigkeit von der Anzahl der Körner. a) Verschiebungs- und b) Spannungsrandbedingungen.

diesen beiden Ergebnissen 3.1 GPa. Für das gleiche Modell ist bei der rein elastischen Rechnung der Unterschied zwischen Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen mit 1.7 GPa (für konstantes  $E$ ) bzw. 1.5 GPa (konstantes  $D$ ) etwa halb so groß. Die Konvergenz erfolgt also bei elektromechanischen Randbedingungen deutlich langsamer als bei rein mechanischen Randbedingungen.

### Dielektrisches Verhalten

Die effektive Dielektrizitätskonstante  $\kappa^*$  kann analog zu den effektiven elastischen Eigenschaften mit vier verschiedenen mechanischen Zuständen berechnet werden: das rein dielektrische Problem mit  $\epsilon = \mathbf{0}$  und  $\sigma = \mathbf{0}$  im ganzen Volumenelement und das piezoelektrisch gekoppelte Problem mit Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen.

In Abbildung 5.16a ist  $\kappa^*$  für Potenzialrandbedingungen und in Abbildung 5.16b für dielektrische Randbedingungen aufgetragen. Es ergibt sich ein zum elastischen Fall analoges Bild. Die beiden Grenzwerte des rein dielektrischen Problems für konstantes  $\sigma$  und konstantes  $\epsilon$  weichen stark voneinander ab. Der Grenzwert des piezoelektrisch gekoppelten Problems liegt dazwischen, wobei konstantes  $\epsilon$  die bessere Näherung darstellt.  $u$ - $D$ -Randbedingungen liefern die niedrigste,  $t$ - $E$ -Randbedingungen die höchste Dielektrizität entsprechend Ungleichung (3.61). Die relative Abweichung von 14.8% zwischen diesen

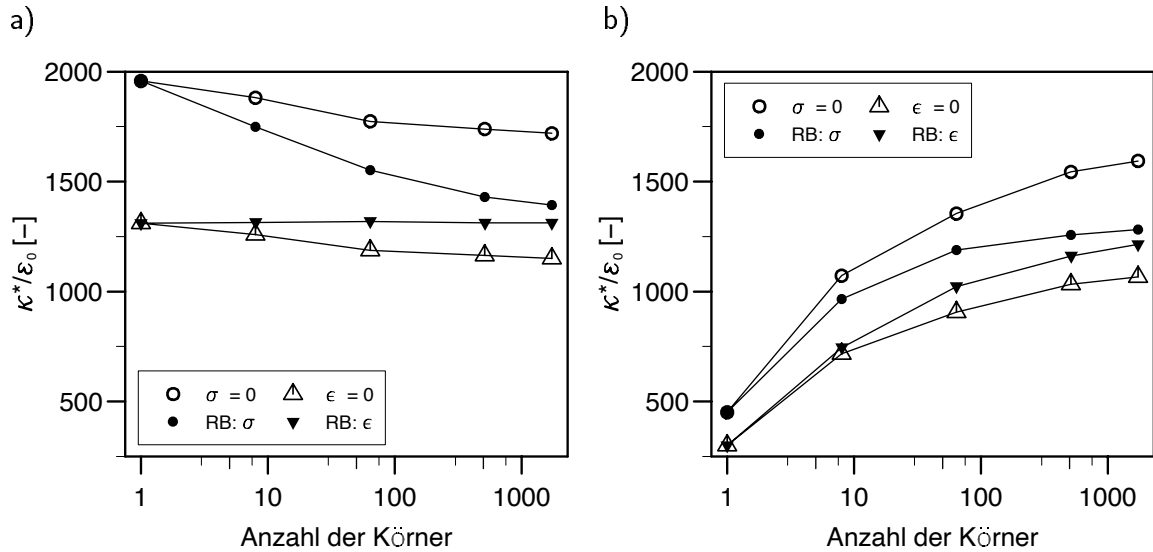


Abbildung 5.16: Effektive dielektrische Konstante  $\kappa^*$  für Verschiebungs- (RB:  $\epsilon$ ) und Spannungsrandbedingungen (RB:  $\sigma$ ) sowie für rein dielektrisches Randwertproblem mit  $\epsilon = 0$  und  $\sigma = 0$  in Abhängigkeit von der Anzahl der Körner. a) Potenzial- und b) dielektrische Randbedingungen.

elektromechanischen Randbedingungen für das größte Modell ist verglichen mit den 5.5 % von  $G^*$  fast dreimal so hoch. Die Wahl der Randbedingungen beeinflusst demnach die effektive Dielektrizität deutlich stärker als die effektive Elastizität.

Diese Rechnungen belegen die Notwendigkeit, die piezoelektrische Kopplung auf der Mikroebene zu berücksichtigen. Selbst für den isotropen Zustand, der keine makroskopische Piezoelektrizität zeigt, beeinflusst die mikroskopische Piezoelektrizität der Körner die effektiven Eigenschaften. Dies ist im Prinzip nicht überraschend und wurde qualitativ bereits von MARUTAKE [56] festgestellt.

In den Abbildungen 5.15 und 5.16 fällt weiter auf, dass für  $u$ - $E$ -Randbedingungen das effektive elastische und dielektrische Materialverhalten nahezu unabhängig von der Größe des Volumenelements ist. Deshalb wird diese Randbedingungskombination für die weiteren Berechnungen verwendet.

### Vergleich mit analytischen Ergebnissen

Zum Vergleich mit den analytischen Methoden aus Abschnitt 3.9 werden nur die Ergebnisse für das größte Volumenelement mit 1728 Körnern betrachtet. Wie in Abbildung 5.17 zu sehen ist, liegt der effektive Gleitmodul  $G^*$  der numerischen Simulationen für die beiden rein elastischen Probleme innerhalb der Voigt-Reuss-Grenzen. Das obere bzw.

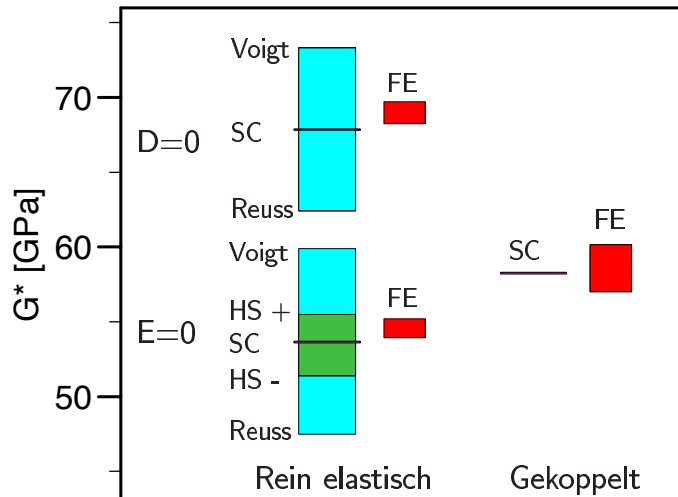


Abbildung 5.17: Analytische Grenzen von Voigt/Reuss und Hashin-Shtrikman (HS) sowie Selbstkonsistente Methode (SC) für elastisches Materialverhalten mit  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  und  $\mathbf{D} = \mathbf{0}$  im RVE. Selbstkonsistente Methode für piezoelektrisch gekoppeltes Materialverhalten. FE-Ergebnisse mit 3D-RVE.

untere Balkenende stellt dabei das Ergebnis für Verschiebungs- bzw. Spannungsrandbedingungen dar. Für konstantes  $\mathbf{E}$  liegt  $G^*$  auch innerhalb der Hashin-Shtrikman-Grenzen, wobei die obere Grenze die bessere Näherung darstellt. Dies wurde bereits für den effektiven E-Modul  $E^*$  des 2D-Modells (siehe Abbildung 5.7) festgestellt. Für konstantes  $\mathbf{D}$  sind die Hashin-Shtrikman-Grenzen nicht in der Literatur tabelliert. In beiden Fällen liefert die ungekoppelte Selbstkonsistente Methode mit kugelförmigen Körnern einen etwas niedrigeren Wert für  $G^*$ .

Ebenfalls in Abbildung 5.17 eingetragen ist der effektive Gleitmodul  $G^*$  der piezoelektrisch gekoppelten Simulationen für  $u$ - $D$ -Randbedingungen (oberes Balkenende) und  $t$ - $E$ -Randbedingungen (unteres Balkenende). OLSON & AVELLANEDA [69] berechneten mit der gekoppelten Selbstkonsistenten Methode ein  $G^*$ , das innerhalb dieser beiden Werte liegt. Die gute Übereinstimmung mit den analytischen Ergebnissen bestätigt die Korrektheit der gewählten Modellierung und der Methode zur Bestimmung der effektiven elektromechanischen Eigenschaften.

### Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

Ein Vergleich mit experimentellen Messungen an polykristallinen Piezokeramiken ist prinzipiell problematisch. Zum einen gibt es deutliche Unterschiede in den Messungen der Materialparameter an Bariumtitanat-Einkristallen [5],[97]. Zudem ist der Einfluss

der herstellungsbedingten Porosität groß [3]. Für eine vollständig porenfreie, ungepolte Bariumtitanat-Keramik sind keine experimentellen Ergebnisse in der Literatur verfügbar. Bei einer Porosität von 4.2 % wurde ein Gleitmodul  $G^* = 49.8$  GPa gemessen [19]. Dieser Wert liegt, wie zu erwarten, deutlich unterhalb der Ergebnisse der numerischen Simulation. DUNN [19] schätzte durch Anwendung eines Mori-Tanaka-Modells die Reduktion des Gleitmoduls der Selbstkonsistenten Methode aufgrund der vorliegenden Porosität ab. Für diesen reduzierten Gleitmodul zeigt sich, bei geeigneter Annahme über die Form der Poren, eine gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Ergebnis.

### 5.3.2 Elektrische Belastung

Nachdem der isotrope Zustand der Piezokeramik ausführlich diskutiert wurde, widmen wir uns nun dem effektiven Verhalten nach einer elektrischen Polung. Das Modell zur Beschreibung der Orientierungsverteilung wurde in Abschnitt 4.3.1 vorgestellt. Der kritische Orientierungswinkel  $\theta_E$  beschreibt dabei den Grad der Ausrichtung der spontanen Polarisation. Aufgrund der Einachsigkeit der Belastung sind die effektiven Materialtensoren transversal isotrop.

#### Elastisches Verhalten

Abbildung 5.18a zeigt den effektiven Elastizitätsmodul  $E_3^*$  in Polungsrichtung und  $E_1^*$  senkrecht zur Polungsrichtung in Abhängigkeit des Winkels  $\theta_E$ . Zur numerischen Simulation wurde ein zweidimensionales Volumenelement mit 1000 Körnern unter  $u$ - $E$ -Randbedingungen und zwei Realisierungen der Orientierungsverteilung verwendet.

Für den ungepolten Ausgangszustand ( $\theta_E = \pi$ ) ergibt sich wegen der begrenzten Anzahl an Körnern im Modell eine schwache Anisotropie. Mit abnehmendem  $\theta_E$  bleibt das elastische Materialverhalten zunächst annähernd isotrop. Der Grund hierfür ist, dass für  $\theta_E > 3\pi/4$  nur 180°-Umklappen auftreten kann. Dabei verändern sich die lokalen piezoelektrischen Tensoren  $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ , nicht aber die Elastizitätstensoren  $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ . Dies hat nur einen geringen Einfluss auf die effektive Elastizität. Erst wenn für  $\theta_E \leq 3\pi/4$  auch 90°-Umklappvorgänge stattfinden können, kommt es zu einer stark zunehmenden elastischen Anisotropie. Für den vollständig ausgerichteten Polykristall ( $\theta_E = \pi/4$ ) wird

$$E_1^* = 190 \text{ GPa} \quad , \quad E_3^* = 119 \text{ GPa}$$

vorhergesagt. Dies sind auch die maximalen bzw. minimalen E-Moduln. Das elastische Verhalten von vollständig gepolten Bariumtitanat-Keramiken ist demnach stark anisotrop.

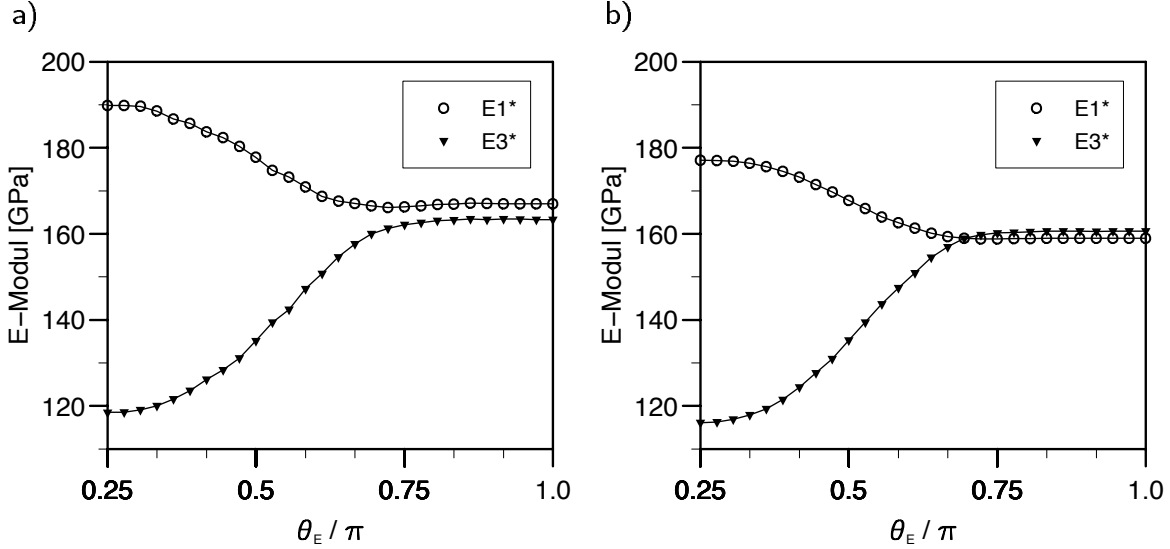


Abbildung 5.18: Effektive transversal isotrope E-Moduln für elektrisch gepolten Zustand in Abhängigkeit vom kritischen Winkel  $\theta_E$  bei a) einem 2D-Volumenelement und b) einem 3D-Volumenelement.

Im Vergleich mit dem Einkristall in (2.14), bei dem  $E_{\max}^{EK}$  mehr als dreimal so groß ist wie  $E_{\min}^{EK}$ , ist die Anisotropie beim Polykristall jedoch deutlich geringer.

In Abbildung 5.18b sind zum Vergleich die Ergebnisse für ein dreidimensionales Volumenelement mit 1728 Körnern aufgetragen. Es zeigt sich, dass der ebene Dehnungszustand etwas steifere Ergebnisse liefert als das 3D-Modell, wie bereits für den elastischen Fall in Abbildung 5.11 beobachtet wurde. Ansonsten existieren beim Polungsverhalten keine bemerkenswerten Unterschiede, die Abweichung zwischen  $E_1^*$  und  $E_3^*$  ist beim 3D-Modell geringfügig kleiner. Im Weiteren wird deshalb nur noch das ebene Modell betrachtet.

Der effektive E-Modul ist in Abbildung 5.19a in Abhängigkeit von der remanenten Polarisation dargestellt. Es wurde hierzu der Zusammenhang zwischen  $\theta_E$  und  $P_3^R$  aus Abbildung 4.12a verwendet. Für  $P_3^R \leq 0.35P^S$  gilt  $E_1^* \approx E_3^*$ . Eine schwach gepolte Piezokeramik kann demnach durchaus ein isotropes elastisches Verhalten zeigen. Die Anisotropie setzt erst bei größerer remanenter Polarisation ein.

Der Verlauf der effektiven Gleitmoduln bei der Polung ist in Abbildung 5.19b zu sehen. Hierbei bezeichnet  $G_{12}^*$  den Gleitmodul senkrecht zur Polungsrichtung und  $G_3^*$  den Gleitmodul in einer Ebene, welche die Polungsrichtung einschließt. Es zeigt sich ein qualitativ ähnliches Verhalten wie beim effektiven E-Modul. Für den vollständig gepolten Zustand ist  $G_{12}^*$  etwa 50% größer als  $G_3^*$ .

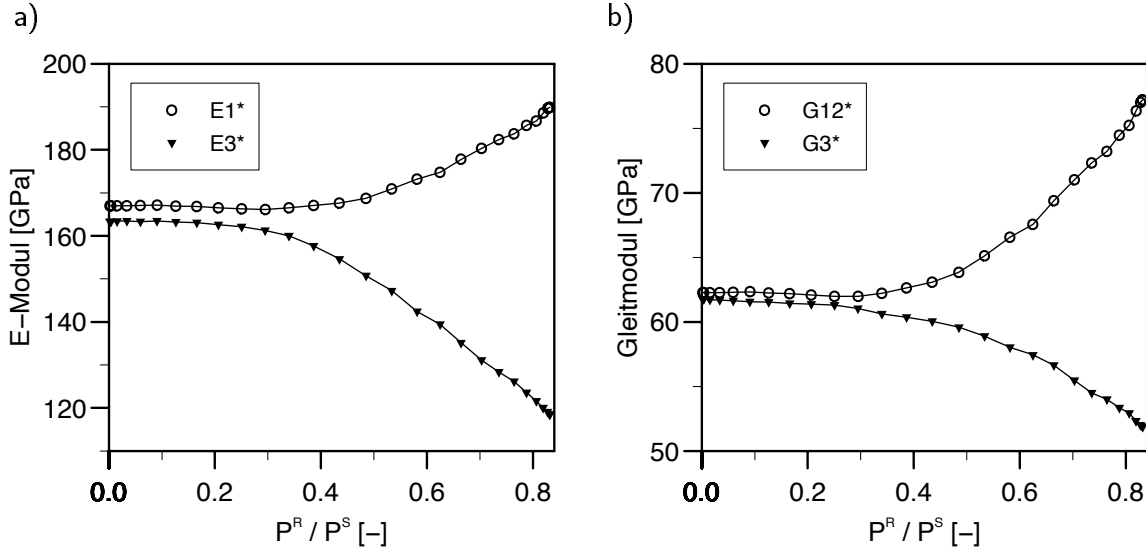


Abbildung 5.19: Effektive a) E-Moduln und b) Gleitmoduln für elektrisch gepolten Zustand in Abhängigkeit von der remanenten Polarisation  $P_3^R/P^S$ .

Mit einer Selbstkonsistenten Methode wird von RÖDEL & KREHER [76] ein etwas steiferes Materialverhalten vorhergesagt. Dies kann vermutlich mit der Abweichung in den zugrunde gelegten Einkristallparametern [97] begründet werden (vgl. Tabelle 5.7). Für große Polungsgrade ergibt sich ebenfalls  $E_1^* > E_3^*$ . Die in [76] gefundene nichtmonotone Abhängigkeit der effektiven elastischen Moduln für kleine Polungsgrade bestätigt sich jedoch mit dem in dieser Arbeit verwendeten Modell nicht.

Experimentelle Messungen von XU [96] an gepolten Bariumtitanat-Keramiken liefern  $E_1 = 117$  GPa und  $E_3 = 112$  GPa. Die niedrige Anisotropie lässt durch Vergleich mit den Ergebnissen aus Abbildung 5.18 auf einen niedrigen Polungsgrad in dem realen Material schließen. Ein niedriger Polungsgrad kann auch mit der Existenz einer Domänenstruktur in den Körnern begründet werden, die Ausrichtung der Domänen erfolgt dann nicht vollständig. Poren und Mikrorisse erklären zumindest zum Teil die deutlich höhere vorhergesagte Steifigkeit [19]. Abweichungen werden zudem durch die Vernachlässigung der (reversiblen) Domänenwandbewegung in diesem Modell verursacht.

### Dielektrisches Verhalten

Wie in Abbildung 5.20a zu sehen ist, zeigt sich eine anisotrope Dielektrizität ebenfalls erst ab einer remanenten Polarisation von etwa  $P_3^R = 0.35P^S$ . Da der lokale Dielektrizitätstensor  $\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x})$  beim  $180^\circ$ -Umklappen unverändert bleibt, sind bis zu diesem Polungsgrad der effektive Dielektrizitätsmodul  $\kappa_{33}^*$  in Polungsrichtung und  $\kappa_{11}^*$  senkrecht zur Polungs-



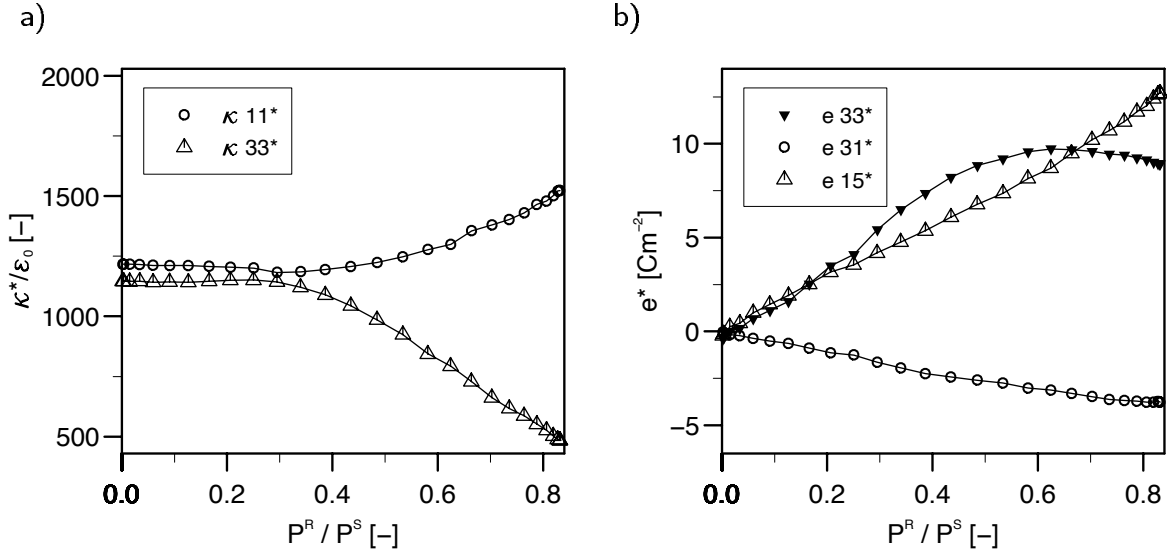


Abbildung 5.20: Effektive a) dielektrische und b) piezoelektrische Moduln für elektrisch gepolten Zustand in Abhängigkeit von der remanenten Polarisation.

richtung nahezu gleich. Bei einer weiteren Zunahme der Polarisation zeigt sich eine starke Anisotropie. Im vollständig ausgerichtetem Zustand ist

$$\kappa_{11}^* = 1520\epsilon_0 \quad , \quad \kappa_{33}^* = 485\epsilon_0 \quad .$$

Damit beträgt die Dielektrizität in Polungsrichtung nur etwa ein Drittel der Dielektrizität senkrecht dazu. Man sieht, dass bei gepolten Bariumtitanat-Keramiken das dielektrische Verhalten deutlich anisotroper als das elastische Verhalten ist. Dies ist aufgrund der höheren Anisotropie beim Einkristall nicht verwunderlich. Der Vergleich mit der Selbstkonsistenten Methode von RÖDEL & KREHER [76] ergibt ähnliche Unterschiede wie für das elastische Verhalten.

### Piezoelektrisches Verhalten

Die Abhängigkeit der effektiven Piezoelektrizität einer Piezokeramik vom Grad der Polarisation ist von besonderem Interesse. In Abbildung 5.20b sind die piezoelektrischen Moduln  $e_{33}^*$ ,  $e_{31}^*$  und  $e_{15}^*$  aufgetragen (Zur Bedeutung dieser Parameter siehe Anhang A).

Im isotropen Zustand gibt es offensichtlich keine makroskopische Piezoelektrizität. Mit zunehmender Polung steigt  $e_{33}^*$  zunächst bis zu einem Maximalwert von  $9.7 \text{ C/m}^2$  bei  $P_3^R = 0.6P^S$ , danach fällt  $e_{33}^*$  wieder leicht ab.  $e_{15}^*$  hängt nahezu linear von der remanenten Polarisation ab.  $e_{31}^*$  fällt in erster Näherung ebenfalls linear. Für den vollständig gepolten

Zustand liefert die FE-Simulation die Werte

$$e_{33}^* = 8.9 C/m^2 \quad , \quad e_{15}^* = 12.7 C/m^2 \quad , \quad e_{31}^* = -3.8 C/m^2 \quad .$$

Im Vergleich zu den Einkristallwerten ( $e_{33} = 3.655 C/m^2$ ,  $e_{15} = 21.30 C/m^2$ , siehe Tabelle 2.1) ist  $e_{33}^*$  für den gepolten Polykristall wesentlich höher und  $e_{15}^*$  wesentlich niedriger. Der qualitative Verlauf der piezoelektrischen Moduln in [76] ist, außer für sehr große Werte der remanenten Polarisation, ähnlich.

Bei einer remanenten Polarisation zwischen  $0.2P^S$  und  $0.7P^S$  liefern die Rechnungen Werte mit  $e_{33}^* > e_{15}^*$ . Das ist auch der Fall für die experimentellen Messungen an gepolten Bariumtitanat-Keramiken ( $e_{33}^* = 18.6 C/m^2$ ,  $e_{15}^* = 11.6 C/m^2$ , siehe [96]). Folglich ist dies ein Anzeichen dafür, dass Werte von  $P_3^R$  in diesem Bereich eher der Realität entsprechen, da nicht zu vermuten ist, dass durch Porosität die Reihenfolge der piezoelektrischen Moduln verändert wird. Zusammen mit dem Vergleich des elastischen Verhaltens deutet dies auf eine nicht vollständig erfolgte Polung in der realen Bariumtitanat-Keramik mit Domänenstruktur hin.

In dem nichtlinearen elektromechanischen Materialmodell von KAMLAH [44] wird eine einfache lineare Abhängigkeit der piezoelektrischen Moduln von der remanenten Polarisation angenommen. Man sieht, dass dies für  $e_{15}^*$  und  $e_{31}^*$  eine gute Näherung darstellt. Für  $e_{33}^*$  könnte jedoch bei einer genaueren Modellierung ein anderer Zusammenhang gewählt werden, falls Werte von  $P_3^R > 0.5P^S$  auftreten.

### 5.3.3 Zugbelastung

Das Modell der Polarisationsverteilung für Zugbelastung einer zunächst isotropen Piezokeramik wurde in Abschnitt 4.3.2 vorgestellt. Offensichtlich sind die effektiven piezoelektrischen Moduln alle null, da durch eine mechanische Belastung keine (makroskopische) Piezoelektrizität induziert werden kann. Zunächst ist zu erwarten, dass sich ein ähnliches elastisches und dielektrisches Verhalten wie bei elektrischer Polung ergibt. In beiden Fällen erfolgt das Umklappen zu der kristallographischen Achse, die den kleinsten Winkel mit der Belastungsachse einschließt. Bei der elektrischen Polung existiert jedoch eine Vorzugsrichtung für die spontane Polarisation, die Polungsrichtung. Dadurch entstehen unterschiedliche Verteilungen der piezoelektrischen Moduln in den Körnern.

#### Elastisches Verhalten

Abbildung 5.21a zeigt die effektiven E-Moduln in Abhängigkeit von der remanenten Deh-

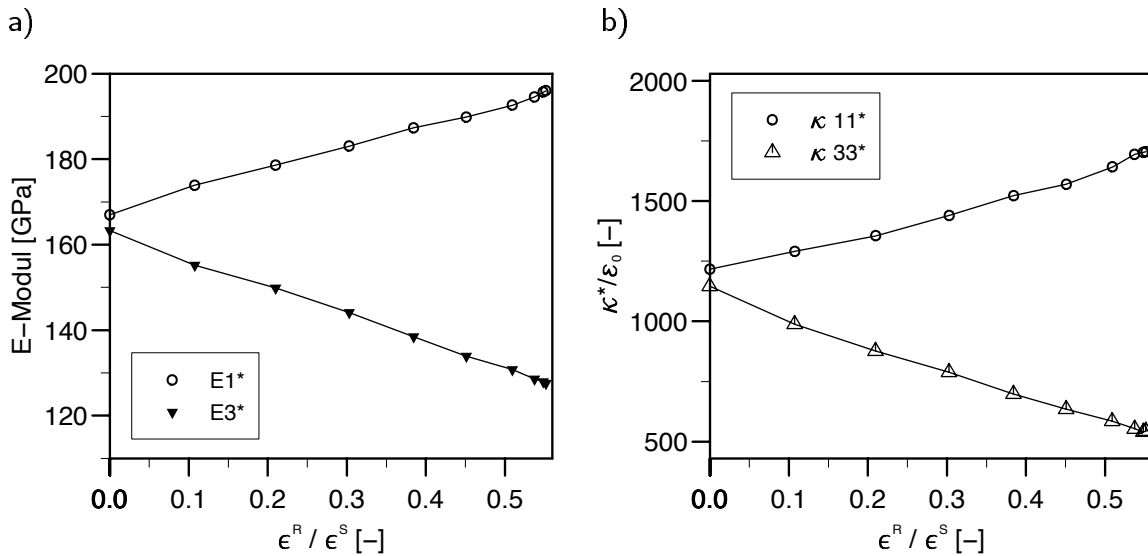


Abbildung 5.21: Effektive a) elastische und b) dielektrische Moduln nach Zugbelastung in Abhängigkeit von der remanenten Dehnung.

nung in Belastungsrichtung. Dabei wurden äquidistante Werte des kritischen Orientierungswinkels  $\theta_Z$  vorgegeben und der Zusammenhang zwischen  $\theta_Z$  und  $\epsilon_{33}^R$  aus Abschnitt 4.3.3 verwendet.

Für  $E_1^*$  und  $E_3^*$  zeigt sich eine nahezu lineare Abhängigkeit von der remanenten Dehnung. Dies stellt keinen prinzipiellen Unterschied zur elektrischen Belastung dar, da in Abbildung 5.19a die Abhängigkeit von der remanenten Polarisation aufgetragen ist. Es ergibt sich jedoch ein steiferes Materialverhalten. So sind im maximal ausgerichteten Fall  $E_1^*$  um etwa 6 GPa bzw.  $E_3^*$  um etwa 9 GPa größer als bei elektrischer Polung in Abbildung 5.19a. Dies entspricht einem prozentualen Unterschied von 3 % bzw. 7 %.

Die entgegengesetzte Ausrichtung der Körner bei Zugbelastung führt also im Vergleich mit der elektrischen Belastung zu einem Steifigkeitszuwachs. Da sich die beiden Zustände nur in den piezoelektrischen Moduln der Körner unterscheiden, ist dieses Ergebnis ein weiteres Indiz für den Einfluss der lokalen piezoelektrischen Kopplung auf die makroskopischen elastischen Eigenschaften.

### Dielektrisches Verhalten

Auch die dielektrischen Moduln hängen näherungsweise linear von der remanenten Dehnung ab, wie in Abbildung 5.21b zu sehen ist. Im Vergleich zur elektrischen Belastung erhält man einen um etwa  $180\epsilon_0$  höheren Wert von  $\kappa_{11}^*$  und einen um  $60\epsilon_0$  höheren Wert von  $\kappa_{33}^*$ , was jeweils einen prozentualen Unterschied von 16 % bzw. 12 % darstellt. Das

unterschiedliche piezoelektrische Verhalten der Körner beeinflusst also ebenfalls die makroskopische Dielektrizität.

### 5.3.4 Druckbelastung

Das Modell der Polarisationsverteilung für die Druckbelastung einer zunächst isotropen Piezokeramik ist in Abschnitt 4.3.2 beschrieben. Wie auch unter Zug wird dabei keine makroskopische Piezoelektrizität induziert. Im Unterschied zur Zugbelastung erfolgt die Ausrichtung der Einheitszellen senkrecht zur Belastung. Deshalb wird eine Darstellung in Abhängigkeit von der negativen remanenten Dehnung in Belastungsrichtung gewählt.

#### Elastisches Verhalten

Aus Abbildung 5.22a ist zu erkennen, dass im Unterschied zur Zug- und elektrischen Belastung der effektive E-Modul  $E_3^*$  größer ist als  $E_1^*$ . Dies liegt an dem Ausrichtungsverhalten senkrecht zur Belastungsrichtung. Weiter fällt auf, dass die Abhängigkeit von  $E_3^*$  und  $\epsilon_{33}^R$  nichtlinear ist. Im maximal ausgerichteten Fall entspricht das Ergebnis  $E_3^* = 190$  GPa dem Wert von  $E_1^*$  bei elektrischer Polung in Abbildung 5.18a.

Besonders interessant ist der E-Modul senkrecht zur Belastungsrichtung  $E_1^* = 144$  GPa. Dieser Wert liegt deutlich höher als der minimale E-Modul  $E_3^* = 119$  GPa bei vollständiger elektrischer Polung und  $E_3^* = 128$  GPa nach Zugbelastung. Da die spontane Polarisation in alle Richtungen senkrecht zur Belastungsachse ausgerichtet ist, wird  $E_1^*$  durch das Einkristallverhalten sowohl in Richtung der spontanen Polarisation als auch senkrecht dazu bestimmt (vgl. Abbildung 4.11b). Dies erklärt, dass  $E_1^*$  nach Druckbelastung zwischen dem minimalen und dem maximalen E-Modul nach elektrischer Polung liegt. Insgesamt stellt man fest, dass eine Bariumtitanat-Keramik nach einer Druckbelastung das steifste Materialverhalten aufweist.

#### Dielektrisches Verhalten

Für die effektiven Dielektrizitätskonstanten ist die Reihenfolge ebenfalls entgegengesetzt zur Zugbelastung (siehe Abbildung 5.22b). Im vollständig ausgerichtetem Fall wird als höchster Wert  $\kappa_{33}^* = 1970\epsilon_0$  beobachtet.  $\kappa_{11}^*$  sinkt mit zunehmendem Grad der Ausrichtung erstaunlicherweise nur geringfügig und bleibt oberhalb von  $1000\epsilon_0$ . Ein Vergleich mit Abbildung 5.20a zeigt, dass dieser Wert fast doppelt so hoch wie die Dielektrizitätskonstante  $\kappa_{33}^* = 485\epsilon_0$  nach vollständiger elektrischer Polung ist.

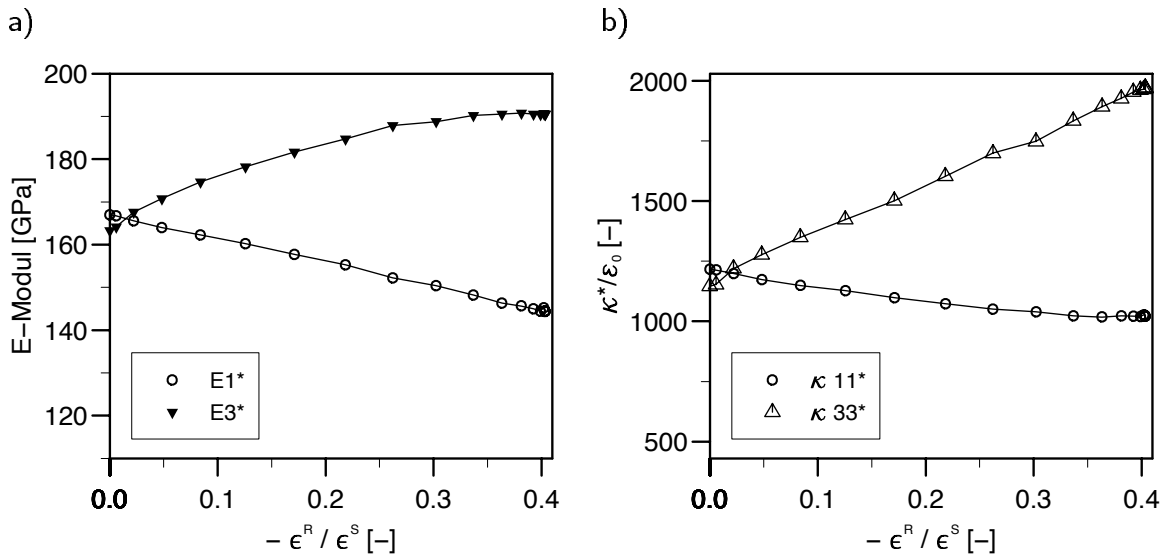


Abbildung 5.22: Effektive a) elastische und b) dielektrische Moduln nach Druckbelastung in Abhängigkeit von der negativen remanenten Dehnung.

Auch hier kann als Erklärung angeführt werden, dass in eine Richtung senkrecht zur Druckachse sowohl die  $c$ -Achse als auch die  $a$ -Achse der Einheitszelle (siehe Abbildung 2.1) eines Kristallits liegen kann. Das dielektrische Verhalten des Polykristalls nach Druckbelastung in  $x_1$ -Richtung setzt sich also aus Beiträgen von  $\kappa_{11}$  und  $\kappa_{33}$  des Einkristalls zusammen. Deshalb ist ein Wert von  $\kappa_{33}^*$  bei Druckbelastung zwischen  $\kappa_{11}^*$  und  $\kappa_{33}^*$  bei Zugbelastung plausibel.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit ist die Berechnung effektiver Materialeigenschaften piezoelektrischer Polykristalle mit Hilfe eines mikromechanischen Modells.

Bei der gewählten mikromechanischen Modellierung wird die heterogene Mikrostruktur, im Unterschied zu analytischen Verfahren, direkt mit einem endlichen Volumenelement beschrieben. Die elektromechanischen Feldgleichungen werden im dreidimensionalen Fall für ein Randbedingungssystem, bestehend aus neun linear unabhängigen Randbedingungen, gelöst. Aus den Volumenmittelwerten der lokalen Felder lassen sich die anisotropen effektiven Materialtensoren vollständig berechnen. Für die wichtigen Fälle einer makroskopischen Isotropie und transversalen Isotropie wurde ein Berechnungsschema zur Bestimmung effektiver (transversal) isotroper elastischer, dielektrischer und piezoelektrischer Parameter angegeben.

Anschließend wurde das Modell des piezoelektrischen Polykristalls vorgestellt. Voronoi-Mosaik stellen dabei die unregelmäßige Geometrie der Kornstruktur dar. Durch Variation des zugrunde gelegten Punktprozesses können die statistischen Eigenschaften des Mosaiks an die Geometrie des realen Polykristalls angepasst werden. Ein in dieser Arbeit entwickelter Algorithmus ermöglicht die automatische Vernetzung eines Voronoi-Mosaiks für die Finite-Elemente-Analyse.

Eine isotrope Orientierungsverteilung der kristallographischen Achsen der einzelnen Körner beschreibt die isotrope, ungepolte Piezokeramik. Ausgehend von diesem Zustand wird die durch Umklappprozesse veränderte Verteilung der spontanen Polarisation mit Polungsrichtungsfunktionen modelliert. Die drei behandelten Belastungsarten sind Polung durch ein äußeres elektrisches Feld oberhalb der Koerzitivfeldstärke sowie einachsige Zug- und Druckbelastung oberhalb der Koerzitivspannung. Dabei wird die tetragonale Kri-

stallsymmetrie von Bariumtitanat explizit berücksichtigt. Der Grad der Ausrichtung der spontanen Polarisierung kann jeweils durch einen Parameter variiert werden.

Mit numerischen Simulationen wurden zunächst die lokal fluktuierenden Felder innerhalb des Volumenelements untersucht. Es zeigt sich für das elektrische Feld eine höhere Streuung als für die Spannungen. Im Allgemeinen genügt es, sich auf ein Voronoi-Mosaik zu beschränken, hingegen sollten mehrere Realisierungen der Orientierungsverteilung betrachtet werden. Die benötigte Größe des Volumenelements kann mit Hilfe eines Anisotropiefaktors abgeschätzt werden. Zur Berechnung effektiver Eigenschaften sollte bei einer zweidimensionalen Modellierung der Ebene Dehnungszustand verwendet werden.

Für das elektromechanisch gekoppelte Problem zeigt sich in Übereinstimmung mit der Theorie, dass die Kombination aus Verschiebungs- und dielektrischen Randbedingungen die höchste effektive Steifigkeit und die niedrigste effektive Dielektrizität liefert. Die Kombination aus Spannungs- und Potenzialrandbedingungen stellt den anderen Grenzfall dar. Der Einfluss der Randbedingungen reduziert sich mit zunehmender Größe des Volumenelements. Im isotropen Zustand kann eine gute Übereinstimmung mit der gekoppelten selbstkonsistenten Methode festgestellt werden.

Für die drei Belastungszustände wurden die transversal isotropen effektiven Materialparameter in Abhängigkeit vom Grad der Ausrichtung der spontanen Polarisierung berechnet. Bei elektrischer Polung ergibt sich eine größere Anisotropie in der Dielektrizität als in der Elastizität. Ein Vergleich der effektiven piezoelektrischen Moduln mit experimentellen Werten für gepolte Bariumtitanat-Keramik lässt auf eine nicht vollständig erfolgte Ausrichtung der Polarisierung schließen. Für Zugbelastung stellt sich eine lineare Abhängigkeit der effektiven Parameter von der remanenten Dehnung heraus. Unter Druckbelastung wird das steifste Materialverhalten und die höchste Dielektrizität beobachtet.

Mit dem entwickelten mikromechanischen Modell lässt sich im Prinzip auch nichtlineares Verhalten simulieren. Dazu müssen die remanente Dehnung und die remanente Polarisierung bei der Finite-Elemente-Analyse berücksichtigt werden. Bei Erhöhung der Belastung können die Umklappprozesse wie in dieser Arbeit beschrieben modelliert werden. Der vorliegende FE-Code ist hierzu jedoch derzeit nicht in der Lage.

# Anhang A

## Materialtensoren der Piezoelektrizität

Es gibt vier verschiedene Darstellungsarten der linear piezoelektrischen Gleichungen, je nachdem welche Feldvariablen als unabhängig gewählt werden. Folgende drei Darstellungsarten werden in dieser Arbeit verwendet:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & -\mathbf{e}^T \\ \mathbf{e} & \boldsymbol{\kappa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} \quad (\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{E} \text{ unabhängig}) \quad , \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon} \\ \mathbf{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{D} & \mathbf{d}^T \\ \mathbf{d} & {}^o\boldsymbol{\kappa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} \quad (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E} \text{ unabhängig}) \quad , \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^D\mathbf{C} & \mathbf{h}^T \\ \mathbf{h} & \boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon} \\ \mathbf{D} \end{pmatrix} \quad (\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D} \text{ unabhängig}) \quad . \quad (\text{A.3})$$

Die Materialparameter in Gleichung (A.2) und (A.3) können aus den Parametern in Gleichung (A.1) unter Berücksichtigung der Inversionsvorschrift für Tensoren vierter Stufe [65] umgerechnet werden

$$\mathcal{D} = \mathbf{C}^{-1} \quad , \quad {}^o\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa} + \mathbf{e} : \mathbf{C}^{-1} : \mathbf{e}^T \quad , \quad \mathbf{d} = \mathbf{e} : \mathbf{C}^{-1} \quad , \quad (\text{A.4})$$

$${}^D\mathbf{C} = \mathbf{C} + \mathbf{e}^T \cdot \boldsymbol{\kappa}^{-1} \cdot \mathbf{e} \quad , \quad \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\kappa}^{-1} \quad , \quad \mathbf{h} = -\boldsymbol{\kappa}^{-1} \cdot \mathbf{e} \quad . \quad (\text{A.5})$$

Der Elastizitätstensor  $\mathbf{C}$ , der Dielektrizitätstensor  $\boldsymbol{\kappa}$  und der piezoelektrische Kopplungstensor  $\mathbf{e}$  bestehen im allgemeinen anisotropen Fall aus 21, 6 bzw. 18 unabhängigen Komponenten und besitzen die Symmetrieeigenschaften

$$\mathcal{C}_{ijkl} = \mathcal{C}_{ijlk} = \mathcal{C}_{klij} \quad , \quad \kappa_{ij} = \kappa_{ji} \quad , \quad e_{ijk} = e_{ikj} \quad . \quad (\text{A.6})$$



Aus dem Nachgiebigkeitstensor  $\mathcal{D}$  können richtungsabhängige Elastizitätsmoduln bestimmt werden. Der Elastizitätsmodul in Richtung  $\mathbf{r}$  mit  $\|\mathbf{r}\| = 1$  ist gegeben durch

$$E(\mathbf{r}) = r_i r_j r_k r_l \mathcal{D}_{ijkl} \quad . \quad (\text{A.7})$$

Der maximale und der minimale Elastizitätsmodul können dann definiert werden als

$$E_{\max} = \max_{\|\mathbf{r}\|=1} E(\mathbf{r}) \quad , \quad E_{\min} = \min_{\|\mathbf{r}\|=1} E(\mathbf{r}) \quad . \quad (\text{A.8})$$

Bei einer tetragonalen materiellen Symmetrie (z.B. Bariumtitanat-Einkristall) reduziert sich die Anzahl der unabhängigen elastischen Komponenten auf sechs. In Matrixschreibweise<sup>1</sup> hat  $\mathbf{C}$  dann die Form

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbb{C}_{11} & \mathbb{C}_{12} & \mathbb{C}_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{C}_{12} & \mathbb{C}_{11} & \mathbb{C}_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{C}_{13} & \mathbb{C}_{13} & \mathbb{C}_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbb{C}_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{C}_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{C}_{66} \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{A.9})$$

Die Materialtensoren  $\mathbf{e}$  und  $\mathbf{\kappa}$  besitzen drei bzw. zwei unabhängige Komponenten und können in der Form

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_{15} & 0 & 0 \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{31} & \epsilon_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

geschrieben werden. Zur Interpretation der piezoelektrischen Moduln: Ein elektrisches Feld der Stärke  $|\mathbf{E}|$  in  $x_3$ -Richtung erzeugt nach dem inversen Piezoeffekt bei festgehaltenem Rand eine Normalspannung  $\epsilon_{33}|\mathbf{E}|$  in Feldrichtung und eine Normalspannung  $\epsilon_{31}|\mathbf{E}|$  senkrecht zur Feldrichtung. Ein elektrisches Feld in  $x_1$ - bzw.  $x_2$ -Richtung erzeugt eine Schubspannung  $\epsilon_{15}|\mathbf{E}|$  in der  $x_1$ - $x_3$ -Ebene bzw. in der  $x_2$ - $x_3$ -Ebene.

Bei einer transversalen Isotropie mit der  $x_3$ -Achse als Symmetrieachse (z.B. gepolte Piezokeramik) gilt die zusätzliche Bedingung

$$\mathbb{C}_{66} = (\mathbb{C}_{11} - \mathbb{C}_{12})/2 \quad . \quad (\text{A.11})$$

---

<sup>1</sup>Beim Übergang von Tensor- zu Matrixschreibweise werden jeweils zwei Indizes von  $\mathcal{C}_{ijkl}$  und  $\mathcal{D}_{ijkl}$  sowie die hinteren zwei Indizes von  $e_{ijk}$ ,  $d_{ijk}$  und  $g_{ijk}$  nach folgendem Schema ersetzt: (11)  $\rightarrow$  (1); (22)  $\rightarrow$  (2); (33)  $\rightarrow$  (3); (23), (32)  $\rightarrow$  (4); (13), (31)  $\rightarrow$  (5); (12), (21)  $\rightarrow$  (6). Für die Tensoren der Darstellung (A.2) müssen zusätzliche Faktoren eingeführt werden:  $\mathbb{D}_{mn} = 2\mathcal{D}_{ijkl}$ , falls  $m \geq 4$  oder  $n \geq 4$ ;  $\mathbb{D}_{mn} = 4\mathcal{D}_{ijkl}$ , falls  $m \geq 4$  und  $n \geq 4$ ;  $d_{in} = 2d_{ijk}$ , falls  $n \geq 4$ .

Die Anzahl der unabhängigen elastischen Parameter reduziert sich demnach auf fünf. Aus der Nachgiebigkeitsmatrix erhält man eine andere Darstellung dieser Parameter:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1/E_1 & -\nu_{12}/E_1 & -\nu_3/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{12}/E_1 & 1/E_1 & -\nu_3/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_3/E_3 & -\nu_3/E_3 & 1/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/G_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{12} \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

mit der Beziehung

$$G_{12} = E_1 / (2(1 + \nu_{12})) \quad . \quad (\text{A.13})$$

Der Elastizitätsmodul ist in jede Richtung innerhalb der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene gleich und wird mit  $E_1$  bezeichnet. Die Poisson-Zahl und der Gleitmodul für zwei beliebige orthogonale Richtungen in dieser Ebene sind ebenfalls gleich und werden mit  $\nu_{12}$  bzw.  $G_{12}$  bezeichnet. Weiter ist  $E_3$  der Elastizitätsmodul in  $x_3$ -Richtung,  $\nu_3$  und  $G_3$  sind die Poisson-Zahl bzw. der Gleitmodul der  $x_3$ -Richtung mit einer beliebigen Richtung in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene.

Bei einer isotropen Symmetrie gibt es lediglich zwei unabhängige elastische Parameter. Zusammen mit Gleichung (A.13) gilt

$$E = E_1 = E_3 \quad , \quad G = G_{12} = G_3 \quad , \quad \nu = \nu_{12} = \nu_3 \quad . \quad (\text{A.14})$$

Der Dielektrizitätstensor  $\boldsymbol{\kappa}$  ist isotrop mit der Dielektrizitätskonstante  $\kappa = \kappa_{11} = \kappa_{33}$ . Der piezoelektrische Kopplungstensor  $\mathbf{e}$  verschwindet.

# Anhang B

## Ungleichungen für Tensoren

Eine symmetrische  $n \times n$ -Matrix  $\mathbf{A}$  heißt positiv definit bzw. positiv semidefinit, wenn

$$\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} > 0 \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \geq 0 \quad (\text{B.1})$$

für alle Vektoren  $\mathbf{x} \neq 0$  erfüllt ist. Damit können Ungleichungen zwischen symmetrischen Matrizen  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  im Sinne einer quadratischen Form definiert werden:

$$\mathbf{A} \leq \mathbf{B} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{B} - \mathbf{A} \text{ positiv semidefinit.} \quad (\text{B.2})$$

Aus  $\mathbf{A} \leq \mathbf{B}$  folgt insbesondere für die Diagonalelemente  $A_{ii} \leq B_{ii}$  (komponentenweise). Sind  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  beide positiv definit und besitzen sie eine gemeinsame Basis aus Eigenvektoren zu den Eigenwerten  $\lambda^{A,i}$  bzw.  $\lambda^{B,i}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , dann gilt

$$\mathbf{A} \leq \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \lambda^{A,i} \leq \lambda^{B,i} \quad (\text{B.3})$$

und

$$\mathbf{A} \leq \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{B}^{-1} \leq \mathbf{A}^{-1} \quad . \quad (\text{B.4})$$

Zur Formulierung von Ungleichungen symmetrischer Tensoren vierter Stufe wird die Matrixschreibweise verwendet (siehe Anhang A). Sind die Elastizitätsmatrizen  $\mathbf{C}^1$  und  $\mathbf{C}^2$  beide isotrop, dann besitzen sie eine gemeinsame Basis aus  $n = 6$  Eigenvektoren. Da  $\mathbf{C}^1$  und  $\mathbf{C}^2$  positiv definit sind, gelten für sie die Beziehungen (B.3) und (B.4).

Isotrope Dielektrizitätsmatrizen  $\boldsymbol{\kappa}^1$  und  $\boldsymbol{\kappa}^2$  erfüllen als positive Diagonalmatrizen ebenfalls die Voraussetzungen für diese Beziehungen.

Die elektromechanischen Materialtensoren in den Gleichungen (A.2) und (A.2) können als symmetrische Matrizen mit  $n = 9$  geschrieben werden. Speziell die Matrix in (A.2) ist entsprechend der Definition in (B.1) positiv definit, wenn

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}^T & \mathbf{y}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{D} & \mathbf{d}^T \\ \mathbf{d} & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} = \mathbf{x}^T \cdot \mathcal{D} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{y}^T \cdot {}^\sigma\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{y} + 2\mathbf{y}^T \cdot \mathbf{d} \cdot \mathbf{x} \geq 0 \quad (\text{B.5})$$

für alle Vektoren  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \neq \mathbf{0}$  erfüllt ist. Die sich daraus ergebende Ungleichung zwischen Matrizen

$$\begin{pmatrix} \mathcal{D}^1 & \mathbf{d}^{1,T} \\ \mathbf{d}^1 & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^1 \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} \mathcal{D}^2 & \mathbf{d}^{2,T} \\ \mathbf{d}^2 & {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

kann abkürzend in folgender Form geschrieben werden:

$$(\mathcal{D}^1, \mathbf{d}^1, {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^1) \leq (\mathcal{D}^2, \mathbf{d}^2, {}^\sigma\boldsymbol{\kappa}^2) \quad . \quad (\text{B.7})$$

Im isotropen Fall ist  $\mathbf{d} = \mathbf{0}$  und es ergibt sich eine Blockmatrix. Für die Untermatrizen  $\mathcal{D}$  und  ${}^\sigma\boldsymbol{\kappa}$  gelten Beziehungen analog zu (B.3) und (B.4).

# Anhang C

## Einflusstensoren

Bei dem linear elastischen Randwertproblem mit linearen Verschiebungsrandbedingungen (3.4) hängen die lokalen Felder  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  linear von dem konstanten Parameter  $\boldsymbol{\epsilon}^0$  ab:

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad , \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad . \quad (\text{C.1})$$

Dabei ist  $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x})$  der vierstufige Einflusstensor. Wegen

$$\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle = \langle \boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle : \boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle : \langle \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle^{-1} : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle \quad (\text{C.2})$$

und der Definition des effektiven Elastizitätstensors durch Gleichung (3.3) kann  $\boldsymbol{\mathcal{C}}^{*u}$  dargestellt werden als

$$\boldsymbol{\mathcal{C}}^{*u} = \langle \boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle : \langle \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle^{-1} \quad . \quad (\text{C.3})$$

Unter Verwendung des Average Strain Theorems (3.7) gilt  $\langle \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle = \boldsymbol{\mathcal{I}}$ . Dann kann  $\boldsymbol{\mathcal{C}}^{*u}$  vereinfacht als der mit  $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x})$  gewichtete Mittelwert von  $\boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x})$  geschrieben werden [80]:

$$\boldsymbol{\mathcal{C}}^{*u} = \langle \boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \rangle \quad . \quad (\text{C.4})$$

Für Mikrostrukturen mit stückweise konstanten Materialeigenschaften in  $n$ -Phasen,  $\boldsymbol{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mathcal{C}}^i = \text{konst.}$  für  $\mathbf{x} \in V_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , vereinfacht sich Gleichung (C.4) zu

$$\boldsymbol{\mathcal{C}}^{*u} = \sum_{i=1}^n c^i \boldsymbol{\mathcal{C}}^i : \boldsymbol{\mathcal{A}}^i \quad . \quad (\text{C.5})$$

Hierbei ist  $c^i = |V_i|/|V|$  der Volumenanteil und  $\boldsymbol{\mathcal{A}}^i$  der Einflusstensor der  $i$ -ten Phase,

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}^i = \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad . \quad (\text{C.6})$$

Unter Verwendung der Hill-Bedingung (3.2) gilt

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \mathcal{A}(\mathbf{x}) \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle \quad (\text{C.7})$$

und weiter

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \mathcal{A}^T(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathcal{A}^T(\mathbf{x}) : \mathcal{C}(\mathbf{x}) : \mathcal{A}(\mathbf{x}) \rangle : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle \quad . \quad (\text{C.8})$$

Damit ergibt sich als weitere Darstellungsmöglichkeit für  $\mathcal{C}^{*u}$

$$\mathcal{C}^{*u} = \langle \mathcal{A}^T(\mathbf{x}) : \mathcal{C}(\mathbf{x}) : \mathcal{A}(\mathbf{x}) \rangle \quad , \quad (\text{C.9})$$

woraus zu ersehen ist, dass  $\mathcal{C}^{*u}$  ein symmetrischer Tensor vierter Stufe ist.

Bei dem elektromechanisch gekoppelten Randwertproblem mit Verschiebungs- und Potenzialrandbedingungen sind die Einflusstensoren  $\mathcal{A}^i$ ,  $i = 1, \dots, 4$ , folgendermaßen definiert:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^1(\mathbf{x}) & \mathcal{A}^2(\mathbf{x}) \\ \mathcal{A}^3(\mathbf{x}) & \mathcal{A}^4(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}^0 \\ \mathbf{E}^0 \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{C.10})$$

Eine Darstellung der effektiven elastischen, dielektrischen und piezoelektrischen Materialtensoren ist analog zu dem rein elastischen Fall möglich.

# Anhang D

## Einschlussproblem nach Eshelby

Für das Konzept der Eigendehnungen wird das Randwertproblem der linearen Elastizität für einen heterogenen Volumenbereich  $\mathcal{C}(\mathbf{x})$  auf ein homogenes Vergleichsproblem mit konstantem  $\mathcal{C}_0$  überführt. Die Heterogenität der Mikrostruktur wird dabei durch das Eigenspannungsfeld  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$  dargestellt:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathcal{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) + \hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) \quad (\text{D.1})$$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) = (\mathcal{C}(\mathbf{x}) - \mathcal{C}_0) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) \quad . \quad (\text{D.2})$$

Die Spannungs- und Dehnungsfelder  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  des homogenen Vergleichsproblems (D.1) stimmen mit denen des heterogenen Ausgangsproblems überein, wenn die Eigenspannungen  $\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x})$  Gleichung (D.2) erfüllen. Es werden lineare Verschiebungsrandbedingungen mit beliebigem  $\boldsymbol{\epsilon}^0$  betrachtet. Das Dehnungsfeld  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  ist dann die Lösung der Integralgleichung [86]

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^0 - \int_V \mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}') \, d\mathbf{x}' \quad . \quad (\text{D.3})$$

Hierbei ist  $\mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  der vierstufige Green'sche Tensor. Mit dem linearen Integraloperator  $\Gamma(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\tau}})$  kann Gleichung (D.3) vereinfacht geschrieben werden als

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^0 - \Gamma(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\tau}}) \quad . \quad (\text{D.4})$$

Im Weiteren wird ein ellipsoidförmiger Einschluss  $V^I \subset \mathbb{R}^3$  in einer unendlichen homogenen Matrix mit Matrixmaterial  $\mathcal{C}^M$  betrachtet:

$$\mathcal{C}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathcal{C}^I = \text{konst.}, & x \in V^I \\ \mathcal{C}^M = \text{konst.}, & x \in V \setminus V^I \end{cases} \quad . \quad (\text{D.5})$$

Durch Einsetzen in die Integralgleichung (D.3) ergibt sich mit  $\mathbf{c}_0 = \mathbf{c}^M$

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^0 - \int_{V^I} \mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') : (\mathbf{c}^I - \mathbf{c}^M) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad . \quad (\text{D.6})$$

Im Falle eines ellipsoidförmigen  $V^I$  ist nach ESHELBY [21] das Integral über die Green'sche Funktion konstant für  $\mathbf{x} \in V^I$ ,

$$\int_{V^I} \mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \text{konst.} \quad . \quad (\text{D.7})$$

Aus diesem Grund ist das Dehnungsfeld  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x})$  in Gleichung (D.6) innerhalb des Ellipsoids ebenfalls konstant,  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\epsilon}^I$ ,  $\mathbf{x} \in V^I$ , weshalb der Eshelby-Tensor

$$\mathcal{P} = \int_{V^I} \mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' : \mathbf{c}^M \quad (\text{D.8})$$

unabhängig von  $\mathbf{x} \in V^I$  ist. Zusammen mit Gleichung (D.6) erhält man

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\epsilon}^I &= \boldsymbol{\epsilon}^0 - \mathcal{P} : (\mathbf{c}^M)^{-1} : (\mathbf{c}^I - \mathbf{c}^M) : \boldsymbol{\epsilon}^I \quad , \\ \boldsymbol{\epsilon}^I &= (\mathcal{I} + \mathcal{P} : ((\mathbf{c}^M)^{-1} : \mathbf{c}^I - \mathcal{I}))^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

$\mathcal{P}$  ist abhängig von dem Matrixmaterial  $\mathbf{c}^M$  sowie von dem Achsenverhältnis und der Orientierung des Ellipsoids. Speziell für isotropes  $\mathbf{c}^M$  mit Poisson-Zahl  $\nu_M$  und einer kugelförmigen Inhomogenität  $V^I$  kann der Eshelby-Tensor geschrieben werden als

$$\mathcal{P}_{ijkl} = \frac{5\nu_M - 1}{15(1 - \nu_M)} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{4 - 5\nu_M}{15(1 - \nu_M)} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad . \quad (\text{D.10})$$

Das Einschlussproblem kann auf den elektromechanisch gekoppelten Fall übertragen werden. Die mechanischen und elektrischen Felder eines ellipsoidförmigen Einschlusses sind in einer homogenen Matrix konstant. Daher können die piezoelektrischen Analoga zu dem Eshelby-Tensor (D.8) der Elastizität mit Hilfe von elektromechanischen Green'schen Funktionen eingeführt werden. Eine Darstellung des piezoelektrischen Eshelby-Tensors für beliebige Anisotropie wurde von BENVENISTE [4] und WANG [89] hergeleitet, jedoch nicht in geschlossener Form. Für den wichtigen Fall einer transversal isotropen Matrix erhielt DUNN [18] explizite Lösungen. Der Einschluss ist dabei ein unendlicher Zylinder mit einer Ellipse als Grundfläche. DUNN & WIENECKE [20] fanden eine explizite Lösung für einen Ellipsoid mit zwei gleichen Halbachsen, welcher in Richtung der Isotropieachse orientiert ist.



# Literaturverzeichnis

- [1] F. Aurenhammer. Voronoi-diagramms - a survey of a fundamental geometric data structure. *ACM Computing Surveys*, 23:345–405, 1991.
- [2] H.G. Baerwald. Thermodynamic theory of ferroelectric ceramics. *Physical Review B*, 105:480–486, 1957.
- [3] U. Bast und W. Wersing. The influence of internal voids with 3-1 connectivity on the properties of piezoelectric ceramics prepared by a new planar process. *Ferroelectrics*, 94:229–242, 1989.
- [4] Y. Benveniste. The determination of the elastic and electric fields in a piezoelectric inhomogeneity. *Journal of Applied Physics*, 72:1086–1095, 1992.
- [5] D. Berlincourt und H. Jaffe. Elastic and piezoelectric coefficients of Single-Crystal Barium Titanate. *Physical Review*, 111:143–148, 1958.
- [6] M. Berveiller und A. Zaoui. Modélisation du comportement mécanique des solides microhétérogènes. In C. G’sell und J.M. Haudin, Herausgeber, *Introduction à la mécanique des polymères*, S. 225–247. Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, 1995.
- [7] P. Bisegna und R. Luciano. Variational bounds for the overall properties of piezoelectric composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 44:583–602, 1996.
- [8] U. Böhle. *Phänomenologische Modellierung und Finite-Elemente-Simulationen von nichtlinearen elektromechanischen Vorgängen in ferroelektrischen Materialien*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1999.
- [9] H.J. Böhm. A Short Introduction to Basic Aspects of Continuum Micromechanics. Forschungsbericht, Technische Universität Wien, 1998.

- [10] H.J. Böhm und W. Han. Comparison between three-dimensional and two-dimensional statistical-based unit cell models for particle reinforced MMCs. Forschungsbericht, Technische Universität Wien, 1999.
- [11] H.J. Böhm, F.G. Rammerstorfer und E. Weissenbek. Some simple models for micromechanical investigations of fiber arrangement effects in MMCs. *Computational Materials Science*, 1:177–194, 1993.
- [12] D.A.G. Bruggeman. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. *Annalen der Physik*, 24:636–679, 1935.
- [13] H.J. Bunge. *Texture Analysis in Materials Science*. Butterworth, London, Boston, Sydney, 1982.
- [14] H. Cao und A.G. Evans. Nonlinear deformation of ferroelectric ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 76:890–896, 1993.
- [15] L. Cizelj und H. Riesch-Oppermann. Modelling the Early Development of Secondary Side Stress Corrosion Cracks in Steam Generator Tube. In *International Symposium Contribution of Materials Investigation to the Resolution of Problems encountered in Pressurized Water Reactors*, S. 583–594. Fontevraud, France, 1998.
- [16] MacNeal-Schwendler Corporation. *MSC/PATRAN Users Guide, Version 8.0*, 1998.
- [17] R.C. DeVries und J.E. Burke. Microstructure of Barium Titanate Ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 40:200–206, 1957.
- [18] M.L. Dunn. Electroelastic Green’s function for transversely isotropic piezoelectric media and their application to the solution of inclusion and inhomogeneity problems. *International Journal of Engineering Science*, 32:119–131, 1994.
- [19] M.L. Dunn. Effects of grain shape anisotropy, porosity and microcracks on the elastic and dielectric constants of polycrystalline piezoelectric ceramics. *Journal of Applied Physics*, 78:1533–1541, 1995.
- [20] M.L. Dunn und H. Wienecke. Inclusions and inhomogeneities in transversely isotropic piezoelectric solids. *International Journal of Solids and Structures*, 34:3571–3582, 1997.
- [21] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field in an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 241:376–396, 1957.

- [22] E. Fatuzzo und W. Merz. *Ferroelectricity*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1967.
- [23] E. Feldtkeller. *Dielektrische und magnetische Materialeigenschaften*. BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1973.
- [24] T. Fett und D. Munz. Measurement of Young's Moduli for Lead Zirconate Titanate (PZT) Ceramics. *Journal of Testing and Evaluation*, 28:27–35, 2000.
- [25] T. Fett, D. Munz und G. Thun. Nonsymmetric Deformation Behavior of Lead Zirconate Titanate Determined in Bending Tests. *Journal of the American Ceramic Society*, 81:269–272, 1998.
- [26] T. Fett, D. Munz und G. Thun. Nonsymmetric deformation behavior of several PZT ceramics. *Journal of Materials Science Letters*, 18:1641–1643, 1999.
- [27] A. Fröhlich, S. Weyer, D. Metz, O. Müller, A. Brückner-Foit und A. Albers. Investigations on the Reliability of FEA Calculations on the microscale. In *International Conference on Computational Nanoscience*, S. 161–164. Hilton Head Island, SC, USA, 2001.
- [28] C. Gerthsen und H. Vogel. *Physik*. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [29] S. Ghosh und N. Mukhopadhyay. A material based finite element analysis of heterogeneous media involving Dirichlet tessellations. *Comput. Methods Appl. Mech.*, 104: 211–247, 1993.
- [30] H.G. Hahn. *Elastizitätstheorie*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1985.
- [31] S.V. Harren. The Finite Deformation of Rate-Dependent Polycrystals- II: A Comparison of the Self-Consistent and Taylor Methods. *J. Mech. Phys. Solids*, 39:361–383, 1991.
- [32] Z. Hashin. Theory of mechanical behavior of heterogeneous media. *Appl. Mech. Rev.*, 17:1–9, 1964.
- [33] Z. Hashin und S. Shtrikman. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 10:335–342, 1962.
- [34] Hibbit, Karlsson und Sorensen. *ABAQUS/Standard User's Manual, Version 5.8*, 1998.

- [35] R. Hill. The elastic behaviour of crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc. (London)*, A65:349–354, 1952.
- [36] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 11:357–372, 1963.
- [37] R. Hill. The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 15:79–95, 1967.
- [38] M. Hori und S. Nemat-Nasser. Universal bounds for effective piezoelectric moduli. *Mechanics of Materials*, 30:1–19, 1998.
- [39] C. Huet. Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *J. Mech. Phys. Solids*, 11:813–841, 1990.
- [40] S.C. Hwang, 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.
- [41] S.C. Hwang, C.S. Lynch und R.M. McMeeking. Ferroelectric/Ferroelastic interactions and a polarization switching model. *Acta Metall. Mater.*, 43:2073–2084, 1995.
- [42] B. Jaffe, W.R. Cook und H. Jaffe. *Piezoelectric Ceramics*. Academic Press, London, New York, 1972.
- [43] T. Johansson. *Analytische Beschreibung von Experimenten an faserverstärkten Keramiken zur Bestimmung von Grenzflächenparametern*. Dissertation, VDI-Verlag, Reihe 18, 1995.
- [44] M. Kamlah. *Zur Modellierung von nichtlinearen elektromechanischen Koppelphänomenen in Piezokeramiken*. Habilitationsschrift, Universität Gesamthochschule Kassel, 2000.
- [45] H.F. Kay und P.Vousden. Symmetry Changes in Barium Titanate at Low Temperatures and their Relation to its Ferroelectric Properties. *Philosophical Magazine*, 40: 1019–1040, 1949.
- [46] H. Kessler und H. Balke. On the Local and Average Energy Release in Polarization Switching Phenomena. *J. Mech. Phys. Solids*, S. (zur Veröffentlichung angenommen), 2001.

- [47] E. Klingbeil. *Tensorrechnung für Ingenieure*. BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1989.
- [48] M. Kraska. Randbedingungen und Anfangsorientierungen für Polykristallsimulationen mit Finiten-Elementen. In *Große plastische Formänderungen, Bad Honnef (1997)*, S. 39–42. Institut für Mechanik der Ruhr-Universität, Bochum, 1998.
- [49] E. Kröner. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Zeitschrift für Physik*, 151:504–518, 1958.
- [50] E. Kröner. *Statistical continuum mechanics*. Springer-Verlag, Udine, 1971.
- [51] E. Kröner. Statistical Modelling. In J. Gittus und J. Zarka, Herausgeber, *Modelling small deformations of polycrystals*. Elsevier Publishers, Netherlands, 1986.
- [52] E. Kullig, T. Johansson, A. Brückner-Foit, H. Riesch-Oppermann, D. Munz, T. Winkler und B. Michel. Ermittlung der Lebensdauerverteilung bei Thermoermüdung mit den Methoden der stochastischen Geometrie. Forschungsbericht FZKA 5692, Forschungszentrum Karlsruhe, 1996.
- [53] J.Y. Li. The effective electroelastic moduli of textured piezoelectric polycrystalline aggregates. *J. Mech. Phys. Solids*, 48:529–552, 2000.
- [54] J.Y. Li und M.L. Dunn. Thermoelastoelectric moduli of textured piezoelectric polycrystals: Exact solutions and bounds for film textures. *Journal of Applied Physics*, 86:4626–4634, 1999.
- [55] J. Lothe und D.M. Barnett. Further development of the theory for surface waves in piezoelectric crystals. *Phys. Norvegica*, 8:239–254, 1977.
- [56] M. Marutake. A calculation of physical constants of ceramic barium titanate. *Journal of the Physical Society of Japan*, 11:807–814, 1956.
- [57] G. A. Maugin. *The Thermomechanics of Plasticity and Fracture*. University Press, Cambridge, 1992.
- [58] R.M. McMeeking und S.C. Hwang. On the potential energy of a piezoelectric inclusion and the criterion for ferroelectric switching. *Ferroelectrics*, 200:151–173, 1997.
- [59] R.M. McMeeking und S.C. Hwang. A finite element model of ferroelastic polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*, 36:1541–1556, 1999.

- [60] W.J. Merz. Double Hysteresis Loop of Barium Titanate at the Curie Point. *Physical Review B*, 91:513–517, 1953.
- [61] T. Michelitsch und W.S. Kreher. A simple model for the nonlinear material behavior of ferroelectrics. *Acta Metallurgica*, 46:5085–5094, 1998.
- [62] S. Moorthy und S. Ghosh. A model for analysis of arbitrary composite and porous microstructures with Voronoi cell finite elements. *Int. Journal for numerical Meth. in Engineering*, 39:2363–2398, 1996.
- [63] S. Moorthy und S. Ghosh. A Voronoi cell finite element model for particle cracking in elastic-plastic composite materials. *Comput. Methods Appl. Mech.*, 151:377–400, 1998.
- [64] M. Müller und D. Besdo. Simulation globaler Anisotropie mit Hilfe eines Vielkristallmodells. *Zeitung für angewandte Mathematik und Mechanik*, 73:658ff, 1993.
- [65] S. Nemat-Nasser und M. Hori. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*. North-Holland, Amsterdam, 1993.
- [66] J. Ohser. Grundlagen und Methodik der lichtmikroskopischen Korngrößenanalyse I. In *Quantitative metallographische Korngrößenanalyse, 24.-28.2.1997, Freiberg/Sachsen*, S. 72–87. Institut für Metallkunde der TU Bergakademie Freiberg, 1997.
- [67] J. Ohser und U. Lorz. *Quantitative Gefügeanalyse - Theoretische Grundlagen und Anwendungen*. Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, Stuttgart, 1994.
- [68] A. Okabe, B. Boots und K. Sugihara. *Spatial tessellations - Concepts and applications of Voronoi diagrams*. John Wiley and Sons, Chichester, 1992.
- [69] T. Olson und M. Avellaneda. Effective dielectric and elastic constants of piezoelectric polycrystals. *Journal of Applied Physics*, 71:4455–4464, 1992.
- [70] P. Onck und E. van der Giessen. Influence of microstructural variations on steady state creep and facet stress in 2-D freely sliding polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*, 34:703–726, 1997.
- [71] M. Ostoja-Starzewski. Random field models of heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 35:2429–2455, 1998.

- [72] B. Paul. Prediction of elastic constants of multiphase materials. *Trans. of the ASME*, 218:36–41, 1960.
- [73] N.A. Pertsev, A.G. Zembilgotov und R. Waser. Aggregate linear properties of ferroelectric ceramics and polycrystalline thin films: Calculation by the method of piezoelectric medium. *Journal of Applied Physics*, 84:1524–1529, 1998.
- [74] A. Reuss. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Zeitung für angewandte Mathematik und Mechanik*, 9:49–58, 1929.
- [75] H. Riesch-Oppermann. VorTess Generation of 2-D Random Poisson-Voronoi Mosaics as Framework for the Micromechanical Modelling of Polycrystalline Materials - Algorithm and Subroutines Description -. Forschungsbericht FZKA 6325, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999.
- [76] J. Rödel und W.S. Kreher. Effective properties of polycrystalline piezoelectric ceramics. *Journal de Physique IV*, 9:239–247, 1999.
- [77] J. Rödel und W.S. Kreher. Modellierung der effektiven Eigenschaften von polykristallinen piezoelektrischen Materialien. In *Simulationstechniken in der Materialwissenschaft*, S. 241–252. TU Bergakademie Freiberg, 1999.
- [78] J. Rödel und W.S. Kreher. Modeling of domain wall contribution to the effective properties of polycrystalline ferroelectric ceramics. In *Proc. SPIE's 7th International Symposium on Smart Structures and Materials*, Band 3992, S. 353–362. The International Society for Optical Engineering, 2000.
- [79] A. Schäufele und K.H. Härdtl. Ferroelastic Properties of Lead Zirconate Titanate Ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 79:2637–2640, 1996.
- [80] T. Seelig und T. Zohdi. Mikromechanik, Vorlesungsmanuskript WS 98/99. Institut für Mechanik, TU Darmstadt, 1998.
- [81] D. Stoyan, W.S. Kendall und J. Mecke. *Stochastic geometry and its applications (2nd Edition)*. John Wiley and Sons, Chichester, 1995.
- [82] D. Stoyan und H. Stoyan. *Fraktale Formen Punktfelder*. Akademie-Verlag, Berlin, 1992.
- [83] D. Stroud. Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material. *Physical Review B*, 12:3368–3373, 1975.

- [84] Y. Toi und J.S. Che. Computational Damage Mechanics Models for brittle micro-cracking Solids based on mesoscopic Simulations. *Engineering Fracture Mechanics*, 4:483–498, 1994.
- [85] A.V. Turik, V.Y. Turik und V.I. Aleshin. On a correlation between remanent polarization and piezoelectric coefficients of perovskite-type ferroelectric ceramics. *Journal of physics. D: Applied physics*, 33:738–743, 2000.
- [86] W.S. Kreher und W. Pompe. *Internal Stresses in Heterogeneous Solids*. Akademie-Verlag, Berlin, 1989.
- [87] W. Voigt. Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper. *Wied. Ann.*, 38:573–587, 1889.
- [88] L.J. Walpole. On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems. *J. Mech. Phys. Solids*, 14:151–162, 1966.
- [89] B. Wang. Three-dimensional analysis of an ellipsoidal inclusion in a piezoelectric material. *International Journal of Solids and Structures*, 29:293–308, 1992.
- [90] J.P. Watt. Clarification of the Hashin-Shtrikman bounds on the effective elastic moduli of polycrystals with hexagonal, trigonal and tetragonal symmetries. *J. Appl. Phys.*, 51:1525–1531, 1980.
- [91] N. Wellerdick-Wojtasik. *Theoretische und experimentelle Untersuchungen über die Fließflächenentwicklung bei großen Scherdeformationen*. Dissertation, VDI-Verlag, Reihe 18, Nr. 215, 1997.
- [92] S. Weyer, A. Brückner-Foit und A. Fröhlich. Overall Properties of Ceramics Subjected to Compressive Loading. In *International Conference on Engineering Ceramics and Structures*, S. 101–107. American Ceramic Society, Cocoa Beach, FL, USA, 2000.
- [93] S. Weyer, A. Fröhlich, H. Riesch-Oppermann, L. Cizelj und M. Kovač. Automatic finite element meshing of planar Voronoi tessellations. *Engineering Fracture Mechanics (zur Veröffentlichung eingereicht)*, 2001.
- [94] O. Wiener. Lamellare Doppelbrechung. *Physikalische Zeitschrift*, 5:332–338, 1904.
- [95] J.R. Willis. The Overall Elastic Response of Composite Materials. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 50:1202–1209, 1983.



- [96] Y. Xu. *Ferroelectric Materials and their Application*. North London, Amsterdam, 1991.
- [97] M. Zgonik, P. Bernasconi, M. Duelli, R. Schlessler, P. Günter, M.H. Garrett, D. Rytz, Y. Zhu und X. Wu. Dielectric, elastic, piezoelectric, electro-optic, and elasto-optic tensors of BaTiO<sub>3</sub> crystals. *Physical Review B*, 50:5941–5949, 1994.